

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ЛУГАНСКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ**

В Е С Т Н И К

**«ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»**

**№ 5(47)
2021**

**МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
"ОТКРЫТЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ЧТЕНИЯ – 2021"**

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Луганск 2021

ВЕСТНИК

ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ

№ 5 (47) 2021

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
ОСНОВАН В 2015 ГОДУ
ВХОДИТ В БАЗУ
РИНЦ

ОСНОВАТЕЛЬ
ГОУ ВО ЛНР «ЛУГАНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации,
печати и массовых коммуникаций
Серия № ПИ 000170 от 19 января 2021 г.

Свидетельство о государственной регистрации
Издателя, изготовителя и распространителя средства
массовой информации
МИ-СРГ ИД 000003 от 20 ноября 2015г.

Журнал включен в перечень научных изданий ВАК ЛНР (Приказ № 8-ОД от 8.01.19) в котором могут публиковаться результаты диссертационных работ на соискание ученой степени доктора и кандидата физико-математических, химических, технических, экономических, исторических, философских, филологических, юридических, педагогических, психологических, социологических наук.

ISSN 2522-4905

Главная редакционная коллегия :

Рябичев В.Д., докт. техн. наук, (главный редактор),
Гутько Ю.И., докт. техн. наук, (зам. главн. редактора),
Витренко В.А., докт. техн. наук (зам. главн. редактора),
Авершин А.А., канд. психол. наук,
Андрійчук Н.Д., докт. техн. наук,
Атоян А.И., докт. филос. наук,
Белых А.С., докт. пед. наук,
Бельдюгин В.А. канд. ист. наук,
Болдырев К.А., докт. экон. наук,
Будиков Л.Я., докт. техн. наук,
Губачева Л.А., докт. техн. наук,
Дейнека И.Г., докт. техн. наук,
Дрозд Г.Я., докт. техн. наук,
Ерошин С.С., докт. техн. наук,
Замота Т.Н., докт. техн. наук,
Исаев В.Д., докт. филос. наук,
Клименко А.С., докт. филол. наук,
Коваленко А.А., канд. техн. наук, проф.,
Кривоколыско С.Г., докт. хим. наук,
Крохмалева Е.Г., канд. пед. наук,
Корсунов К.А., докт. техн. наук,
Лазор В.В., докт. юридич. наук,
Лазор Л.И., докт. юридич. наук,
Лустенко А.Ю., докт. филос. наук,
Ляпин В.П., докт. биол. наук,

Максимова Т.С., докт. экон. наук,
Максимов В.В., докт. экон. наук,
Мечетный Ю.Н., докт. мед. наук,
Мирошников В.В., докт. техн. наук,
Мортиков В.В., докт. экон. наук,
Нечаев Г.И., докт. техн. наук,
Панайотов К.К., канд. техн. наук,
Родионов А.В., докт. экон. наук,
Рябичева Л.А., докт. техн. наук,
Салита С.В., докт. экон. наук,
Санжаров С.Н., докт. ист. наук,
Свиридова Н.Д., докт. экон. наук,
Семин Д.А., докт. техн. наук,
Скляр П.П., докт. психол. наук,
Слащев В.А., канд. техн. наук, проф.,
Тарарычкін І.А., докт. техн. наук,
Тисунова В.Н., докт. экон. наук,
Утутов Н.Л., докт. техн. наук,
Фесенко Ю.П., докт. филол. наук,
Харьковский Р.Г. канд. ист. наук,
Шамшина И.И., докт. юридич. наук,
Шелюто В.М., докт. филос. наук,
Яковенко В.В., докт. техн. наук

Ответственный за выпуск: Корсунов К.А.

Рекомендовано в печать Ученым советом Луганского государственного университета имени Владимира Даля.
(Протокол № 1 от 02.10.2020 г.)

Материалы номера печатаются на языке оригинала.

© ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля, 2021
© SEE HT LPR «Lugansk Vladimir Dahl State University», 2021

VESTNIK

LUGANSK
VLADIMIR DAHL
STATE UNIVERSITY

№ 5 (47) 2021

THE SCIENTIFIC JOURNAL
WAS FOUNDED IN 2015
INCLUDED INTO THE BASE OF
RISC

FOUNDER
SEE HT LPR
«LUGANSK VLADIMIR DAHL
STATE UNIVERSITY»

Journal is registered by the Ministry of Information,
Publishing and Mass Communications
Series № PI 000170 of January, 19 2021

State Registration Certificate of Publisher, Producer
and Distributor of means of mass information

MI-SRG ID 000003 of November, 20 2015

С О Д Е Р Ж А Н И Е

СЕКЦИЯ 1.
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

АКУСТИЧЕСКИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОМ 1D ФОНОННОМ КРИСТАЛЛЕ Румянцев В.В., Федоров С.А., Паладян Ю.А.-----	11
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РУТЕНИЕВЫХ ТОЛСТОПЛЕНОЧНЫХ РЕЗИСТОРОВ С ИЗМЕНЯЮЩИМСЯ КОЛИЧЕСТВОМ ТОКОПРОВОДЯЩИХ ФАЗ Лозинский Н.С. -----	17
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ТЕМПЛАТНОГО СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И НАНОУГЛЕРОДА МЕТОДОМ CVD. ВЛИЯНИЕ МАКРОКИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ПРОЦЕССА, СТРУКТУРЫ КАТАЛИЗАТОРА И НОСИТЕЛЯ НА МОРФОЛОГИЮ УГЛЕРОДНЫХ ПРОДУКТОВ Прудченко А.П., Савоськин М.В., Полякова О.Ю., Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Глазунова В.А.--	23
ЕСТЕСТВЕННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА В ОБЛАСТИ ЭКСИТОННОГО РЕЗОНАНСА Румянцев В.В., Федоров С.А., Рыбалка А.Е.-----	29
ЭВОЛЮЦИЯ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА И СОСТОЯНИЯ ПЬЕЗОАКТИВНОСТИ В СИСТЕМЕ НИОБАТОВ НАТРИЯ - КАЛИЯ - КАДМИЯ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ УСЛОВИЙ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ Мойса М.О., Андрушин К. П., Резниченко Л. А. -----	34
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И СЕГНЕТОЭЛАСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ PZT-CN Андрушин К.П., Шилкина Л.А., Нагаенко А.В., Андрушина И.Н., Дудкина С.И., Резниченко Л.А. --	37
ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПЛЁНКАХ $CN_x:Eu_yO_z$. Шемченко Е.И., Яковец А.А., Лихтенштейн И.Я. -----	42
ГИДРОСТРИКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АНОДОВ И КАТОДОВ АККУМУЛЯТОРНЫХ БАТАРЕЙ НА ОСНОВЕ НИОБАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ Зубарев Я.Ю., Шилкина Л.А., Крутов В.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А. -----	46
СВЯЗЬ ИСЧИСЛЕНИЯ ВНЕШНИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ФОРМ С МЕТОДОМ ЯКОБИАНОВ И ОСОБЕННОСТИ ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕРМОДИНАМИКЕ Шелест В.В., Червинский Д.А.-----	52
СВЯЗЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ С АКУСТИКОЙ Шелест В.В., Червинский Д.А., Христов А.В.-----	54
СОИНТЕРКАЛАТ НИТРАТА ГРАФИТА С ЭТИЛ- И БУТИЛАЦЕТАТОМ КАК ПРЕДШЕСТВЕННИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ Осколкова О.Н., Давыдова А.А., Ракша Е.В., Гнатовская В.В., Сухов П.В., Берестнева Ю.В., Глазунова В.А., Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Савоськин М.В. -----	57
ГРАФИТОПОДОБНЫЕ ПЛЕНКИ С ВЫСОКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ ПРОВОДИМОСТИ Изотов А.И., Кильман Г.В., Сироткин В.В., Шалаев Р.В. -----	63
ПРИМЕНЕНИЕ НИОБАТНОЙ СЕГНЕТОПЬЕЗОКЕРАМИКИ В МЕДИЦИНСКОЙ ПРАКТИКЕ Дудкина С.И., Шилкина Л.А., Андрушин К.П., Андрушина И.Н., Вербенко И.А., Резниченко Л.А. --	66
ПОВЕДЕНИЕ АНИОННОЙ ВАКАНСИИ В (100) ПЛАСТИНАХ АНАТАЗА РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ Токий Н.В., Токий В.В., Гребенюк Н.А.-----	70

ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ОДНОФАЗНОГО ГИБРИДА ДЛЯ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ В ПРИБЛИЖЕНИИ ФОГТА Токий В. В., Токий Н.В.-----	74
РАСЧЕТ ТОЛЩИНЫ И ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПО СПЕКТРАМ ПРОПУСКАНИЯ Жидель К.М., Павленко А.В.-----	77
ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ Малашенко В.В.-----	83
ОПТИМИЗАЦИЯ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ НИОБАТА НАТРИЯ-КАЛИЯ ПУТЕМ ПРИМЕНЕНИЯ МЕХАНОАКТИВАЦИИ Глазунова Е.В., Шилкина Л.А., Вербенко И.А., Ситало Е.И., Нагаенко А.В., Резниченко Л.А. -----	87
КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ФАЗЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $ABO_3 - LiNbO_3$ ($ABO_3 - BiFeO_3$, $LaMnO_3$ и $LaFeO_3$) Рудский Д.И., Лебединская А.Р., Кабиров Ю.В., Кофанова Н.Б., Рудская А.Г. -----	90
МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА-ВИСМУТА: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И ВОЗМОЖНЫЕ МЕХАНИЗМЫ Волков Д.В., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Павленко А.В., Павелко А.А. -----	95
ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И СВОЙСТВА КЕРАМИКИ $(0.5-x)BiFeO_3-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3-xPbTiO_3$ Болдырев Н.А., Ситало Е.И., Шилкина Л.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А. -----	98
УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ NE И AR ПОД ДАВЛЕНИЕМ Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А., Ткачева А.О. -----	106
ИСТОРИЯ, ПРИМЕНЕНИЕ, ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/Yb$ Хасбулатов С. В., Вахажи Х-М. М., Мацаев М-С.М.-----	115
ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/La$ Хасбулатов С.В., Вахажи Х-М.М., Лепнев Х.Х.-----	118
СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $BiFeO_3/Pr$ Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В., Корсунов К.А.-----	122
ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО МУЛЬТИФЕРРОИКА $BiFeO_3/Sm$ Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В.-----	126

СЕКЦИЯ 2. ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЯЧИХ И ХОЛОДНЫХ ПЯТЕН УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО МУТАГЕНЕЗА НА УЧСТКЕ ДВУНИТЕВОЙ ДНК С ОДНОРОДНЫМ НУКЛЕОТИДНЫМ СОСТАВОМ Гребнева Е.А. -----	130
ОБОСНОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ УСТРОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ СИСТЕМ И СЕТЕЙ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ Третьяков И.А.-----	136
ВЛИЯНИЕ НАТЯГА НА ПЛОТНОСТЬ И ОСТАТОЧНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ДОРНОВАНИИ ПОРОШКОВОЙ ПОРИСТОЙ ЗАГОТОВКИ Рябичева Л.А., Решетняк Д.В. -----	141
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОЭЛЕКТРОДНЫХ ПЕЧНЫХ УСТАНОВКАХ Кухарев А.Л. -----	146

НЕФТЯНОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ВОД В АБХАЗСКОМ СЕКТОРЕ ЧЕРНОГО МОРЯ Гицба Я.В.-----	151
ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СДВИГОВ И ПРОСЕДАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД НАД ОТРАБОТАННЫМ ПРОСТРАНСТВОМ ШАХТ ГОРОДА ДОНЕЦКА Несова А.В., Шестакин Н.С., Хархордин Е.В.-----	155
АНАЛИЗ УСТРОЙСТВ РАВНОМЕРНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ПОТОКА РАБОЧЕЙ ЖИДКОСТИ В ГИДРАВЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ, ИСПОЛЪЗУЕМЫХ В ТЯЖЕЛОМ МАШИНОСТРОЕНИИ И МОБИЛЬНЫХ СЛОЖНОТЕХНИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВАХ Горбунов Р.С., Цурцилина А.Ю., Деркачев И.С.-----	161
ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАЗРЯДА В ЖИДКОСТИ Сергиенко С.Н., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.-----	165
О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИИ ЭФФЕКТА ШВИНГЕРА РОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОН- ПОЗИТРОННЫХ ПАР С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ Никитин Е.В.-----	171
АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАТЕРИАЛОВ Астафьев П.А.-----	174
ПЕРСПЕКТИВА ДАЛЬНЕЙШЕГО ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ НАКАЧКИ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРАХ Мурга Е.В., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.-----	180
ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК СТОЛБА СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДУГИ МЕТОДОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА Калужный Г.С., Корсунов К.А., Лыштван Е.Ю., Чаленко А.В.-----	184
ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ САПФИРА, ВОЗБУЖДАЕМАЯ СКОЛЬЗЯЩИМ ВЫСОКОВОЛЬТНЫМ РАЗРЯДОМ Громенко В.М., Харченко Е.И.-----	188
РАДИАЦИОННАЯ ОЦЕНКА ГОРОДСКИХ ПАРКОВ ГОРОДА ЛУГАНСКА Воробьев С.Г., Чаленко А.В.-----	190
ОСОБЕННОСТИ ЛАТЕРАЛЬНОГО И РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ ГОРНОЙ АДЫГЕИ Буряева Е.А., Ширяева А.А.-----	194
РАДИАЦИОННАЯ ОБСТАНОВКА НА РЕКРЕАЦИОННЫХ, УРБАНИЗИРОВАННЫХ И ПРИРОДНО-ТЕХНОГЕННЫХ ТЕРРИТОРИЯХ РОСТОВСКОЙ ОБЛАСТИ Ляхова Н.В., Швецова Д.А., Шадин А.Е., Буряева Е.А., Михайлова Т.А.-----	198
РАДИОНУКЛИДНЫЙ И ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВЫ АЭРОЗОЛЬНОЙ ПЫЛИ НА ТЕРРИТОРИИ РОСТОВСКОЙ АГЛОМЕРАЦИИ Михайлова Т.А., Машаров К.С., Буряева Е.А., Кашаева Е.А., Ширяева А.А.-----	202
МАГНИТНЫЕ ЖИДКОСТИ: СВОЙСТВА И ОСНОВНЫЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ Алиев И. М., Дудаева М.А., Сайд-Ахматова Ф.С., Хапаева М. С.-----	206

СЕКЦИЯ 3. МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ

РЕАЛИЗАЦИЯ КОМПЕТЕНТНОСТНОГО ПОДХОДА ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ СТУДЕНТАМИ-ФИЗИКАМИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ Корсунов К.А., Харченко Е.И., Чаленко А.В.-----	217
---	-----

ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УМЕНИЙ СТУДЕНТОВ ФИЗИКОВ В ПРОЦЕССЕ ПРЕДДИПЛОМНОЙ ПРАКТИКИ	
Харченко Е.И., Чаленко А.В., Лыштван Е.Ю. -----	221
ОРГАНИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ФИЗИКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ	
Горбенко Е.Е., Грицких А.В. -----	225
ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ	
Акулов Ю.В., Безверхний А.Л., Грицких А.В. -----	228
МЕТОДИКА И ТЕХНОЛОГИИ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ОДАРЕННЫХ ШКОЛЬНИКОВ	
Воробьев С.Г., Каменев С.А., Чернопятко Е.А., Христиди Т.А., Сорока Н.В. -----	233
СОВРЕМЕННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	
Дадашева З.И. Дадашев Р.Р., Мисирова Л.М. -----	239
ФОРМИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННО - ДИДАКТИЧЕСКИХ УМЕНИЙ ПЕДАГОГОВ	
Дадашева З.И. -----	242
ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ КОМПЕТЕНТНОСТЬ УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ	
Дадашева З.И., Дадашев С.И. -----	245

CONTENTS

SECTION 1.
PHYSICS OF CONDENSED CONDITION

ACOUSTIC EXCITATIONS IN A NON-IDEAL ONE-DIMENSIONAL FONON CRYSTAL Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Paladyan Yu.A.-----	11
COMPUTER SIMULATION OF ELECTRICAL PARAMETERS OF RUTHENIUM THICK FILM RESISTORS WITH A VARIABLE NUMBER OF CURRENT-CONDUCTING PHASES Lozynskyy M.S.-----	17
REGULARITIES OF THE PROCESS OF TEMPLATE SYNTHESIS OF CARBON NANOTUBES AND NANOCARBON BY THE CVD METHOD. INFLUENCE OF MACROKINETIC FACTORS OF THE PROCESS, THE STRUCTURE OF THE CATALYST AND THE CARRIER ON THE MORPHOLOGY OF CARBON PRODUCTS Prudchenko A.P., Savos'kin M.V., Polyakova O.Yu., Burhovetskiy V.V., Volkova G.K., Glazunova V.A.----	23
NATURAL OPTICAL ACTIVITY OF A NON-IDEAL MOLECULAR CRYSTAL IN THE EXCITON RESONANCE REGION Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Rybalka A.Ye. -----	29
EVOLUTION OF THE DIELECTRIC HYSTERESIS LOOPS AND THE PIEZOACTIVITY STATE IN THE SODIUM-POTASSIUM-CADMIUM NIOBATE SYSTEM UNDER CHANGING CONDITIONS OF EXTERNAL INFLUENCES Moysa M.O., Andryushin K.P., Reznichenko L.A.-----	34
DIELECTRIC, PIEZOELECTRIC AND FERROELASTIC PROPERTIES OF SOLID SOLUTION PZT-CN Andryushin K.P., Shilkina L.A., Nagaenko A.V., Andryushin I.N., Dudkina S.I., Reznichenko L.A.-----	37
FEATURES OF THE FORMATION OF MULTILAYER CARBON NANOTUBES IN FILMS $CN_x:Eu_yO_z$. Shemchenko E.I., Yakovets A.A., Liechtenstein I.Ya. -----	42
HYDROSTRICTIVE MATERIALS FOR ANODES AND CATHODES OF STORAGE BATTERIES BASED ON NIOBATES OF ALKALI AND ALKALINE EARTH METALS Zubarev J.Y., Shilkina L.A., Krutov V.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A.-----	46
EXTERNAL DIFFERENTIAL FORMS CALCULATION AND JACOBEAN METHOD CONNECTION, ITS THERMODYNAMICAL APPLICATION Shelest V.V., Chervinskii D.A.-----	52
THERMODYNAMIC PHASE STATE STABILITY CONNECTION WITH ACOUSTICS Shelest V.V., Chervinskii D.A., Hristov A.V. -----	54
COINTERCALATE OF GRAPHITE NITRATE WITH ETHYL- AND BUTYL ACETATE AS A PRECURSOR OF CARBON NANOPARTICLES Oskolkova O.N., Davydova A.A., Raksha E.V., Gnatovskaya V.V., Sukhov P.V., Berestneva Yu.V., Glazunova V.A., Burkhovetskij V.V., Volkova G.K., Savoskin M.V. -----	57
GRAPHITE-LIKE FILMS WITH HIGH ANISOTROPY CONDUCTIVITY Izotov A.I., Kilman G.V., Sirotkin V.V., Shalaev R.V. -----	63
APPLICATION OF NIOBATE FERROPIEZOCERAMICS IN MEDICAL PRACTICE Dudkina S.I., Shilkina L.A., Andryushin K.P., Andryushina I.N., Verbenko I.A., Reznichenko L.A. -----	66
BEHAVIOR OF ANYON VACANCY IN (100) ANATASE PLATES OF DIFFERENT THICKNESS Tokiy N.V., Tokiy V.V., Gebenjuk N.A.-----	70

THE THREE-COMPONENT MODEL OF A SINGLE-PHASE HYBRID FOR SUBMICROCRYSTALLINE COPPER IN THE VOIGT APPROXIMATION Tokiy V. V., Tokiy N.V.-----	74
CALCULATION OF THE THICKNESS AND OPTICAL CONSTANTS OF THIN FILMS FROM THEIR TRANSMISSION SPECTRA Zhidel K.M., Pavlenko A.V.-----	77
DYNAMIC EFFECTS UNDER HIGH STRAIN RATE DEFORMATION OF METALS AND ALLOYS Malashenko V.V.-----	83
OPTIMIZATION OF THE PROPERTIES OF SOLID SOLUTIONS MULTICOMPONENT SYSTEM BASED ON SODIUM-POTASSIUM NIOBATE USING MECHANOACTIVATION Glazunova E.V., Shilkina L.A., Verbenko I.A., Sitalo E.I., Nagaenko A. V., Reznichenko L.A. -----	87
CRYSTALLINE PHASES OF $ABO_3 - LiNbO_3$ (ABO_3 - $BiFeO_3$, $LiMnO_3$ AND $LiFeO_3$) SOLID SOLUTIONS Rudsky D.I., Lebedinskaya A.R., Kofanova N.B., Kabirov Yu.V., Rudskaya A.G.-----	90
MAGNETORESISTANCE IN SOLID SOLUTIONS BASED ON LANTHANUM-BISMUTH MANGANITE: EXPERIMENTAL VALUES AND POSSIBLE MECHANISMS Volkov D.V., Verbenko I.A., Shilkina L.A., Pavlenko A.V., Pavelko A.A. -----	95
PHASE DIAGRAM AND PROPERTIES OF $(0.5-x)BiFeO_3-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3-xPbTiO_3$ CERAMICS Boldyrev N.A., Sitalo E.I., Shilkina L.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A. -----	98
EQUATION OF STATE NE AND AR CRYSTALS UNDER PRESSURE Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Tkacheva A.O. -----	106
HISTORY, APPLICATION, PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC $BiFeO_3/YB$ Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Matsaev M-S. M. -----	115
PREPARATION, STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC $BiFeO_3/LA$ Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Lepiev Kh. R.-----	118
SPECTROSCOPY, DIELECTRIC AND THERMAL PROPERTIES $BiFeO_3/PR$ Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S. V., Korsunov K.A.-----	122
RESEARCH OF HIGH TEMPERATURE MULTIFEROIC $BiFeO_3/SM$ Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S.V. -----	126

SECTION 2. APPLIED PHYSICS

POTENTIAL CURVED LINES FOR THE HYDROGEN BOND PROTON IN A WATER DIMER AT DIFFERENT LENGTHS OF HYDROGEN BOND AND THEIR VALUE FOR POLYMERABLE- TATUTOMERIC MODELS Grebneva H.A.-----	130
JUSTIFICATION OF THE PHYSICAL FOUNDATIONS OF FUNCTIONAL ELECTRONICS DEVICES FOR THE PRACTICAL IMPLEMENTATION OF TELECOMMUNICATIONS SYSTEMS AND NETWORKS Tretiakov I.A.-----	136
INFLUENCE OF THE TIGHTNESS OF BURNISHING ON DENSITY AND RESIDUAL STRESS OF POWDER POROUS BILLET Ryabicheva L.A., Reshetnyak D.V.-----	141

MATHEMATICAL MODELING OF MAGNETOHYDRODYNAMIC PROCESSES IN MULTI-ELECTRODE FURNACE Kukharev A.L. -----	146
OIL POLLUTION OF WATERS IN THE ABKHAZIAN SECTOR OF THE BLACK SEA Gitsba Ya.V. -----	151
POSSIBILITIES OF STUDYING SHIFTS AND SITTING ROCKS OVER THE WORKED SPACE OF THE MINES OF THE CITY OF DONETSK Nesova A.V., Shestavin N.S., Kharkhordin E.V. -----	155
ANALYSIS OF DEVICES FOR UNIFORM SEPARATION OF THE WORKING FLUID FLOW IN HYDRAULIC SYSTEMS USED IN HEAVY ENGINEERING AND MOBILE COMPLEX ENGINEERING DEVICES Gorbunov R.S., Putilin N.V., Derkachev I.S. -----	161
PHYSICAL MODELS OF DISCHARGE IN A LIQUID Sergienko S.N., Yuriev S.A., Malyuta E.R. -----	165
ON THE POSSIBILITY OF OBSERVING THE SCHWINGER EFFECT OF THE PRODUCTION OF ELECTRON-POSITRON PAIRS USING LASER RADIATION Nikitin E.V. -----	171
ANALYSIS OF THE CURRENT STATE OF ELECTRODYNAMIC PARAMETERS RESEARCH METHODS OF MATERIALS Astafev P.A. -----	174
THE PROSPECT OF FURTHER IMPROVING THE EFFICIENCY OF PUMP ENERGY CONVERSION IN SOLID-STATE LASERS Murga E.V., Yuriev S.A., Malyuta E.R. -----	180
INVESTIGATION OF THE CHARACTERISTICS OF THE COLUMN OF A STABILIZED ELECTRIC ARC BY THE METHOD OF COMPUTATIONAL EXPERIMENT Kalyuzhny G.S., Korsunov R.A., Lyshtvan E.Y., Chalenko A.V. -----	184
SAPPHIRE PHOSPHORESCENCE, EXCITED BY A SLIDING HIGH-VOLTAGE DISCHARGE Gromenko V.M., Kharchenko E.I. -----	188
RADIATION ASSESSMENT OF URBAN PARKS OF LUGANSK Vorobjov S.G., Chalenko A.V. -----	190
OF LATERAL AND RADIAL DISTRIBUTION OF RADIONUCLIDES IN THE SOILS OF MOUNTAIN ADYGEA Buraeva E.A., Shiryayeva A.A. -----	194
RADIATION SITUATION IN RECREATIONAL, URBANIZED AND NATURAL-MAN-MADE TERRITORIES OF THE ROSTOV REGION Lyakhova N.V., Shvetsova D.A., Shadin A.E., Buraeva E.A., Mikhailova T.A. -----	198
RADIONUCLIDE AND ELEMENTAL COMPOSITIONS OF AEROSOL DUST IN THE ROSTOV AGGLOMERATION Mikhaylova T.A., Masharov K.S., Buraeva E.A., Kaschaeva E.A., Shiryayeva A.A. -----	202
MAGNETIC FLUIDS: PROPERTIES AND MAIN APPLICATIONS Aliev I. M., Dudaeva M. A., Sayd-Akhmatova F S., Khapaeva M. S. -----	206

SECTION 3. METHOD OF TEACHING PHYSICAL

IMPLEMENTATION OF THE COMPETENCE-BASED APPROACH WHEN PERFORMING RESEARCH WORK BY PHYSICS STUDENTS Korsunov K.A., Kharchenko E.I., Chalenko A.V. -----	217
FORMATION OF RESEARCH SKILLS OF PHYSICS STUDENTS IN THE COURSE OF PRE-GRADUATE PRACTICE Kharchenko E.I., Chalenko A.V., Lyshtvan E.Y. -----	221
ORGANIZATION OF RESEARCH WORK OF FUTURE TEACHERS OF PHYSICS BY EXPERIMENTAL METHODS Gorbenko Ie.Ie., Hrytskykh A.V. -----	225
FORMATION OF RESEARCH COMPETENCE OF STUDENTS OF HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS OF PHYSICAL SPECIALTIES Akulov Y. V., Bezverhniy A.L., Hrytskykh A.V. -----	228
METHODS AND DISTANCE LEARNING TECHNOLOGIES OF GIFTED STUDENTS Vorobjov S.G., Kamenev S.A., Chernopyatko E.A., Khristidi T.A., Soroka N.V. -----	233
MODERN EDUCATION IN THE CONDITIONS OF DEVELOPMENT OF INFORMATION TECHNOLOGIES Dadasheva Z.I., Dadashev R.R., Misirova L.M. -----	239
FORMATION OF INFORMATION AND DIDACTIC SKILLS OF TEACHERS Dadasheva Z.I. -----	242
PROFESSIONAL COMPETENCE OF A PHYSICS TEACHER Dadasheva Z.I., Dadashev S.I. -----	245

СЕКЦИЯ 1

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ

УДК 539.2

АКУСТИЧЕСКИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОМ 1D ФОНОННОМ
КРИСТАЛЛЕ

Румянцев В.В., Федоров С.А., Паладян Ю.А.

ACOUSTIC EXCITATIONS IN A NON-IDEAL ONE-DIMENSIONAL
FONON CRYSTAL

Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Paladyan Yu.A.

В рамках приближения виртуального кристалла изучены особенности распространения акустических возбуждений через несовершенную 1D сверхрешетку, выполнено численное моделирование зависимости ширины нижней запрещенной акустической зоны идеального (разупорядоченного как по составу, так и по толщине слоев) двухподрешеточного 1D фоннного кристалла от концентрации примесных слоев.

Ключевые слова: акустические возбуждения, идеальный 1D фоннный кристалл, приближение виртуального кристалла.

Введение. Исследования распространения звука в веществе, как на макроскопическом, так и на микроскопическом уровнях, составляющие предмет физической акустики [1, 2], занимают сегодня видное место при решении многих прикладных задач. Таких, например, как снижение уровня нежелательных звуков (борьба с шумом), поиск способов выделения полезных звуковых сигналов, а также решение проблемы акустического обнаружения объектов (эхолот). В связи с этим важное место занимает разработка и совершенствование акустической техники, способной измерять соответствующие физические свойства с помощью звука, и создание новых акустических метаматериалов, позволяющих контролировать распространение звуковых волн в среде. Совершенствование техники эксперимента, развитие теоретических представлений расширяет диапазон частот акустических возбуждений и делает акустические методы незаменимыми в исследованиях структуры твердых тел.

В настоящее время имеется значительное число работ [3-8], посвященных расчетам спектров электромагнитных и акустических возбуждений в сверхрешетках. Эти расчеты основываются на

использовании метода Т-матрицы и решении системы уравнений для коэффициентов разложения соответствующих полей в ряд Фурье. При нахождении конкретных физических характеристик (например, коэффициентов прохождения электромагнитного излучения, зонного спектра) точный расчет в общем случае осуществить не представляется возможным, поэтому используются приближенные методы. Например, в работе [9] показано, что вблизи зоны Бриллюэна можно приближенно представить в аналитической форме зависимость соответствующих частот от волнового вектора. Заметим, что реальные акустические сверхрешетки – это идеальные системы [10-12]. Распространенным методом расчета нормальных мод в неупорядоченных сверхрешетках со случайным распределением структурных дефектов по всему объему, является приближение виртуального кристалла (ПВК), которое заключается [13-15] в замене конфигурационно зависимых параметров гамильтониана задачи на конфигурационно усредненные их значения. При исследовании [7,8] электромагнитных возбуждений идеальных одномерных (1D) систем, содержащих инородные (дефектные) слои, распределенные случайным образом в объеме сверхрешетки, авторы данной работы применили развитый для идеальных сверхрешеток подход [9], с помощью которого соответствующие оптические характеристики идеальных сверхрешеток получены [7,8] с использованием именно ПВК.

В представленной работе указанный подход в рамках идеологии [8] перенесен на аналогичные расчеты характеристик акустических возбуждений, распространяющихся в несовершенном 1D фоннном

кристалле – системе плоскопараллельных слоев с анизотропными (в отличие от исследованных в [16] массивов изотропных слоев) примесными слоями, отличающимися упругими характеристиками.

Упругие волны в неидеальных 1D сверхрешетках. Рассмотрим подробнее акустические возбуждения в 1D неоднородной вдоль оси z , слоистой среде, полученной в результате случайной замены слоев идеальной сверхрешетки инородными однородными одноосными примесными слоями. Причем «ячейки» трансформированной «сверхрешетки» отличаются от соответствующих ячеек идеальной системы как по составу, так и по толщине. В данном случае в точном смысле понятия – нет ячеек (поскольку нарушена трансляционная инвариантность), однако, сохраняется взаимно однозначное соответствие между слоями идеальной и неидеальной систем. В рамках представленной модели соответствующие характеристики вещества: плотность $\rho(z)$ и упругие модули $\hat{\Lambda}(z)$ – можно представить, используя θ -функцию:

$$\rho(z) = \sum_{n,\alpha} \rho_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad \hat{\Lambda}(z) = \sum_{n,\alpha} \hat{\Lambda}_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z). \quad (1)$$

В дальнейшем удобно использовать величину $\hat{B}(z) = \hat{\Lambda}(z) / \rho(z)$, которую можно записать аналогично (1) в следующей форме:

$$\hat{B}(z) = \sum_{n,\alpha} \hat{B}_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad \hat{B}_{n\alpha} \equiv \frac{\hat{\Lambda}_{n\alpha}}{\rho_{n\alpha}} \quad (2)$$

где

$$\theta_{n\alpha}(z) = \theta \left[z - (n-1)d - \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} - a_{n\alpha} \right) \right] - \theta \left[z - (n-1)d - \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} \right]. \quad (3)$$

$\rho_{n\alpha}$, $\hat{\Lambda}_{n\alpha}$ и $a_{n\alpha}$ – соответственно слоевые характеристики (плотность вещества, модули упругости) и толщина слоя, причем n – номер «ячейки», α – номер элемента «ячейки».

Простейшим приближением, позволяющим выявлять особенности и трансформацию спектра элементарных возбуждений, обусловленные наличием в исследуемой системе дефектных слоев является ПВК. Это приближение дает возможность получить спектр акустических возбуждений в зависимости от концентрации дефектов в неидеальной 1D сверхрешетке в результате конфигурационного усреднения соответствующих параметров гамильтониана задачи. Процедура усреднения «преобразует» исследуемую неидеальную систему в т. н. виртуальный кристалл, в котором восстановлена трансляционная симметрия.

В отличие от идеальной сверхрешетки в случае несовершенного 1D фононного кристалла с варьируемыми составом и толщиной слоев тензор $\hat{B}_{n\alpha}$ и величина $a_{n\alpha}$ являются конфигурационно зависимыми. При использовании случайных величин $\eta_{n\alpha}^{\nu}$ они представимы в виде:

$$\hat{B}_{n\alpha} = \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad a_{n\alpha} = \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\mu(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{\mu(\alpha)}, \quad (4)$$

причем $\eta_{n\alpha}^{\nu,\mu} = 1$, если в узле $(n\alpha)$ 1D кристалла находится слой $\nu(\alpha)$ -го сорта и/или $\mu(\alpha)$ -й толщины, $\eta_{n\alpha}^{\nu,\mu} = 0$ – в ином случае. В дальнейшем полагаем, что эти факторы разупорядочения независимы друг от друга. После применения в соответствии с ПВК (аналогично квазичастичному подходу [8,14]) процедуры конфигурационного усреднения (обозначенной угловыми скобками) из (4) следует, что:

$$\langle \hat{B}_{n\alpha} \rangle = \sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)}, \quad \langle a_{n\alpha} \rangle = \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} a_{\alpha}^{\mu(\alpha)} C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)}, \quad (5)$$

здесь $C_{C\alpha}^{\nu}$, $C_{T\alpha}^{\mu}$ – концентрация примесного слоя ν, μ -го сорта соответственно по составу (нижний индекс «C») или по толщине (нижний индекс «T») в α -й подрешетке, $\sum_{\nu(\alpha)=1}^{s(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} = 1$, $\sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} = 1$. Как и в

случае неидеальной сверхрешетки задача нахождения фононных характеристик сводится к соответствующей задаче для «виртуального кристалла», слоевые характеристики которого характеризуются величинами $\hat{B}_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$ с толщинами слоев $a_{\alpha}^{\mu(\alpha)} \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$ и периодом ячеек $d \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$

(фигурные скобки содержат совокупность переменных $C_{C\alpha}^{\nu}$, $C_{T\alpha}^{\mu}$ для различных значений ν, μ). В указанном подходе соответствующие величины (спектр, ширина щели и т. д.) являются функциями концентрации инородных слоев $C_{C(T)\alpha}^{\nu(\alpha)}$.

Результаты и обсуждение. Рассмотрим распространение упругой монохроматической волны с блоховским вектором $\vec{K} = (0, 0, K)$ в полученном в результате конфигурационного усреднения 1D фононном «виртуальном кристалле» – идеальной системе с периодом решетки d . Таким образом, $\rho(z) = \rho(z+d)$, $a_{n\alpha} \equiv a_{\alpha}$, $\rho_{n\alpha} \equiv \rho_{\alpha}$ (аналогичные равенства выполняются и относительно тензора $\hat{\Lambda}$). После несложных вычислений, получим следующую систему уравнений для фурье-амплитуд $U_K^m(g)$ поля упругих смещений [16]:

$$\omega^2 U_K^i(g) = \sum_{g'} \left[B_{izzm}(g-g')(K+g')^2 - \right] U_K^m(g'), \quad (6)$$

где $g = \frac{2\pi}{d} p$ ($p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) - векторы соответствующей обратной решетки. Легко показать,

$$\hat{B}(p) = -\frac{i}{2\pi p} \sum_{\alpha, \nu(\alpha)} \hat{B}_\alpha^{\nu(\alpha)} C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \times \left\{ \exp \left[i \frac{2\pi}{d} \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) p \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right] - \exp \left[i \frac{2\pi}{d} \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) p \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) - a_\alpha \left(\left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right) \right] \right\}. \quad (7)$$

При наличии примесных одноосных слоев при выборе $\vec{K}$ вдоль оси симметрии $\vec{K} = (0, 0, K)$ отличны от нуля следующие компоненты тензора $\hat{B}(p)$ [18]: $B_{zzzz}(p), B_{zzxz}(p) = B_{yzyy}(p)$. В этом случае происходит продольно-поперечное расщепление фононного возбуждения и система уравнений (6) распадается на две независимые подсистемы. Первая, которая содержит лишь величины B_{zzzz} , описывает распространение продольных звуковых возбуждений, а вторая, в которой фигурирует лишь $B_{zzxz} = B_{yzyy}$, описывает поперечные возбуждения. Очевидно, что такое расщепление оказалось возможным, благодаря выбору геометрии задачи.

Законы дисперсии соответствующих акустических возбуждений определяются бесконечной системой уравнений, которая в общем случае (для произвольных K) решается с помощью приближенных численных методов (аналогично нахождению экситон-поляритонных возбуждений в диэлектрических сверхрешетках [3]). Тем не менее (как будет показано ниже), для значений волнового вектора K , близких к границе зоны Бриллюэна ($|K - \frac{2\pi}{d}| \approx K$), зависимость $\omega = \omega(K)$ можно записать в аналитической форме. Действительно, из (6) видно, что в этом случае наибольшими являются

что для случая 1D сверхрешетки, с характеристиками слоев, удовлетворяющими (6), тензор $A_{zzm}(g)$ обращается в нуль. Фурье-образ тензора $\hat{B}$, который получен с использованием выражения (6), имеет вид:

величины $U_K^i(g)$ для g с $p = 0, -1$ при выполнении условия $\omega^2 \approx K^2 B_{\parallel, \perp}^{(0)}$ (аналогично (6.1.23) в [7]). Здесь $B_{\parallel, \perp}^{(0)} \equiv B_{zzzz, xzzx}(p=0)$, $B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \equiv B_{zzzz, xzzx}(p=-1)$ - фурье-коэффициенты [18]. Оставляя в системе (9) только слагаемые соответствующие резонансу указанных плоских волн, $p = 0, -1$, получаем следующий закон дисперсии акустических возбуждений:

$$\omega_{\pm, \parallel, \perp}^2 \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) = K^2 \left[B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \pm B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right) \right]. \quad (8)$$

При изучении особенностей распространения акустических возбуждений важной для физических приложений величиной является ширина запрещенной зоны $\Delta\omega = |\omega_+ - \omega_-|$. Корни уравнения (8), ω_+, ω_- определяют границы спектральной полосы: при частотах $\omega_-(K) < \omega < \omega_+(K)$ - корни комплексные (запрещенная зона), при этом акустические волны - затухающие (брэгговское отражение), область частот $\omega < \omega_-, \omega > \omega_+$ соответствует распространяющимся волнам. В исследуемом случае ширина нижайшей запрещенной зоны, согласно (8), равна:

$$\frac{\Delta\omega \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)}{\omega} = \sqrt{1 + |B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)| / B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)} - \sqrt{1 - |B_{\parallel, \perp}^{(-1)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)| / B_{\parallel, \perp}^{(0)} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)|}. \quad (9)$$

Величины $B_{\parallel, \perp}^{0, -1} \left(\left\{ C_{C\alpha}^{\nu(\alpha)} \right\}, \left\{ C_{T\alpha}^{\mu(\alpha)} \right\} \right)$, зависящие от концентрации инородных (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоев, определяются количеством подрешеток и характеристиками материала такими, как коэффициенты Ламэ λ, μ (для однородных систем), плотность ρ вещества и коэффициенты упругости (для одноосной

подсистемы). Поэтому, концентрационное поведение запрещенной зоны $\Delta\omega$ может быть весьма разнообразным в зависимости от соответствующих параметров задачи.

Численное моделирование выполним для конкретного случая системы, в которой варьируется лишь вторая подрешетка, как по составу, так и по толщине. Причем в данном двухподрешеточном 1D

фононном кристалле первая подрешетка - слои дюралюминия (с модулем Юнга $E_1 = 70 \text{ ГПа}$, коэффициентом Пуассона $\sigma_1 = 0,31$ и плотностью $\rho_1 = 2800 \text{ кг/м}^3$), вторая подрешетка - слои целлулоида (с модулем Юнга $E_2^{(1)} = 1,9 \text{ ГПа}$, коэффициентом Пуассона $\sigma_2^{(1)} = 0,39$ и плотностью $\rho_2^{(1)} = 1400 \text{ кг/м}^3$). В качестве примесных по составу вторая подрешетка содержит одноосные слои α -кварца с концентрацией C_C . Поскольку вторая подрешетка варьируется также и по толщине, то усредненный период исследуемого 1D фононного кристалла имеет вид:

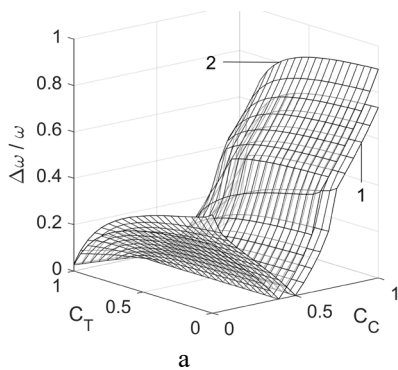
$$d(C_T) = a_1 \left[1 + \frac{a_2^{(1)}}{a_1} + \left(\frac{a_2^{(2)}}{a_1} - \frac{a_2^{(1)}}{a_1} \right) C_T \right], \quad (10)$$

где a_1 - толщина слоев первой подрешетки, $a_2^{(1)}$ - толщина слоев второй подрешетки идеальной сверхрешетки, $a_2^{(2)}$ - толщина примесных слоев второй подрешетки с концентрацией C_T .

Подробный расчет на основе соотношения (7) приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} B_{\parallel,\perp}^{(0)} &= \frac{a_1}{d(C_T)} \left[B_{(\parallel,\perp)1} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} - (B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)}) C_C^{(2)} \right], \\ B_{\parallel,\perp}^{(-1)} &= \frac{1}{\pi} \left\{ B_{(\parallel,\perp)1}^2 + \left[B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} + (B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)}) C_C^{(2)} \right]^2 - \right. \\ &\quad \left. - 2B_{(\parallel,\perp)1} \left[B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)} + (B_{(\parallel,\perp)2}^{(2)} - B_{(\parallel,\perp)2}^{(1)}) C_C^{(2)} \right] \right\}^{1/2} \sin \frac{\pi a_1}{d(C_T)} \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь, согласно [18], $B_{(\parallel)1} = \frac{E_1(1-\sigma_1)}{\rho_1(1+\sigma_1)(1-2\sigma_1)}$,



$$\begin{aligned} B_{(\perp)1} &= \frac{E_1}{2\rho_1(1+\sigma_1)}, B_{(\parallel)2}^{(1)} = \frac{E_2^{(1)}(1-\sigma_2^{(1)})}{\rho_2^{(1)}(1+\sigma_2^{(1)})(1-2\sigma_2^{(1)})}, \\ B_{(\perp)2}^{(1)} &= \frac{E_2^{(1)}}{2\rho_2^{(1)}(1+\sigma_2^{(1)})}, \text{ а для одноосных примесных} \\ \text{слоев, следуя (5), } B_{(\parallel)2}^{(2)} &\equiv B_{(zzzz)2}^{(2)} = \frac{\Lambda_{(zzzz)2}^{(2)}}{\rho_2^{(2)}}, \\ B_{(\perp)2}^{(2)} &\equiv B_{(xzzx)2}^{(2)} = \frac{\Lambda_{(xzzx)2}^{(2)}}{\rho_2^{(2)}}. \end{aligned}$$

Рассмотрим особенности зависимости приведенной ширины щели $\Delta\omega/\omega$ исследуемой сверхрешетки от концентрации примесных слоев при вариации их по составу и по толщине во второй подрешетке. В этом случае зависимость $\Delta\omega/\omega(C_C, C_T)$ представлена на рис.1. Анализ поведения поверхностей $\Delta\omega/\omega(C_C, C_T)$ показывает, что при конкретных параметрах задачи и величинах концентрации примесных слоев значения $\Delta\omega$ - существенно различны. Для определенных C_C, C_T значения $\Delta\omega$ - велики, т.е. многослойная система является акустически слабопроницаемой, а для других значений концентрации структурных дефектов ширина щели $\Delta\omega$ (в рамках используемой модели) мала. Причем она обращается в нуль лишь при определенном значении C_C и произвольных C_T . (следовательно, акустические возбуждения определенной частоты проходят беспрепятственно через многослойники с соответствующими характеристиками материала).

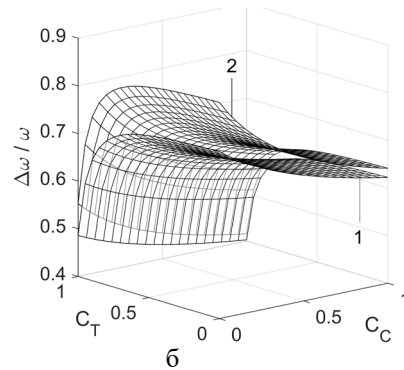


Рис. 1. Зависимость величины приведенной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega$ исследуемой сверхрешетки от концентрации примесных слоев при вариации их по составу и по толщине: C_C, C_T . Поверхности 1 и 2 соответствуют продольной и поперечной модам. Случай а) соответствует $a_2^{(1)}/a_1 = 5$, $a_2^{(2)}/a_1 = 0,1$, а в случае б) - $a_2^{(1)}/a_1 = 10$, $a_2^{(2)}/a_1 = 0,5$

Выводы. Из выше проведенного исследования следует, что величина ширины запрещенной зоны $\Delta\omega$ зависит от параметров конкретной исследуемой сверхрешетки и поляризации акустических волн.

Показано, что на концентрационное поведение $\Delta\omega/\omega(C_C, C_T)$ влияет также отношение величин

$\frac{a_2^{(2)}}{a_1}, \frac{a_2^{(1)}}{a_1}$. Отметим, что на одной и той же частоте

звуковой волны для одной и той же сверхрешетки не обязательно найдутся такие значения концентраций C_c, C_T , при которых поперечная и/или продольная моды удовлетворяют условию $\Delta\omega = 0$. Как показано на рис. 1, это условие выполняется лишь для определенной области значений C_c . Выполненное в работе исследование зависимости ширины нижней запрещенной акустической зоны неидеальных 1D сверхрешеток от концентрации примесных слоев может оказаться полезным при конструировании акустических композитных материалов, используемых при различных режимах эксплуатации.

Л и т е р а т у р а

1. Бреховских Л.М., Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973.
2. Shu Zhang, Chunguang Xia, Nicholas Fang // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. - P. 024301(1).
3. Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N., Meade R.D., Photonic Crystals. Molding the Flow of Light / Second Edition. Princeton, Princeton University Press, 2008.
4. Шабанов В.Ф., Ветров С.Я., Шабанов А.В., Оптика реальных фотонных кристаллов, Новосибирск, СО РАН, 2005.
5. Косевич А.М. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. Вып. 11. - С. 633.
6. Pendry J.B., Li Jensen // New Journal of Physics. 2008. V.10, 11. - P.115032(1).
7. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Shtaerman E.Ya. // Superlattices and Microstructures. 2010. V. 47. № 1. - P. 29.
8. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. // Photonic Crystals: Optical Properties, Fabrication and Applications. Chapter 8 / ed. William L. Dahl, NY, Nova Science Publishers, Inc., 2011.
9. Яриу А., Юх П., Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987.
10. Feng-Ming Li, Yue-Sheng Wang // Int. J. Solids Struct. 2005. V. 42. - P. 6457.
11. A.-Li Chen, Yue-Sheng Wang // Phys. B. 2007. V. 392. - P. 369.
12. Zhi-Zhong Yan, Chuanzeng Zhang, Yue-Sheng Wang // Wave Motion, 2010. V. 47. - P. 409.
13. Parmenter R.H. // Phys. Rev. 1955. V. 97. № 3. - P. 587.
14. Займан Дж., Модели беспорядка. М.: Мир, 1982.
15. Dargan T.G., Capaz R.B., Koiler Belita // Brazilian J. of Phys. 1997. V. 27/A. - P. 299.
16. Румянцев В.В., Федоров С.А., Гуменник К.В. Акустический журнал. - 2014. -Т.60, №3. - С. 327
17. Косевич А.М., Физическая механика реальных кристаллов. К.: Наукова думка, 1981.
18. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975. - 680с.
19. Най Дж., Физические свойства кристаллов. М.: Мир, 1967. - 388с.
3. Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N. and Meade R.D. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light (Second Edition Princeton: Princeton University Press), 2008. - p. 305.
4. Shabanov V.F., Vetrov S.Ya. and Shabanov A.V. Optics of real photonic crystals. Liquid crystal defects, irregularities [In Russian] (RAS Publisher, Siberian Branch), 2005. - p. 239.
5. Kosevich A.M. // JETP Letters. - 2001. 74. - 559.
6. Pendry J.B. and Li Jensen // New Journal of Physics. - 2008. 10, 11. - 115032(1).
7. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A. and Shtaerman E.Ya. // Superlattices and Microstructures, 2010. 47. - 29.
8. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A. and Gumennyk K.V. Photonic Crystals: Optical Properties, Fabrication and Applications Chapter 8 / ed. William L. Dahl (NY: Nova Science Publishers Inc.), 2011. - p. 34.
9. Yariv A. and Yeh P. Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation (Wiley: New York), 1984. - p. 604.
10. Feng-Ming Li and Yue-Sheng Wang // Int. J. Solids Struct. 2005.- 42. - 6457.
11. A-Li Chen and Yue-Sheng Wang // Physica B: Condensed Matter. - 2007. 392. - 369.
12. Zhi-Zhong Yan, Chuanzeng Zhang and Yue-Sheng Wang // Wave Motion. - 2010. 47. - 409.
13. Parmenter R.H. // Phys. Rev. - 1955. 97. - 587.
14. Ziman J.M. Models of Disorder (London: Cambridge Univ. Press), 1979. - p. 480.
15. Dargan T.G., Capaz R.B. and Koiler Belita // Brazilian J. of Phys. - 1997. - 27/A. - 299.
16. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A. and Gumennik K.V. // Acoustical Physics. - 2014. 60. - 348.
17. Kosevich A.M. Physical mechanics of real crystals [In Russian] (Kiev: Naukova Dumka; translated into Polish: Wroclaw, Wydawnictwo Uniwersytetu Wroclawskiego, 2000), 1981. - p. 327.
18. Sirotnin Yu.I. and Shaskolskaya M.P. Fundamentals of Crystal Physics (Chicago: Imported Publications), 1983. - p. 654.
19. Nye J.F. Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices (Oxford University Press), 1985. - p. 352.

Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Paladyan Ya.A. ACOUSTIC EXCITATIONS IN A NON-IDEAL ONE-DIMENSIONAL SUPERLATTICE WITH ANISOTROPIC IMPURITY LAYERS

The virtual crystal approximation is used to study the specifics of propagation of acoustic excitations through a non-ideal one-dimensional superlattice. Numerical modeling is performed to evaluate the dependence of the lowermost acoustic band gap in a two-sublattice phonon crystal (disordered in composition and widths of constituent layers) on impurity layer concentration.

Key words: acoustic excitations, non-ideal one-dimensional phonon crystal, virtual crystal approximation

Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. отделом теории динамических свойств сложных систем, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина.

E-mail: 380957931135@yandex.ru

Rumyantsev Vladimir Vasilevich, D. Sci. in Solid State Physics, professor, head of department of theory of

complex systems dynamic properties, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering
E-mail: 380957931135@yandex.ru

Федоров Станислав Афанасьевич, к. ф.-м. н., ст. научный сотрудник, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина.
E-mail: stan.fedorov2012@yandex.ua

Fedorov Stanislav Afanasevich, PhD in Solid State Physics, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering,
E-mail: stan.fedorov2012@yandex.ua

Паладян Юлия Александровна, младший научный сотрудник, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина.
E-mail: paladyan0108@yandex.ru

Paladyan Yuliya Aleksandrovna, junior researcher, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering,
E-mail: paladyan0108@yandex.ru

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2018

УДК 621.316.8:004.94

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РУТЕНИЕВЫХ ТОЛСТОПЛЕНОЧНЫХ РЕЗИСТОРОВ С ИЗМЕНЯЮЩИМСЯ КОЛИЧЕСТВОМ ТОКОПРОВОДЯЩИХ ФАЗ

Лозинский Н.С.

COMPUTER SIMULATION OF ELECTRICAL PARAMETERS OF RUTHENIUM THICK FILM RESISTORS WITH A VARIABLE NUMBER OF CURRENT-CONDUCTING PHASES

Lozynskyy M.S.

Сопоставляются значения нормированного удельного поверхностного сопротивления (ρ_s) и его температурного коэффициента (ТКС) толсто пленочных резисторов (ТПР), изготовленных вжиганием паст на основе рутенита свинца и стекла кислотного характера с параметрами, полученными моделированием свойств толстых пленок, содержащих одну и две токопроводящие фазы (ТПФ) с различной проводимостью, по известной формуле В.И. Оделевского.

Показано, что рассчитанные значения ρ_s и ТКС модели на основе двух ТПФ ближе к экспериментальным параметрам, нежели модели с одной исходной ТПФ. При этом ρ_s двухкомпонентной по ТПФ модели ТПР тем ниже, а ТКС тем выше в области положительных значений, чем больше проводника с более высокой проводимостью в ней задействовано. Такие расчеты, являются аргументированным обоснованием причины повышения проводимости рутениевых резисторов при образовании в их составе оксида рутения (IV) после вжигания паст на основе рутенитов свинца и других металлов.

Ключевые слова: электротехнические параметры толсто пленочных резисторов, компьютерное моделирование свойств двух- и трехкомпонентных систем.

Введение. Количество ТПФ в ТПР изменяется при вжигании резистивных паст, содержащих химически активные ингредиенты, например, диоксид рутения(IV) и стекло основного характера или рутенит свинца и стекло кислотного характера [1]. В последнем случае, наряду с исходной ТПФ – $\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ (с удельным объемным сопротивлением (ρ_v) = $4 \cdot 10^{-4}$, Ом·м (далее – B_2) и ТКС = $100 \cdot 10^{-6}$, $1/^\circ\text{C}$, (далее – α_2), появляется проводник с более высокой проводимостью – RuO_2 (ρ_v = $4 \cdot 10^{-7}$, Ом·м (B_3) и ТКС ~ $8000 \cdot 10^{-6}$, $1/^\circ\text{C}$ (α_3) [2]. По мнению разработчиков ТПР это должно привести, и приводит к уменьшению ρ_s и росту, в области положительных значений, ТКС резисторов [3–5]. Однако, это очевидное, но умозрительное толкование факта, требующее более углубленного и аргументированного теоретического обоснования.

Целью работы является обоснование методом математического моделирования обобщенной проводимости причин и характера влияния на электротехнические параметры толсто пленочных резисторов новой (второй), образующейся в процессе изготовления, токопроводящей фазы с более высокой проводимостью.

Изложение основного материала. Для интерпретации причин и характера влияния на свойства многокомпонентных систем параметров технологического процесса производства широко применяются и достаточно эффективны методы математического моделирования обобщенной проводимости [6, 7]. Среди известных для такого моделирования [8–12], привлекает внимание формула В.И. Оделевского, которая: справедлива при расчетах свойств систем, компоненты (фазы) которых значительно различаются значениями обобщенной проводимости (например, смесь проводника и диэлектрика) [9]; позволяет рассчитывать, как концентрационные, так и их температурные зависимости [10]; демонстрирует хорошее соответствие расчетных результатов с экспериментальными данными [9] и уже применялась для расчета параметров толсто пленочных резисторов [11].

В рамках «статистической системы» обобщенная проводимость толсто пленочного резистора, как i -фазной «смеси», по выбранной формуле представляется как [13]:

$$\sum_i \frac{\lambda_i - \lambda}{\lambda_i + 2\lambda} \cdot \varphi_i = 0,$$

где λ_i – проводимость i -той фазы (i -компонента), λ – обобщенная проводимость статистической смеси, φ_i – объемная доля i -той фазы (i -компонента).

Для моделируемого случая, когда толсто пленочный резистор содержит три фазы – рутенит свинца, оксид рутения (IV) и стекло, формула принимает вид:

$$\frac{\lambda_1 - \lambda}{\lambda_1 + 2\lambda} \cdot \varphi_1 + \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 + 2\lambda} \cdot \varphi_2 + \frac{\lambda_3 - \lambda}{\lambda_3 + 2\lambda} \cdot \varphi_3 = 0,$$

где λ_1 – удельная электропроводность стекла,

$$\lambda_1 = A e^{\frac{E}{kT}}, \quad (k - \text{константа Больцмана, } A -$$

электропроводность стекла при $T \rightarrow \infty$, E – энергия активации электропроводности, эВ);

$\lambda_2 = 1/B_2[1 + \alpha_2(T-273)]$, $\lambda_3 = 1/B_3[1 + \alpha_3(T-273)]$ – удельные электропроводности рутенита свинца и оксида рутения (IV), соответственно (α_2 и α_3 – температурные коэффициенты сопротивления, $1/^\circ\text{C}$, а B_2 и B_3 – сопротивление при 273 К рутенита свинца и оксида рутения (IV), соответственно); φ_1 , φ_2 , φ_3 – объемные доли фаз (компонентов) (стекла, рутенита свинца и оксида рутения (IV), соответственно).

Формульное представление для обобщенной электропроводности – решение кубического уравнения, получаемого по формуле Кардано. Обобщенную электропроводность ТПР моделировали по стандартной подпрограмме математического обеспечения. Расчет производили для значений $\alpha_2 = 100 \cdot 10^{-6}$, $1/^\circ\text{C}$, $B_2 = 4 \cdot 10^{-4}$ Ом·м [2] и α_3 в интервале $5 \cdot 10^{-2} \div 5 \cdot 10^{-4}$, $1/^\circ\text{C}$, $B_3 = 4 \cdot 10^{-7}$ Ом·м [2], E и A в интервалах $0,001 \div 10$ эВ и $5 \cdot 10^{-4} \div 5 \cdot 10^7$ Ом⁻¹·м⁻¹, соответственно. Значения φ_1 , φ_2 и φ_3 определяли методом количественного рентгенофазового анализа (РФА) по методике [1] (результаты приведены в табл. 1), а также выбирали, исходя из предположения о возможном разрушении рутенита свинца в ТПР резисторов на 10, 50 и 90% (табл. 2). Параллельно проводили расчет обобщенной проводимости ТПР, если бы компонентный состав резисторов при изготовлении не подвергался изменению. Формульное представление для обобщенной электропроводности в этом случае – это решение квадратного уравнения. Значения φ_1 и φ_2 такого двухкомпонентного толсто пленочного резистора представлено в табл. 1.

Величины остальных параметров при расчете не изменяли.

По полученным значениям λ рассчитывали сопротивление ТПР по формуле $R = 1/\lambda h$, где h – нормированная толщина резистивной пленки – $1 \cdot 10^{-6}$ м.

Пасты и резисторы получали, а также измеряли их ρ_s (нормировали к толщине ТПР – $1 \cdot 10^{-6}$ м) и температурный коэффициент сопротивления (ТКС) по технологии и методикам, описанным в [1].

Программа моделирования предусматривала несколько этапов:

- нахождение значений E и A , при которых вычисленные значения максимально приближались к экспериментально измеренному сопротивлению ТПР при температуре 298К;

- нахождение значений сопротивления ТПР в интервале температур 73–673К и их ТКС;

- установление характера влияния на расчетное сопротивление ТПР вариаций содержания фаз, как результата разрушения рутенита свинца;

- сопоставление результатов моделирования для двух и трехкомпонентных моделей между собой и с параметрами изготовленных резисторов.

Результаты исследований. Моделирование показывает, что на величину обобщенной электропроводности самое сильное влияние оказывают параметры A и E стекла. Максимально приближенные значения между расчетными и экспериментальными данными получены при значениях этих параметров в интервалах $5 \cdot 10^{-6} \div 5$ и $0,001 \div 2$, соответственно. При этом абсолютные величины обобщенной электропроводности для образцов с одинаковыми объемными долями фаз остаются близкими при значительном варьировании параметров A и E . По этой причине, а также учитывая, что E известного кадмийсодержащего стекла, которое близко по составу к выбранному в работе стеклу, равно 1,8 эВ [14, 15], при моделировании, для получения, сопоставляемых с экспериментальными данными, приняты значения для $A = 5 \cdot 10^{-6}$, Ом⁻¹·м⁻¹ и $E = 2$ эВ.

Таблица 1

Объемное содержание фаз в толстых пленках, содержащих 20–90 мас.% ТПР

Содержание $\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ в неорганической композиции паст, мас.%	Объемное содержание фаз, %				
	Двухфазная система (взаимодействие отсутствует), мас.%		Трехфазная система (взаимодействие установлено), мас.%		
	$\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$	Стекла (ПС)	$\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ (установленный % превращения)	RuO_2	ПС
20	11,15	88,85	4,07 (65%)	3,32	92,61
30	17,70	82,30	11,06 (40%)	3,24	85,70
35	21,27	78,73	15,44 (30%)	2,91	81,64
40	25,07	74,93	19,48 (25%)	2,86	77,65
50	33,41	66,59	28,35 (18%)	2,74	68,91
60	42,94	57,06	39,60 (10%)	1,94	58,46
70	53,94	46,06	51,24 (7%)	1,70	47,06
90	81,87	18,13	80,98 (2%)	0,73	18,30

Таблица 2

Выбранные вариации объемных долей фаз в ТПР

Содержание $Pb_2Ru_2O_6$ в неорганических композициях паст, мас. %	Степень превращения $Pb_2Ru_2O_6$, %	Объемная доля фаз		
		φ_1	φ_2	φ_3
50	10	0,6614	0,2937	0,0398
	50	0,6442	0,1616	0,1941
	90	0,6279	0,0315	0,3405
40	10	0,7456	0,2245	0,0300
	50	0,7309	0,1222	0,1468
	90	0,7168	0,0240	0,2592
35	10	0,7840	0,1906	0,0254
	50	0,7708	0,1041	0,1251
	90	0,7581	0,0205	0,2214
30	10	0,8201	0,1587	0,0212
	50	0,8086	0,0870	0,1044
	90	0,7975	0,0172	0,1452
20	10	0,8866	0,1001	0,0134
	50	0,8787	0,0551	0,0662
	90	0,8710	0,0109	0,1181

Рассчитанное сопротивление ТПР при этих значениях параметров А и Е и объемных долях фаз по табл. 1 представлены на рис. 1. График 1 показывает изменение усредненных значений сопротивлений изготовленных резисторов (по 40 образцов для каждого номинала) от содержания токопроводящей фазы в неорганической композиции паст (табл. 3).

Наилучшее соответствие между экспериментальными и расчетными результатами наблюдается для модели толсто пленочного резистора, на основе трех, а не двух компонентов, при содержании 30–50 мас.% (15–30 об.%) ТПФ в неорганических композициях паст.

Таблица 3

Удельное поверхностное сопротивление толсто пленочных резисторов, нормированное к толщине $1 \cdot 10^{-6}$ м

Содержание ТПФ в неорганической композиции паст, мас. %	Результаты статистической обработки сопротивления ТПР						
	R_{CP} , кОм	$R_{CP} + \varepsilon_\alpha$	$R_{CP} - \varepsilon_\alpha$	S_x	$\bar{S}$	ε_α	$\frac{\varepsilon_\alpha \cdot 100}{R_{CP}}$
20	463,8	677,2	250,4	278,31	92,77	213,33	71,12
30	18,357	31,540	5,173	12,42	5,07	13,183	43,94
35	7,183	9,641	4,724	3,871	1,117	2,453	27,32
40	3,831	7,749	1,909	2,449	1,224	3,918	30,60
50	0,9371	1,1999	0,674	0,3613	0,1142	0,2628	26,28
70	0,02994	0,0392	0,0207	$3,73 \cdot 10^{-3}$	$2,2 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$	30,89

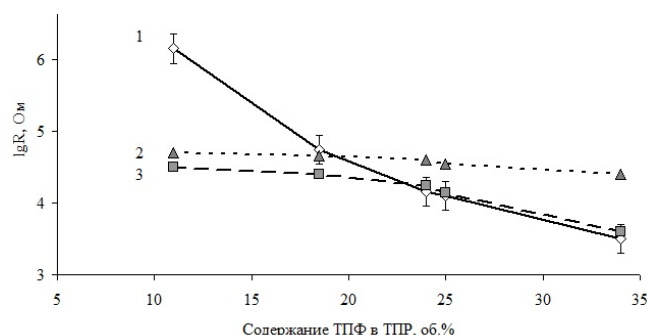


Рис. 1. Зависимость сопротивления ТПР от содержания ТПФ в неорганической композиции паст, об. %:

1 – для изготовленных резисторов; 2 – расчетная для резисторов с однофазной ТПФ;

3 – расчетная для резисторов с двухфазной ТПФ

При увеличении значений Е постоянного связующего до 3–5 эВ растут абсолютные значения экстремумов проводимости (сопротивление ТПР соответственно падает) и расширяется диапазон составов $0,6891 < \varphi_1 < 0,9261$, у которых они

проявляются. Увеличение степени превращения рутенита свинца в ТПР (при расчетах с φ по табл. 2) приводит к росту в экстремальных точках, по абсолютной величине в отрицательной области значений, ТКС резисторов и смещает их в сторону

уменьшения содержания токопроводящей фазы в неорганической композиции паст (рис. 2). Этот же процесс вызывает аналогичное изменение сопротивления и смещение положения его экстремума по температуре модельных ТПР (рис. 3).

Кроме того, моделирование показывает, что увеличение степени превращения рутенита свинца вызывает рост ТКС резисторов, а увеличение значений E стекла, наоборот, его снижение.

Значения ТКС, согласно модели, для ϕ , приведенных в табл. 1, при $E = 2$ эВ показывает, что для двухфазных модельных толсто пленочных резисторов их значения отрицательны, менее $-50 \cdot 10^{-6}$, $1/^\circ\text{C}$ и они практически не зависят от содержания ТПФ, а для трехкомпонентных моделей положительно и растут с увеличением содержания RuO_2 и ТПФ в целом в толсто пленочном резисторе (табл. 4).

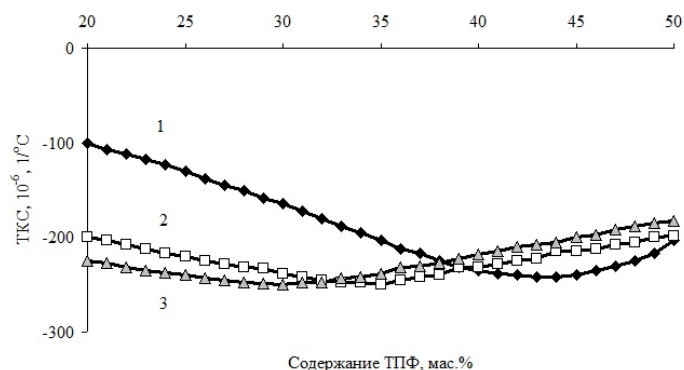


Рис. 2. Модельные концентрационные зависимости ТКС толсто пленочных резисторов от компонентного состава ТПФ, мас. %: 1 – 90 $\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ и 10 RuO_2 ; 2 – 50 $\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ и 50 RuO_2 ; 3 – 10 $\text{Pb}_2\text{Ru}_2\text{O}_6$ и 90 RuO_2

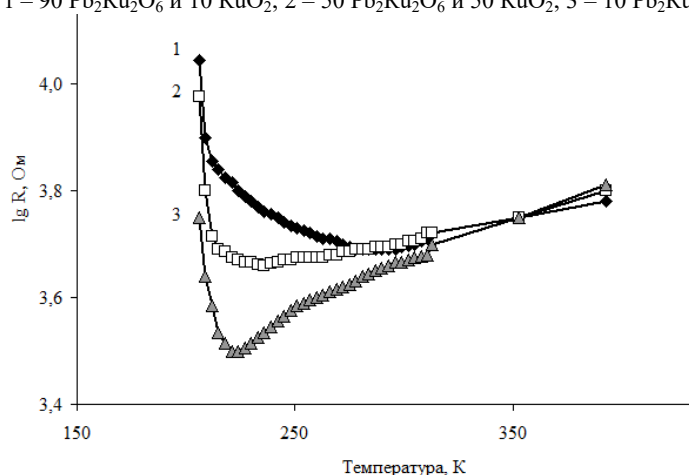


Рис. 3. Расчетные температурные зависимости $\lg R$ для ТПР, содержащих 35 мас.% ТПФ в неорганической композиции резистивных паст с различной степенью превращения рутенита свинца, %: 1 – 10; 2 – 50; 3 – 90 (Значения ϕ_1 , ϕ_2 и ϕ_3 приведены в табл. 2, $E = 3$ эВ)

Таблица 4

Расчетные значения ТКС ТПР с варьируемыми значениями степени превращения ТПФ и величины энергии активации проводимости стекла

Содержание ТПФ в неорганической композиции паст, мас.%	Энергия активации проводимости стекла, эВ								
	2			3			5		
	Температурный коэффициент сопротивления в областях температур, °C: 25÷125 (верхнее значение) и –60÷25 (нижнее значение) при степени превращения рутенита свинца в мас.%, 1/°C								
	10	50	90	10	50	90	10	50	90
50	3139	3298	4035	723	1756	2099	716	1746	2084
	6104	6742	7354	1100	2337	2691	1089	2326	3073
40	272	944	1313	270	944	1318	250	931	1302
	374	1252	1704	346	1231	1701	321	1208	1677
35	153	683	1006	154	664	997	138	647	977
	210	845	1262	176	832	1263	143	809	1241
30	97	453	738	90	444	735	76	430	713
	117	552	910	102	537	897	57	513	874
20	26	188	363	21	197	451	7	180	334
	24	240	432	11	216	402	–24	184	371

Выводы. Компьютерное моделирование электротехнических параметров толсто пленочных резисторов с изменяющимся количеством токопроводящих фаз (одна и две) в рамках теории обобщенной проводимости В.И. Одеlevского показывает, что появление в пленках новой токопроводящей фазы с более высокой, чем у исходной, проводимостью вызывает снижение их сопротивления и рост его температурного коэффициента в целом.

Полученные тенденции и оценки являются аргументированным обоснованием причины наблюдаемого на практике снижения ρ_s и повышения температурного коэффициента сопротивления в области положительных значений, толсто пленочных резисторов на основе рутенидов металлов ($Pb_2Ru_2O_6$, $Bi_2Ru_2O_7$, $CaRuO_3$, $BaRuO_3$ и других), в составе которых при вжигании паст образуется вторая токопроводящая фаза – RuO_2 .

Л и т е р а т у р а

1. Lopanov, A.N. Chemical processes accompanying the formation of modified ruthenium resistors and their functional properties [Text] / A.N. Lopanov, N.S. Lozinsky, Ya.A. Moroz // Russian Chemical Bulletin, International Edition. – 2021. – Vol. 69, No. 9. – P. 1719–1723.

2. Chiou, B.-Sh. Temperature dependence of the electrical conduction in RuO_2 -based thick film resistors [Text] / B.-Sh. Chiou, J.-Yu. Sheu // J. Electronic Materials. – 1992. – Vol. 21, No. 6. – P. 575–581.

3. Khanna, P.K. Inter-diffusion phenomena and electrical conduction in thick-film segmented-resistor structures [Text] / P.K. Khanna, S.K. Bhatnagar, M.L. Sisodia // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1988. – Vol. 21. – P. 1796–1801.

4. Pit, K. Chemical constitution and conduction mechanisms in thick film resistors [Text] / K. Pit // J. Mat. Sci.: Mat. Electron. – 1996. – Vol. 7. – P. 187–190.

5. Hrovat M. The interactions of conductive and glass phase in thick-film resistors during firing [Text] / M. Hrovat et al // Informacije MIDE. – 2004. – Vol. 34, No. 1. – P. 7–10.

6. Listkiewicz, E. Computer simulation of thick resistive films as two component percolation systems: segregation of the conducting component [Text] / E. Listkiewicz, A. Kusy // Thin Solid Films. – 1985. – Vol. 130. – P. 1–15.

7. Cai, J., Naraghi M. Computational analysis of electrical conduction in hybrid nanomaterials with embedded non-penetrating conductive particles [Text] // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2016. – Vol. 24. – Atcl. 065004 (22 p).

8. Murthy, K.S.R.C. Evolution of conduction mechanism in thick film resistors [Text] / K S.R.C. Murthy // Int. J. Adv. Res. – 2019. – Vol. 7, No 4. – P. 238–256.

9. Эдвabник, В.Г. Теория обобщенной проводимости / В.Г. Эдвabник. – Новосибирск : Наука, 2019. – 210 с.

10. Grimaldi, C. Conduction mechanisms in printed thick-film resistors. – P. 112–133. In book: Printed films Materials science and applications in sensors, electronics and photonics. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. Ed. M. Prudenziati, J. Hormadaly. – Oxford: Woodhead Publishing Limited, 2012. – 608 p.

11. Василенко, О.А. Расчет зависимости состав – свойство композиционных материалов в приближениях «статистических систем» [Текст] / О.А. Василенко [и др.]

// Электронная техника – 1985. – Сер. 6. Материалы, №3(202). – С. 71–74.

12. Nilsson, F. Conductivity simulations of field-grading composites [Text] / F. Nilsson, M. Unge // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2016. – Vol. 49. – Atcl. 335303 (9 p).

13. Одеlevский, В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем. Статистические смеси невытянутых частиц [Текст] / В.И. Одеlevский // Журн. технической физики. – 1951. – Т. 21, №6. – С. 678–685.

14. Ansell, M.P. Conduction process in thick film resistor [Text] / M.P. Ansell // Electrocomp. Sci. Technol. – 1976. – Vol. 34. – P. 131–140.

15. Абдурахманов Гулмурза Особенности структуры и транспортных свойств бесщелочных свинцово-силикатных стекол, легированных оксидами металлов : дис. ... доктора физ.-мат. наук – Ташкент, 2014. – 268 с.

R e f e r e n c e s

1. Lopanov, A.N. Chemical Processes Accompanying the Formation of Modified Ruthenium Resistors and Their Functional Properties [Text] / A.N. Lopanov, N.S. Lozinsky, Ya.A. Moroz // Russian Chemical Bulletin, International Edition. – 2020. – Vol. 69, No. 9. – P. 1719–1723.

2. Chiou, B.-Sh. Temperature dependence of the electrical conduction in RuO_2 -based thick film resistors [Text] / B.-Sh. Chiou, J.-Yu. Sheu // J. Electronic Materials. – 1992. – Vol. 21, No. 6. – P. 575–581.

3. Khanna, P.K. Inter-diffusion phenomena and electrical conduction in thick-film segmented-resistor structures [Text] / P.K. Khanna, S.K. Bhatnagar, M.L. Sisodia // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1988. – Vol. 21. – P. 1796–1801.

4. Pit, K. Chemical constitution and conduction mechanisms in thick film resistors [Text] / K. Pit // J. Mat. Sci.: Mat. Electron. – 1996. – Vol. 7. – P. 187–190.

5. Hrovat M. The interactions of conductive and glass phase in thick-film resistors during firing [Text] / M. Hrovat et al // Informacije MIDE. – 2004. – Vol. 34, No. 1. – P. 7–10.

6. Listkiewicz, E. Computer simulation of thick resistive films as two component percolation systems: segregation of the conducting component [Text] / E. Listkiewicz, A. Kusy // Thin Solid Films. – 1985. – Vol. 130. – P. 1–15.

7. Cai, J., Naraghi M. Computational analysis of electrical conduction in hybrid nanomaterials with embedded non-penetrating conductive particles [Text] // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2016. – Vol. 24. – Atcl. 065004 (22 p).

8. Murthy, K.S.R.C. Evolution of conduction mechanism in thick film resistors [Text] / K S.R.C. Murthy // Int. J. Adv. Res. – 2019. – Vol. 7, No 4. – P. 238–256.

9. Jedvabnik, V.G. Teorija obobshhennoj provodimosti / V.G. Jedvabnik. – Novosibirsk : Nauka, 2019. – 210 s.

10. Grimaldi, C. Conduction mechanisms in printed thick-film resistors. – P. 112–133. In book: Printed films Materials science and applications in sensors, electronics and photonics. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. Ed. M. Prudenziati, J. Hormadaly. – Oxford: Woodhead Publishing Limited, 2012. – 608 p.

11. Василенко, О.А. Расчет зависимости состав – свойство композиционных материалов в приближениях «статистических систем» [Текст] / О.А. Василенко [и др.] // Электронная техника – 1985. – Сер. 6. Материалы, №3(202). – С. 71–74.

12. Nilsson, F. Conductivity simulations of field-grading composites [Text] / F. Nilsson, M. Unge // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2016. – Vol. 49. – Atcl. 335303 (9 p).

13. Odelevskij, V.I. Raschet obobshhennoj provodimosti geterogennyh sistem. Statisticheskie smesi nevytjanutyh chastic [Tekst] / V.I. Odelevskij // Zhurn. tekhnicheskoy fiziki. – 1951. – T. 21, №6. – S. 678–685.

14. Ansell, M.P. Conduction process in thick film resistor [Text] / M.P. Ansell // Electrocomp. Sci. Technol. – 1976. – Vol. 34. – P. 131–140.

15. Abdurahmanov Gulmurza Osobennosti struktury i transportnyh svoystv besshelochnyh svincovo-silikatnyh stekol, legirovannyh oksidami metallov : dis. ... doktora fiz.-mat. nauk. – Tashkent, 2014 – 268 s.

Lozynskyy M.S.

COMPUTER SIMULATION OF ELECTRICAL PARAMETERS OF RUTHENIUM THICK FILM RESISTORS WITH A VARIABLE NUMBER OF CURRENT-CONDUCTING PHASES

The composition of the conductive phase (CF) in thick film resistors (TFRs) changes when firing resistive pastes containing reactive ingredients such as ruthenium (IV) dioxide and base glass or lead ruthenite and sour glass. According to the TFRs developers, this should and does lead to a decrease in specific surface resistance (ρ_s) and an increase in the region of positive TCR values of resistors.

To interpret the causes and nature of the effect on the properties of multicomponent systems of technological parameters of production, methods of mathematical modeling of generalized conductivity are widely used and quite effective. Many formulas are known for such modeling. For a number of advantages, the V.I. Odelevsky. The generalized conductivity TFRs was modeled in accordance with a standard software routine with a wide range of variable values: conductivity of glass at infinitely high temperature (A); activation energy of electrical conductivity of glass (E); temperature coefficients of resistance (α_2 , α_3) and resistance at 273K (B_2 and B_3) of lead ruthenite and ruthenium (IV) oxide; volume fractions of phases (glass, lead ruthenite and ruthenium (IV) oxide - ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 , respectively).

The simulation program included several stages:

- finding the values of E and A , at which the calculated values are as close as possible to the experimentally measured resistance of TFRs at a temperature of 298K;
- finding values of resistance TFRs in the temperature range 73–673K and their TCR;
- establishing the nature of the effect on the calculated TFRs resistance of variations in the phase content as a result of the destruction of lead ruthenite;
- comparison of simulation results of two and three-component models with each other and with the parameters of real resistors.

Modeling shows that glass parameters A and E have the strongest effect on the value of the generalized conductivity. The most approximate values between the calculated and experimental ones were obtained at the values of these parameters in the intervals of $5 \cdot 10^{-6} \div 5$ and $0.001 \div 2$, respectively. The best agreement with the experimental results for the TFRs model containing three rather than two phases; moreover, it is more satisfactory for samples containing 15–30 vol.% CF in the composition of inorganic pastes and less for samples with a lower content, i.e. - TFRs resistance with high glass content. An increase in the degree of destruction of lead ruthenite causes an increase in the TCR of resistors, while an increase in E-glass, on the contrary, decreases it. For the two-phase TFRs model, their values are negative, less than $-50 \cdot 10^{-6}$ 1/°C and practically do not depend on the CF content, while for the three-component models they are positive and grow with increasing in CF content in TFRs.

Computer simulation of electrical parameters of thick-film resistors with a variable number of conducting phases (one and two) in the framework of the theory of generalized conductivity V.I. Odelevsky shows that the appearance in the films of a new conducting phase with a higher conductivity than the initial one causes a decrease in the resistance and an increase in the TCR of the model TFRs as a whole.

The tendencies and estimates obtained are a reasoned substantiation of the reason for the well-known in practice decrease in ρ_s and increase in TCR in the region of positive values of thick-film resistors based on metallic ruthenites ($Pb_2Ru_2O_6$, $Bi_2Ru_2O_7$, $CaRuO_3$, $BaRuO_3$, etc.), in the composition of which, during the firing of pastes, a second CF is formed – RuO_2 .

Keywords: electrical parameters of thick-film resistors, computer simulation of the properties of two and three-component systems.

Лозинский Николай Степанович, кандидат технических наук, старший научный сотрудник, научный сотрудник, ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», г. Донецк.

E-mail: lozinsky58@mail.ru, **SPIN-код:** 6060-9575. **Author ID:** 638770. **ORCID** 0000-0001-6119-6359.

Lozynskyy Mykola Stepanovych, Candidate of Technical Sciences, Research Officer, State institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry», Donetsk.

Рецензент: Кривоколыско Сергей Геннадиевич, д.х.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.03.2021

УДК 546.26-162

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ТЕМПЛАТНОГО СИНТЕЗА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И НАНОУГЛЕРОДА МЕТОДОМ CVD. ВЛИЯНИЕ МАКРОКИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ПРОЦЕССА, СТРУКТУРЫ КАТАЛИЗАТОРА И НОСИТЕЛЯ НА МОРФОЛОГИЮ УГЛЕРОДНЫХ ПРОДУКТОВ

Прудченко А.П., Савоськин М.В., Полякова О.Ю.,
Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Глазунова В.А.

REGULARITIES OF THE PROCESS OF TEMPLATE SYNTHESIS OF CARBON NANOTUBES AND NANOCARBON BY THE CVD METHOD. INFLUENCE OF MACROKINETIC FACTORS OF THE PROCESS, THE STRUCTURE OF THE CATALYST AND THE CARRIER ON THE MORPHOLOGY OF CARBON PRODUCTS

Prudchenko A.P., Savos`kin M.V., Polyakova O.Yu.,
Burhovetskiy V.V., Volkova G.K., Glazunova V.A.

Для выявления общих закономерностей темплатного синтеза углеродных нанотрубок (УНТ) и наноуглерода (НУ) методом химического осаждения из газовой фазы (CVD – метод) исследовано влияние структуры темплата (носителя), способа ее предорганизации на эффективность процесса, структуру и морфологию углеродных продуктов. С использованием метода полимеризованных комплексных предшественников разработана стандартная методика получения высокопористых носителей и металлооксидных катализаторов (МОК) роста УНТ. Установлено, что эффективность процесса с использованием катализаторов общего состава $Fe_2Co / CaCO_3$ (CaO , MgO , Al_2O_3 , $NaCl$) уменьшается в ряду $CaCO_3(CaO) > MgO > Al_2O_3 > NaCl$, что коррелирует с изменениями насыпной плотности МОК, которая увеличивается в ряду $MgO < CaCO_3(CaO) < Al_2O_3 < NaCl$. На основании сравнительного анализа эффективности действия металлооксидных катализаторов роста углеродных нанотрубок в CCVD – процессе, качественного состава продуктов установлено, что природа носителя, используемого для получения МОК методом полимеризованных комплексных предшественников является определяющим фактором.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, наноуглерод, темплат, нанотехнология, металлоксидные катализаторы.

Введение. Графен, наноуглерод (НУ), нанографит (НГ), одностенные (ОУНТ) и многостенные (МУНТ) углеродные нанотрубки, гибридные материалы на их основе прочно вошли в перечень самых перспективных функциональных углеродных наноматериалов 21-го столетия [1]. Заслуженный интерес к ним вызван их уникальными свойствами: высокой механической прочностью на

разрыв и на изгиб, химической стойкостью (в частности, стойкостью к окислению), термической стойкостью, высокой термо- и электропроводностью и т.д. В связи с этим все большее количество исследователей и специалистов высказывают мнение о начавшейся в сфере микроэлектроники революции – переход от кремниевой микро- к углеродной наноэлектронике. Во всяком случае, уже сейчас создано большое количество устройств с применением этих углеродных наноматериалов (УНМ) и интерес к развитию данного направления нанотехнологии возрастает с каждым годом. Одним из направлений исследований является разработка эффективных методов синтеза УНМ методом осаждения углерода из газовой фазы (CVD – метод) с использованием подходов темплатного синтеза – процесса, происходящего при влиянии тех или иных факторов пространственного ограничения, которые позволяют управлять структурой образующейся фазы, задаваемой с помощью своеобразного шаблона – темплата. В данном случае образующийся в процессе синтеза углеродный наноматериал после удаления темплата (нанесенного металлооксидного катализатора (МОК)) является инверсной репликой и повторяет форму исходного шаблона с той лишь разницей, что размер микро-, мезо-, макропор в продукте будет определяться толщиной стенок пор исходного шаблона. Важным преимуществом метода CVD с использованием темплатов различной природы, структуры, физико-химических свойств, по сравнению с другими методами, является возможность осаждать углерод на подложку любой формы и, в принципе, любого размера. Среди множества макрокинетических факторов, влияющих

на синтез УНТ методом CVD основными являются природа и структура прекурсора углерода, катализатора и носителя катализатора.

Целью настоящей работы является исследование влияния природы и структуры темплата на эффективность CVD – синтеза УНМ (НУ и УНТ) и морфологию частиц углеродных нанопроductов.

Экспериментальная часть. Для проведения исследований в качестве модельных носителей были выбраны $\text{CaCO}_3(\text{CaO})$, MgO , Al_2O_3 , NaCl как наиболее часто используемые. Очевидно, что для корректного сравнительного анализа влияния структуры темплата (с учетом особенностей текстуры, типа кристаллической решетки) на производительность CVD – процесса и морфологию частиц УНМ необходима стандартная процедура предорганизации темплата (носителя МОК). Самым распространенным способом получения МОК в настоящее время является термическое разложение прекурсоров МОК (нитратов Fe, Co, Ni, Ca, Mg, Al) [2], поскольку отличается простотой необходимых операций, быстротой, сравнительно низкими энергетическими затратами и, по этой причине, весьма перспективен для масштабирования и промышленного использования. Однако в предложенном методе термическая диссоциация солей происходит одновременно с очень быстрым испарением воды и, фактически, мгновенным формированием пористого оксидного каркаса. Как нам кажется, управлять процессом на этой стадии не представляется возможным, а результат в большей мере зависит от температуры и продолжительности процедуры прокаливании.

Исходя из этих соображений, мы разработали методику получения МОК роста УНТ, предполагающую стадию предорганизации системы с формированием 3d-матрицы предкатализатора в твердом виде, определяющей морфологию, пористость и дисперсность катализатора. В основе

методики лежит метод полимеризованных комплексных предшественников (ПКП), являющийся, по сути, разновидностью хелатного метода золь-гель технологии. Суть данного метода заключается в использовании способности катионов металлов 3d-группы образовывать устойчивые комплексы с углеводами (моно-, ди- и полисахаридами) состава $\text{Me}(\text{NO}_3)_x\text{L}$, где L – органический лиганд. Термолиз такого комплекса выше 130°C приводит в результате реакции полиэтерификации к образованию трёхмерной полимерной органической матрицы, в которой ионы металлов, входящих в состав катализатора, равномерно распределены по всему её объёму. В общем случае синтез МОК состоит из нескольких последовательных стадий:

- 1) растворение компонентов, гомогенизация, нагрев до $70 - 80^\circ\text{C}$ (образование комплекса углеводов – Me^{n+} , окислительно-восстановительная реакция);
- 2) дегидратация, получение вязких сиропов при $100 - 115^\circ\text{C}$;
- 3) термоокисление в щадящих условиях при $130 - 200^\circ\text{C}$ (формирование твердой матрицы предкатализатора);
- 4) термоокисление (горение) углеродной матрицы и разложение предкатализатора ($250 - 450^\circ\text{C}$);
- 5) отжиг, удаление остатков органической углеродной матрицы при $550 - 650^\circ\text{C}$;
- 6) механоактивация.

Металлоксидные катализаторы (МОК – ПКП) общего состава $\text{Fe}_2\text{Co} / \text{CaCO}_3$ (CaO , MgO , Al_2O_3 , NaCl) с молярным соотношением Fe, Co / CaCO_3 (CaO , MgO , Al_2O_3 , NaCl) равным 0,12:1 были получены методом ПКП по описанной ранее методике [3] и по сравнению с катализаторами, полученными другими методами, отличаются малыми значениями насыпной плотности $\rho_n = 0,01 - 0,25 \text{ г/см}^3$ (табл. 1).

Таблица 1.

Насыпная плотность катализаторов, полученных методом ПКП с использованием различных носителей

Носитель катализатора	CaCO_3	MgO	Al_2O_3	NaCl
Насыпная плотность катализатора, г/см^3	0,025 – 0,032	0,013 – 0,024	0,181 – 0,202	0,223 – 0,233

Как видно из данных табл. 1 насыпная плотность МОК в зависимости от природы носителя увеличивается в ряду $\text{MgO} < \text{CaCO}_3 < \text{Al}_2\text{O}_3 < \text{NaCl}$, что соответствует росту плотности упаковки кристаллической решетки. Так называемые «нулевые носители», полученные этим же методом, но без активных d-металлов (Fe, Co) имеют схожие величины насыпной плотности.

CVD – синтез УНМ с использованием указанных носителей проводили в трубчатом

реакторе при $T = 800^\circ\text{C}$ (газ-носитель – Ar, $60 \text{ см}^3/\text{мин}$; газ-прекурсор углерода – коммерческая пропан-бутановая смесь, $30 \text{ см}^3/\text{мин}$) по описанной ранее методике [4]. Морфология частиц УНМ после удаления темплата – носителя представлена на рис. 1. Анализ полученных данных позволяет сделать вывод, что продукты некаталитического CVD – процесса – УНМ (НУ) повторяют форму исходного темплата, которая и предопределяет структуру и дисперсное состояние конечного продукта.

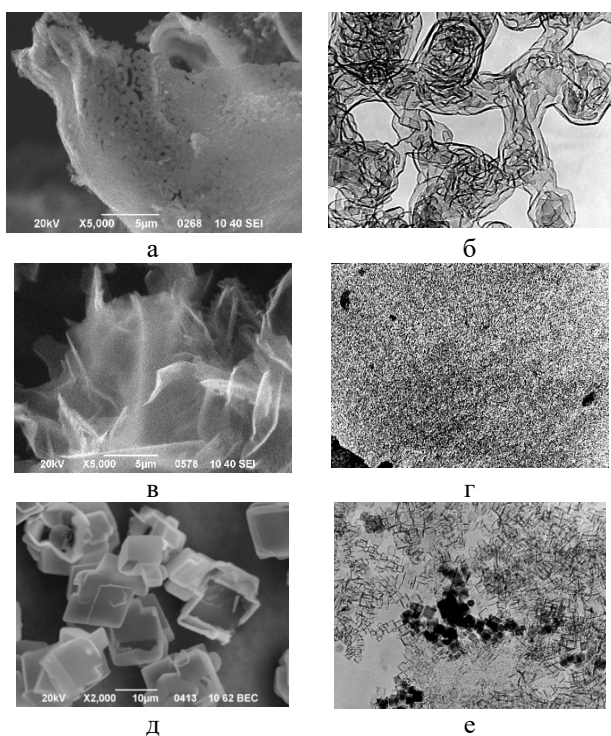


Рис. 1. СЭМ и ПЭМ – изображения УНМ, полученных в CVD – процессе на носителях ПКП (CaCO_3 – а, б, MgO – в, г) и реактивах марки хч (CaCO_3 – д, е)

При этом удельный выход НУ для носителей ПКП в 3,78 раза (для CaCO_3) и в 5,84 раза (для MgO) больше по сравнению с коммерческими носителями. Абсолютные значения удельного выхода НУ для ПКП носителей составили 0,195 г/ CaCO_3 (для CaCO_3) и 0,461 г/ MgO (для MgO), что говорит о довольно высокой производительности процесса по НУ, причем по данным РФА фазовый состав углеродного продукта для этих носителей идентичен (рис. 2, а, кривая 1, 2) и характеризуется наличием рефлексов аморфного углерода (АУ) в области 2θ 15–18° и (002) НУ 2θ 21,4–22,5°, относимых нами к структурам в виде малослойного наногрфита – продукта спонтанной ассоциации наноразмерных дефектных графеновых плоскостей с тенденцией к скроллообразованию (рис. 1, б).

Однако, по данным РФА (рис. 2, а, кривая 3) в составе УНМ кроме фазы МУНТ (002) 2θ 26,1–26,2° проявляется также и фаза НУ с несовершенной графитоподобной структурой (002) НУ 2θ 21,4–22,5°. Подтверждением наличия таких структур являются данные Романовской спектроскопии (рис. 2, б) по наличию сигналов G (1590 cm^{-1}), соответствующих С–С колебательным модам графеновой сетки (sp^2), а также D (1327 cm^{-1} , sp^3) и 2D (2624 cm^{-1}) сигналов, свидетельствующих о наличии дефектов структуры при довольно высокой степени кристалличности.

Таким образом, можно сделать вывод, что в CCVD – процессе кроме МУНТ образуются УНМ, подобные по структуре углеродным продуктам некаталитического CVD – процесса, но морфологически, как отдельные частицы, не проявляются. Этот факт приводит к заключению, что такие структуры либо встроены в структуру УНТ, что маловероятно, либо образуют на основе слабых Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий супрамолекулярную структуру УНТ – НУ, что представляется вполне возможным, если учитывать их структурную подобность.

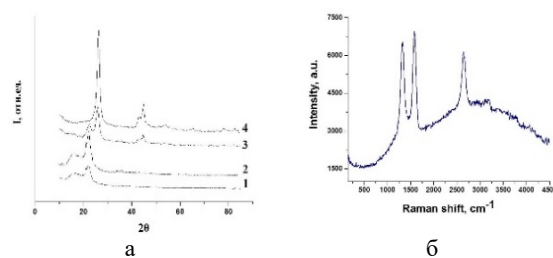


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы УНМ: а – НУ, полученных в CVD – процессе на ПКП носителях CaCO_3 – 1, MgO – 2 и МУНТ на МОК – ПКП общего состава $\text{Fe}_2\text{Co} / \text{CaCO}_3$ (CaO) – 3, 4; б – спектры комбинационного рассеяния МУНТ

В то же время, при проведении CCVD – процесса с использованием МОК, получены УНМ, состоящие в основном из многослойных углеродных нанотрубок, о чём свидетельствуют данные исследования образцов такими локальными методами как ПЭМ и СЭМ (рис. 3, а, б).

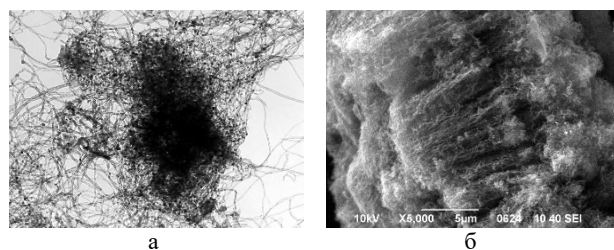


Рис. 3. ТЭМ (а) и СЭМ (б) изображения МУНТ, полученных с использованием МОК – ПКП

Методом ПЭМ нами было проведено исследование тонкой структуры МУНТ, полученных в CVD – процессе с использованием МОК – ПКП (рис. 4), которое очевидным образом подтверждает наличие на внешней поверхности УНТ латеральных отложений углерода (ЛОУ – на снимке это более светлые тона), не являющихся структурно элементами стенок УНТ, причем толщина такого слоя достигает 2 нм.

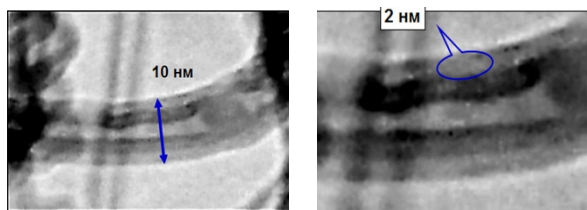
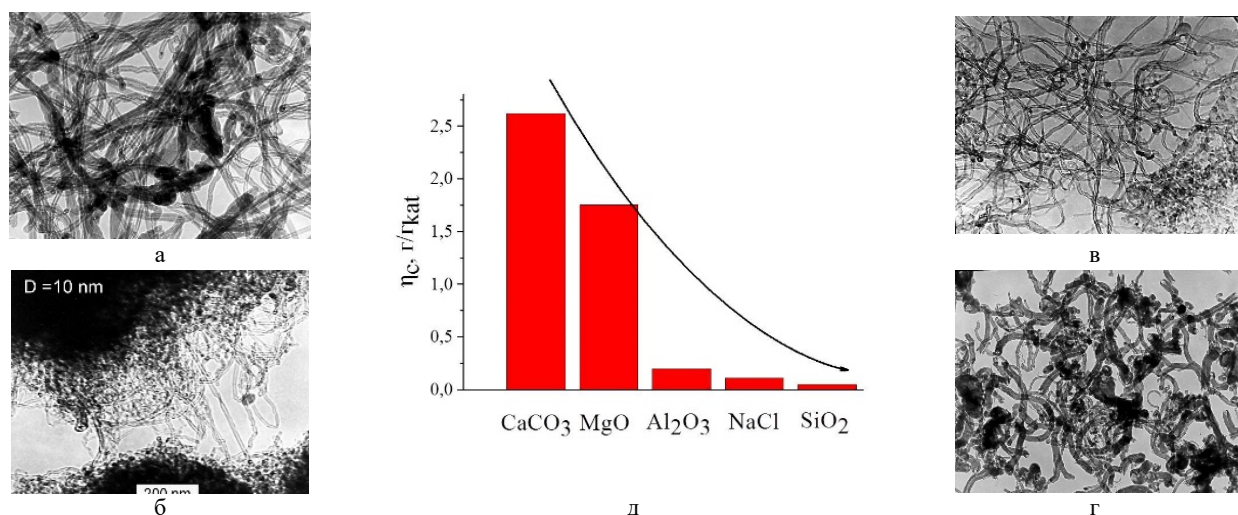


Рис. 4. Тонкая структура МУНТ

Наше предположение, что по своей природе эти ЛОУ ни что иное как супрамолекулярный комплекс УНТ – НУ, основанный на слабых взаимодействиях, подтверждается тем фактом, что при ультразвуковой обработке (УЗО) образцов МУНТ в смеси соляной и муравьиной кислот в течение 1 часа при нормальной температуре (70 wt, 42 Khz) интенсивность рефлексов (по данным РФА), соответствующих НУ 20 21,4 – 22,5° существенно снижается. При этом потеря массы образцов за счет «отшелушивания» конденсированных углеродных фрагментов с поверхности УНТ не превышала 1,9 – 2,1 %. Таким образом, можно предположить, что в ходе каталитического процесса синтеза УНТ также происходит образование НУ в виде фрагментов несовершенного наногрифта, состоящего из дефектных графеновых плоскостей, отличающихся по своим латеральным размерам. Однако накопление НУ происходит не на поверхности носителя, а на поверхности образующихся УНТ, которая играет роль своеобразной (графеновой) матрицы.

Данные по влиянию природы носителя МОК на эффективность ССVD – синтеза и морфологию МУНТ, полученные с использованием металлооксидных катализаторов общего состава $\text{Fe}_2\text{Co} / \text{CaCO}_3(\text{CaO}, \text{MgO}, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{NaCl})$ с мольным соотношением $\text{Fe}, \text{Co} / \text{носитель}$ равным 0,122:1 представлены на рис. 5. Синтез МУНТ проводили по стандартной методике ($T = 800^\circ\text{C}$, $\text{Ar} = 60 \text{ см}^3/\text{мин}$, пропан-бутановая смесь = $30 \text{ см}^3/\text{мин}$). Из зависимости удельного выхода УНМ от природы носителя, представленной на гистограмме (рис. 5, д) видно, что эффективность МОК – ПКП уменьшается в ряду $\text{CaCO}_3(\text{CaO}) > \text{MgO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{NaCl}$, что, по нашему мнению, связано с различием в кислотно-основных свойствах носителей, величинах удельной площади поверхности, плотности упаковки кристаллической решетки и связанных с этим величинами насыпной плотности МОК, которая согласно данным табл. 1 увеличивается в ряду $\text{MgO} < \text{CaCO}_3(\text{CaO}) < \text{Al}_2\text{O}_3 < \text{NaCl}$.

Рис. 5. Влияние природы носителя на эффективность МОК. ПЭМ изображения МУНТ, полученных с использованием МОК на основе $\text{CaCO}_3(\text{CaO})$, (а); MgO , (б); Al_2O_3 , (в); NaCl , (г); гистограмма, (д)

Из полученных нами данных РФА средние значения ОКР для исследованных образцов МУНТ находились в пределах 5 – 15 нм, что свидетельствует об очень малых размерах нанокристаллитов. Так, если ОКР для образцов МУНТ (МОК – $\text{CaCO}_3(\text{CaO})$) имеет величину 5,7 – 7,3 нм, а диаметр МУНТ 25 – 40 нм, то для МОК

(MgO) при значениях ОКР 2,2 нм диаметр МУНТ составляет 7 – 15 нм (рис. 5, а, б), диаметры МУНТ (МОК – Al_2O_3) при значениях ОКР 5,7 нм находятся в пределах 12 – 28 нм. Таким образом, прослеживается прямая связь между природой носителя катализатора, удельной производительностью катализатора и качественным

составом УНМ. Ранее нами было показано, что изменение количественного содержания активных металлов (АМ) в составе МОК оказывает незначительное влияние на количественный, качественный состав, морфологию частиц УНТ и их спектральные характеристики [5]. В то же время полученные данные о влиянии природы носителя на производительность МОК в CCVD – процессе заставляют по-новому взглянуть на роль носителя МОК и определить ее если не главной, то определяющей. В этом смысле синтез МОК, основанный на методе ПКП с получением твердотельного промежуточного предкатализатора и его дальнейшего термического разложения, представляется перспективным, рациональным и легко масштабируемым. Более того, имея разработанный универсальный алгоритм синтеза МОК, но применяя различные носители или их смеси, становится возможным управлять процессом с целью получения необходимых по структуре УНМ.

Выводы.

1. Показано, что применение метода полимеризованных комплексных предшественников в темплатном синтезе МОК позволяет получать высокоэффективные и селективные катализаторы роста УНТ, использование которых в CCVD – процессе приводит к образованию однородных по структуре массивов многостенных углеродных нанотрубок.

2. На основании сравнительного анализа эффективности действия металлооксидных катализаторов роста углеродных нанотрубок в CCVD – процессе установлено, что природа носителя, использующегося для получения МОК методом полимеризованных комплексных предшественников является определяющим фактором, влияющим на производительность процесса.

3. Показано, что удельный выход МУНТ в зависимости от природы носителя уменьшается в ряду $\text{CaCO}_3(\text{CaO}) > \text{MgO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{NaCl}$, что коррелирует с изменениями насыпной плотности МОК, которая увеличивается в ряду $\text{MgO} < \text{CaCO}_3(\text{CaO}) < \text{Al}_2\text{O}_3 < \text{NaCl}$.

4. Показано, что диаметр МУНТ, полученных в CCVD – процессе зависит от природы носителя МОК и увеличивается в ряду $\text{MgO} < \text{Al}_2\text{O}_3 < \text{CaCO}_3(\text{CaO}) < \text{NaCl}$. Установление такой взаимосвязи позволяет сделать вывод о возможности управлять процессом синтеза МУНТ, варьируя состав носителей катализаторов.

5. Показано, что продукты некаталитического CVD – синтеза (наноуглерод в виде дефектных графеновых фрагментов) могут образовывать латеральные отложения углерода на внешней поверхности МУНТ. Наличие таких отложений даже в количестве до 2 % по массе может приводить к искажению данных РФА или их неправильной интерпретации.

Л и т е р а т у р а

1. Елисеев А.А. Функциональные материалы / А.А. Елисеев, А.В. Лукашин // М. : Физматлит, 2010. – 456 с.
2. Dyachkova T. Peculiarities of obtaining a catalyst for the synthesis of nanostructured carbon materials via thermal decomposition // T. Dyachkova [et al.] // AIP Conference Proceedings, 2017. – Vol. 1899. – P. 020008 – 1–6.
3. Темплатный синтез углеродных нанотрубок в CCVD-процессе: влияние способа нанесения катализатора на морфологию частиц и удельный выход УНТ / А.П. Прудченко [и др.] // Материалы 5-й Международной научно-практической конференции «Инновационные перспективы Донбасса», г. Донецк, 21-23 мая 2019г. – Т.4: Перспективные направления развития экологии и химической технологии. – Донецк: ДонНТУ. – 2019. – Т. 4. – С. 40–44.
4. Прудченко А.П. Закономерности процесса темплатного синтеза пористых углеродных материалов методом CVD / А.П. Прудченко [и др.] // Вестник Луганского национального университета имени Владимира Даля, 2018. – №5(11). – С. 299–303.
5. CCVD – синтез углеродных нанотрубок: влияние состава металлоксидных катализаторов / А.П. Прудченко [и др.] // Материалы V Международной конференции «Донецкие чтения 2020: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности». – 2020. – Т. 2. – С. 75–78.

R e f e r e n c e s

1. Eliseev A.A. Funkcional'nye materialy / A.A. Eliseev, A.V. Lukashin // M. : Fizmatlit, 2010. – 456 s.
2. Dyachkova T. Peculiarities of obtaining a catalyst for the synthesis of nanostructured carbon materials via thermal decomposition // T. Dyachkova [et al.] // AIP Conference Proceedings – 2017. - Vol. 1899. - P. 020008 – 1–6.
3. Templatnyj sintez uglerodnyh nanotrubok v CCVD-processe: vliyanie sposoba nanesenija katalizatora na morfologiju chastic i udel'nyj vyhod UNT / A.P. Prudchenko [i dr.] // Materialy 5-j Mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferencii «Innovacionnye perspektivy Donbassa», g. Doneck, 21-23 maja 2019g. – Т.4: Perspektivnye napravlenija razvitija jekologii i himicheskoy tehnologii. – Doneck: DonNTU. – 2019. – Т. 4. – С. 40–44.
4. Prudchenko A.P. Zakonomernosti processa templatnogo sinteza poristyh uglerodnyh materialov metodom CVD / A.P. Prudchenko [i dr.] // Vestnik Luganskogo nacional'nogo universiteta imeni Vladimira Dalja, 2018. – №5(11). – С. 299–303.
5. SSVD – sintez uglerodnyh nanotrubok: vlijanie sostava metalloksidnyh katalizatorov / A.P. Prudchenko [i dr.] // Materialy V Mezhdunarodnoj konferencii «Doneckie chtenija 2020: obrazovanie, nauka, innovacii, kul'tura i vyzovy sovremennosti». – 2020. – Т. 2. – С. 75–78.

Prudchenko A.P., Savos'kin M.V., Polyakova O.Yu., Burhovetskiy V.V., Volkova G.K., Glazunova V.A.
REGULARITIES OF THE PROCESS OF TEMPLATE SYNTHESIS OF CARBON NANOTUBES AND NANOCARBON BY THE CVD METHOD. INFLUENCE OF MACROKINETIC FACTORS OF THE PROCESS, THE STRUCTURE OF THE CATALYST AND THE CARRIER ON THE MORPHOLOGY OF CARBON PRODUCTS

A method for the synthesis of metal oxide catalysts for the growth of carbon nanotubes using the method of

polymerized complex precursors is proposed. The influence of the chemical nature and structure of the catalysts on the yield and qualitative composition of the products of template synthesis of carbon nanotubes (MWCNTs) by the method of chemical deposition from the gas phase (CVD-method) is considered. It is determined that the specific yield of MWCNTs decreases depending on the nature of the carrier in the series $\text{CaCO}_3(\text{CaO}) > \text{MnO} > \text{Al}_2\text{O}_3 > \text{NaCl}$. It is shown that the diameter of MWCNTs obtained in the CCVD process depends on the nature of the carrier of the catalyst and increases in the series $\text{MnO} < \text{Al}_2\text{O}_3 < \text{CaCO}_3(\text{CaO}) < \text{NaCl}$. The establishment of such a relationship allows us to conclude that it is possible to control the process of MWCNTs synthesis by varying the composition of catalyst carriers

Key words: carbon nanotubes (MWCNTs), templates, metal oxide catalysts, CVD, nanotechnology.

Прудченко Анатолий Павлович, кандидат химических наук, старший научный сотрудник ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко».
E-mail: prudchenko.a@yandex.ru

Prudchenko Anatoliy Pavlovich, candidate of chemical sciences, senior research fellow Public Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry».

Савоськин Михаил Витальевич, кандидат химических наук, старший научный сотрудник, директор ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко».
E-mail: m.savoskin@yandex.ru

Savoskin Michael Vitalievich, candidate of chemical sciences, senior research fellow, director Public Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry».

Полякова Оксана Юрьевна, младший научный сотрудник ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко».
E-mail: oksi-polyakova@mail.ru

Polyakova Oksana Yurievna, junior research fellow Public Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry».

Бурховецкий Валерий Викторович, научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина».
E-mail: val-bur@ukr.net

Burhovetskiy Valeriy Viktorovich, research fellow Public institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin».

Волкова Галина Кузьминична, научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина».
E-mail: prudchenko.a@yandex.ru

Volkova Galina Kuzminichna, research fellow Public institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin».
E-mail: prudchenko.a@yandex.ru

Глазунова Валентина Александровна, научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина».
E-mail: glasunova-2007@rambler.ru

Glazunova Valentina Alexandrovna, research fellow Public institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin».

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 09.04.2021

УДК 539.2

ЕСТЕСТВЕННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА В ОБЛАСТИ ЭКСИТОННОГО РЕЗОНАНСА

Румянцев В.В., Федоров С.А., Рыбалка А.Е.

NATURAL OPTICAL ACTIVITY OF A NON-IDEAL MOLECULAR CRYSTAL IN THE EXCITON RESONANCE REGION

Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Rybalka A.Ye.

В рамках приближения виртуального кристалла изучены особенности естественной оптической активности неидеального молекулярного кристалла и выполнено численное моделирование ее частотной дисперсии в экситонной области энергетического спектра. Исследована зависимость вращательной способности от концентрации структурных дефектов в данной кристаллической решетке для различных частотных интервалов.

Ключевые слова: молекулярный кристалл, структурные дефекты, оптическая активность, приближение виртуального кристалла.

Введение. К настоящему времени исследованию оптических свойств кристаллов в экситонной области спектра посвящено достаточно много работ (см., например, [1, 2]). Они позволяют глубже понять электронную структуру кристаллов, свойства квазичастиц и взаимодействие между ними. При этом, как справедливо отмечает С.И. Пекар [2], при изучении оптических явлений в кристаллах, особенности, связанные с сильным взаимодействием структурных единиц кристалла с электромагнитным полем следует отличать от явления пространственной дисперсии (ПД), то есть зависимости диэлектрической проницаемости ϵ как от частоты ω , так и от волнового вектора k электромагнитной волны. Учет пространственной дисперсии дает возможность расширить спектр изучаемых явлений и рассматривать такие эффекты, как естественная оптическая активность (ЕОА), электрогирация, круговой дихроизм и т. п. Изучение дисперсии гиротропных характеристик позволяет выявлять структурные особенности соответствующих сред, определять важные динамические параметры образующих их молекул [3], а также помогает учитывать эффекты пространственной дисперсии в поляризационных измерениях спектральных характеристик нелинейных оптических процессов. Кроме того, гиротропия часто является единственным возможным способом определения некоторых стерео- и кристаллохимических параметров, а также тонких деталей строения соответствующих

пространственно диспергирующих структур. Имеется большое количество сложных органических комплексов и полимеров, которые являются оптически активными вследствие особенностей структуры или оптической активности входящих в их состав молекул [4,5]. Значительное число работ [6-11] посвящено исследованиям оптических свойств идеальных и неидеальных кристаллических систем, в том числе на основе полимеров и жидких кристаллов [12]. Особый интерес к исследованию этих объектов обусловлен их высокой чувствительностью к внешним полям и сильной анизотропией диэлектрической проницаемости. Разработанная в [12] методика учета особенностей концентрационной зависимости показателя преломления света неидеальной лиотропной ламеллярной системой оказывается полезной при моделировании композитных материалов на основе жидких кристаллов с заданными параметрами (без учета пространственной дисперсии). В то же время, учет пространственной дисперсии дает возможность расширить спектр изучаемых явлений и рассматривать такие эффекты, как естественная оптическая активность, электрогирация, круговой дихроизм и т. п. Изучение дисперсии гиротропных характеристик позволяет выявлять структурные особенности соответствующих сред, определять важные динамические параметры образующих их молекул [3], а также помогает учитывать эффекты пространственной дисперсии в поляризационных измерениях спектральных характеристик нелинейных оптических процессов. Кроме того, гиротропия часто является единственным возможным способом определения некоторых стерео- и кристаллохимических параметров, а также тонких деталей строения соответствующих пространственно диспергирующих структур. Важной характеристикой многих биологических систем является молекулярная хиральность, представляющая интерес для биохимических и фармакологических исследований. Примерами таких хиральных систем могут служить аминокислоты, сахара, белки и ферменты. В то время как биомолекулы, в основном, были изучены в

растворах, большое значение в фармацевтике имеет изучение свойства их твердотельной фазы. Особый интерес представляют также случаи, когда молекулы теряют оптическую активность в растворе, но приобретают ее вновь в твердой фазе.

Реальные кристаллические системы всегда содержат структурные дефекты, поэтому интерпретация экспериментальных данных и выявление соответствующих механизмов гиротропии, а также понимание их особенностей требуют развития микротории, учитывающей указанные несовершенства. В настоящей работе на основе экситонной теории [13] ЕОА молекулярных кристаллов выполнено численное моделирование особенностей важной количественной характеристики гиротропии – вращательной способности неидеального тернарного молекулярного кристалла и ее частотной дисперсии в экситонной области энергетического спектра от концентрации дефектов структуры.

Теоретическая модель. Известно, что ответы на ряд вопросов таких, как определение частотной дисперсии угла вращения плоскости поляризации линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны, нахождение связи угла вращения со структурой экситонных состояний, определение численных значений исследуемых величин и т.п., могут быть получены лишь в рамках микроскопической теории. ЕОА. Применительно к молекулярным кристаллам построение микротории ЕОА оказалось возможным после создания Аграновичем [13] и Давыдовым [14] теории экситонов Френкеля для молекулярных кристаллов. В настоящей работе используется микроскопическое

рассмотрение ЕОА, проведенное авторами [15,16], на основе более ранних работ [17,18].

Изучим подробнее особенности вращательной способности неидеального молекулярного кристалла и ее частотной дисперсии в экситонной области энергетического спектра в рамках одноуровневой модели, обусловленные наличием дефектов в структуре. Для конкретизации проблемы рассмотрим топологически упорядоченную кристаллическую систему с примитивной решеткой, в узлах которой случайным образом расположены два сорта изотопических молекул и вакансии. В этом случае, как следует из формулы (12) в [16], справедливо равенство:

$$C_1 + C_2 + C_v = 1 \quad (1)$$

где C_1 и C_2 – концентрации изотопических молекул соответственно первого (основного) и второго (примесного) сортов, C_v – концентрация вакансий.

Для рассматриваемой неидеальной системы выражение для $\rho(\vec{s}, \omega)$ превращается в соотношение (17) из [16] для $\rho(\vec{s}, \omega, C_1, C_2, C_v)$, которое учитывает зависимость этой величины от концентрации дефектов. Для системы с примитивной решеткой кристаллическая составляющая вращательной способности равна нулю и данное выражение для $\rho(\vec{s}, \omega, C_1, C_2, C_v)$ после несложных преобразований с учетом (1) приобретает вид:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{s}, \omega, C_2, C_v) = & \frac{2A}{\hbar c^2} (\hbar \omega)^2 [C_2 (\hbar^2 \omega^2 - E_1^2) + (1 - C_2 - C_v) (\hbar^2 \omega^2 - E_2^2) - \\ & - 2(1 - C_2 - C_v) C_2 (E_1 W^{11} + E_2 W^{22}) + (W^{12} + W^{21}) (E_1 + E_2)] [(\hbar^2 \omega^2 - E_1^2) (\hbar^2 \omega^2 - E_2^2) - \\ & - 2(\hbar^2 \omega^2 - E_1^2) E_2 W^{22} C_2 - 2(\hbar^2 \omega^2 - E_2^2) E_1 W^{11} (1 - C_2 - C_v) + \\ & + 4E_1 E_2 (1 - C_2 - C_v) C_2 (W^{11} W^{22} - W^{12} W^{21})]^{-1} \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь c – скорость света;

$$A = i \frac{2\pi}{v_0} \left[\vec{s} \times \vec{P}_{0f} \right]^l s^p Q_{0f}^{pl}, \quad \text{величины } \vec{P}_{0f} \text{ и}$$

Q_{0f}^{pl} – матричные элементы соответственно операторов дипольного момента молекулы и производной оператора фурье-образа плотности тока этой молекулы по $\vec{k}$ (для всех изотопических молекул эти величины практически одинаковы); E_1 и E_2 – энергии возбуждения молекул соответственно первого и второго сортов; $W^{\nu\mu}$ – фурье-образ (при $\vec{k} = 0$) матрицы резонансного межмолекулярного

взаимодействия, соответствующей кулоновскому взаимодействию молекул ν -го и μ -го сортов. Для изотопических молекул с хорошей точностью можно полагать $W^{11} \approx W^{22} \approx W^{12} \approx W^{21}$ [19].

Результаты и обсуждение. Значительный интерес при исследовании ЕОА неидеальных систем представляет изучение концентрационной зависимости вращательной способности в различных частотных областях. В рамках одноуровневой модели проведем рассмотрение особенностей $\rho(\vec{s}, \omega, C_1, C_2, C_v)$, обусловленных наличием дефектов в структуре топологически упорядоченной кристаллической системы с примитивной решеткой, в узлах которой случайным образом расположены

два сорта изотопических молекул и вакансии с концентрациями соответственно C_1 , C_2 и C_v . Для конкретизации проблемы рассмотрим (с учетом $C_1 = 1 - C_2 - C_v$) вращательную способность $\rho(\bar{s}, \omega, C_2, C_v)$ молекулярных кристаллов бензола

со случайной заменой атомов водорода на атомы дейтерия в интервале $\hbar\omega$ вблизи типичных [19] для данной структуры молекулярных энергий возбуждения: $E_1 = 3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $E_2 = 3,0033 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$.

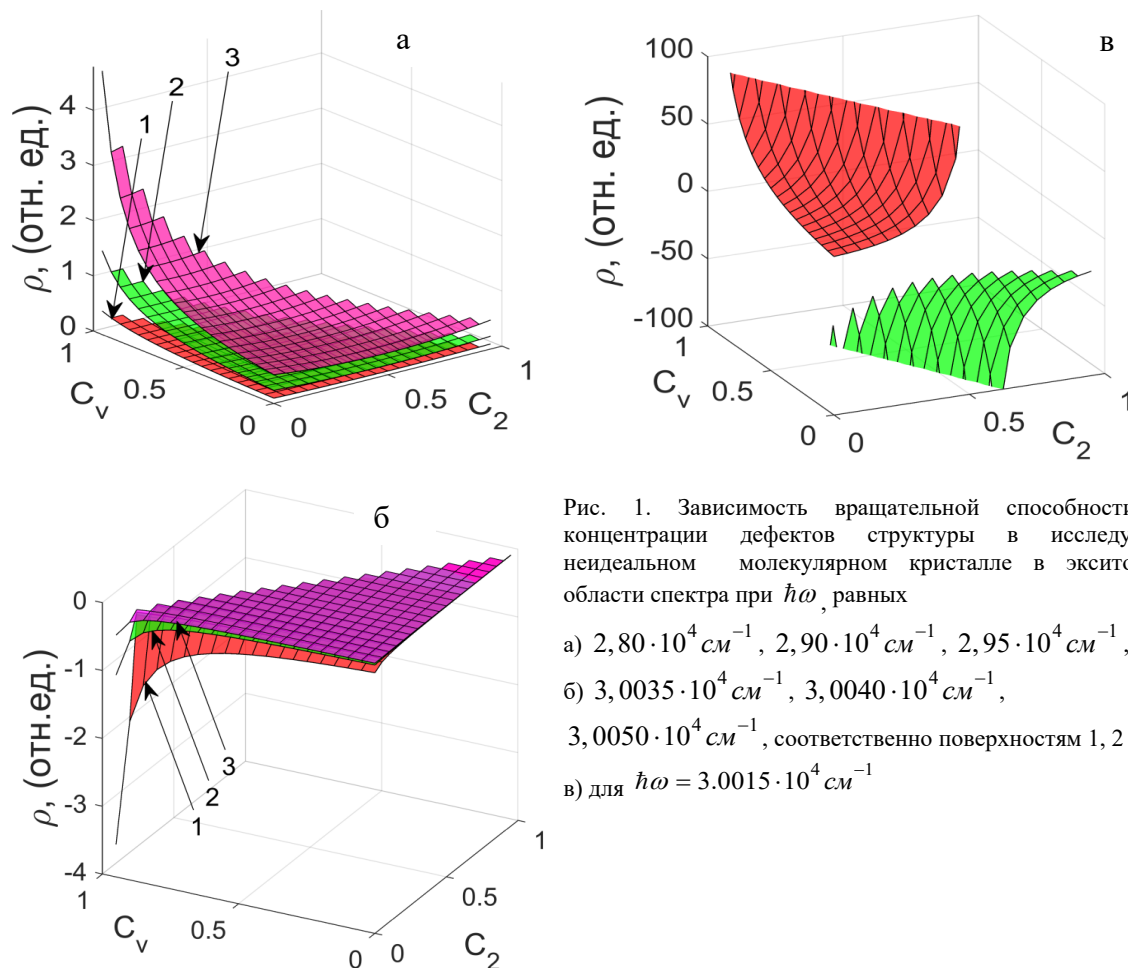


Рис. 1. Зависимость вращательной способности от концентрации дефектов структуры в исследуемом неидеальном молекулярном кристалле в экситонной области спектра при $\hbar\omega$, равных

- а) $2,80 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $2,90 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $2,95 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$,
 б) $3,0035 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $3,0040 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$,
 $3,0050 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, соответственно поверхностям 1, 2 и 3;
 в) для $\hbar\omega = 3.0015 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$

Численный расчет зависимости вращательной способности от концентрации дефектов структуры в исследуемом неидеальном молекулярном кристалле в экситонной области энергетического спектра вблизи энергии E_1 возбуждения молекул при $\hbar\omega$, равных $2,80 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $2,90 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $2,95 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, или вблизи энергии E_2 , равных $3,0035 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $3,0040 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $3,0050 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, показывает, что для рассматриваемой системы имеются частотные области, которым соответствуют существенно различные зависимости вращательной способности от C_2, C_v . В частности, из полученного графика, который приведен (в относительных единицах) на рис.1 (а, б), следует, что при удалении $\hbar\omega$ от энергии возбуждения E_1 или E_2 соответствующая

поверхность $\rho(C_2, C_v)$ становится более полой, т.е. концентрационная зависимость вращательной способности от структурных дефектов слабеет. Причем отметим, что для $\hbar\omega < E_1$ вращательная способность $\rho(C_2, C_v) > 0$ (правовращающий кристалл), а для $\hbar\omega > E_2$ $\rho(C_2, C_v) < 0$. (левовращающий кристалл). Этот случай проиллюстрирован на рис. 1в, который отражает появление сингулярности для определенных значений концентраций C_2, C_v структурных дефектов. Эта особенность свидетельствует о наличии экситонного резонанса в системе.

Выводы. В работе выполнено исследование особенностей вращательной способности неидеального молекулярного кристалла и ее частотной дисперсии в экситонной области спектра,

обусловленных наличием дефектов структуры. Полученный результат представляет интерес, поскольку эта измеряемая характеристика позволяет объяснять частотную дисперсию оптической активности и устанавливать связь экспериментально измеряемой величины удельного угла вращения с микрохарактеристиками среды. В настоящее время известно большое количество сложных органических комплексов и полимеров, которые являются оптически активными вследствие особенностей структуры или оптической активности входящих в их состав молекул [3,20]. Благодаря значительному прогрессу в теории оптических свойств идеальных и неидеальных структур разнообразию функциональных свойств и широкой области применения исследование полимерных композиционных материалов достаточно актуально [20,21].

Авторы надеются, что эта работа стимулирует интерес к экспериментальным исследованиям рассмотренного круга проблем.

Л и т е р а т у р а

1. Агранович В.М., Гинзбург В.Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1979. 432с.
2. Пекар С.И. Кристаллооптика и добавочные световые волны. Киев: Наукова думка, 1982. 296с.
3. Кизель В.А., Бурков В.И. Гиротропия кристаллов. М.: Наука 1980. 304с.
4. Ryan A.J., Jones R.A.L., Polymers: the quest for motility. // *Materials Today*, 2008. V.11. N7-8. P.21-23.
5. Chun Zhang, Hirt D.E. Layer-by-layer self-assembly of ... patterning flexible substrates // *Polymer*, 2007. V.48. N23, P. 6748-6754.
6. Pucci A., Bizzarri R., Ruggeri G. Polymer composites with smart optical properties // *Soft Matter*. 2011. V. 7. P. 3689-3700
7. Rhee H., Choi J-H., Cho M. Infrared optical activity: Electric field approaches in time domain. // *Acc. Chem. Res.* 2010. V.43. P. 1527-1536.
8. Choi J-H., Cheon S., Lee H., Cho M. Two-dimensional nonlinear optical activity spectroscopy of coupled multi-chromophore system // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, V 10, P. 3839-3856.
9. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. Theory of Optically Active Imperfect Composite Materials. Selected Topics. Colne: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012, 52p.
10. Jeon J., Yang S., Choi J-H., Cho M., Computational Vibrational Spectroscopy of Peptides and Proteins in One and Two Dimensions // *Acc. Chem. Res.* 2009. V.42. N 9, P.1280-1289.
11. Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами. Донецк: Норд-Пресс, 2006. 347с
12. Румянцев В.В., Федоров С.А., Гуменник К.В. Оптическая активность неидеальных ЖК сверхрешеток // *Жидкие кристаллы*. 2009. Вып. 3. С. 55 – 60.
13. Агранович В.М. Теория экситонов. М.: Наука. 1968. 382с.
14. Давыдов А.С. Теория молекулярных экситонов. М.: Наука, 1968. 296с
15. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. Theory of Optically Active Imperfect Composite Materials. Selected Topics. Colne: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. 52p.
16. Рыбалка А.Е., Румянцев В.В., Федоров С.А. // *Мониторинг. Наука и технологии* 2020. Т. 44. № 2. С 79-86.
17. Овандер Л.Н., Тю Н.С., Федоров С.А. // *УФЖ*. 1983. Т.28, № 11. С.1674 -1677
18. Kato T. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1973. V. 34. P.763-768.
19. Броуде В.Л., Рашба Э.И., Шека Е.Ф. Спектроскопия молекулярных кристаллов. М.: Энергоиздат, 1981. 248с.
20. Ryan A.J., Jones R.A.L. // *Materials Today*, 2008. V.11, N 7-8. P.21-23.
21. Chun Zhang, Hirt D.E. // *Polymer*, 2007. V.48. N23, P. 6748-6754.

References

1. Agranovich V. M., Ginzburg V. L. Crystal optics taking into account spatial dispersion and exciton theory. Moscow: Nauka, 1979. 432p.
2. Pekar S. I. Crystal optics and additional light waves. Kiev: Naukova dumka, 1982. 296p.
3. Kizel' V.A., Burkov V.I. Gyrotropy of Crystals. Moscow: Nauka, 1980. 304p.
4. Ryan A.J., Jones R.A.L., Polymers: the quest for motility. // *Materials Today*, 2008. V.11. N7-8. P.21-23.
5. Chun Zhang, Hirt D.E. Layer-by-layer self-assembly of ... patterning flexible substrates // *Polymer*, 2007. V.48. N23, P. 6748-6754.
6. Pucci A., Bizzarri R., Ruggeri G. Polymer composites with smart optical properties // *Soft Matter*. 2011. V. 7. P. 3689-3700
7. Rhee H., Choi J-H., Cho M. Infrared optical activity: Electric field approaches in time domain. // *Acc. Chem. Res.* 2010. V.43. P. 1527-1536.
8. Choi J-H., Cheon S., Lee H., Cho M. Two-dimensional nonlinear optical activity spectroscopy of coupled multi-chromophore system // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, V 10, P. 3839-3856.
9. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. Theory of Optically Active Imperfect Composite Materials. Selected Topics. Colne: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012, 52p.
10. Jeon J., Yang S., Choi J-H., Cho M., Computational Vibrational Spectroscopy of Peptides and Proteins in One and Two Dimensions // *Acc. Chem. Res.* 2009. V.42. N 9, P.1280-1289.
11. Rumyantsev V.V., Interaction of Electromagnetic Radiation and Light Particles with Crystalline Media, Nord-Press, Donetsk, 2006,
12. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. Optical activity of non-ideal LC superlattices // *Liquid crystals and applications*, 2009. N 3. P. 55 – 60
13. Agranovich V. M. Exciton theory. Moscow: Nauka, 1968. 382p.
14. Davydov A. S. Theory of molecular excitons. Moscow: Nauka, 1968. 296p.
15. Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V. Theory of Optically Active Imperfect Composite Materials. Selected Topics. Colne: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. 52p.
16. Rybalka A.Ye., Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Dispersion of optical activity of non-ideal molecular crystals // *Monitoring. Science & Technologies*. 2020. V.44, № 2. P. 79-86.

17. Ovander L. N., Tu N. S. Fedorov S. A. // Ukr. Phys. J. 1983. V. 28, No. 11. P. 1674 -1677.

18. Kato T. // J. Phys. Soc. Jap. 1973. V. 34. P.763-768.

19. Broude V.L., Rashba E.I., Sheka Ye.F. Spectroscopy of molecular crystals. Moscow: Energoizdat, 1981. 248p.

20. Ryan A.J., Jones R.A.L. // Materials Today, 2008. V.11, N 7-8. P.21-23.

21. Chun Zhang, Hirt D.E. // Polymer, 2007. V.48. N23. P. 6748-6754.

Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Rybalka A.Ye.
NATURAL OPTICAL ACTIVITY OF A NON-IDEAL MOLECULAR CRYSTAL IN THE EXCITON RESONANCE REGION

Within the framework of the virtual crystal approximation, the features of the optical activity of a non-ideal molecular crystal are studied and its frequency dispersion in the exciton region of the energy spectrum is numerically modeled. The dependence of the rotational ability on the concentration of structural defects in a given crystal lattice for different frequency intervals is studied

Key words: molecular crystal, structural defects, optical activity, virtual crystal approximation

Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. отделом теории динамических свойств

сложных систем, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина.

E-mail: vladimir.rumyantsev2011@yandex.ru

Rumyantsev Vladimir Vasilevich, D. Sci. in Solid State Physics, professor, head of department of theory of complex systems dynamic properties, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering

Федоров Станислав Афанасьевич, к.ф.-м.н., ст. научный сотрудник, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина.

E-mail: stan.fedorov2012@yandex.ua

Fedorov Stanislav Afanasevich, PhD in Solid State Physics, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering,

Рыбалка Алексей Евгеньевич, аспирант, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк,

Rybalka Alexey Yevgenievich, graduate student, A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics & Engineering, Donetsk.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 09.04.2021

УДК 538.956

ЭВОЛЮЦИЯ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА И СОСТОЯНИЯ ПЬЕЗОАКТИВНОСТИ В СИСТЕМЕ НИОБАТОВ НАТРИЯ - КАЛИЯ - КАДМИЯ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ УСЛОВИЙ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Мойса М.О., Андриюшин К. П., Резниченко Л. А.

EVOLUTION OF THE DIELECTRIC HYSTERESIS LOOPS AND THE PIEZOACTIVITY STATE IN THE SODIUM-POTASSIUM-CADMIUM NIOBATE SYSTEM UNDER CHANGING CONDITIONS OF EXTERNAL INFLUENCES

Moysa M.O., Andryushin K.P., Reznichenko L.A.

Двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием по обычной керамической технологии изготовлен твёрдый раствор состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$. Проведено экспериментальное исследование петель диэлектрического и электромеханического гистерезиса в зависимости от амплитуды постоянного/переменного электрического поля. Сделано заключение о целесообразности использования полученных результатов при разработке функциональных сегнетоактивных материалов с участием ниобатов натрия – калия – кадмия и устройства на их основе.

Ключевые слова: сегнетокерамика, твёрдый раствор, бессвинцовая керамика, P-E петли, KNN, многокомпонентная система.

Введение. Замена токсичных Pb – содержащих керамик альтернативными бессвинцовыми средами стала неотъемлемой частью современных исследований в области материаловедения [1, 2]. С 2000 года был достигнут значительный прогресс в исследованиях и разработках таких пьезоэлектрических материалов, электрофизические свойства которых сравнимы с керамиками на основе цирконата – титаната – свинца (PZT) [3]. Среди них наиболее перспективными являются твёрдые растворы (ТР) ниобатов натрия – калия (KNN), обладающие уникальными электрофизическими свойствами (низкая плотность, высокая скорость звука и низкая диэлектрическая проницаемость), а также интересной эволюцией структурных неустойчивостей [4]. Вышесказанное побудило нас более детально исследовать трёхкомпонентную систему $(1-x-y)\text{NaNbO}_3 - x\text{KNbO}_3 - y\text{CdNb}_2\text{O}_6$, в которой ранее нами были найдены оптимальные условия изготовления ТР, построена фазовая диаграмма состояний, установлены закономерные связи состав – структура – свойства [5, 6].

Настоящая работа является продолжением и развитием ранее предпринятых исследований и посвящена вопросам формирования петель диэлектрического и электромеханического

гистерезиса ТР системы в зависимости от амплитуды постоянного/переменного электрического поля.

Объекты, методы получения и исследования образцов. В качестве объектов исследования выступил ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$. Образцы получены твердофазным синтезом в две стадии и спечены по обычной керамической технологии (ОКТ) ($T_{\text{синт.1}} = 1220\text{ K}$, $\tau = 5\text{ ч.}$, $T_{\text{синт.2}} = 1240\text{ K}$, $\tau = 10\text{ ч.}$; $T_{\text{спек.}} = 1200\text{ K}$ в зависимости от состава).

Спеченные керамические заготовки подвергались механической обработке (резке по плоскости, шлифовке по плоским поверхностям и торцам) с целью получения измерительных образцов $\varnothing 10\text{ мм} \times 1\text{ мм}$. Перед металлизацией образцы прокаливались при температуре $T_{\text{прок.}} = 770\text{ K}$ в течение 0.5 час. для удаления остатков органических веществ и обезжиривания поверхностей с целью повышения адгезии металлического покрытия с керамикой. Электроды наносили двукратным вжиганием серебросодержащей пасты при температуре 1070 K в течение 0.5 ч.

P-E петли диэлектрического гистерезиса исследовали с использованием схемы Сойера – Тауэра, при $f = 50\text{ Гц}$. При этом определяли спонтанную (P_r) и остаточную ($P_{\text{ост.}}$) поляризацию, E_c – коэрцитивное поле. В измерительной ячейке в качестве изолятора использовали полиэтиленсилоксановое масло, имеющее температуру кипения $\approx 480\text{ K}$. Для устранения влияния гидролиза образцы предварительно отжигали при $T = 670\text{ K}$.

Кривые униполярной деформации (S_{33}), индуцированной постоянным электрическим полем напряженностью E , ($S_{33}-E$), получены при комнатной температуре на поляризованных образцах с помощью измерительного стенда на базе прибора для проверки концевых мер длины

МИКРОН-02, нановольтметра/микроомметра Agilent 34420 А. Кривые $S_{33}(E)$ аппроксимировали с помощью метода наименьших квадратов. Критерием качества аппроксимации была минимальная величина стандартного отклонения r . Расчет обратного пьезомодуля (d_{33}) производили с использованием формулы $d_{33}=dS_{33}/dE$.

Экспериментальные результаты, и обсуждение. На рис. 1 представлено семейство петель диэлектрического гистерезиса ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$, полученных при различных величинах переменного электрического (ac) поля. Выявлено, что при напряженностях $E=(6 \text{ и } 11) \text{ кВ/см}$ не происходит формирования насыщенной сегнетоэлектрической петли. Указанное свидетельствует о том, что приложенное ac поле не превышает коэрцитивного поля экспериментального образца. При $E \geq 15.5 \text{ кВ/см}$ наступает полное насыщение системы (переориентация доменной структуры), вследствие чего наблюдается формирование насыщенной P - E петли. Превышение указанного напряжения вызывает расширение петли и увеличение потерь энергии за цикл переполяризации, а также, спустя 10^3 циклов переполяризации, наступает электрический пробой и разрушение экспериментального образца.

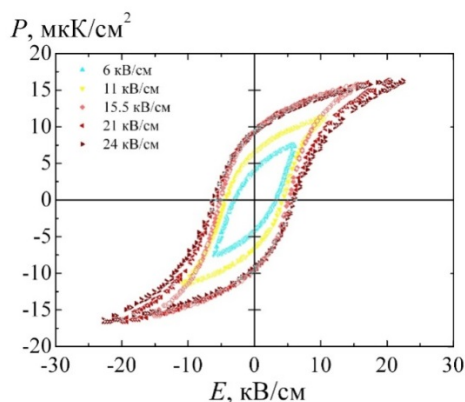


Рис. 1. Семейство P - E петель ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$ в диапазоне внешнего электрического поля (6÷24) кВ/см

На рис. 2 представлена петля электромеханического гистерезиса ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$. Выявлено, что исследованный ТР характеризуется несимметричной петлей зависимости $S_{33}(E)$, при этом при амплитуде поля $E = (10, -12) \text{ кВ/см}$ обнаружено формирование точек пересечения восходящей и нисходящей ветвей $S_{33}(E)$ петли.

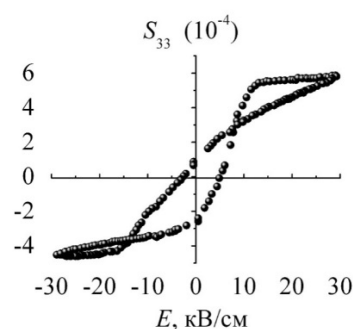


Рис. 2. $S_{33}(E)$ петля ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$

Из восходящей ветви полупериода петли электромеханического гистерезиса была получена кривая $d_{33}(E)$ (рис. 3). Обнаружено, что зависимость $d_{33}(E)$ демонстрирует экстремальное поведение с формированием максимума d_{33} при значении E , равном 17 кВ/см.

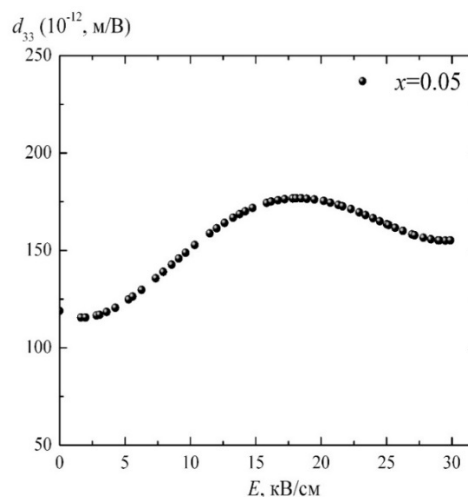


Рис. 3. Кривая $d_{33}(E)$ ТР состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$

Выводы. Изготовлен твёрдый раствор состава $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.05\text{KNbO}_3 - 0.15\text{CdNb}_2\text{O}_6$. Обнаружено, что при $E \geq 15.5 \text{ кВ/см}$ происходит формирование насыщенной сегнетоэлектрической P - E петли. Выявлено, что при амплитуде поля $E = (10 \text{ и } -12) \text{ кВ/см}$ происходит формирование точек пересечения восходящей и нисходящей ветвей $S_{33}(E)$ петли. Установлено экстремальное поведение кривой $d_{33}(E)$ с образованием максимума d_{33} при $E \sim 17 \text{ кВ/см}$.

Полученные результаты целесообразно учитывать при разработке устройств пьезотехники для различных областей применения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ)

Л и т е р а т у р а

1. Директива 2002/95/ЕС Европейского парламента и Совета от 27 января 2003 года об ограничении использования некоторых опасных веществ в электронном оборудовании, в Официальном журнале Европейского Союза. (2003) Т. 46. 19-23.

2. Директива 2011/65/ЕС Европейского парламента и Совета от 8 июня 2011 года об ограничении использования некоторых опасных веществ в электрическом и электронном оборудовании, в Официальном журнале Европейского Союза. (2011) Т. 54. 88.

3. ЦзяганВу. Достижения в области бессвинцовых пьезоэлектрических материалов // Ж. Шпрингер Натур, Сингапур (2018). <https://doi.org/10.1007/978-981-10-8998-5>

4. Сафари А., Хиджази М. Safari A., Hejazi M. Бессвинцовые пьезоэлектрические материалы на основе КНН // Ж. Шпрингер, Нью-Йорк (2012) https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9598-8_5

5. Мойса М.О., Андришин К.П., Шилкина Л.А., Нагаенко А.В., Андришина И.Н., Резниченко Л.А. Микроструктура, электрохимический гистерезис и поляризационные характеристики твёрдых растворов системы (Na, K, Cd_{0.5}) NbO₃ // Ж. Конференционная серия: Материаловедение и инженерия Т. 1093, (2021), 012020, Стр. 1-6. doi:10.1088/1757-899X/1093/1/012020

6. Андришин К.П. и др. Ниобаты натрия - калия-кадмия. Получение, структура, электрофизические и термочастотные свойства // Академическое издательство Ламберта 61, 2012

R e f e r e n c e s

1. Directive 2002/95/EU of the European Parliament and of the Council of 27 January 2003 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electronic equipment, in Official Journal of the European Union. L. 37. (2003) V. 46. 19-23.

2. Directive 2011/65/EU of the European Parliament and of the Council of 8 June 2011 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment, in Official Journal of the European Union. L. 174. (2011) V. 54. 88.

3. Jiagang Wu. Advances in Lead-Free Piezoelectric Materials // J. Springer Nature, Singapore (2018). <https://doi.org/10.1007/978-981-10-8998-5>

4. Safari A., Hejazi M. (2012) Lead-Free KNN-Based Piezoelectric Materials. In: Priya S., Nahm S. (eds) Lead-Free Piezoelectrics. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9598-8_5

5. Moysa M.O., Andryushin K.P., Shilkina L.A., Nagaenko A.V., Andryushina I.N. and Reznichenko L.A. Microstructure, electromechanical hysteresis and polarization characteristics of solid solutions of the system (Na, K, Cd_{0.5}) NbO₃ // Journal IOP Conference Series: Materials Science and Engineering Volume 1093, (2021), 012020, P. 1-6. doi:10.1088/1757-899X/1093/1/012020

6. Andryushin K.P. et al. Sodium solutions of sodium-potassium-cadmium. Preparation, structure, electrophysical and thermofrequency properties // LAP Lambert Academic Publishing 61, 2012.

Moysa M.O., Andryushin K.P., Reznichenko L.A. EVOLUTION OF THE DIELECTRIC HYSTERESIS LOOPS AND THE PIEZOACTIVITY STATE IN THE SODIUM-POTASSIUM-CADMIUM NIOBATE SYSTEM UNDER CHANGING CONDITIONS OF EXTERNAL INFLUENCES

A solid solution of the composition 0.8NaNbO₃ – 0.05KNbO₃ – 0.15CdNb₂O₆ was prepared by two-stage solid-phase synthesis followed by sintering using conventional ceramic technology. An experimental study of the loops of dielectric and electromechanical hysteresis depending on the amplitude of the DC/AC electric field is carried out. The conclusion is made about the expediency of using the obtained results in the development of functional ferroactive materials with the participation of sodium – potassium – cadmium niobates and devices based on them.

Keywords: ferroceramics, solid solution, lead-free ceramics, P-E loops, KNN, multicomponent system.

Мойса Максим Олегович, аспирант, научный сотрудник отдела интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону

E-mail: maksim.moysa@mail.ru

Moysa Maksim, PhD student, Researcher of the department Intellectual materials and nanotechnologies of Research Institute of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Андришин Константин Петрович, к.ф.-м.н., докторант, ведущий научный сотрудник отдела интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону.

E-mail: kpandryushin@gmail.com

Andryushin Konstantin, PhD, Leading Researcher, department Intellectual materials and nanotechnologies of Research Institute of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник, заведующая отделом интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики, Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: lareznichenko@sfsedu.ru

Reznichenko Larisa, Doctor of science, professor, Chief researcher of department Intellectual materials and nanotechnologies of Research Institute of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 537.3

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ, ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И СЕГНЕТОЭЛАСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ PZT-CN

Андрюшин К.П., Шилкина Л.А., Нагаенко А.В.,
Андрюшина И.Н., Дудкина С.И., Резниченко Л.А.

Dielectric, piezoelectric and ferroelastic properties of solid solution PZT-CN

Andryushin K.P., Shilkina L.A., Nagaenko A.V.,
Andryushina I.N., Dudkina S.I., Reznichenko L.A.

Двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием по обычной керамической технологии изготовлены твердые растворы (ТР) состава $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3$ - $x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ (PZT-CN) с $x=0.025\div 0.100$; $\Delta x=0.025$. Установлено, что во всем концентрационном диапазоне исследований ТР принадлежат к тетрагональной (Т) сингонии. По мере обогащения системы ниобатом кадмия усиливается неоднородность композиций, связанная с сосуществованием нескольких Т- фаз с близкими параметрами ячейки. В окрестности и внутри области $0.05\leq x\leq 0.10$ все макроотклики испытывают некие аномальные изменения, обусловленные, на наш взгляд, появлением локальных областей (кластеров) с отличной от Т симметрией. На основе исследования диэлектрических спектров установлено, что все ТР являются классическими сегнетоэлектриками, при этом увеличение содержания $\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ с $x\geq 0.05$ вызывает снижение температуры Кюри. Сделано заключение о целесообразности использования полученных данных при разработке подобных материалов и устройств на их основе.

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, PZT, пьезоэлектрические свойства

Введение. Пьезоэлектрические материалы широко используются в качестве узлов при разработке гидролокаторов, акселерометров, ультразвуковых устройств, MEMS, пьезоэлектрической аппаратуры и т.д. [1, 2]. Их основой, чаще всего, являются твердые растворы (ТР) на базе системы цирконата- титаната свинца (PZT). Разработанные с участием PZT промышленные материалы обладают рядом достоинств: высокие температуры Кюри и значения диэлектрических и пьезоэлектрических откликов. Как правило, разработки таких материалов осуществляются по следующим описанным в литературе направлениям: вариации термодинамической предыстории, легирование небольшим количеством монооксидов, переход к многокомпонентным системам [3, 4]. Необходимо отметить, что при реализации последнего пути обычно использовались соединения

со структурой типа перовскита. Детальные же исследования электрофизических свойств ТР на основе PZT, с участием неизоструктурных семейств перовскита соединений практически не проводились. Одним из таких перспективных кандидатов, обладающих высокими значениями диэлектрической проницаемости и кристаллизующихся в структуре колумбита, является $\text{CdNb}_2\text{O}_6(\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3)$ [5, 6].

Целью настоящей работы явилось установление закономерностей фазообразования и формирования макрооткликов (диэлектрических, пьезоэлектрических и сегнетоэластических) в системе $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3$ - $x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$.

Объекты и методы исследования. Объектами исследования выступили ТР системы $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3$ - $x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ (PZT-CN) с $x=0.025\div 0.100$, $\Delta x=0.025$. Экспериментальные образцы были получены твердофазным синтезом в две стадии и спечены по обычной керамической технологии ($T_{\text{синт.1}} = T_{\text{синт.2}} = 1220\text{K}$, $\tau = 4$ ч.; $T_{\text{спек.}}=1490\text{K}$, $\tau_{\text{спек.}} = 2$ ч.).

Рентгенографические исследования выполняли методом порошковой дифракции на дифрактометре ДРОН-3 с использованием $\text{CoK}\alpha$ излучения. Параметры ячейки рассчитывали по стандартной методике [7], ошибка измерения параметров составляла: $\Delta a=\Delta b=\Delta c=\pm 0.003 \text{ \AA}$, $\Delta V=\pm 0.05 \text{ \AA}^3$, где a , b , c – параметры, V – объем тетрагональной (Т) ячейки.

Экспериментальную плотность образцов измеряли методом гидростатического взвешивания в октане. Рентгеновская плотность рассчитывалась по формуле: $\rho_{\text{рентг}}=1.66\cdot M/V$, где M – молекулярная масса, приходящаяся на одну ячейку, V – объем ячейки. Относительная плотность определялась по формуле $\rho_{\text{отн.}} = (\rho_{\text{эксп.}}/\rho_{\text{рентг.}})\times 100 \%$.

Для исследования микроструктуры сколов образцов использовали сканирующий электронный микроскоп JSM-6390L (Япония) с системой микроанализаторов фирмы Oxford Instruments (Великобритания). Разрешение микроскопа до 1.2 nm

при ускоряющем напряжении 30 kV (изображение во вторичных электронах), пределы ускоряющего напряжения – от 0.5 до 30 kV, увеличение от $\times 10$ до $\times 1000000$, ток пучка до 200 nA.

Измерение электрофизических параметров ТР при 300 К проводили с использованием прецизионных LCR-метров Agilent 4980A методом резонанса-антирезонанса [8]. При этом определяли относительные диэлектрические проницаемости неполяризованных ($\varepsilon/\varepsilon_0$) и поляризованных ($\varepsilon_{33}^T/\varepsilon_0$) образцов, диэлектрические потери в слабом поле (тангенс угла диэлектрических потерь, $\tan\delta$), пьезомодуль ($|d_{31}|$), пьезочувствительность ($|g_{31}|$), коэффициент электромеханической связи планарной моды колебаний (K_p), механическую добротность (Q_m), модуль Юнга (Y_{11}^E), скорость звука (V_1^E). Погрешности измерений электрофизических параметров имеют следующие величины: $\varepsilon/\varepsilon_0$, $\varepsilon_{33}^T/\varepsilon_0 \leq \pm 1.5\%$, $K_p \leq \pm 2.0\%$, $|d_{31}| \leq \pm 4.0\%$, $d_{33} \leq \pm 10\%$, $Q_m \leq \pm 12\%$; $Y_{11}^E \leq \pm 0.7\%$. Пьезомодуль d_{33} и, соответственно, пьезоэлектрический коэффициент g_{33} исследовались при комнатной температуре квазистатическим методом при помощи прибора Piezo d_{33} TestSystem (YE2730Ad $_{33}$ METER).

Полученные значения параметров всех измеренных образцов каждого состава усредняли. Построение зависимостей диэлектрических, пьезоэлектрических и сегнетоэластических характеристик при комнатной температуре от состава осуществлено с использованием этих усредненных значений.

Температурные зависимости действительной и мнимой частей относительной комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*/\varepsilon_0 = \varepsilon'/\varepsilon_0 - i\varepsilon''/\varepsilon_0$ ($\varepsilon_0 = 8.75 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – диэлектрическая постоянная) образцов при $T = (300 \div 800)$ К в диапазоне частот $f = (25 \div 10^6)$ Гц изучали с помощью измерительного стенда на базе LCR-метра Agilent 4980A. Глубину дисперсии составов рассчитывали по формуле $\Delta\varepsilon = [(\varepsilon_{m25Hz} - \varepsilon_{m1MHz})/\varepsilon_{m25Hz}] \cdot 100\%$.

Экспериментальные результаты и обсуждение. Тот факт, что ТР характеризуются достаточно высокими значениями $\rho_{отн.} \sim (87 \div 96)\%$ (в зависимости от состава), что предельно возможно для данной технологии [9], свидетельствует о достоверности и надежности представленных ниже данных.

Рентгенографически установлено, что все ТР системы имеют структуру типа перовскита с тетрагональной (Т) элементарной ячейкой. Но по мере обогащения системы ниобатом кадмия усиливается неоднородность ТР, связанная с

сосуществованием нескольких Т-фаз с близкими параметрами ячейки. На рис. 1 эта область выделена штриховкой. Здесь же отмечается увеличение фона между пиками 002 и 200. Аналогичный эффект имеет место в PZT-системе в области морфотропного перехода из Т-фазы в ромбоэдрическую, что связано с появлением промежуточных моноклинных фаз [10]. В нашей системе симметрия не изменяется, поэтому данный эффект обусловлен, скорее всего, появлением локальных областей с отличной от Т-ой симметрией. И именно с этим обстоятельством связаны все аномалии на концентрационных зависимостях макрооткликов вблизи и внутри выделенной области. Установлено, что по мере увеличения содержания $\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ микроструктура измельчается (от размеров зерен $2.5 \div 5$ мкм при $x=0.025$ до ~ 1 мкм при $x=0.10$).

На рис. 1 представлены результаты исследования плотности, диэлектрических, пьезоэлектрических и сегнетоэластических свойств ТР $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3 - x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ при $T = 300$ К на фоне сложившейся в ней фазовой ситуации.

На рис. 2 в качестве иллюстраций представлены зависимости $\varepsilon'/\varepsilon_0|_f$ (а), $\varepsilon''/\varepsilon_0$ (б) ($f=25 \div 2 \cdot 10^6$ Гц), $\varepsilon'/\varepsilon_0$ (в режиме нагрев/охлаждение), $(\varepsilon''/\varepsilon_0)^{-1}$ ($f=840512$ Гц) (Т) (в) керамик с $x=0.025$, в интервале температур $T = (300 \div 800)$ К.

Установлено, что $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$ (рис. 2, а) имеют λ -образный вид с четкими максимумами, не размывающимися и не меняющими своего положения при увеличении f . Представленные зависимости характеризуются также отсутствием дисперсии $\varepsilon'/\varepsilon_0$ слева от T_c , появлением её в момент фазового перехода (ФП) и справа от T_c . Выше T_c выявлен стремительный рост $\varepsilon'/\varepsilon_0$ начиная с температур тем более низких, чем ниже f .

Кривые $\varepsilon''/\varepsilon_0$ (Т) (рис. 2, б) характеризуются наличием платообразного участка, предвещающего ФП в параэлектрическую (ПЭ) фазу, на котором $\varepsilon''/\varepsilon_0$ либо слабо возрастает, либо остается постоянной, сменяясь резким ростом вблизи T_c . Все вышесказанное характерно для классических сегнетоэлектриков.

Исследование зависимости $(\varepsilon'/\varepsilon_0)^{-1}$ от T (рис. 2, в), полученные объекты в ПЭ фазе подчиняются эмпирическому закону Кюри-Вейсса, $\varepsilon'/\varepsilon_0^{-1} = C/(T - T_c)$, где C – константа Кюри-Вейсса, T_c – температура Кюри-Вейсса.

Рост дисперсии $\varepsilon'/\varepsilon_0$ в ПЭ фазе на фоне резкого увеличения $\varepsilon''/\varepsilon_0$ может быть связан с увеличением электропроводности материала, в частности, за счет высвобождения связанных зарядов, участвующих в экранировке спонтанной поляризации в СЭ фазе.

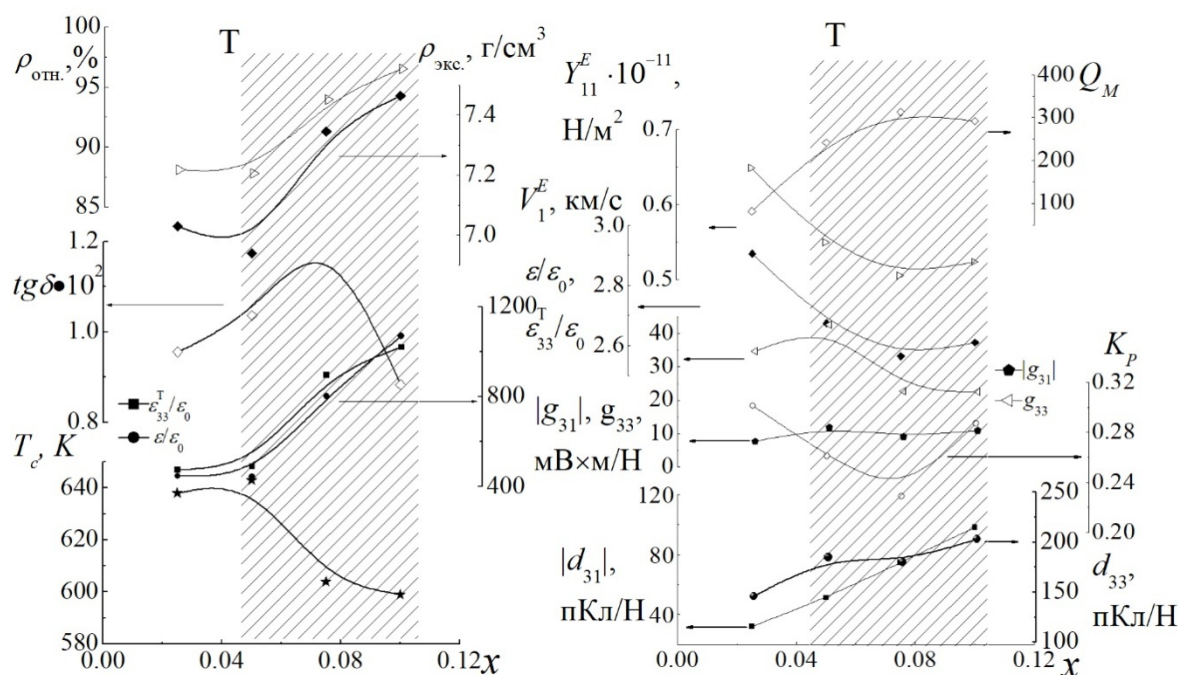


Рис. 1. Зависимости диэлектрических, пьезоэлектрических и сегнетоэластических характеристики ТР состава $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3 - x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ от содержания $\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ в системе ($T=300\text{K}$).

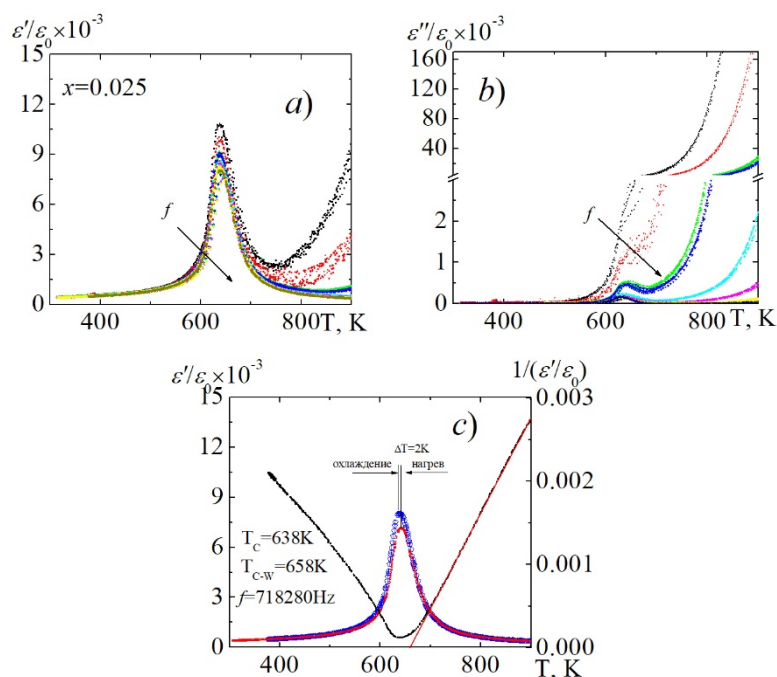


Рис. 2. Зависимости ϵ'/ϵ_0 , ϵ''/ϵ_0 , $(\epsilon'/\epsilon_0)^{-1}(T)$ при $f \sim (26 \div 900)$ кГц керамики ТР $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3 - x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ с $x=0.025$, в интервале $T = (300 \div 900)$ К

Выводы. Впервые твердофазным синтезом в две стадии с последующим спеканием по обычной керамической технологии изготовлены ТР состава $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3 - x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ с $x=0.025-0.1$, $\Delta x=0.025$. Показано, что полученные ТР во всем концентрационном диапазоне исследований

принадлежат тетрагональной сингонии. При этом в окрестности и внутри области $0.05 \leq x \leq 0.10$ все макроструктуры испытывают некие аномальные изменения, обусловленные, на наш взгляд, появлением локальных областей (кластеров) с отличной от тетрагональной симметрией.

Результаты диэлектрической спектроскопии показали, что все ТР относятся к классическим сегнетоэлектрикам. Увеличение содержания $\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ приводит к снижению температуры Кюри при $x > 0.05$.

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке подобных материалов и устройств на их основе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ). Работа выполнена на оборудовании центра коллективного пользования “Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел” НИИ физики и “Высокие технологии” Южного федерального университета.

Л и т е р а т у р а

1. G.H. Haertling Ferroelectric ceramics: history and technology. J. Am. Ceram. Soc., 82 (1999) 797-818. 10.1111/j.1151-2916.1999.tb01840.x.
2. Jaffe B., Cook W. R., and Jaffe H. Piezoelectric ceramics. Academic Press, New York, -1971, -259 p.
3. Данцигер А.Я., Разумовская О.Н., Резниченко Л.А., Сахненко В.П., Клевцов А.Н., Дудкина С.И., Шилкина Л.А., Дергунова Н.В., Рыбанец А.Н. Многокомпонентные системы сегнетоэлектрических сложных оксидов: физика, кристаллохимия, технология. Аспекты дизайна сегнетоэлектрических материалов. Ростов-на-Дону: Изд-во РГУ. -2001. -Т.1. -408с. -Т.2. -365с.
4. Данцигер А.Я., Разумовская О.Н., Резниченко Л.А., Гринева Л.Д., Девликанова Р.У., Дудкина С.И., Гавриляченко С.В., Дергунов Н.В., Клевцов А.Н. Высокоэффективные пьезокерамические материалы. Справочник. Ростов н/Д.: Изд-во АО "Книга". - 1994, -31с.
5. Lewis, B., White, E.A.D., Lxv. Structure and phase transitions of ferroelectric sodium cadmium niobates Journal of Electronics and Control, 1 (1956), 646-664 doi: 10.1080/00207215608961468.
6. Hsiao, Y.-J., Chang, Y.-S., Chen, G.-J., Chang, Y.-H. Synthesis and the luminescent properties of CdNb_2O_6 oxides by sol-gel process. Journal of Alloys and Compounds, 471 (2009) 259-262. 10.1016/j.jallcom.2008.03.081.
7. Фесенко Е.Г. Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. М.: Атомиздат. 1972. 248с.
8. IEEE Standard on Piezoelectricity ANSI/IEEE Std 176-1987, New-York. 1988. DOI: 10.1109/IEEESTD.1988.79638
9. Окадзак К. Технология технических диэлектриков. Энергия, Москва, -1976,- 336с.
10. Noheda B., Gonzalo J.A., Cross L.E., Guo R., Park S.-E., Cox D.E., Shirane G. Tetragonal-to-monoclinic phase transition in a ferroelectric perovskite. Physical Review B, 61 (2000) 8687-8695. doi: 10.1103/PhysRevB.61.8687

References

1. G.H. Haertling Ferroelectric ceramics: history and technology. J. Am. Ceram. Soc., 82 (1999) 797-818. 10.1111/j.1151-2916.1999.tb01840.x.

2. Jaffe B., Cook W. R., and Jaffe H. Piezoelectric ceramics. Academic Press, New York, -1971, -259 p.

3. Danciger A.Ya., Razumovskaya O.N., Reznichenko L.A., Sahnenko V.P., Klevcov A.N., Dudkina S.I., Shilkina L.A., Dergunova N.V., Rybyanec A.N. Mnogokomponentnyesistemysegnetoelektricheskikhslzhnyho ksidov: fizika, kristallohimiya, tekhnologiya. Aspektydizajnap'ezoelektricheskikhmaterialov. Izd-vo RGU, Rostov-na-Donu. -2001. -V.1. -408p. -V.2. -365p.

4. Danciger A.Ya., Razumovskaya O.N., Reznichenko L.A., Grinyova L.D., Devlikanova R.U., Dudkina S.I., Gavriyachenko S.V., Dergunova N.V., Klevcov A.N. Vysokoeffektivnyep'ezokeramicheskiematerialy. Spravochnik. Izd-vo AO «Kniga», Rostov-na-Donu. (1994).

5. Lewis, B., White, E.A.D., Lxv. Structure and phase transitions of ferroelectric sodium cadmium niobates Journal of Electronics and Control, 1 (1956), 646-664 doi: 10.1080/00207215608961468.

6. Hsiao, Y.-J., Chang, Y.-S., Chen, G.-J., Chang, Y.-H. Synthesis and the luminescent properties of CdNb_2O_6 oxides by sol-gel process. Journal of Alloys and Compounds, 471 (2009) 259-262. 10.1016/j.jallcom.2008.03.081.

7. Fesenko E.G. The perovskite family and ferroelectricity. M.: Atomizdat. -1972, -248p.

8. IEEE Standard on Piezoelectricity ANSI/IEEE Std 176-1987, New-York. 1988. DOI: 10.1109/IEEESTD.1988.79638.

9. Okadzaki K. Technology of Technical Dielectrics, Energy, Moscow, -1976, -336p

10. Noheda B., Gonzalo J.A., Cross L.E., Guo R., Park S.-E., Cox D.E., Shirane G. Tetragonal-to-monoclinic phase transition in a ferroelectric perovskite. Physical Review B, 61 (2000) 8687-8695. doi: 10.1103/PhysRevB.61.8687

Andryushin K.P., Shilkina L.A., Nagaenko A.V.,

Andryushin I.N., Dudkina S.I., Reznichenko L.A.

CALCULATION OF MAGNETIC LOSSES OF ENERGY IN STEEL OF POWER TRANSFORMERS WITH THE ACCOUNT OF NON-INVISIBILITY OF MAGNETIC INDUCTION

Solid solutions (SS) of the composition $(1-x)\text{Pb}(\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{O}_3-x\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ (PZT-CN) with $x = 0.025 \div 0.100$ were prepared by two-stage solid-phase synthesis followed by sintering using conventional ceramic technology; $\Delta x = 0.025$. It was found that, in the entire concentration range of investigations SS belong to the tetragonal (T) system. As the system is enriched with cadmium niobate, the heterogeneity of the compositions increases, which is associated with the coexistence of several T phases with similar cell parameters. In the vicinity and within the region $0.05 \leq x \leq 0.10$, all macro-responses experience some anomalous changes caused, in our opinion, by the appearance of local areas (clusters) with a symmetry different from T. Based on the study of dielectric spectra, it was found that all SS are classical ferroelectrics, while an increase in the content of $\text{Cd}_{0.5}\text{NbO}_3$ from $x \geq 0.05$ causes a decrease in the Curie temperature. A conclusion is made about the expediency of using the obtained data in the development of similar materials and devices based on them.

Key words: ferroelectrics, PZT, piezoelectric properties

Андрюшин Константин Петрович, к.ф.-м.н., в.н.с. НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростова-на-Дону.
E-mail:kpandryushin@gmail.com

Andryushin Konstantin Petrovich, Candidate of Sciences, a leading researcher of Research Institute of Physics of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Шилкина Лидия Александровна, с.н.с., НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростова-на-Дону
E-mail:lid_shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidiya Alexandrovna, senior researcher of Research Institute of Physics of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Нагаенко Александр Владимирович, к.т.н., доц.кафедры информационных и измерительных технологий Южного федерального университета г. Ростова-на-Дону.
E-mail: nagaenko@sfedu.ru

Nagaenko Alexander Vladimirovich, Candidate of Sciences, dosent of the Chair доценткафедры "Information and Measurement Technologies" of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Андрюшина Инна Николаевна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник отдела интеллектуальных

материалов нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета г. Ростова-на-Дону.
E-mail: futur6@mail.ru

Andryushina Inna Nikolaevna, Candidate of Sciences, senior researcher of Research Institute of Physics of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Дудкина Светлана Ивановна, с.н.с. НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростова-на-Дону
E-mail: s.i.dudkina@yandex.ru

Dudkina Svetlana Ivanovna, senior researcher of Research Institute of Physics of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., г.н.с. НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростова-на-Дону
E-mail: lareznichenko@sfedu.ru

Reznichenko Larisa Andreevna, Doctor of Sciences, principal researcher of Research Institute of Physics of Southern federal university, Rostov-on-Don.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 533.922, 533.924, 539.234, 67.02

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПЛЁНКАХ $CN_x:Eu_yO_z$.

Шемченко Е.И., Яковец А.А., Лихтенштейн И.Я.

FEATURES OF THE FORMATION OF MULTILAYER CARBON NANOTUBES IN FILMS $CN_x:Eu_yO_z$.

Shemchenko E.I., Yakovets A.A., Liechtenstein I.Ya.

В работе рассмотрены возможные механизмы роста углеродных нанотрубок в плёнках нитрида углерода, легированных оксидом европия, полученных с помощью DC-магнетрона. Определено, что возникновение трубок определяется различием свойств между графеновыми плоскостями, из которых состоят стенки трубок, и аморфной глобулой на вершине трубки. Влияние оксида европия в качестве примеси определяется травящим эффектом кислорода оксида, что существенно затрудняет определение механизмов роста углеродных нанотрубок.

Ключевые слова: нанотрубка, углеродная плёнка, наноструктура, DC-магнетрон, механизм роста.

Введение. DC-магнетрон позволяет синтезировать материалы сложного химического состава и структуры. Это определяется его особенностью – кластерным распылением мишени [1-4]. Например, при легировании плёнок нитрида углерода в процессе роста оксидами редкоземельных металлов, можно получать люминесцирующие плёнки. Было определено, что характеристики спектров люминесценции таких образцов зависят не только от количества легирующей примеси в образце, но и от геометрических размеров наноструктурных элементов плёнки [5].

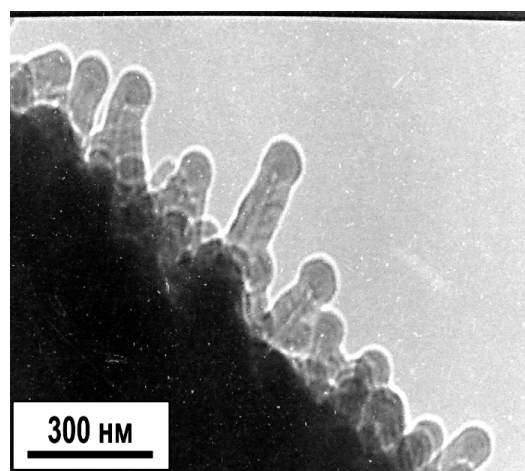
В том числе эта его особенность позволяет получать плёнки нитрида углерода, состоящие из плотноупакованных массивов многослойных нанотрубок. Размеры единичных наноструктурных элементов зависят от параметров работы DC-магнетрона, и могут быть заданы заранее.

При этом структура единичных трубок полностью идентична трубкам, полученным с помощью метода управляемого синтеза с предварительным засеванием подложки каплями металла катализатора.

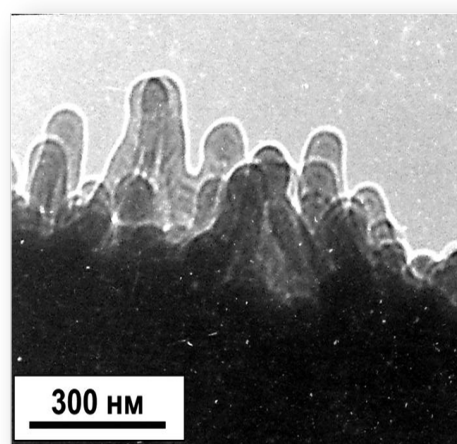
Целью данной работы было описать возможный механизм роста таких трубок.

Эксперимент. Методика получения плёнок подробно описывалась в работах [6-8].

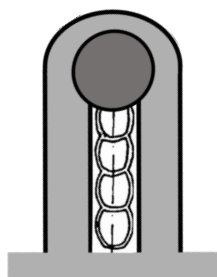
На рис.1 представлены 2-D изображения плёнок $CN_x:Eu_yO_z$, полученных методами ПЭМ, JEM200A и схема одиночной нанотрубки:



а



б



в

Рис. 1. 2-D изображения плёнок $CN_x:Eu_yO_z$, полученных методами ПЭМ (JEM200A) – а,б и схема одиночной нанотрубки – в

Результаты и обсуждение. Для того, чтобы облегчить понимания процессов, происходящих при росте нанотрубок, и в качестве примера уже известных механизмов роста, рассмотрим рост углеродной нанотрубки, получаемой методом предварительного засевания подложки металлическими каплями катализаторами с точки зрения свободной поверхностной энергии границ раздела фаз [9]. Под разными фазами будем подразумевать графеновые стенки трубки, каплю металла и газообразный ростовой поток углерода.

Полагая, что жидкость на вершине нанотрубки, то есть капля металла, плохо смачивает как внутреннюю, так и внешнюю поверхности нанотрубки, будем считать, что она находится в зацепленном состоянии на торцевом контуре вершины нанотрубки, сохраняя при этом устойчивое механическое равновесие. Форма капли будет характеризоваться радиусами кривизны части капли снаружи и внутри нанотрубки, краевыми углами смачивания внешней и внутренней поверхностей нанотрубки соответственно, и границами раздела трех фаз, которые примыкают к круговому контуру сечения нанотрубки на ее вершине. В первом приближении для простоты исключим из рассмотрения влияние линейного натяжения границы трехфазного контакта. Поскольку капля смачивает только вершинный торцевой контур нанотрубки и не смачивает ее внутренние и внешние поверхности, на круговом контуре торца трубки должно устанавливаться механическое равновесие капли. В процессе роста нанотрубки равновесие жидкости на вершине трубки в системе «газ (кластеры потока) – жидкость (жидкая капля) – твердое тело (стенка трубки)» задается условием: при всех возможных вариациях формы поверхности жидкой капли (при сохранении ее объема) свободная энергия системы должна оставаться постоянной (минимальной для устойчивого равновесия).

Чтобы избавиться от разности капиллярных давлений, капля будет стремиться понизить величину поверхностной энергии, перемещая адсорбированные атомы углерода с внешней поверхности капли на ее внутреннюю поверхность. На пути перемещения атомов углерода происходит образование сетки шестичленных колец по торцевому контуру нанотрубки. Вместе с этим капля будет стремиться также увеличить площадь внешней поверхности жидкой фазы и уменьшить площадь внутренней поверхности. Это достигается периодическим стягиванием (сокращением) вытянутой капли и смещением ее вдоль направления роста нанотрубки. Тогда разность капиллярных давлений будет движущей силой смещения капли катализатора при росте нанотрубки. В результате будет происходить движение жидкости по образующимся стенкам нанотрубки до тех пор, пока капиллярные давления не выровняются. Результатом смещения капли будет самопроизвольный рост нанотрубки.

В нашем случае наиболее вероятен следующий механизм роста: в первый момент роста нанотрубки, полужидкие углеродные кластеры попадая на подложку, сливаются вместе, превращаясь в аморфную глобулу – аналог капли металла, под действием вторичной заряженной плазмы магнетрона. При этом, часть глобулы, прилегающей к подложке, остывает, теряя возможность менять своё агрегатное состояние. Верхняя часть глобулы сохраняет полужидкое состояние, стремясь принять форму, отвечающей минимальной поверхностной энергии. Учитывая поступающий поток вещества от распыляемой мишени в верхнюю полужидкую часть углеродной глобулы, получаем тот же самый процесс по периодическому стягиванию (сокращению) вытянутой жидкой части глобулы и смещением ее вдоль направления от подложки к свободной поверхности. Таким образом, образуются стенки канала движения углеродной глобулы, которые и есть многослойная углеродная нанотрубка. Остальной механизм роста многослойной углеродной нанотрубки аналогичен, описанному выше.

Необходимо отметить действие примеси, оксида европия, на процесс роста. Оксид европия в потоке распылённого углерода мишени частично разлагается с образованием чистого кислорода, который стравливает растущую плёнку нитрида углерода. Учитывая, что аморфная фаза углерода травится кислородом с более высокой скоростью, чем графеновая, то нанотрубки плёнки получают более однородные по геометрическим размерам. Это существенно меняет вид плёнки нитрида углерода, что затрудняет определение механизмов роста углеродных нанотрубок.

Выводы.

1. Рост углеродных нанотрубок со структурой аналогичной полученным с помощью метода управляемого синтеза с предварительным

засеванием подложки каплями металла катализатора, происходит с образованием аморфной углеродной глобулы.

2. Механизмы роста таких нанотрубок зависят от разницы физических свойств аморфной углеродной глобулы и графеновых плоскостей, из которых состоят стенки трубок.

3. Оксид европия в качестве примеси стравливает аморфную составляющую плёнки нитрида углерода, что существенно затрудняет определение механизмов роста углеродных нанотрубок.

Л и т е р а т у р а

1. Haberland, H Transition to plasmonlike absorption in small Hg cluster/H. Haberland, Bernd von Issendorff, Ji. Yufeng, T. Kolar//Phys. Rev. Lett. –1992. – V.69, №22. -3212 - 3215.

2. Haberland, H Thin films from energetic cluster impact: A feasibility study/H. Haberland, M. Karrais, M. Mall, Y. Thurner//J.Vac.Sci.Technol. A. -1992.- V.10,№5 –P.3266 - 3271.

3. Tsang, S. C. High-resolution electron microscopy studies of a microporous carbon produced by arc-evaporation/S. C. Tsang, P. J. F. Harris, J. B. Caridge, M. L. H. Green//J.Chem.Soc., Faraday Trans. –1994.-V.90,№18 –P.2799 -2802.

4. Bursill, L. A. Image-analysis of a negatively curved graphitic sheet model for amorphous-carbon/L. A. Bursill, L. N Bourgeois//Mod. Phys.Lett. B, Mod. Phys. Lett. B.-1995. -V.9 - P. 1461 – 1465.

5. Техтелев, Ю.В. Оптические свойства алмазоподобные плёнок, активированных европием/Техтелев, Ю.В., Свиридов В.В., Шемченко Е.И., Кара Мурза С.В.// Вестник луганского национального университета имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ. -2018. -№ 5(11) -С.110 - 114.

6. Shemchenko, E. I. Formation of Nanocolumnar Structures under Magnetron Growth of Europium-oxide-doped Carbon nitride Films/E. I. Shemchenko, K. V. Gumennyk, V. V. Rumyantsev//Journal of Nanoscience with Advanced Technology. -2015.-V.1, №1 –P.1 - 5.

7. Шемченко, Е.И. Исследование зависимости размеров наноструктуры плёнок нитрида углерода, легированных оксидом европия в процессе роста, от параметров получения/Е. И. Шемченко, А. Г. Петренко, И. Я. Лихтенштейн//Вестник луганского национального университета имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ. -2018. -№ 5(11) -С.151 - 154.

8. Свиридов, В.В. Эллипсометрическое изображение как критерий выбора модели слоя $CN_x:Eu_yO_z$ на SiO_2 /В. В. Свиридов, Е. И. Шемченко, И. А. Вербенко, А. А. Павелко//Вестник луганского национального университета имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ. -2014. -№ 2 (4).- С.142 – 145.

9. Небольсин, В.А. Роль поверхностной энергии при росте углеродных нанотрубок в процессе каталитического пиролиза углеводородов/ В.А.Небольсин, А.Ю.Воробьев// Неорганические материалы -2011. -том 47, № 2 –С.168–172.

R e f e r e n c e s

1. Haberland, H Transition to plasmonlike absorption in small Hg cluster/H. Haberland, Bernd von Issendorff, Ji. Yufeng, T. Kolar//Phys. Rev. Lett. –1992. – V.69, №22. -3212 - 3215.

2. Haberland, H Thin films from energetic cluster impact: A feasibility study/H. Haberland, M. Karrais, M. Mall, Y. Thurner//J.Vac.Sci.Technol. A. -1992.- V.10,№5 –P.3266 - 3271.

3. Tsang, S. C. A microporous carbon produced by arc-evaporation/S. C. Tsang, P. J. F. Harris, J. B. Caridge, M. L. H. Green//J. Chem. Soc. Chem. Commun. –1993.-№19. -P.1519 – 1522.

4. Bursill, L. A. Image-analysis of a negatively curved graphitic sheet model for amorphous-carbon/L. A. Bursill, L. N Bourgeois//Mod. Phys.Lett. B, Mod. Phys. Lett. B.-1995. -V.9 - P. 1461 – 1465.

5. Shemchenko, E. I. Optical properties of diamondlike CN_x films activated BY EUROPIUM /Tekhteleev Y.V., Sviridov V.V., Shemchenko E.I., Kara-Murza S.V. // Bulletin of Lugansk National University named after VLADIMIR DALY.– 2018.-№ 5 (11) -P110 – 114.

6. Shemchenko, E. I. Formation of Nanocolumnar Structures under Magnetron Growth of Europium-oxide-doped Carbon nitride Films/E. I. Shemchenko, K. V. Gumennyk, V. V. Rumyantsev//Journal of Nanoscience with Advanced Technology. -2015.-V.1, №1 –P.1 - 5.

7. Shemchenko, E. I. A study of the dependence of the nanostructure dimensions of carbon nitride films doped with europium oxide in the growth process on the production parameters/E. I. Shemchenko, A. G. Petrenko, I. Ya. Liechtenstein//Bulletin of Lugansk National University named after VLADIMIR DALY.– 2018.-№ 5 (11) -P151 – 154.

8. Sviridov, V. V Ellipsometric image as a criterion for choosing a layer model $CN_x:Eu_yO_z$ on SiO_2 /V. V. Sviridov, E. I. Shemchenko, I. A. Verbenko, A. A. Pavelk//Bulletin of Lugansk National University named after VLADIMIR DALY. - 2014.- № 2 –P.142 – 145.

9. 9. Nebosin, V.A. The role of surface energy with the growth of carbon nanotubes in the process of catalytic pyrolysis of hydrocarbons / V.A. Nebolsin, A.Yu.Vorobyov // Inorganic materials -2011. -The 47, No. 2 -c.168-172.

Shemchenko E.I., Yakovets A.A.

FEATURES OF THE FORMATION OF MULTILAYER CARBON NANOTUBES IN FILMS $CN_x:Eu_yO_z$.

The paper considers possible mechanisms of the growth of carbon nanotubes in films of carbon nitride doped with europium oxide, obtained using a DC-magnetron. It has been determined that the appearance of the tubes is determined by the difference in properties between the graphene planes that make up the tube walls and the amorphous globule at the top of the tube. The influence of europium oxide as an impurity is determined by the etching effect of oxide oxygen, which significantly complicates the determination of the growth mechanisms of carbon nanotubes.

Key words: nanotube, carbon film, nanostructure, DC-magnetron, growth mechanism.

Шемченко Евгений Иванович, м.н.с. отдела

«Высоких давлений и перспективных технологий» ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина».

E-mail: shemal@mail.ru

Shemchenko Yevgeny Ivanovich, associate researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin, Donetsk

Яковец Александр Александрович, н.с. отдела «Высоких давлений и перспективных технологий» ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина».

Yakovets Alexander Alexandrovich, associate researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin, Donetsk

Лихтенштейн Игорь Яковлевич, аспирант отдела «Высоких давлений и перспективных технологий» ГУ

«Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина».

Liechtenstein Igor Yakovlevich, graduate student, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin, Donetsk

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 538.911

ГИДРОСТРИКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АНОДОВ И КАТОДОВ АККУМУЛЯТОРНЫХ БАТАРЕЙ НА ОСНОВЕ НИОБАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Зубарев Я.Ю., Шилкина Л.А., Крутов В.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А.

HYDROSTRICTIVE MATERIALS FOR ANODES AND CATHODES OF STORAGE BATTERIES BASED ON NIOBATES OF ALKALI AND ALKALINE EARTH METALS

Zubarev J.Y., Shilkina L.A., Krutov V.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A.

В статье представлены результаты исследования материалов на основе ниобатов натрия и кальция, обладающих способностью к захвату воды из-за проявления эффекта Хэдвелла. Рентгенографически установлено, что процесс интеркаляции воды сопровождается изменением топологических характеристик кристаллов – гидрострикцией. Установленные явления представляют интерес не только для создания катализаторов разложения воды, но и для разработки Na-ион аккумуляторных батарей.

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, ниобат натрия, пирониобат кальция, микроструктура, гидрострикция, Na-ion.

Введение. Солнечная энергетика приобрела новый вектор развития в связи с повышением эффективности представителей семейства типа перовскита в качестве фотопреобразователей. При этом использование солнечной энергии не ограничивается установкой солнечных батарей. Большой интерес представляет и фотокатализ как метод получения экологически чистого водородного топлива наряду с новыми эффективными методами хранения и транспортировки собранной энергии. Одним из передовых явлений последних лет является открытие фотострикции у некоторых объектов, то есть механизма, родственного явлению пьезострикции [1, 2]. Исследования по данной тематике тесно связаны с изучением люминофорных свойств [3], и фотокаталитических характеристик [4]. Помимо этого, исследовательский интерес вызывает явление адсорбции воды на поверхность слоистого перовскитоподобного соединения - монокристалла рутената стронция, $\text{Sr}_{n+1}\text{Ru}_n\text{O}_{3n+1}$ ($n = 1, 2$), в котором авторы обнаружили любопытный эффект: кружение гидроксильной группы OH– вокруг атома водорода [5]. Преимущества слоистых перовскитоподобных структур заключаются в реализации в них ионообменных свойств за счет высокой подвижности межслоевых катионов, обеспечивающей широкую вариацию состава и, как следствие, управляемость фотокаталитической активностью [6]; наноструктурированности объектов,

способствующих снижению вероятности рекомбинации индуцированных при действии света электронов и дырок; способности, в отдельных случаях, к обратной интеркаляции молекул воды в межслоевое пространство, приводящей к увеличению удельной поверхности фотокатализаторов и к пространственному разделению центров окисления-восстановления воды [7]; возможности расслоения на нанослои [8].

В исследуемой нами в связи с вышеизложенным актуальным представляется установление зависимостей фазообразования и формирования фазовых свойств в системе, включающей «перовскитные» и «слоистые» компоненты бинарной системы на основе ниобатов натрия и кальция один из крайних компонентов, NaNbO_3 , является антисегнетоэлектриком, кристаллизуется в структуре типа перовскита ABO_3 , имеет ромбическую симметрию (пространственная группа $Pbma$) с моноклинно искаженной перовскитовой ячейкой. Параметры моноклинной ячейки: $a=c=3.915 \text{ \AA}$, $b=3.885 \text{ \AA}$, $\beta=90.64$ [9]. Связь параметров перовскитовых ячеек с ромбическими имеет вид $A=a-c$, $B=4b$, $C=a+c$, где A , B , C – осевые векторы ромбических ячеек. Наряду с антисегнетоэлектрической (Р) фазой в NaNbO_3 обнаружена сегнетоэлектрическая (Q) фаза [10, 11], в которой $B=2b$. Второй крайний компонент, $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, является сегнетоэлектриком с температурой Кюри выше 1800 К [12], имеет перовскитоподобную слоистую структуру, принадлежащую гомологическому ряду $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$. Пирониобат кальция существует в двух модификациях, одна из которых имеет моноклинную симметрию (пространственная группа $P2_1$) [13], другая – ромбическую симметрию (пространственная группа Cmcm) [14]. В первом случае параметры ячейки $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ равны: $a=13.40 \text{ \AA}$, $b=5.51 \text{ \AA}$, $c=7.72 \text{ \AA}$, $\beta=98.28^\circ$, во втором: $a=3.849 \text{ \AA}$, $b=26.460 \text{ \AA}$, $c=5.490 \text{ \AA}$. Пирониобат кальция перспективен в качестве нелинейного оптического материала [15], а также матрицы для получения новых материалов,

используемых в лазерной технике. Кроме того, $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ является высокоактивным фотокатализатором для разделения воды на H_2 и O_2 при облучении ультрафиолетовым светом, причем в [16] отмечается, что PLS ряда $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ являются более активными фотокатализаторами, чем перовскитоподобные слоистые соединения гомологического ряда $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$ со структурой типа Раддлсдена-Поппера (Ruddlesden-Popper).

В системы $(1-x)\text{NaNbO}_3-x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ нами ранее установлена фазовая x -Т ($T=300$ К) диаграмма (ФД) [9], уточненная в работах [17]. В соответствии с этими диаграммами состояний ТР со структурой типа перовскита в системе $(1-x)\text{NaNbO}_3-x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ образуются в области, близкой к метаниобату натрия – $0.00 \leq x \leq 0.20$, при этом по мере увеличения концентрации $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ в этой области происходит изменение симметрии ТР от ромбической с учетверенной осью b моноклинной подъячейки (Р-фаза), свойственной NaNbO_3 , к ромбической с удвоенной осью b (Q-фаза) и далее до кубической со сверхструктурой и без нее. При $x > 0.20$ образуются PLS, принадлежащие гомологическому ряду $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ с различными значениями n .

Дальнейшие исследования позволили установить факт адсорбции воды [18] в структуру исследуемых объектов, что позволяет рекомендовать их в качестве элементов экологических преобразователей энергии. В статье обсуждается возможность использования исследуемых объектов в качестве Na-ion аккумуляторных батарей за счет проявления свойств гидрострикции.

2. Объекты, методы получения и исследования

Объектом настоящего исследования выступил керамический твердый раствор (ТР) бинарной системы $(1-x)\text{NaNbO}_3-x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ с $x=0.25$ (NCN25).

Исследуемый ТР изготовлен методом твердофазных реакций, при температурах синтеза $(1220 \div 1500)$ К и длительностях обжига 4 часа, с последующим спеканием по обычной керамической технологии при температурах спекания, $T_{\text{сп}}$, из интервала $(1530-1660)$ К в течение 2.5 часов.

Механоактивационная обработка синтезированных порошков ТР проводилась с использованием шаровой планетарной мельницы АГО-2. Составы загружались в барабаны с внутренним диаметром 63 мм вместе с шарами из ZrO_2 диаметром 8 мм общей массой 200 г. Барабаны со смесью загружались в АГО-2, измельчение порошков производилось в присутствии спирта в течении 10 минут при частоте вращения барабана 1800 об/мин.

Высокотемпературные рентгенографические исследования проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра АДП-1 (схема фокусировки по Брэггу-Брентано, $\text{Co}_{\text{K}\alpha}$ -излучение). Образцы для проведения измерений были изготовлены в виде таблетки, спрессованной с помощью поливинилового спирта из измельченной керамики, которая затем приклеивалась к держателю

образца силикатным клеем с добавлением для связки очень малого количества ZnO .

Микроструктуру ТР исследовали на сканирующем лазерном микроскопе KEYENCE VK-9700. Источником света служил лазер с длиной волны 408 нм. Разрешение сканирования лазером составило 2048×1536 пикселей с 16-ти битным фотоумножителем. Были получены изображения внутренней структуры на сколе образцов с увеличением в 3000 раз. Изображения строились методом конфокальной микроскопии. При этом происходила последовательная съемка изображений, находящихся в фокусе на разной высоте. Все, что находилось выше или ниже фокуса, отсекалось конфокальной щелью с сохранением четкой только той поверхности, которая находилась на данной высоте. Сканирование происходило сверху вниз с шагом 0,1 мкм (ось Z), после чего все полученные изображения на разных высотах «сшивались», образуя четкую двумерную картину, а данные о «высоте» (т.е. вертикальном положении окуляра) позволяли сформировать 3D-визуализацию исследуемого объекта без контакта с его поверхностью.

3. Экспериментальные результаты. Обсуждение.

Исходная керамика ТР NCN25, обладая слоистой перовскитоподобной структурой, с ромбической симметрией и параметрами ячейки $a=5.512$ Å, $b=60.07$ Å, $c=3.898$ Å, $V=1290$ Å³. При этом формула соединения – $\text{Na}_6\text{Ca}_4\text{Nb}_{10}\text{O}_{32}$. После того как произошла адсорбция воды, ромбическая симметрия сохранилась с изменением параметров ячейки: $a=5.518$ Å, $b=65.14$ Å, $c=3.903$ Å, $V=1404$ Å³, $n=11$ и формула соединения – $\text{Na}_7\text{Ca}_4\text{Nb}_{11}\text{O}_{35}$. Рентгенограммы соединения представлены на рис.1.

Линию, обозначенную на рентгенограмме (2) буквой S, проиндифицировать в выбранной ячейке не удалось, поэтому она рассматривается нами как спутник основной линии 200, (110)_c. Основанием для такого заключения служит то, что в группе соединений $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ чередование плотных перовскитовых слоев с межслоевым пространством происходит вдоль направления $[110]_c$ и может сопровождаться модуляцией структуры. Поэтому появление наиболее сильного спутника рядом с линией 200 (110)_c вполне вероятно. Рассчитанная по формуле $\Lambda = |1/d_{hkl} - 1/d_s|^{-1}$ (d_{hkl} , d_s – межплоскостные расстояния основной линии и спутника, соответственно) длина волны модуляции в направлении $[100]$ ромбической ячейки $\Lambda=59.8$ Å – значение, близкое к параметру b исходного образца.

Основной причиной увеличения b является интеркаляция кислорода в межслоевое пространство, вследствие адсорбции воды.

Подтверждением этого предположения стали результаты исследования образца после его нагревания в интервале температур $(293 \div 523)$ К. Нагрев NCN25 проводили в два этапа:

сначала образец нагревали до 423 К и охлаждали до 343 К с одинаковым шагом 10 К и изотермической выдержкой в каждой точке 10 минут. До комнатной температуры образец охлаждался с печью. На следующий день образец нагревали от 423 до 523 К с шагом 25 К, после чего его охлаждали вместе с печью до комнатной температуры. При 293 К рентгенограммы записывали на следующий день (через 15 часов) после нагрева, через 7 дней и через 21 день.

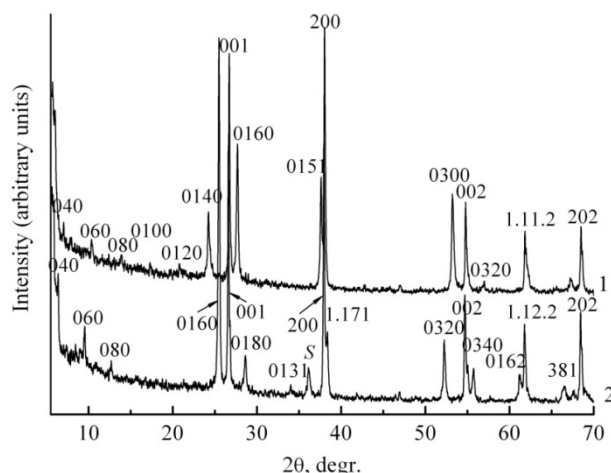


Рис. 1. Рентгенограммы исходного образца NCN25 (1) и после длительного хранения (2)

Исследование показало, что NCN25 (при комнатной температуре его состояние обозначили, как фаза R1) выше 373 К через промежуточную фазу (R2) возвращается в состояние, которое соответствует исходному NCN25 (фаза R3). Симметрия промежуточной фазы R2 тоже ромбическая, а параметр ячейки b имеет среднее значение между параметрами b фаз R1 и R3, при почти одинаковых параметрах a и c . На рис. 2 приведены рентгенограммы NCN0.25, находящегося в разных фазовых состояниях: при 293 К до съемки (фаза R1), 363 К (фазы R1+R2), 413 К (фазы R2+R3), 523 К (фаза R3) и при 293 К после съемки (фазы R3 и R1).

На рис. 3 показаны зависимости параметров и объема ячейки образца NCN25 от температуры. Видно, что параметр b промежуточной фазы R2 в широкой области ее существования остается одним и тем же – 61.83 Å. При нагреве в области сосуществования фаз R1 и R2 параметры a , c и объем ячейки обеих фаз также не изменяются, что характерно для морфотропного фазового перехода в твердых растворах. В области сосуществования R2 и R3 фаз при нагреве только параметры a и c , одинаковые в обеих фазах, увеличиваются скачком при 423 и 403 К, соответственно. Других особенностей на температурных зависимостях нет. В процессе охлаждения зависимости повторяют форму кривых нагрева, но проходят несколько ниже вплоть до $T = 393$ К. При 383 К все параметры и объемы ячейки фаз R2 и R3 увеличиваются, некоторые

скачком (a и V – R2, V – R3) и превосходят их значения при нагреве.

а)

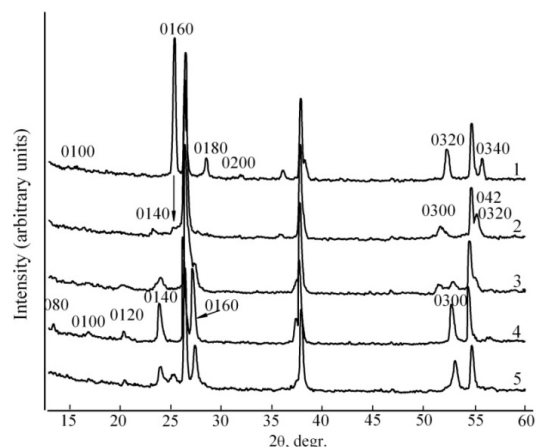


Рис. 2. Рентгенограммы образца NCN25 в интервале углов 2θ 13-60° при разных температурах (охлаждение от 523 К): 1- 293 К до съемки (фаза R1), 2- 363 К (фаза R2 и следы фазы R1), 3- 413 К (фазы R2 и R3), 4- 523 К (фаза R3), 5- 293 К через 15 ч после съемки (фазы R3 и R1)

Итак, результаты исследования позволяют сделать однозначный вывод о том, что увеличение параметра b NCN25 связано с адсорбцией кислорода в межслоевом пространстве. Адсорбционно-активными центрами в данном случае могут являться атомы Na, расположенные в межслоевом пространстве и имеющие координационное число, отличное от 12. Это предположение сделано на основании данных о структуре соединений $\text{NaCa}_4\text{Nb}_5\text{O}_{17}$ [15] и $\text{Nd}_4\text{Ca}_2\text{Ti}_6\text{O}_{20}$ [16], принадлежащих серии $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$. Авторы указанных работ установили, что атомы Na в первом соединении и Ca – во втором размещаются только в перовскитовых слоях, тогда как атомы Ca – в первом соединении и Nd – во втором занимают позиции как внутри слоев, так и в межслоевом пространстве. То есть между перовскитовыми слоями размещаются А катионы, количество которых в соединении больше. В пользу того, что адсорбционно-активными центрами являются атомы Na свидетельствуют результаты поверхностного легирования малым количеством атомов щелочных металлов для увеличения каталитической активности в промышленном гетерогенном катализе. Это приводит к уменьшению энергии диссоциации исходных молекул при их адсорбции, а, значит, к увеличению ее скорости. Появление фазы R2 с параметром b , промежуточным между параметрами b фаз R1 и R3, указывает на то, что адсорбция кислорода в межслоевом пространстве происходит аналогично адсорбции атомов поверхностью моно- или поликристаллического объекта. Атомы вследствие латерального взаимодействия адсорбируются сначала одной стороной в межслоевом пространстве, в результате

чего и появляется фаза R2 с промежуточным параметром $b=61.83 \text{ \AA}$, которому соответствует $n=10.4$, то есть эта фаза является несоизмерной. В некотором температурном интервале низкотемпературная и несоизмерная фазы сосуществуют. Когда адатомы полностью займут одну сторону межслоевого пространства, начинается заполняться другая сторона и появляется соизмерная фаза R3 с $n=11$, сосуществующая с несоизмерной фазой в некотором температурном интервале.

Свидетельства об изменении параметров решетки, в нашем случае, может служить косвенным признаком явления гидрострикции: изменения топологии кристалла под влиянием гидроксильных групп.

На рис.4 показаны фрагменты микроструктур, до и после механоактивации, керамики NCN25. Как можно заметить механоактивация приводит к упорядочению кристаллитов, но и к снижению плотности.

Поскольку габитус формирующихся в ходе рекристаллизации зерен зависит от прочности и анизотропии химических связей, а так же существования преимущественных направлений поверхностной диффузии и самодиффузии, можно предполагать развитие анизотропии скоростей роста зерен в процессе первичной и собирательной рекристаллизации, обеспечивающих форму и размер кристаллитов, которые отвечают слоистой кристаллографической симметрии.

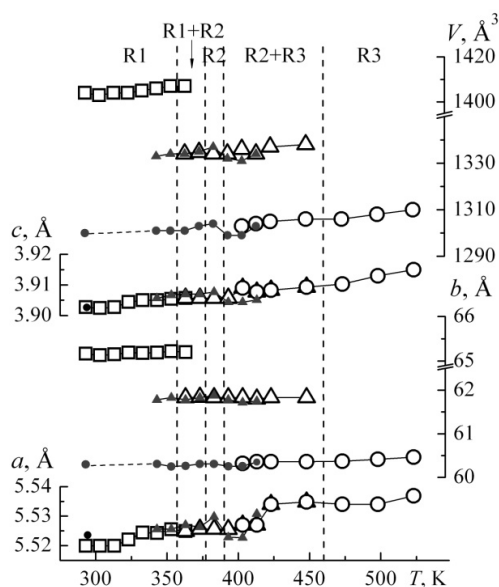


Рис.3. Зависимости параметров a , b , c , объема, V , ромбической ячейки образца NCN25 от температуры, пунктирными линиями выделены области, отличающиеся фазовым составом при нагреве. Параметры и объем фаз обозначены: R1- квадратами, R2-треугольниками, R3- кружками, светлые значки - нагрев, черные - охлаждение.

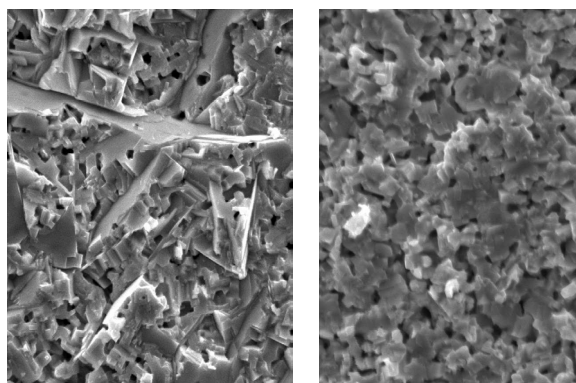


Рис.4. Микроструктура керамик TP $(1-x)\text{NaNbO}_3-x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ $x=0.25$ до(слева) и после (справа) механоактивации (Увеличение 3000)

Кластеризация структуры и все симметричные превращения в перовскитовой области отражаются в поведении характеристик микроструктуры (размеры и форма зерен, однородность и упорядоченность их

упаковки). То же можно сказать и о чередующихся слоистых структурах, сопровождающихся трансформациями зеренных ландшафтов, что напоминает «геометрические»

фазовые переходы при формировании микроstructures большого числа сегнетокерамиков. Таким образом, механоактивирующие процедуры позволяют получить изотропную по составу керамику, что и представляет интерес для создания Na-ion АКБ.

Выводы. Целесообразно использовать полученные данные при разработке материалов с участием компонентов, принадлежащих двум структурным группам – перовскита и слоистых перовскитоподобных, а также устройств с их участием.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ).

Л и т е р а т у р а

1. C. Pan, J.-C. Zhang, M. Zhang, X. Yan, H.-D. Zhang, Y.-Z. Long, X.-Y. Sun, H.-T. Jiang Trap-controlled mechanoluminescence in Pr^{3+} -activated $\text{M}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ ($\text{M} = \text{Sr}, \text{Ca}$) isomorphic perovskites // *Optical Materials Express* 2018 8(6), с. 1425-1434.
2. T.-C. Wei, H.-P. Wang, H.-J. Liu, D.-S. Tsai, J.-J. Ke, C.-L. Wu, Y.-P. Yin, Q. Zhan, G.-R. Lin, Y.-H. Chu, J.-H. He. Photostriction of strontium ruthenate // *Nature Communications* 8, 2017 15108(1-7).
3. J.-C. Zhang, Y.-J. Liu, X. Yan, H.-D. Zhang, J. Zhang, X. Wang, W.-P. Han, Y.-Z. Long, X.-Y. Sun. Multicolor Tuning in Room-Temperature Self-Activated $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ Submicroplates by Lanthanide Doping // *ChemPhysChem* 201718(3), с. 269-273.
4. S.P. Adhikari, Z.D. Hood, A. Lachgar, Semiconductor Heterojunctions for Enhanced Visible Light Photocatalytic H_2 Production // *MRS Advances* 2018 3(55), с. 3263-3270.
5. D. Halwildl, B. Stoger, W. Mayr-Schmolzner, J. Pavelec, D. Fobes, J. Peng, Z. Mao, G. S. Parkinson, M. Schmid, F. Mittendorfer, J. Redinger, U. Diebold. Adsorption of water at the SrO surface of ruthenates. // *Nat.Mat.* 2016. V.15. P.450-456.
6. H.G. Kim, O.S. Becker, J.S. Jang, S.M. Ji, P.H. Borse, J.S. Lee. A generic method of visible light sensitization for perovskite-related layered oxides: Substitution effect of lead // *J. Solid. State Chem.* 2006. V. 179. P. 1214-1218.
7. T. Takata, A. Tanaka, M. Hara, J.N. Kondo, K. Domen. Recent progress of photocatalysts for overall water splitting // *Catalysis Today.* 1998. V. 44. P. 17-26.
8. R.E. Schaak, T.E. Mallou Perovskites by Design: A Toolbox of Solid-State Reactions // *Chem. Mater.* 2002. V. 14. P. 1455-1471.
9. M. Nanot, F. Queyroux, J.-C. Gilles, A. Carpy, J. Galy. Phases multiples dans les Systemes $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ - NaNbO_3 : les series homologues de formule $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$. // *J. of Solid state chemistry.* 1974. V. 11. P. 272-284
10. R. Portier, M. Fayard, A. Carpy, J. Galy. Etude par microscopie electronique de quelques termes de la serie (Na, Ca) $_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ // *Mat. Res. Bull.* 1974. V. 9. P. 371-378.
11. R. Portie, A. Carpy, M. Fayard, J. Galy. Perovskite-Like Compounds ABO_{3+x} ($0.44 \leq x < 0.5$). Electron Microscopy Survey on the (NaCa) $_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ ($4 < n \leq 4.5$) Homologous Series. // *Phys. Stat. Sol. (a).* 1975. V. 30. P. 683-697.
12. F. Lichtenberg, A. Herrnberger, K. Wiedenmann, J. Mannhart. Synthesis of perovskite-related layered $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2} = \text{ABO}_x$ type niobates and titanates and study of their structural, electric and magnetic properties. // *Progress in Solid State Chemistry.* 2001. V. 29. P. 1-70.
13. F.J. Zuniga, J. Darriet $\text{NaCa}_4\text{Nb}_5\text{O}_{17}$: a Layered Perovskite $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ Compound // *Acta Cryst. C.* 2003. V. 59, i18-i20.
14. R. Muhammad, Y. Iqbal, C.R. Rambo. Structure-property relationship in $\text{NaCa}_4\text{B}_5\text{O}_{17}$ ($\text{B} = \text{Nb}, \text{Ta}$) perovskites // *J Mater Sci: Mater Electron.* 2015. V. 26. P. 2161-2166.
15. J. Yang, M. Zhao, M. Shahid, J. Feng, C. Wan, W. Pan. Electronic structure, anisotropic elastic and thermal properties of monoclinic $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$. // *Ceramics International.* 2016. V. 42. P. 9426-9432.
16. I. Levin, L.A. Bendersky. Symmetry classification of the layered perovskite-derived $\text{A}_n\text{B}_n\text{X}_{3n+2}$ structures. // *Acta Cryst. B Structural Science Crystal Engineering Materials.* 1999. V. 55. Part 6. P. 853-866.
17. J.Y. Zubarev, L.A. Shilkina, L.A. Reznichenko. Phase states and dielectric properties of solid solutions of $(1-x)\text{NaNbO}_3$ - $x\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, $(1-x)\text{NaNbO}_3$ - $x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ binary systems // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics,* 2016, 80(11), стр. 1361–1363.
18. J.Y. Zubarev, L.A. Shilkina, A.P. Budnik, A.V. Nazarenko, S.I. Dudkina, O.N. Razumovskaya, L.A. Reznichenko. Intercalation of water molecules from air into perovskite and layered structures formed in the system $(1-x)\text{NaNbO}_3$ - $x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$

References

1. C. Pan, J.-C. Zhang, M. Zhang, X. Yan, H.-D. Zhang, Y.-Z. Long, X.-Y. Sun, H.-T. Jiang Trap-controlled mechanoluminescence in Pr^{3+} -activated $\text{M}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ ($\text{M} = \text{Sr}, \text{Ca}$) isomorphic perovskites // *Optical Materials Express* 2018 8(6), с. 1425-1434.
2. T.-C. Wei, H.-P. Wang, H.-J. Liu, D.-S. Tsai, J.-J. Ke, C.-L. Wu, Y.-P. Yin, Q. Zhan, G.-R. Lin, Y.-H. Chu, J.-H. He. Photostriction of strontium ruthenate // *Nature Communications* 8, 2017 15108(1-7).
3. J.-C. Zhang, Y.-J. Liu, X. Yan, H.-D. Zhang, J. Zhang, X. Wang, W.-P. Han, Y.-Z. Long, X.-Y. Sun. Multicolor Tuning in Room-Temperature Self-Activated $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ Submicroplates by Lanthanide Doping // *ChemPhysChem* 201718(3), с. 269-273.
4. S.P. Adhikari, Z.D. Hood, A. Lachgar, Semiconductor Heterojunctions for Enhanced Visible Light Photocatalytic H_2 Production // *MRS Advances* 2018 3(55), с. 3263-3270.
5. D. Halwildl, B. Stoger, W. Mayr-Schmolzner, J. Pavelec, D. Fobes, J. Peng, Z. Mao, G. S. Parkinson, M. Schmid, F. Mittendorfer, J. Redinger, U. Diebold. Adsorption of water at the SrO surface of ruthenates. // *Nat.Mat.* 2016. V.15. P.450-456.
6. H.G. Kim, O.S. Becker, J.S. Jang, S.M. Ji, P.H. Borse, J.S. Lee. A generic method of visible light sensitization for perovskite-related layered oxides: Substitution effect of lead // *J. Solid. State Chem.* 2006. V. 179. P. 1214-1218.
7. T. Takata, A. Tanaka, M. Hara, J.N. Kondo, K. Domen. Recent progress of photocatalysts for overall water splitting // *Catalysis Today.* 1998. V. 44. P. 17-26.
8. R.E. Schaak, T.E. Mallou Perovskites by Design: A Toolbox of Solid-State Reactions // *Chem. Mater.* 2002. V. 14. P. 1455-1471.

9. M. Nanot, F. Queyroux, J.-C. Gilles, A. Carpy, J. Galy. Phases multiples dans les Systemes $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7\text{-NaNbO}_3$: les series homologues de formule $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$. // J. of Solid state chemistry. 1974. V. 11. P. 272-284.

10. R. Portier, M. Fayard, A. Carpy, J. Galy. Etude par microscopie electronique de quelques termes de la serie $(\text{Na}, \text{Ca})_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ // Mat. Res. Bull. 1974. V. 9. P. 371-378.

11. R. Portie, A. Carpy, M. Fayard, J. Galy. Perovskite-Like Compounds ABO_{3+x} ($0.44 \leq x < 0.5$). Electron Microscopy Survey on the $(\text{NaCa})_n\text{Nb}_n\text{O}_{3n+2}$ ($4 < n \leq 4.5$) Homologous Series. // Phys. Stat. Sol. (a). 1975. V. 30. P. 683-697.

12. F. Lichtenberg, A. Herrnberger, K. Wiedenmann, J. Mannhart. Synthesis of perovskite-related layered $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2} = \text{ABO}_x$ type niobates and titanates and study of their structural, electric and magnetic properties. // Progress in Solid State Chemistry. 2001. V. 29. P. 1-70.

13. F.J. Zuniga, J. Darriet. $\text{NaCa}_4\text{Nb}_5\text{O}_{17}$: a Layered Perovskite $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ Compound // Acta Cryst. C. 2003. V. 59, i18-i20.

14. R. Muhammad, Y. Iqbal, C.R. Rambo. Structure-property relationship in $\text{NaCa}_4\text{B}_5\text{O}_{17}$ ($\text{B} = \text{Nb}, \text{Ta}$) perovskites // J Mater Sci: Mater Electron. 2015. V. 26. P. 2161-2166.

15. J. Yang, M. Zhao, M. Shahid, J. Feng, C. Wan, W. Pan. Electronic structure, anisotropic elastic and thermal properties of monoclinic $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$. // Ceramics International. 2016. V. 42. P. 9426-9432.

16. I. Levin, L.A. Bendersky. Symmetry classification of the layered perovskite-derived $\text{A}_n\text{B}_n\text{X}_{3n+2}$ structures. // Acta Cryst. B Structural Science Crystal Engineering Materials. 1999. V. 55. Part 6. P. 853-866.

17. J.Y. Zubarev, L.A. Shilkina, L.A. Reznichenko. Phase states and dielectric properties of solid solutions of $(1-x)\text{NaNbO}_3\text{-}x\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, $(1-x)\text{NaNbO}_3\text{-}x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ binary systems // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2016, 80(11), стр. 1361-1363.

18. J.Y. Zubarev, L.A. Shilkina, A.P. Budnik, A.V. Nazarenko, S.I. Dudkina, O.N. Razumovskaya, L.A. Reznichenko. Intercalation of water molecules from air into perovskite and layered structures formed in the system $(1-x)\text{NaNbO}_3\text{-}x\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$.

Zubarev J.Y., Shilkina L.A., Krutov V.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A.

HYDROSTRICTIVE MATERIALS FOR ANODES AND CATHODES OF STORAGE BATTERIES BASED ON NIOBATES OF ALKALI AND ALKALINE EARTH METALS.

The article presents a study of materials based on sodium and calcium niobates, which have the ability to capture water due to the manifestation of the Hadwell effect. It was found by X-ray diffraction that the process of intercalation of water is

accompanied by a change in the topological characteristics of the crystals - hydrostriction. The established phenomena are of interest not only as catalysts for water decomposition, but also as a basis for the creation of Na-ion storage batteries.

Зубарев Ярослав Юрьевич, н.с. ОИМинТ НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: yzubarev@sfedu.ru

Jroslav Zubarev, Researcher, Research Institute of Physics Southern Federal University

Крутов Владимир Алексеевич, аспирант, ИСОП, ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет».
E-mail: yzubarev@sfedu.ru

Krutov Vladimir, ISE FSBEI HE DGU

Шилкина Лидия Александровна, н.с., НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: lid-shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidia Aleksandrovna, researcher, Research Institute of Physics, SFU.

Назаренко Александр Владимирович к.ф.-м.н., Лаборатория механики активных материалов, ФГБУН "Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской академии наук"

Nazarenko Alexandr, Canditate of Physics and Mathematics, Mechanics of Active Materials Laboratory, SSC RAS.
E-mail: avnazarenko1@gmail.com

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., проф., зав. ОИМинТ НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: lareznichenko@sfedu.ru

Reznichenko Larisa, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Head of the Department of Intellectual Materials and Nanotechnologies Research Institute of Physics Southern Federal University.

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК: 513.73, 517.1, 517.2, 536.7, 539.1

СВЯЗЬ ИСЧИСЛЕНИЯ ВНЕШНИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ФОРМ С МЕТОДОМ ЯКОБИАНОВ И ОСОБЕННОСТИ ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕРМОДИНАМИКЕ

Шелест В.В., Червинский Д.А

EXTERNAL DIFFERENTIAL FORMS CALCULATION AND JACOBEAN METHOD CONNECTION, ITS THERMODYNAMICAL APPLICATION

Shelest V.V., Chervinskii D.A.

Определяются взаимосвязи между термодинамическими характеристиками, характеризующими калориметрические свойства конденсированной среды с использованием принципов исчисления внешних дифференциальных форм.

Ключевые слова: якобиан перехода, внешние дифференциальные 2-формы, термодинамические коэффициенты.

Как в физике, так и в математике часто ставится задача перехода от одних переменных к другим, традиционно решаемая при помощи якобианов [1-3]. В исчислении внешних дифференциальных форм переход от одних переменных (u, v) к другим (x, y) записывается как

$$\tilde{d}u\tilde{d}v = J\tilde{d}x\tilde{d}y \quad (1)$$

Предлагается формально переписать указанное соотношение в виде дроби, выражающей коэффициент J (якобиан) в виде

$$J \equiv \frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \frac{\tilde{d}u\tilde{d}v}{\tilde{d}x\tilde{d}y} \quad (2)$$

По сути дела используется другая форма записи якобиана. В развернутом виде формула (2) записывается как

$$J = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_y \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_x - \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_x \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_y = \frac{\tilde{d}u\tilde{d}v}{\tilde{d}x\tilde{d}y} = \frac{\tilde{d}v\tilde{d}x}{\tilde{d}y\tilde{d}x} - \frac{\tilde{d}u\tilde{d}x}{\tilde{d}y\tilde{d}x} \cdot \frac{\tilde{d}v\tilde{d}y}{\tilde{d}x\tilde{d}y} \quad (3)$$

Связь, отражающая обратный переход, будет иметь вид

$$J^{-1} \equiv \frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} = \frac{\tilde{d}x\tilde{d}y}{\tilde{d}u\tilde{d}v} \quad (4)$$

Очевидно, что $J \cdot J^{-1} = 1$.

В данной работе приведены примеры применения внешних дифференциальных форм в термодинамике, прежде всего используя тот факт, что с отношениями 2-форм можно обращаться как с дробями.

Рассмотрим преобразование некоторых термодинамических величин, связанных с калориметрией. При этом будем учитывать

основное калибровочное равенство $\tilde{d}P\tilde{d}V = \tilde{d}T\tilde{d}S$, из которого следуют используемые в дальнейшем соотношения $(\tilde{d}P\tilde{d}V) / (\tilde{d}T\tilde{d}S) = 1$ (или $(\tilde{d}T\tilde{d}S) / (\tilde{d}P\tilde{d}V) = 1$) [1, 2].

Получим выражения для изохорической и изобарической теплоемкости [3], опираясь на исчисление внешних дифференциальных форм [1, 2]. Тогда, в частности, исходя из определения теплоемкости в абстрактной форме [1, 2] будем иметь:

$$\begin{aligned} C_V(T, V) &= \frac{\tilde{\delta}Q\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = T \frac{\tilde{d}S\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = \\ &= T \frac{\tilde{d}S\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}V} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}S} = -T \frac{\tilde{d}S\tilde{d}V}{\tilde{d}S\tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = \\ &= -T \frac{\partial(S, V)}{\partial(S, T)} \cdot \frac{\partial(P, V)}{\partial(T, V)} = \\ &= -T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = -TV\alpha_S\beta_V. \end{aligned} \quad (5)$$

С другой стороны, можно вычислить ту же величину следующим образом:

$$\begin{aligned} C_V &= -T \frac{\tilde{d}S\tilde{d}V}{\tilde{d}S\tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}V}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = -T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}T\tilde{d}S}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = \\ &= -T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}T\tilde{d}S}{\tilde{d}T\tilde{d}V} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}T}{\tilde{d}P\tilde{d}T} = \\ &= -T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}T\tilde{d}S}{\tilde{d}P\tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}T}{\tilde{d}T\tilde{d}V} = \\ &= T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}P\tilde{d}V}{\tilde{d}P\tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}P\tilde{d}T}{\tilde{d}V\tilde{d}T} = \\ &= T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = -TV\alpha_S\alpha_P K_T. \end{aligned} \quad (6)$$

Из равенств (5) и (6) получаем соотношение

$$\alpha_P K_T = P\beta_V. \quad (7)$$

Докажем теперь равенство (7) другим способом. Перепишем его в виде

$$\frac{\alpha_P K_T}{P \beta_V} = 1.$$

Левую часть данного равенства представим через внешние дифференциальные формы и выполним соответствующие преобразования, опираясь на правила обращения с 2-формами [1-3]:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_P K_T}{P \beta_V} &= - \left\{ \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}V} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}T} \right\} / \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}V} = \\ &= \left\{ \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V} \right\} / \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}V} = \\ &= \left\{ \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}T} \cdot 1 \right\} / \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}V} = \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V} = 1 \cdot 1 = 1. \end{aligned}$$

В результате вычислений получаем верное равенство, что и подтверждает высказанное выше утверждение.

Теперь рассчитаем изобарическую теплоемкость [1-3].

$$\begin{aligned} C_P(T, P) &= \frac{\tilde{\delta} Q \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = T \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = \\ &= T \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V} = \\ &= T \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} = T \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = \quad (8) \\ T \frac{\partial(S, P)}{\partial(S, T)} \cdot \frac{\partial(V, P)}{\partial(T, P)} &= T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \\ &= TVP \beta_S \alpha_P. \end{aligned}$$

Если провести вычисления другим путем, то получим следующий результат:

$$\begin{aligned} C_P &= T \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} \cdot \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V} = T \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V} \cdot \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = \\ &= T \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} \cdot \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T} = \\ &= T \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}V}{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T} \cdot \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = \\ &= T \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} \cdot \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P} = \quad (9) \\ &= T \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \frac{\tilde{d}S \wedge \tilde{d}T}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P} \cdot \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}P}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}P} = \\ &= T \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S \cdot 1 \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \\ &= -TV \alpha_P \alpha_S K_S. \end{aligned}$$

Исходя из равенств (8) и (9), получаем

$$\alpha_S K_S = -P \beta_S \quad (10)$$

Подтвердим равенство (10), используя ту же методику, что и при доказательстве уравнения (7). Представим (10) в виде

$$-\frac{\alpha_S K_S}{P \beta_S} = 1.$$

Распишем левую часть данного соотношения в терминах внешних дифференциальных форм и,

проводя элементарные действия с дробями, получаем верное равенство:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}S} / \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} = \\ = \frac{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}V \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}P \wedge \tilde{d}S} \cdot \frac{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S}{\tilde{d}T \wedge \tilde{d}S} = \\ = 1 \cdot 1 \cdot 1 = 1. \end{aligned}$$

Выводы. Работа расширяет представления о сфере применимости фундаментальных принципов векторного анализа. Продемонстрирована эффективность использования внешних дифференциальных 2-форм как альтернативы методу якобианов.

Л и т е р а т у р а

1. В.В.Шелест, Д.А. Червинский, ФТВД, **30**, 3, с.33, (2020).
2. В.В. Шелест, А.В. Христов, Д.А. Червинский, ФТВД, **30**, 4, с.18 (2020).
3. Д.А. Червинский, А.В. Христов, В.В. Шелест, ФТВД, **31**, 2 (в печати).

R e f e r e n c e s

1. V.V.Shelest, D.A.Chervinskii., PHPT, **30**, 3, p.33, (2020).
2. V.V.Shelest, A.V.Hristov, D.A.Chervinskii, PHPT, **30**, 4, p.18 (2020).
3. D.A.Chervinskii, A.V.Hristov, V.V.Shelest, PHPT, **31**, 2 (in printing).

Shelest V.V., Chervinskii D.A.

EXTERNAL DIFFERENTIAL FORMS CALCULATION AND JACOBEAN METHOD CONNECTION, ITS THERMODYNAMICAL APPLICATION

Interconnection between thermodynamical coefficients characterizing calorimetric matter properties defined using external differential forms calculation principles.

Keywords: transition Jacobean, external differential 2-forms, thermodynamical coefficients

Шелест Валерий Викторович, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», Донецк.

E-mail: chervin@dfti.donbass.com

Shelest Valeriy Viktorovich, PhD in Physics and Mathematics, senior fellow of State Institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin», Donetsk.

Червинский Дмитрий Александрович, младший научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», Донецк.

E-mail: chervin@dfti.donbass.com

Chervinskii Dmitrii Aleksandrovich, junior fellow of State Institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin», Donetsk.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК: 513.73, 534.21, 536.7, 539.1, 539.2

СВЯЗЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ С АКУСТИКОЙ

Шелест В.В., Червинский Д.А., Христов А.В.

THERMODYNAMIC PHASE STATE STABILITY CONNECTION WITH ACOUSTICS

Shelest V.V., Chervinskii D.A., Hristov A.V.

Определяется связь между ангармоническими свойствами упруго деформированной среды, акустикой и термодинамикой устойчивости равновесного фазового состояния системы. Выводятся аналитические соотношения, демонстрирующие взаимное влияние комплексного ангармонизма и звуковых волн в континуальной среде.

Ключевые слова: комплексный ангармонизм, соотношение Грюнайзена, параметр Грюнайзена, скорость упругой волны, детерминант устойчивости, звуковые волны.

1. Связь комплексного ангармонизма упруго деформированной среды с акустикой. Согласно теории упруго деформированного континуума, в среде могут распространяться продольные и поперечные звуковые волны [1-10]. Поскольку распространение звуковых волн происходит без теплообмена, то используются адиабатические величины (и соответствующие обозначения) [1-3, 7-10]. Скорости продольных и поперечных волн различны и выражаются через коэффициенты Ляме следующим образом:

$$\rho v_{\perp}^2 = \mu_S \quad (1)$$

$$\rho v_{\parallel}^2 = \lambda_S + 2\mu_S \quad (2)$$

В соотношениях (1) и (2) ρ - плотность, $v_{\perp}$ и $v_{\parallel}$ - соответственно поперечная и продольная скорости звука в среде, λ_S и μ_S - адиабатические коэффициенты Ляме. Из (1) и (2) следует очевидное равенство

$$\lambda_S = \rho v_{\parallel}^2 - 2\rho v_{\perp}^2 \quad (3)$$

В то же время, следуя теории упругости сплошной среды, коэффициенты Ляме можно связать с модулями упругости среды [1,8-10]:

$$\mu_S = G_S \quad (4)$$

$$\lambda_S + \frac{2}{3}\mu_S = K_S \quad (5)$$

Здесь G_S - это модуль сдвига, K_S - модуль упругого объемного сжатия.

Легко показать [1,8-10], что в изотермическом случае модули упругости удовлетворяют условиям

$G_T = G_S = G$, тогда как $K_T \neq K_S$. В этом контексте из (5) на основе (1) и (3) получаем связь

$$\frac{K_S}{\rho} = v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3}v_{\perp}^2 \quad (6)$$

Известно, что в кристаллах кубической симметрии (в континуальном пределе являющимися сплошной средой) могут распространяться три типа волн разной поляризации (одна продольная и две поперечные). В то же время средняя квадратическая скорость распространения звуковых волн в кристалле есть величина инвариантная, то есть не зависящая от направления, выражаемая формулой [3,8-10]

$$\langle v \rangle^2 = \frac{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}{3} \quad (7)$$

Другими словами, несмотря на анизотропию кристаллов кубической симметрии, в среднем квадрат скорости звука в данной среде такой же, как в изотропном случае [1,3,9,10]. Следуя концепции, отмеченной в [6-10], квадрат средней квадратической скорости может быть определен через термодинамические коэффициенты следующим образом:

$$\rho \langle v \rangle^2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_P}{\alpha_P} \cdot \frac{1}{V} \quad (8)$$

Данная формула, по [6,10], используется для экспериментального определения среднего квадрата скорости.

Соотношение Грюнайзена [1-3,7-10] можно сформулировать в виде следующей связи между параметром Грюнайзена γ_G и коэффициентом теплового расширения α_P (которые являются величинами, непосредственно характеризующими комплексный ангармонизм системы):

$$\gamma_G = V \alpha_P \frac{K_S}{C_P} \quad (9)$$

Таким образом, опираясь на равенства (6)-(9), получаем связь параметров комплексного ангармонизма с акустическими величинами в виде

$$\gamma_G = \frac{9}{2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2}, \quad (10)$$

$$\alpha_P = \frac{9}{2} \cdot \frac{C_P}{v_{\parallel}^2 + 2v_{\perp}^2} \cdot \frac{1}{\rho V}. \quad (11)$$

В дальнейшем будем придерживаться постулата $\rho V = \text{const}$. Если учесть, что теплоемкость при постоянном давлении сама связана с комплексным ангармонизмом согласно формуле [2,9,10]

$$C_P = C_V (1 + \gamma_G \alpha_P T), \quad (12)$$

то из (11) следует соотношение

$$\alpha_P = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_V}{\langle v^2 \rangle \rho V} (1 + \gamma_G \alpha_P T). \quad (13)$$

Разрешая последнее равенство относительно параметра α_P и используя (10), получаем для коэффициента теплового расширения следующую формулу:

$$\alpha_P = \frac{3}{2} \cdot \frac{C_V}{\langle v \rangle^2 \rho V} \times \left[1 - \frac{27}{4} \cdot \frac{C_V T}{\rho V \langle v \rangle^4} \left(v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3} v_{\perp}^2 \right) \right]^{-1} \quad (14)$$

$$D_y = \frac{T \cdot \rho V}{V_0^2 C_V \left\{ 1 + \frac{3}{2} \cdot \frac{TC_V}{\langle v \rangle^2 \rho V} \left[1 - \frac{27}{4} \cdot \frac{C_V T}{\rho V \langle v \rangle^4} \left(v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3} v_{\perp}^2 \right) \right]^{-1} \right\}^2} \times \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{1 + \frac{3}{2} T \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{\langle v \rangle^4} \left\{ 1 + \frac{3}{2} \cdot \frac{TC_V}{\langle v \rangle^2 \rho V} \left[1 - \frac{27}{4} \cdot \frac{C_V T}{\rho V \langle v \rangle^4} \left(v_{\parallel}^2 - \frac{4}{3} v_{\perp}^2 \right) \right]^{-1} \right\}} \quad (19)$$

С другой стороны, если учесть, что $D_y = (T/V)(K_S/C_P) = (T/V)(K_T/C_V)$ [7-10], то можно получить и термический модуль упругости

$$K_T = \frac{V}{T} D_y C_V, \quad (20)$$

который, в принципе, можно выразить, опираясь на использованные выше равенства, в форме, подобной (19).

Замечания. Отметим, что связь между адиабатическим и термическим модулями упругости такая же, как между соответствующими теплоемкостями (12), а именно $K_S = K_T (1 + \gamma_G \alpha_P T)$ [7-10], что подтверждается известным соотношением [8-10]

2. Связь детерминанта устойчивости с акустикой. Детерминант устойчивости [7], выраженный через параметры комплексного ангармонизма, определяется как величина [7-10]:

$$D_y = \frac{T}{V^2} \cdot \frac{\gamma_G}{\alpha_P}. \quad (15)$$

Согласно соотношению Грюнайзена (9) равенство (15) запишем в виде

$$D_y = \frac{T}{V} \cdot \frac{K_S}{C_P} = \frac{T \cdot \rho V}{V^2} \cdot \frac{K_S / \rho}{C_P}. \quad (16)$$

Опираясь на соотношения (6), можно привести детерминант устойчивости к следующему виду:

$$D_y = \frac{T \cdot \rho V}{V^2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{C_P}. \quad (17)$$

Дальнейшая трансформация формулы (17) связана с ангармонизмом, когда используется формула $V = V_0(1 + \alpha_P T)$ для объема и подобная ей формула для C_P (12) (при условии постоянства удельной массы вещества ρV). В результате простой подстановки получаем

$$D_y = \frac{T \cdot \rho V}{V_0^2 C_V (1 + \alpha_P T)^2} \cdot \frac{v_{\parallel}^2 - (4/3)v_{\perp}^2}{1 + \gamma_G \alpha_P T}. \quad (18)$$

Если использовать соотношения (10) и (14), то окончательно выражение, определяющее детерминант устойчивости, примет вид

$$\frac{C_P}{C_V} = \frac{K_S}{K_T} \quad (21)$$

Выводы. В работе определены связи между термодинамическими коэффициентами, детерминантом устойчивости, параметрами комплексного ангармонизма и скоростями упругих волн в конденсированной среде.

Л и т е р а т у р а

1. В.С.Постников Физика и химия твердого состояния. М.: «Металлургия», 1978.
2. Л.Жирифалько Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1975.
3. А.А.Кацнельсон Введение в физику твердого тела. Изд-во Моск. ун-та, 1984.

4. В.Б.Баскакова, А.В.Головин, М.М.Мартынюк, В.К.Семенченко. Акустический журнал, т.11, вып.1, с.30 (1965).
5. И.П.Базаров. Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991.
6. В.Н.Беломестных. Письма в ЖЭТФ, т.30, вып.3, с.14-19 (2004).
7. В.В.Шелест, А.В.Христов. ФТВД, **29**, 4, с.73 (2019).
8. В.В.Шелест, А.В.Христов, Д.А.Червинский, ФТВД, **30**, 4, с.18 (2020).
9. В.В.Шелест, Д.А.Червинский, А.В.Христов, ФТВД, **31**, 1, с.5 (2021)
10. Червинский Д.А., Христов А.В., Шелест В.В. V Всероссийская научно-практическая конференция «Информационные и инновационные технологии в науке и образовании» (с международным участием), Таганрог, 28 – 29 октября 2020 г., с.793-797.

References

1. V.S.Postnikov. Physics and chemistry of solid state M.: Metallurgy, 1978.
2. Л.Жирифалько L.Girifalko. Solid state statistical physics M.: World, 1975.
3. A.Katsnelson Solid state physics introduction. Moscow university, 1984.
4. V.B.Baskakova, A.V.Golovin, M.M.Martyniuk, V.K.Semenchenko. Acoustic journal, vol.11, part 1, p.30 (1965).
5. I.P.Bazarov. Thermodynamics. M.: High school, 1991.
6. V.N.Belomestnyh JETP letters, vol.30, part 3, p.14-19 (2004).
7. V.V.Shelest, A.V.Hristov PTHP, **29**, 4, p.73 (2019).
8. V.V.Shelest, A.V.Hristov, D.A.Chervinskii PTHP, **30**, 4, p.18 (2020).
9. , PTHP **31**, 1, p.5 (2021)
10. D.A.Chervinskii, A.V.Hristov, V.V.Shelest V conference IITSE, Taganrog, October 28– 29, 2020, p.793-797.

Shelest V.V., Chervinskii D.A., Hristov A.V.
THERMODYNAMIC PHASE STATE STABILITY
CONNECTION WITH ACOUSTICS

Elastically deformed matter complex anharmonism and acoustic connection studies. Particularly, analytic relations demonstrating dependence between complex anharmonism and sound waves in continual matter.

Keywords: Complex anharmonism, Gruneisen relation, Gruneisen parameter, elastic wave speed, determinant of stability, sound waves.

Шелест Валерий Викторович, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», Донецк.
E-mail: chervin@dfti.donbass.com

Shelest Valeriy Viktorovich, PhD in Physics and Mathematics, senior fellow of State Institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin», Donetsk.

Червинский Дмитрий Александрович, младший научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», Донецк.
E-mail: chervin@dfti.donbass.com

Chervinskii Dmitrii Aleksandrovich, junior fellow of State Institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin», Donetsk.

Христов Александр Вячеславович, к.ф.-м.н., научный сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», Донецк.
E-mail: efbji@list.ru

Khristov Alexander Vyacheslavovich, PhD in Physics and Mathematics, fellow of State Institution «Donetsk institute for physics and engineering named after A.A. Galkin», Donetsk.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 546.26-162

СОИНТЕРКАЛАТ НИТРАТА ГРАФИТА С ЭТИЛ- И БУТИЛАЦЕТАТОМ КАК ПРЕДШЕСТВЕННИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Осколкова О.Н., Давыдова А.А., Ракша Е.В., Гнатовская В.В., Сухов П.В.,
Берестнева Ю.В., Глазунова В.А., Бурховецкий В.В., Волкова Г.К., Савоськин М.В.

COINTERCALATE OF GRAPHITE NITRATE WITH ETHYL- AND BUTYL ACETATE AS A PRECURSOR OF CARBON NANOPARTICLES

Oskolkova O.N., Davydova A.A., Raksha E.V., Gnatovskaya V.V., Sukhov P.V.,
Berestneva Yu.V., Glazunova V.A., Burkhovetskiy V.V., Volkova G.K., Savoskin M.V.

В результате модификации нитрата графита этил- и бутилацетатом получен соинтеркалат (ССНГ), представляющий собой смесь соединений II-й и IV-й стадий интеркалирования. Структурная реорганизация графитовой матрицы при образовании соинтеркалата и терморасширенного графита (ТРГ) на его основе исследована методами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии. Установлено, что использование этил- и бутилацетата в качестве соинтеркалантов приводит к увеличению высоты заполненного внедренными частицами слоя по сравнению с нитратом графита для соединения IV-й стадии, а также к увеличению коэффициента термического расширения. Показано, что расслоение полученного соинтеркалата и терморасширенного графита на его основе в жидких средах ведет к образованию дисперсий углеродных наночастиц различной морфологии. Дисперсия, содержащая преимущественно малослойные графены, получена расслоением ТРГ в трет-бутаноле при содействии ультразвука, образование наносcrollов превалирует при расслоении ССНГ в сольвотермических условиях в среде соинтеркаланта (бутилацетата).

Ключевые слова: малослойные графены, наносcrollы, соединения соинтеркалирования нитрата графита, терморасширенный графит, просвечивающая электронная микроскопия

Введение. Жидкофазное расслоение графита является одним из основных методов получения дисперсий графена и родственных структур в лабораторной практике [1] и обладает высоким потенциалом для развития на его основе метода производства графена в промышленном масштабе. Помимо графита в качестве предшественников углеродных наночастиц могут быть использованы также его соединения интеркалирования донорного [2] и акцепторного типов [3, 4], поскольку также содержат в своей структуре углеродные слои. Внедрение частиц интеркаланта между соседними слоями графита ведет к увеличению расстояния и уменьшению Ван-дер-Ваальсовых сил взаимодействия между ними. Поэтому структуру соединений интеркалирования графита, в которой

углеродные слои чередуются со слоями внедренных частиц, можно рассматривать как предорганизованную для генерирования одно- и малослойных графеновых частиц.

Целью данной работы является синтез и исследование особенностей структуры тройного соединения соинтеркалирования нитрата графита с этил- и бутилацетатом (ССНГ), а также терморасширенного графита (ТРГ) на его основе; изучение морфологии углеродных наночастиц, образующихся в результате ультразвуковой обработки ССНГ и ТРГ в спиртах (этанол, трет-бутанол) а также при расслоении ССНГ в среде бутилацетата в сольвотермических условиях.

Экспериментальная часть. Исходным материалом для синтеза соединения соинтеркалирования нитрата графита является природный чешуйчатый графит Завальевского месторождения (Украина) марки ГТ-1 по ГОСТ 4596-75, который перед использованием предварительно обеззоливали обработкой концентрированными соляной и плавиковой кислотами. После очистки зольность графита составила 0,01 %.

Синтез ССНГ проводили в термостатируемом реакторе при 20 °С в соответствии с методикой, приведенной в [5]. На первом этапе при взаимодействии графита с дымящей азотной кислотой получали нитрат графита, который далее обрабатывали этилацетатом и бутилацетатом (в соотношении 1 : 1 по объему). Полученный продукт сушили на воздухе до постоянной массы при комнатной температуре.

Терморасширенный графит на основе ССНГ получен при 900 °С в ударном режиме нагрева [6, 7]. Коэффициент термического расширения ССНГ определяли из соотношения (1) как среднее арифметическое трех параллельных измерений.

$$K_V = \frac{V}{m}, \quad (1)$$

где K_V – коэффициент термического расширения, $\text{см}^3 \cdot \text{г}^{-1}$; V – объем графитовой пены, см^3 ; m – масса исходного анализируемого образца, г.

Рентгенофазовый анализ (РФА) образцов исходного графита, ССНГ и ТРГ выполнен на дифрактометре ДРОН-3 (излучение $\text{CuK}\alpha$, $\lambda = 1,54181 \text{ \AA}$). На основе угловых положений пиков на дифрактограммах исходного графита и ССНГ рассчитывали периоды идентичности (I_C , $\text{\AA}$) в соответствии с уравнением (2):

$$I_C = l \cdot \frac{\lambda}{2 \sin \theta_i}, \quad (2)$$

где λ – длина волны излучения, $\text{\AA}$; θ_i – угол скольжения, $^\circ$; l – порядок отражения под углом θ_i .

Порядок отражения l максимальной интенсивности связан с номером стадии интеркалирования ССНГ n соотношением $l = n + 1$. Высоту заполненного межслоевого пространства (d_i , $\text{\AA}$) для ССНГ определяли из соотношения (3):

$$d_i = I_C - (n - 1) \cdot 3,360, \quad (3)$$

где I_C – период идентичности, $\text{\AA}$; n – номер стадии интеркалирования (число графитовых плоскостей между соседними слоями интеркаланта); $3,360 \text{ \AA}$ – межплоскостное расстояние в исходном графите.

Морфологию поверхности исходного графита, ССНГ и ТРГ исследовали методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с помощью микроскопа JSM – 6490LV (Япония). Изучение микроструктуры и морфологии углеродных наночастиц, образующихся из ССНГ и ТРГ, проводили методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с помощью микроскопа JEM-200A фирмы «JEOL». Образцы для микроскопии формировали на покрытых углеродом медных сетках путем помещения капли дисперсии наночастиц на сетку.

Дисперсии углеродных наночастиц получали тремя способами:

(А) – расслоение свежеприготовленного ССНГ в этаноле при содействии ультразвука (ультразвуковая установка И100-6 фирмы "Ультразвуковая техника – Инлаб", Россия, рабочие параметры: 22 кГц, 470 Вт, 1 час). Свежеприготовленную дисперсию центрифугировали в течение 5 минут (3000 об/мин), отбирали верхний слой и анализировали методом ПЭМ.

(В) – расслоение свежеприготовленного ССНГ в бутилацетате (145°C , 6 часов) в сольвотермических условиях. После охлаждения образца до комнатной температуры отбирали верхний слой и анализировали методом ПЭМ.

(С) – расслоение ТРГ в *трет*-бутаноле при содействии ультразвука (22 кГц, 470 и 630 Вт, 1 час). Образцы дисперсий отстаивали в течение 24 часов, отбирали верхний слой и анализировали методом ПЭМ.

Обсуждение результатов. Ранее нами было установлено, что модификация нитрата графита

органическими соединениями приводит как к его дополнительной стабилизации, так и к значительному увеличению способности к термическому расширению [5, 8]. Причем для тройных соединений соинтеркалирования в большей степени наблюдается структурная реорганизация графитовой матрицы [5]. Тройное соединение соинтеркалирования нитрата графита с этил- и бутилацетатом получали в два этапа последовательной обработкой графита дымящей азотной кислотой и органическими соинтеркалантами (рис. 1). СЭМ-микрофотографии образцов иллюстрируют слоистую структуру, как исходного графита, так и полученного ССНГ. При небольшом увеличении внешний вид частиц ССНГ (рис. 2, б) мало отличается от исходного графита (рис. 2, а). Однако при большем увеличении (дополнительные фрагменты на рис. 2, а, б) заметным становится изменение структуры частиц при образовании ССНГ – частичное расслаивание (деламинация).

Структурные характеристики исходного графита и ССНГ определяли методом РФА. Рисунок 3 демонстрирует дифрактограммы исходного графита и ССНГ в координатах $I^{0,5} - 2\theta$. Свежеприготовленный образец ССНГ (рис. 3, б) представляет собой смесь соединений II-й (β -форма) и IV-й (α -форма) стадий интеркалирования (в соотношении 1 : 8). Использование этил- и бутилацетата в качестве соинтеркаланта в большей степени ведет к структурной реорганизации графитовой матрицы по сравнению с нитратом графита [5]. Расстояние между соседними углеродными слоями в ССНГ (высота заполненного интеркалантами слоя d_i составляет $6,5 - 7,9 \text{ \AA}$ (табл. 1) в зависимости от стадии интеркалирования и срока хранения образца ССНГ) значительно увеличено по сравнению с графитом ($3,34 \text{ \AA}$).

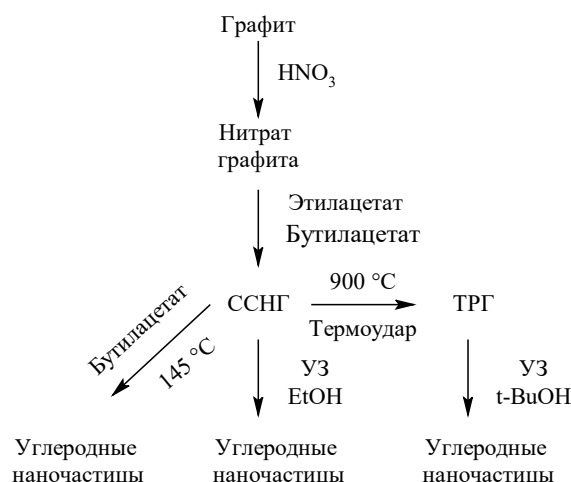


Рис. 1. Обобщенная схема получения ССНГ, ТРГ и дисперсий углеродных наночастиц расслоением ССНГ и ТРГ в различных условиях

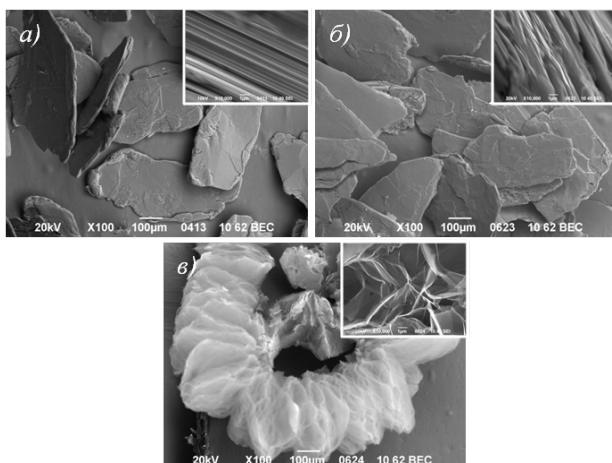


Рис. 2. Типичные СЭМ-микрофотографии исходного графита (а), ССНГ (б) и ТРГ (в)

При хранении образца ССНГ на воздухе (комнатная температура) наблюдается его дальнейшая структурная реорганизация, о чем свидетельствует изменение характера и основных параметров дифрактограммы (рис. 3, $z - ж$). По данным РФА, происходит уменьшение величины периода идентичности I_C и высоты заполненного интеркалантами слоя d_i (табл. 1) для соединения IV-й стадии, что указывает на постепенный переход из α в β -форму (по аналогии с нитратом графита), сопровождающийся изменением ориентации частиц интеркалантов относительно углеродных слоев,

уменьшением числа частиц в сольватной оболочке нитрат-аниона за счет деинтеркалирования. Для соединения II-й стадии наблюдается увеличение параметров I_C и d_i , что, по-видимому, обусловлено поглощением влаги из воздуха и увеличением числа частиц в межслоевом пространстве. Косвенным подтверждением уменьшения мольной доли интеркалантов при хранении образца ССНГ в указанных условиях является наблюдаемое незначительное снижение коэффициента термического расширения K_V (табл. 1).

Таблица 1

Изменение структурных параметров и коэффициента термического расширения ССНГ при хранении на воздухе

Параметр	1 час	20 суток	40 суток	155 суток
$K_V, \text{см}^3/\text{г}$	315	300	300	300
II стадия				
$2\theta, ^\circ$	26,96	26,80	26,68	26,68
$I_C, \text{\AA}$	9,921	9,979	10,023	10,023
$d_i, \text{\AA}$	6,561	6,619	6,663	6,663
IV стадия				
$2\theta, ^\circ$	24,72	25,28	25,40	25,68
$I_C, \text{\AA}$	18,007	17,614	17,532	17,344
$d_i, \text{\AA}$	7,927	7,534	7,453	7,264

* значение определено через сутки после синтеза образца

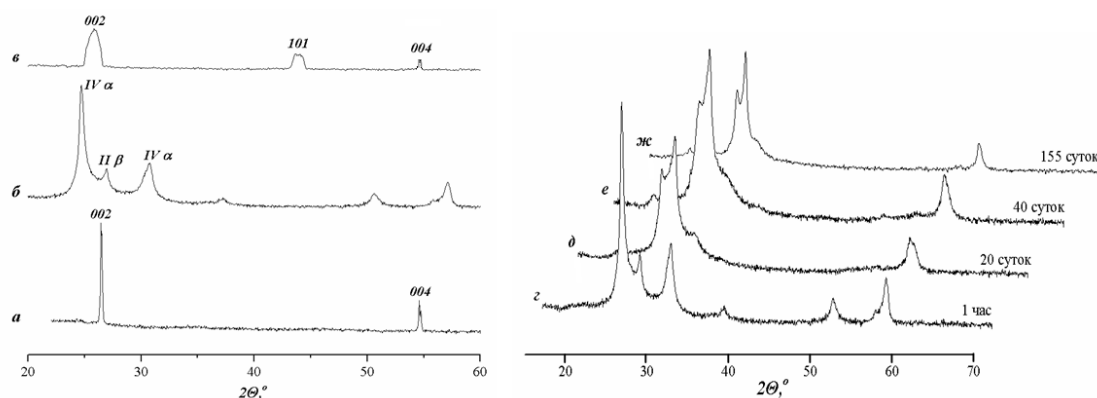


Рис. 3. Дифрактограммы исходного графита (а), ССНГ (б) и ТРГ (в) на его основе, а также дифрактограммы образца ССНГ при его хранении на воздухе ($z - ж$)

Образование ТРГ в режиме термоудара (900 °С) сопровождается дальнейшим изменением микроструктуры графита и образованием ячеистой структуры (рис. 2, в). Размер видимых пор в структуре ТРГ составляет 1 – 20 мкм. По данным РФА, фазовый состав ТРГ представлен графитом. На дифрактограмме ТРГ (рис. 3, в) отсутствуют характерные для предшествующего ССНГ рефлексы. Уширение и смещение в область меньших углов рефлекса 002 ($\Delta 2\theta = 0,68^\circ$), появление достаточно интенсивного рефлекса 101 указывает на увеличение межплоскостного расстояния между соседними углеродными слоями

и частичную разупорядоченность графитовых слоев, формирующих стенки ячеистой структуры ТРГ. Таким образом, полученный ТРГ демонстрирует предорганизованную структуру для генерирования малослойных графеновых частиц.

Расслоение нитрата графита [9] и его соединений соинтеркалирования с органическими веществами [4, 5] в спиртах при содействии ультразвука различной мощности позволяет получить углеродные наночастицы различной морфологии – мало- и мультислойные графены, наноскроллы, мелкие графеноподобные частицы. В данной работе в качестве предшественников

углеродных наночастиц использовали как свежеприготовленные образцы ССНГ, так и терморасширенный графит. Обобщенная схема получения дисперсий наночастиц приведена на рис. 1. Путем расслоения исследуемого ССНГ в этаноле при содействии ультразвука (1 ч, 22 кГц, 470 Вт) получена дисперсия углеродных наночастиц, содержащая по данным ПЭМ (рис. 4, а) малослойные графены (плоскостные размеры частиц достигают 1–2 мкм) и наноскроллы (диаметр 15–50 нм, длина 200–500 мкм).

Преимущественно малослойные графены образуются при расслоении ТРГ в *трет*-бутаноле при содействии ультразвука (1 ч, 22 кГц, 470 Вт). На рис. 4, б, в приведены типичные микрофотографии графеноподобных частиц, для которых на картине электронной дифракции выбранной области присутствуют несколько наборов четких гексагональных рефлексов, повернутых друг относительно друга. Интенсивности рефлексов внутреннего (I_1) и внешнего круга (I_2) микроэлектроннограмм совпадают, что характерно для малослойных графенов. Таким образом, наблюдаемые частицы представляют собой малослойные графены, плоскости которых

разориентированы друг относительно друга на угол от 6 до 28°. Увеличение мощности УЗ-обработки от 470 до 630 Вт ведет к формированию частиц разнообразной морфологии. Чаще всего, это пакеты кристаллических разориентированных пластин, склонных к скроллообразованию (рис. 4, г). На типичной картине электронной дифракции выбранной области присутствует множество мелких рефлексов от напряженных кристаллических частиц, которые сливаются и выглядят как прерывистая линия. Следовательно, в указанных условиях эффективного расслоения графитовой матрицы не происходит, а фрагментирование и деструкция протекают по всему объему нерасслоившихся нанопластин.

Расслоение ССНГ в среде одного из интеркалантов (бутилацетат) в сольвотермических условиях (145 °С) без дополнительной ультразвуковой обработки приводит к терморасширению ССНГ, которое сопровождается расслоением ССНГ и образованием дисперсии наночастиц, большинство которых представляют собой наноскроллы двух типов (рис. 4, д, е). Диаметр скроллов составляет 30–200 нм и 20–40 нм, а длина – 400–700 нм и 40–200 нм.

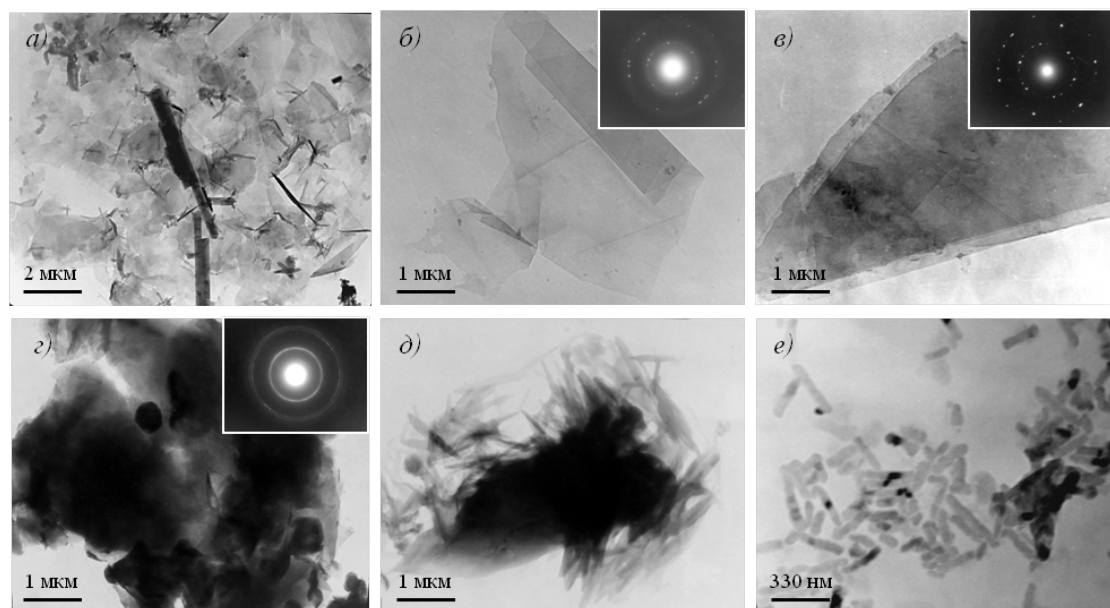


Рис. 4. Типичные ПЭМ-микрофотографии углеродных наночастиц, полученных расслоением ССНГ в этаноле (а) и бутилацетате (д, е), а также расслоением ТРГ в *трет*-бутаноле (б–г)

Выводы. Таким образом, получено тройное соединение соинтеркалирования нитрата графита с этил- и бутилацетатом, характеризующееся большим по сравнению с нитратом графита значением высоты заполненного интеркалантом слоя. Слоистая структура ССНГ и ячеистая структура ТРГ являются предорганизованными для образования малослойных графеновых частиц. Расслоение ССНГ в этаноле под действием ультразвука приводит к образованию углеродных наночастиц различной морфологии – малослойных

графенов и наноскроллов. Использование ТРГ в качестве предшественника ведет к генерированию малослойных графенов в *трет*-бутаноле. В результате расслоения ССНГ в сольвотермических условиях в среде соинтеркаланта получена дисперсия, содержащая преимущественно наноскроллы.

Л и т е р а т у р а

1. Xu Y, Cao H, Xue Y [et al.] Liquid-Phase Exfoliation of Graphene: An Overview on Exfoliation Media,

Techniques, and Challenges // Nanomaterials (Basel). 2018. Vol. 8, Iss. 11. P. 942.

2. Zhi-Lin Cheng, Ying-Chao Kong, Lei Fan [et al.] Ultrasound-assisted Li⁺/Na⁺ co-intercalated exfoliation of graphite into few-layer graphene // Ultrasonics Sonochemistry. 2020. Vol. 66, Iss. 9. - P. 105108

3. Author links open overlay panelXiaoguang Gu, Yue Zhao, Kai Sun [et al.] Method of ultrasound-assisted liquid-phase exfoliation to prepare graphene Ultrasonics Sonochemistry. 2019. Vol. 58, Iss. 11. - P. 104630

4. Raksha E.V., Davydova A.A., Berestneva Yu.V. [et al.] Morphology and Structure of Carbon Nanoparticles Generated from Graphite Nitrate Co-intercalation Compound. Effect of Sonication Regime // Advanced Materials, Springer Proceedings in Materials / Ed.: I.A. Parinov [et al.]. 2020. Vol. 6, Chapter 4. P. 41 – 47.

5. Давыдова А.А., Ракша Е.В., Глазунова В.А. [и др.] Синтез и свойства соединений соинтеркалирования нитрата графита со сложными эфирами карбоновых кислот // Журн. неорг. химии. 2021. Т. 66, № 3. С. 336 – 343

6. Berestneva Yu.V., Raksha E.V., Voitash A.A. [et al.] Thermally expanded graphite from graphite nitrate cointercalated with ethyl formate and acetic acid: morphology and physicochemical properties // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. Vol. 1658. P. 012004.

7. Давыдова А.А., Ракша Е.В., Осолкова О.Н. [и др.] Малослойные графеновые частицы на основе терморасширенного соинтеркалата нитрата графита с уксусной и муравьиной кислотами // Межвузовский сб. научн. тр. «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов». 2020. Вып. 12. С. 580 – 590.

8. Savoskin M.V., Yaroshenko A.P., Whyman G.E., Mysyk R.D. New graphite nitrate derived intercalation compounds of higher thermal stability // J. Phys. Chem. Sol. 2006. Vol. 67. P. 1127 – 1131.

9. Ракша Е.В., Давыдова А.А., Осолкова О.Н. [и др.] Углеродные наночастицы на основе соединения соинтеркалирования нитрата графита с муравьиной кислотой // Вестник ДонНУ. Сер. А: Естественные науки. 2021. № 1 – С. 148-153.

References

1. Xu Y, Cao H, Xue Y [et al.] Liquid-Phase Exfoliation of Graphene: An Overview on Exfoliation Media, Techniques, and Challenges // Nanomaterials (Basel). 2018. Vol. 8, Iss. 11. P. 942.

2. Zhi-Lin Cheng, Ying-Chao Kong, Lei Fan [et al.] Ultrasound-assisted Li⁺/Na⁺ co-intercalated exfoliation of graphite into few-layer graphene // Ultrasonics Sonochemistry. 2020. Vol. 66, Iss. 9. - P. 105108

3. Author links open overlay panelXiaoguang Gu, Yue Zhao, Kai Sun [et al.] Method of ultrasound-assisted liquid-phase exfoliation to prepare graphene Ultrasonics Sonochemistry. 2019. Vol. 58, Iss. 11. - P. 104630

4. Raksha E.V., Davydova A.A., Berestneva Yu.V. [et al.] Morphology and Structure of Carbon Nanoparticles Generated from Graphite Nitrate Co-intercalation Compound. Effect of Sonication Regime // Advanced Materials, Springer Proceedings in Materials / Ed.: I.A. Parinov [et al.]. 2020. Vol. 6, Chapter 4. P. 41 – 47.

5. Davydova A.A., Raksha E.V., Glazunova V.A. [et al.] Synthesis and properties of graphite nitrate cointercalation compounds with carboxylic acid esters // Russ. J. Inorg. Chem. 2021. Vol. 66, No. 3. P. 324 – 331.

6. Berestneva Yu.V., Raksha E.V., Voitash A.A. [et al.] Thermally expanded graphite from graphite nitrate cointercalated with ethyl formate and acetic acid: morphology and physicochemical properties // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. Vol. 1658. P. 012004.

7. Davydova A.A., Raksha E.V., Oskolkova O.N. [et al.] Few-layer graphene particles based on thermally expanded cointercalate of graphite nitrate with acetic and formic acids // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2020. Iss. 12. P. 580 – 590.

8. Savoskin M.V., Yaroshenko A.P., Whyman G.E., Mysyk R.D. New graphite nitrate derived intercalation compounds of higher thermal stability // J. Phys. Chem. Sol. 2006. Vol. 67. P. 1127 – 1131.

9. Raksha E.V., Davydova A.A., Oskolkova O.N. [et al.] Carbon nanoparticles on the base of graphite nitrate cointercalation compound with formic acid // Bulletin of Donetsk National University. Series A. Natural Sciences 2021. No 1 – P. 148-153.

Oskolkova O.N., Davydova A.A., Raksha E.V., Gnatovskaya V.V., Sukhov P.V., Berestneva Yu.V., Glazunova V.A., Burhovetskiy V.V., Volkova G.K., Savoskin M.V. COINTERCALATE OF GRAPHITE NITRATE WITH ETHYL- AND BUTYL ACETATE AS A PRECURSOR OF CARBON NANOPARTICLES

As a result of the modification of graphite nitrate with ethyl and butyl acetates, a cointercalate (GNCC) was obtained, which is a mixture of compounds of the Ist and IVth stages of intercalation. The structural reorganization of the graphite matrix during the formation of the cointercalate and thermally expanded graphite (TEG) based on it was investigated by X-ray phase analysis and scanning electron microscopy. It has been established that the use of ethyl and butyl acetates as cointercalants leads to an increase in the height of the layer filled with intercalants in comparison with graphite nitrate for the compound of the IV stage, as well as to an increase in the coefficient of thermal expansion. It was shown that liquid-phase exfoliation of the obtained cointercalate and thermally expanded graphite based on it leads to the dispersions of carbon nanoparticles of various morphologies. The dispersion, containing mainly few-layer graphenes, was obtained by the exfoliation of TEG in tert-butanol with the assistance of sonication, the formation of nanoscrolls predominates during the exfoliation of GNCC under solvothermal conditions in a cointercalant (butyl acetate) medium.

Keywords: few-layer graphenes, nanoscrolls, graphite nitrate cointercalation compounds, thermally expanded graphite, transmission electron microscopy

Осолкова Оксана Николаевна младший научный сотрудник ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»

E-mail: gares@list.ru

Oskolkova Oksana Nikolaevna junior research fellow State Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry»

Давыдова Алина Александровна младший научный сотрудник ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»

E-mail: ww-52007@yandex.ru

Davydova Alina Alexandrovna junior research fellow
State Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical
Organic and Coal Chemistry»

Ракша Елена Владимировна кандидат химических
наук, старший научный сотрудник ГУ «Институт физико-
органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко»
E-mail: elenaraksha411@gmail.com

Raksha Elena Vladimirovna candidate of chemical
sciences, senior research fellow State Institution
«L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal
Chemistry»

Гнатовская Виктория Валерьевна ведущий
инженер ГУ «Институт физико-органической химии и
углехимии им. Л.М. Литвиненко»
E-mail: viktoriasuhareva777@gmail.com

Gnatovskaya Viktoriia Valer'evna lead engineer
State Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical
Organic and Coal Chemistry»

Сухов Петр Владимирович младший научный
сотрудник ГУ «Институт физико-органической химии и
углехимии им. Л.М. Литвиненко»
E-mail: petr.suhov@mail.ru

Sukhov Petr Vladimirovich junior research fellow
State Institution «L.M. Litvinenko Institute of Physical
Organic and Coal Chemistry»

Берестнева Юлия Васильевна кандидат
химических наук, старший научный сотрудник
ФГБНУ «Федеральный научный центр агроэкологии,
комплексных мелиораций и защитного лесоразведения
Российской академии наук»
E-mail: berestnevayuv@mail.ru

Berestneva Yuliya Vasilievna candidate of chemical
sciences, senior research fellow Federal State Budget
Scientific Institution "Federal Scientific Centre of
Agroecology, Complex Melioration and Protective
Afforestation of the Russian Academy of Sciences"
E-mail: berestnevayuv@mail.ru

Глазунова Валентина Александровна научный
сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт
им. А.А. Галкина»
E-mail: glasunova-2007@rambler.ru

Glazunova Valentina Alexandrovna research fellow
State institution «Donetsk institute for physics and engineering
named after A.A. Galkin»

Бурховецкий Валерий Викторович научный
сотрудник ГУ «Донецкий физико-технический институт
им. А.А. Галкина»
E-mail: val-bur@ukr.net

Burkhovetskij Valerij Viktorovich research fellow
State institution «Donetsk institute for physics and engineering
named after A.A. Galkin»

Волкова Галина Кузьминична научный сотрудник
ГУ «Донецкий физико-технический институт
им. А.А. Галкина»
E-mail: glasunova-2007@rambler.ru

Volkova Galina Kuzminichna research fellow
State institution «Donetsk institute for physics and engineering
named after A.A. Galkin»

Савоськин Михаил Витальевич кандидат
химических наук, старший научный сотрудник, директор
ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии
им. Л.М. Литвиненко»
E-mail: m.savoskin@yandex.ru

Savoskin Michael Vitalievich candidate of chemical
sciences, senior research fellow, director State Institution
«L.M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal
Chemistry»

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич,
д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский
государственный университет имени Владимира
Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 537.311.3; 539.231

ГРАФИТОПОДОБНЫЕ ПЛЕНКИ С ВЫСОКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ ПРОВОДИМОСТИ

Изотов А.И., Кильман Г.В., Сироткин В.В., Шалаев Р.В.

GRAPHITE-LIKE FILMS WITH HIGH ANISOTROPY CONDUCTIVITY

Izotov A.I., Kilman G.V., Sirotkin V.V., Shalaev R.V.

Методом магнетронного распыления графитовой мишени получены две графитоподобные пленки на различных подложках. Образцы выращены при одинаковых параметрах – в атмосфере аргона при токе 40 мА и температуре 360°С, время роста составляло 40 мин. Для измерения поперечной проводимости использована пленка на подложке из покровного стекла, для получения данных о продольной проводимости был взят образец на подложке из инструментальной хромистой стали. Измерения проводились двухзондовым методом и показали анизотропию проводимости в продольном и поперечном направлениях.

Ключевые слова: анизотропия проводимости, графитоподобные пленки

Введение. В настоящее время можно говорить о том, что стремительно развивающаяся электроника вступила в непреодолимое противоречие со своей традиционной кремниевой платформой. Здесь и проблема отвода тепла от неорганических конструкций при сверхплотном расположении элементов атомных размеров, и проблема уменьшения энергопотребления и увеличения быстродействия, и масса других вопросов, которые возможно решить только заменой кремния новым материалом, отвечающим требованиям сегодняшнего дня. Одним из наиболее перспективных материалов, способных прийти на смену кремнию, считается углерод. Его электрические свойства, которые могут варьировать в очень широком диапазоне, изучаются уже давно, но настоящий всплеск интереса к углероду произошел после создания графена. Это монослой кристаллического графита, атомы которого составляют правильную гексагональную ячейку; данный материал отличается высокой подвижностью носителей заряда (при нормальных условиях в 10 раз больше, чем в кремнии) [1], амбиполярным полевым эффектом [2], баллистическим транспортом при нормальных условиях [3] и многими другими интересными свойствами. Уже сейчас существуют прототипы интегральных схем на основе графена, работающих на частоте до 10 ГГц при комнатной температуре и имеющих площадь менее 1 мм². Кроме того, не стоит забывать, что, помимо графена, углерод может формировать также идеальные одномерные структуры и гибридные объекты. В

комплексе все вышеперечисленное дает возможность в будущем реализовать идею полностью углеродной высокоскоростной наноэлектроники [4].

Таким образом, поиск и создание новых материалов на основе углерода, способных обеспечить рост производительности интегральных микросхем, представляется на сегодняшний день весьма актуальной задачей. Целью настоящей работы являлось исследование электрических и оптических свойств графитоподобных пленок с высокой анизотропией проводимости. Необычные электрические свойства делают подобные материалы весьма перспективными для микро- и наноэлектроники.

Методика эксперимента. Пленки для исследований были получены методом магнетронного распыления графита. Образцы выращивались на различных подложках, но при одинаковых параметрах – в атмосфере аргона при токе 40 мА и температуре 360°С. Время роста составляло 40 мин.

В качестве подложек использовались покровное стекло и инструментальная хромистая сталь. Пленка, полученная на подложке из покровного стекла, дала возможность получить данные о поперечной проводимости. Для изучения продольной проводимости использовался аналогичный образец, выращенный на металлической подложке; измерения проводились в структуре хромистая сталь – пленка – измерительный контакт. В обоих случаях сопротивление измерялось двухзондовым методом.

Образец, полученный на покровном стекле, был дополнительно исследован с помощью спектрофотометра Shimadzu UV-2450, в результате чего нами были получены спектры пропускания материала.

Основные результаты и их обсуждение. На рис. 1 представлен спектр пропускания образца, полученного на подложке из покровного стекла. Из рисунка видно, что поглощение достигает наиболее высоких значений в коротковолновом диапазоне. В видимой области пленка также малопрозрачна, но прозрачность плавно растет с увеличением длины волны.

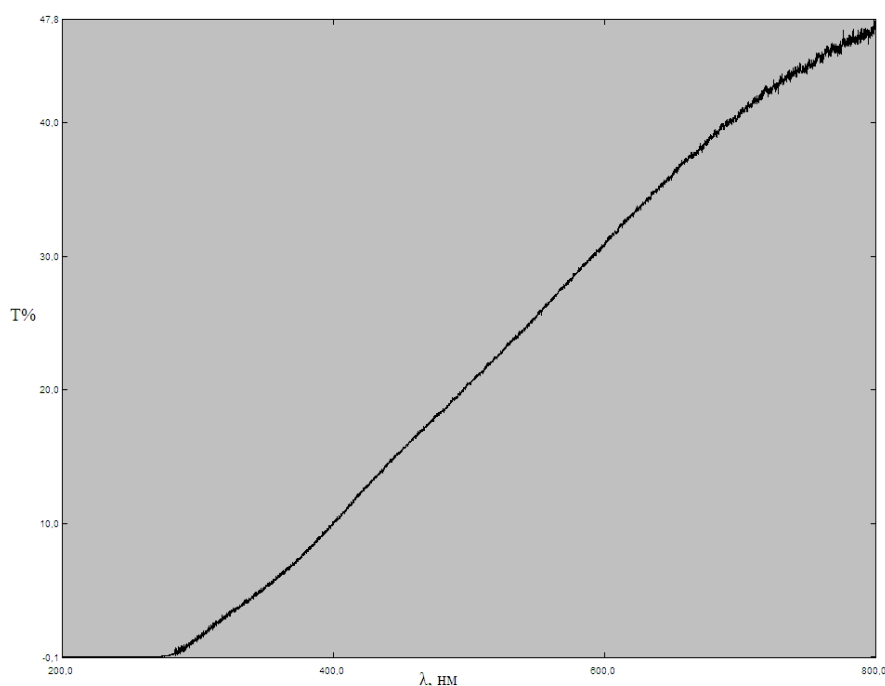


Рис. 1. Спектр пропускания образца

Измерение электрического сопротивления пленок в двух различных направлениях показало, что полученные образцы обладают значительной анизотропией проводимости. Согласно приближительному расчету, произведенному на основе экспериментальных данных, удельное сопротивление материала в поперечном направлении составляет порядка 10^5 Ом·мм. Удельное сопротивление в продольном направлении (инструментальная хромистая сталь – пленка – измерительный контакт) оказалось заметно меньше – порядка 10^2 Ом·мм. Таким образом, анизотропия проводимости полученных пленок составляет 10^3 Ом·мм.

При измерении продольной проводимости нами также была получена вольт-амперная характеристика образца, которая приведена на рис. 2, а при измерениях в поперечном направлении – температурная зависимость сопротивления, приведенная на рис. 3.

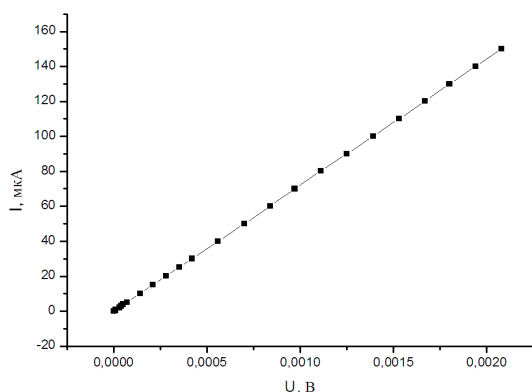


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика, полученная при продольных измерениях проводимости образца

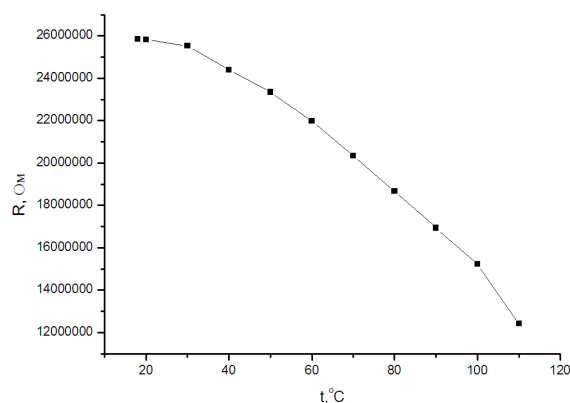


Рис. 3. Температурная зависимость поперечного сопротивления образца

Выводы. Проведенные нами исследования показали, что полученные графитоподобные пленки обладают существенной анизотропией проводимости, составляющей 10^3 Ом·мм. Данное свойство материала может быть интересно в прикладных областях – таких, как микро- и нанoeлектроника. Продолжив работу в данном направлении, мы планируем выяснить, какими структурными особенностями полученных пленок обусловлен подобный эффект. Не исключено, что это даст возможность получать пленки с прогнозируемыми электрическими свойствами, необходимыми для конкретных прикладных задач.

Л и т е р а т у р а

1. F. Schwier, Nature Nanotech. 5, 487 (2010).

2. Gong Gu, Shu Nie, R.M. Feenstra et al. Appl. Phys. Lett. 90, 253507 (2007).

3. A.K. Geim. Science. 324, 1530 (2009).

4. С.П. Губин, Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии. 3, № 1, 47 (2011).

References

1. F. Schwierz, Nature Nanotech. 5, 487 (2010).

2. Gong Gu, Shu Nie, R.M. Feenstra et al. Appl. Phys. Lett. 90, 253507 (2007).

3. A.K. Geim. Science. 324, 1530 (2009).

4. S.P. Gubin, Radioelektronika. Nanosistemy. Informacionnye tehnologii. 3, № 1, 47 (2011).

Izotov A.I., Kilman G.V., Sirotkin V.V., Shalaev.
Graphite like films with high anisotropy conductivity.

The method of magnetron sputtering of a graphite target was used to obtain two graphite-like films on different substrates. The samples were grown under the same parameters - in an argon atmosphere at a current of 40 mA and a temperature of 360 °C; the growth time was 40 min. To measure the transverse conductivity, a film on a cover glass substrate was used; to obtain data on the longitudinal conductivity, a sample was taken on a chromium tool steel substrate. The measurements were carried out by a two-probe method and showed significant anisotropy of conductivity in the longitudinal and transverse directions.

Key words: anisotropy of conductivity, graphite-like films

Изотов Анатолий Иванович, ведущий инженер, Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им.А.А.Галкина».

E-mail: izotov.anatoli@gmail.com

Izotov Anatoliy, Lead Engineer, Public Institution “Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin”

Сироткин Владимир Владимирович, ведущий инженер, Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им.А.А.Галкина».

E-mail: vladir.52@mail.ru

Vladimir Syrotkin, Lead Engineer, Public Institution “Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin”

Кильман Галина Владимировна, ведущий инженер, Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им.А.А.Галкина».

E-mail: galyna.k.2015@gmail.com

Kilman Galyna, Lead Engineer Public Institution “Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin”.

Шалаев Ростислав Валериевич, к. ф.-м. н., с.н.с., Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им.А.А.Галкина».

E-mail: sharos@donfti.ru

Shalaev Rostyslav, PhD, senior research, Public Institution “Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin”.

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 года

УДК 537.9

ПРИМЕНЕНИЕ НИОБАТНОЙ СЕГНЕТОПЬЕЗОКЕРАМИКИ В МЕДИЦИНСКОЙ ПРАКТИКЕ

Дудкина С.И., Шилкина Л.А., Андриюшин К.П., Андриюшина И.Н.,
Вербенко И.А., Резниченко Л.А.

APPLICATION OF NIOBATE FERROPIEZOCERAMICS IN MEDICAL PRACTICE

Dudkina S.I., Shilkina L.A., Andryushin K.P., Andryushina I.N.,
Verbenko I.A., Reznichenko L.A.

Ниобатные сегнетопьезокерамики, включающие ниобаты натрия, лития и модификаторы, изготовлены двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием методом горячего прессования. Показано, что полученные материалы характеризуются высокой чувствительностью к механическому напряжению, что обеспечивается высокими значениями пьезочувствительности, $|g_{31}|$, равными (13.7–19.2) мВ·м/Н.

Разработанные ниобатные сегнетопьезоматериалы опробованы в датчиках типа АДП для эхоахтогемофонов. Испытания показали, что по полученным значениям электроакустических параметров ниобатная сегнетопьезокерамика не уступает пьезокерамике типа ЦТС и может быть рекомендована для применения в медицинской практике.

Ключевые слова: твердые растворы, ниобат натрия, ниобат лития, сегнетопьезокерамика, пьезочувствительность, медицинские датчики

Введение. В медицинской диагностической аппаратуре повышение пьезочувствительности для идентификации мелких объектов: в офтальмологии – ультразвуковое, УЗ, измерение толщины роговицы,

анализ мелких структур глаза; в остеометрии – исследование состояния костей пациентов: трещины, переломы, вымывание кальция; в кардиологии – контроль состояния стенок сосудов и клапанов сердца. В качестве основного материала УЗ преобразователей медицинских приборов в настоящий момент используется пьезокерамика на основе бинарной системы ЦТС ($\text{Pb}(\text{Ti,Zr})\text{O}_3$) – ЦТС-19, ПКР-1, ПКР-37 [1], характеристики которых приведены в табл. 1. Такая керамика используется в отдельных акустических датчиках (АДП-2, АДП-4, АДП-8), предназначенных для применения в составе эхоахтогемофона – доплеровского индикатора скорости кровотока, работающего в режиме непрерывного излучения.

Необходимо отметить, однако, что при определенных режимах работы датчиков медицинской аппаратуры свойства применяемой в них пьезокерамики ЦТС не являются оптимальными, что требует поиска альтернативных материалов, к тому же без токсичного свинца.

Таблица 1

Электрофизические характеристики пьезокерамик на основе ЦТС

Материал	T_K, K	$\varepsilon_{33}^T/\varepsilon_0$	$\text{tg}\delta, \%$ $E=50 \text{ кВ/см}$	K_p	K_{15}	$ d_{31} $, пКл/Н	d_{33} , пКл/Н	$ g_{31} $, мВ·м/Н	g_{33} , мВ·м/Н	Q_M
ПКР-1	628	650	2.0	0.62	0.70	95	220	16.5	38.0	90
ПКР-37	618	1400	1.6	0.68	-	170	375	13.7	30.3	105
ЦТС-19	563	1600	2.5	0.60	-	150	340	10.6	24.0	50
PZT-5A	638	1700	2.0	0.60	0.68	171	374	11.4	24.8	75

К таким относятся сегнетопьезоматериалы на основе ниобатов щелочных металлов (НЦМ) [2-5]. Последнее отвечает требованиям современной законодательной базы, запрещающей использование свинца в электронной и электротехнической отраслях реального сектора мировых экономик [6, 7].

В связи с этим, целью работы явилась разработка экологически чистых бессвинцовых сегнетопьезокерамических материалов с повышенной пьезочувствительностью для медицинских нужд.

Объекты, методы получения и исследования образцов. Объектами исследования явились твердые растворы на основе бинарной системы, включающей ниобаты натрия и лития, полученные двухстадийным твердофазным синтезом при температурах 800 °С и 850 °С в течение 5 часов каждый, с последующим спеканием методом горячего прессования при (1000–1030) °С (в зависимости от состава), давлении 19.6 МПа, изотермической выдержке 40 мин. Спеченные керамические заготовки подвергали механической обработке (резке по плоскости, шлифовке по плоским поверхностям и торцам) с целью получения

измерительных образцов диаметром 10 мм и высотой 1 мм. Electroды наносили двукратным вжиганием серебросодержащей пасты при температуре 800 °C в течение 0.5 час. Поляризацию образцов проводили в полиэтиленсилоксановой жидкости при температуре 140 °C в течение 40 мин в поле напряженностью 60 кВ/см.

Рентгенографические исследования проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра ДРОН-3 (Сока – излучение). Расчёт структурных параметров проводили по стандартной методике [8]. Рентгеновскую плотность ($\rho_{\text{рентг.}}$) определяли по формуле: $\rho_{\text{рентг.}} = 1.66 \cdot M/V$, где M вес формульной единицы в граммах, V – объём перовскитной ячейки в Å. Погрешности измерений структурных параметров имеют следующие величины: линейных $\Delta a = \Delta b = \Delta c = \pm(0.002-0.004)$ Å; угловых $\Delta \alpha = 3'$; объёма $\Delta V = \pm 0.05$ Å³ ($\Delta V/V \cdot 100\% = 0.07\%$).

Определение экспериментальной ($\rho_{\text{эксп.}}$) плотности образцов осуществляли методом гидростатического взвешивания, где в качестве жидкой среды использовали октан. Относительную

плотность ($\rho_{\text{отн.}}$) рассчитывали по формуле $(\rho_{\text{эксп.}}/\rho_{\text{рентг.}}) \cdot 100\%$.

Электрофизические параметры – относительную диэлектрическую проницаемость поляризованных образцов, $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$, тангенс угла диэлектрических потерь, $\text{tg}\delta$, коэффициент электромеханической связи радиальной моды колебаний, K_p , пьезомодуль, $|d_{31}|$, пьезочувствительность, $|g_{31}|$, механическую добротность, Q_m , скорость звука, V_1^E ; – определяли в соответствии с [9] на основе измерений характеристик материалов с использованием прецизионного LCR-метра Agilent 4980A и прецизионного анализатора импеданса Wayne Kett 6500B.

Экспериментальные результаты и обсуждение. Нами разработаны 3 группы ниобатных сегнетопьезокерамик, отличающихся высокой чувствительностью к механическому напряжению, что обеспечивается высокими значениями пьезочувствительности, $|g_{31}|$, равными (13.7–19.2) мВ·м/Н. В таблицах 2-4 приведены их электрофизические характеристики.

Таблица 2

Электрофизические характеристики лучших составов разработанных материалов на базе модифицированных твердых растворов системы (Na,Li)NbO₃

№ п/п	T_k^*, K	$\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$	$\text{tg}\delta, \%$ $E=50$ кВ/см	K_p	$ d_{31} $, пКл/Н	$ g_{31} $, мВ·м/Н	Q_m	V_1^E , км/с
1	630	105	2.16	0.293	15	15.9	223	5.397
2	630	100	2.09	0.327	17	19.2	271	5.300
3	630	105	2.27	0.294	15	15.9	253	5.456
4	630	104	2.55	0.304	15	16.5	239	5.367
5	635	108	1.93	0.281	14	15.1	512	5.424
7	610	104	2.40	0.235	12	12.5	429	5.672
8	620	105	2.11	0.238	12	12.7	316	5.776

* T_k – температура Кюри

С точки зрения высоких значений $|g_{31}|$ и низких Q_m представляют интерес и некоторые составы системы (Na,Li)NbO₃ с добавлением стронция и кальция (табл. 3, 4).

Таблица 3

Параметры некоторых составов системы (Na,Li)NbO₃ с добавлением стронция

№ состава	T_k, K	$\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$	K_p	$ g_{31} $, мВ·м/Н	Q_m	V_1^E , км/с
1	610	107	0.215	13.7	40	4.9
2	560	110	0.296	15.8	295	5.4

Таблица 4.

Параметры некоторых составов системы (Na,Li)NbO₃ с добавлением кальция

№ состава	$\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$	K_p	$ g_{31} $, мВ·м/Н	Q_m	V_1^E , км/с
1	95	0.290	15.7	30	5.65
2	75	0.213	17.1	45	5.54
3	101	0.275	16.8	185	5.87

Разработанная пьезокерамика была опробована в специализированных датчиках для эхотахогеофонов. Испытания показали, что по полученным значениям электроакустических параметров ниобатная сегнетокерамика не уступает

пьезокерамикам типа ЦТС и может быть рекомендована для применения в медицинской практике.

Выводы. Двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием методом

горячего прессования изготовлены твердые растворы на основе бинарной системы, включающей ниобаты натрия и лития. Показано, что некоторые группы ниобатных сегнетопъезокерамик отличаются высокой чувствительностью к механическому напряжению $|g_{31}|$.

Разработанные ниобатные сегнетопъезоматериалы с высокими значениями пьезочувствительности $|g_{31}|$, равными (13.7–19.2) мВ·м/Н, опробованы в датчиках типа АДП для эхотахогемофонов и могут быть рекомендованы для применения в медицинском оборудовании.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ).

Л и т е р а т у р а

1. Данцигер А.Я., Разумовская О.Н., Резниченко Л.А., Сахненко В.П., Клевцов А.Н., Дудкина С.И., Шилкина Л.А., Дергунова Н.В., Рыбнянец А.Н. Многокомпонентные системы сегнетоэлектрических сложных оксидов: физика, кристаллохимия, технология. Аспекты дизайна пьезоэлектрических материалов. – Ростов-на-Дону: «Новая книга», 2002. Т. 2. – 365 с.
2. Go S.H., Kim D.S., Han S.H., Kang H.-W., Lee H.-G., Cheon C. Figures of merit of (K, Na, Li)(Nb, Ta)O₃ ceramics with various Li contents for a piezoelectric energy harvester // J Korean Ceram. Soc. 2017. V. 54. P. 530-534.
3. Zhao Y.J., Ge Y.Y., Yuan X.Y., Zhao Y.Z., Zhou H.P., Li J.B., Jin H.B. Effect of phase structure changes on the lead-free Er³⁺-doped (K_{0.52}Na_{0.48})_{1-x}Li_xNbO₃ piezoelectric ceramics // J. Alloys Compd. 2016. V. 680. P. 467-472.
4. Zhao Y.J., Wang L.H., Huang R.X., Liu R.Z., Zhou H.P. The correlation between the microstructure and macroscopic properties of (K, Na, Li)(Nb, Ta)O₃ ceramic via rare earth oxide doping // Ceramics International. 2013. V. 40. P. 2505-2510.
5. Zhao Y.J., Zhao Y.Z., Huang R.X., Liu R.Z., Zhou H.P. Microstructure and piezoelectric properties of CuO-doped 0.95(K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃–0.05Li(Nb_{0.5}Sb_{0.5})O₃ lead-free ceramics // J. Eur. Ceram. Soc. 2011. V. 31. P. 1939-1944.
6. Directive 2002/95/EU of the European Parliament and of the Council of 27 January 2003 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electronic equipment // Official Journal of the European Union. L. 37. 2003. V. 46. P. 19-23.
7. Directive 2011/65/EU of the European Parliament and of the Council of 8 June 2011 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment // Official Journal of the European Union. L. 174. 2011. V. 54. P. 88-110.
8. Фесенко Е.Г. Семейство перовскита и сегнетоэлектричество. – М.: «Атомиздат», 1972. – 248 с.
9. IEEE Standard on Piezoelectricity ANSI/IEEE Std. 176-1987. – New-York. 1988.
DOI: 10.1109/IEEESTD.1988.79638.

R e f e r e n c e s

1. Danziger A Ya, Razumovskaya O N, Reznichenko L A, Sakhenko V P, Klevtsov A N, Dudkina S I, Shilkina L A, Dergunova N V and Rybyanets A N Multicomponent systems of ferroelectric complex oxides: physics, crystal chemistry,

technology. Aspects of the design of piezoelectric materials. – Rostov-on-Don: "Kniga". 2002. Vol. 2. – 365 p.

2. Go S.H., Kim D.S., Han S.H., Kang H.-W., Lee H.-G., Cheon C. Figures of merit of (K, Na, Li)(Nb, Ta)O₃ ceramics with various Li contents for a piezoelectric energy harvester // J Korean Ceram. Soc. 2017. V. 54. P. 530-534.
3. Zhao Y.J., Ge Y.Y., Yuan X.Y., Zhao Y.Z., Zhou H.P., Li J.B., Jin H.B. Effect of phase structure changes on the lead-free Er³⁺-doped (K_{0.52}Na_{0.48})_{1-x}Li_xNbO₃ piezoelectric ceramics // J. Alloys Compd. 2016. V. 680. P. 467-472.
4. Zhao Y.J., Wang L.H., Huang R.X., Liu R.Z., Zhou H.P. The correlation between the microstructure and macroscopic properties of (K, Na, Li)(Nb, Ta)O₃ ceramic via rare earth oxide doping // Ceramics International. 2013. V. 40. P. 2505-2510.
5. Zhao Y.J., Zhao Y.Z., Huang R.X., Liu R.Z., Zhou H.P. Microstructure and piezoelectric properties of CuO-doped 0.95(K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃–0.05Li(Nb_{0.5}Sb_{0.5})O₃ lead-free ceramics // J. Eur. Ceram. Soc. 2011. V. 31. P. 1939-1944.
6. Directive 2002/95/EU of the European Parliament and of the Council of 27 January 2003 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electronic equipment // Official Journal of the European Union. L. 37. 2003. V. 46. P. 19-23.
7. Directive 2011/65/EU of the European Parliament and of the Council of 8 June 2011 on the restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment // Official Journal of the European Union. L. 174. 2011. V. 54. P. 88-110.
8. Fesenko E.G. The perovskite family and ferroelectricity. – М.: "Атомиздат", 1972. – 248 p.
9. IEEE Standard on Piezoelectricity ANSI/IEEE Std. 176-1987. – New-York. 1988.
DOI: 10.1109/IEEESTD.1988.79638.

Dudkina S.I., Shilkina L.A., Andryushin K.P., Andryushina I.N., Verbenko I.A., Reznichenko L.A. APPLICATION OF NIOBATE FERROPIEZOCERAMICS IN MEDICAL PRACTICE

Niobate ferroelectric piezoceramics, including sodium and lithium niobates and modifiers, were prepared by two-stage solid-phase synthesis followed by hot-pressing sintering. It is shown that the obtained materials are characterized by high sensitivity to mechanical stress, which is provided by high values of piezoelectric sensitivity, $|g_{31}|$, equal to (13.7–19.2) mV·m/N.

The developed niobate ferroelectric piezoelectric materials were tested in ADP-type sensors for echoacohemophones. Tests have shown that, according to the obtained values of electroacoustic parameters, niobate ferroelectric ceramics are not inferior to piezoelectric ceramics of the PZT type and can be recommended for use in medical practice.

Key words: solid solutions, sodium niobate, lithium niobate, ferroelectric piezoceramics, piezoelectric sensitivity, medical sensors

Дудкина Светлана Ивановна, научный сотрудник НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: s.i.dudkina@yandex.ru

Dudkina Svetlana Ivanovna, Researcher, Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational

Institution of Higher Education "Southern Federal University",
Rostov-on-Don.

Шилкина Лидия Александровна, научный сотрудник НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: lid-shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidia Alexandrovna, Researcher, Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Southern Federal University", Rostov-on-Don.

Андрюшин Константин Петрович, к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: vortexblow@gmail.com

Andryushin Konstantin Petrovich, Candidate of physical and mathematical sciences, Leading Researcher, Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Southern Federal University", Rostov-on-Don.

Андрюшина Инна Николаевна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: futur6@mail.ru

Andryushina Inna Nikolaevna, Candidate of physical and mathematical sciences, Senior Researcher, Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational

Institution of Higher Education "Southern Federal University",
Rostov-on-Don.

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н., директор НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: ilich001@yandex.ru

Verbenko Ilya Alexandrovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Director of the Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Southern Federal University", Rostov-on-Don.

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., проф., заведующая отделом интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: lareznichenko@sfnedu.ru

Reznichenko Larisa Andreevna, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Intellectual Materials and Nanotechnologies, Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Southern Federal University", Rostov-on-Don.

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 539.211, 548.4

ПОВЕДЕНИЕ АНИОННОЙ ВАКАНСИИ В (100) ПЛАСТИНАХ АНАТАЗА РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

Токий Н.В., Токий В.В., Гребенюк Н.А.

BEHAVIOR OF ANION VACANCY IN (100) ANATASE PLATES OF DIFFERENT THICKNESS

Tokiy N.V., Tokiy V.V., Gebenjuk N.A.

В рамках квантово-механического подхода методом DFT проведены расчеты полной энергии шести- и десяти-слойных (100) пластин анатаза с анионной вакансией при ее перемещении по равновесным кислородным узлам кристаллической решетки в направлении [100]. В толстой пластине обнаружена немонотонность изменения полной энергии при перемещении анионной вакансии в ее середине. Это приводит к дополнительному барьеру при реализации стремления анионной вакансии в приповерхностный слой из середины пластины. Анализ позволил оценить термодинамический параметр механизма реализации стремления анионной вакансии в направлении [100] в приповерхностный слой.

Ключевые слова: анионная вакансия, энергия миграции, (100) пластина анатаза, DFT.

Введение. В настоящее время возрастает интерес к установлению роли наноструктур в управлении технологическими и эксплуатационными свойствами материалов для ключевых научно-технических направлений, которые оказывают наиболее существенное влияние на развитие экономики, в частности, в таких ее секторах, как металлообработка, химическая индустрия, приборостроение, здравоохранение, нефтехимия, металлургия, энергетика, машиностроение, электроника, телекоммуникации, строительные и промышленные материалы, биотехнологии. Развиваемые нами упругий и квантовомеханические подходы моделирования свойств материалов сокращают сроки проектирования и обратного инжиниринга от свойств, срок получения нового материала, то есть до модельных и натурных испытаний все рассчитать. Диоксид титана, как уже отмечалось нами, широко используется для фотокатализаторов, для производства водорода, в солнечных элементах. Его применяют при изготовлении кислородных сенсоров, варисторов, самоочищающихся покрытий, в спинтронике, в дисплеях [1, 2]. Обладая высоким коэффициентом отражения, TiO_2 широко используется для защиты космических аппаратов от солнечного излучения. Стойкость покрытий определяется наличием кислородных вакансий в диоксиде титана. В

последнее время ввиду использования диоксида титана как гетерогенного катализатора [3] повысился интерес к изучению поверхностей диоксида титана со структурой анатаза [4].

Для установления физического механизма реализации стремления анионной вакансии в приповерхностный слой 100 пластины и определения его активационных параметров, контролирующих структуру и функциональные свойства анатаза, требуются первопринципные квантово-механические расчеты более толстых пластин.

Целью работы является изучить поведение анионной вакансии в (100) пластинах анатаза различной толщины в рамках квантово-механического подхода методом DFT.

Модель. Для изучения поведения анионной вакансии в анатазе нами были построены атомные модели ячеек пластин диоксида титана. Анатаз имеет структуру тетрагональной симметрии (пространственная группа I_{41}/amd) [5]. В качестве формы ячейки выбран прямоугольный параллелепипед с ребрами $\vec{a} \times \vec{b} \times \vec{c}$, длина (в Å) которых составляет: $a = 27.125$, $b = 3.875$, $c = 9.514$. Базисный вектор для ядра атома s в ячейке можно записать в виде $\vec{r}_s = \tau_a^s \vec{a} + \tau_b^s \vec{b} + \tau_c^s \vec{c}$. Ячейка, моделирующая анионную вакансию в тонкой (100) пластине диоксида титана состоит из 35 атомов, в том числе 12 Ti, 23 O. Для моделирования толстой пластины анатаза с вакансией мы использовали ячейку из 59 атомов, в том числе 20 Ti и 39 O.

На рис. 1,а и 1,б представлены атомные структуры (100) пластин анатаза с анионной вакансией, где атомы титана обозначены синим цветом, атомы кислорода – красным и анионная вакансия в приповерхностном слое – зеленым. На рис. 1,а показана шестислойная (100) пластина, а на рис. 1,б – десятислойная (100) пластина.

Моделирование в настоящей работе было выполнено в рамках DFT [6-10]. Главным принципом DFT является описание взаимодействия системы фермионов через трехмерную электронную плотность, а не через их многомерные волновые функции. Применение нами DFT для диоксида титана

проведено на основе приближения обменно-корреляционного потенциала. Нужно, однако, отметить, что до сих пор существуют проблемы при выборе обменно-корреляционного потенциала и базисных волновых функций. Широкое распространение получил способ выбора этого локального потенциала в виде потенциала для однородного электронного газа – так называемое приближение локальной плотности (LDA).

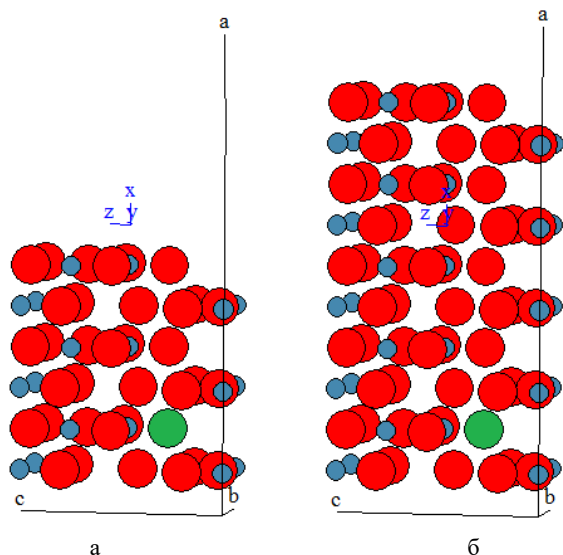


Рис. 1. Атомная структура пластин анатаза

Моделирование проводили в программе ABINIT [11] с помощью abinit-инструмента (Version 2.8.3) nanoHUB [12]. Реализацию DFT [10] в LDA для энергии обменной корреляции электронов осуществляли с использованием псевдопотенциалов Troullier-Martins [13] для Ti и O (предлагаемых по умолчанию в пакете ABINIT), а также энергии обрезания для плоских волн 60 Ha.

Полная энергия оксидов и ее составляющие в теории псевдопотенциалов описаны нами в работах [6-9].

Результаты. Полная энергия E_{tot} для 6-слойной (100) пластины диоксида титана со структурой анатаз при смещении анионной вакансии в направлении [100] по равновесным кислородным узлам кристаллической решетки, отсчитываемое от середины пластины, представлено на рис. 2.

Анализ полной энергии обнаруживает стремление вакансии в приповерхностные слои [14].

Полная энергия E_{tot} толстой 10-слойной (100) пластины анатаза при смещении анионной вакансии в направлении [100] по равновесным кислородным узлам кристаллической решетки от центра пластины представлено на рис. 3.

Анализ полной энергии обнаруживает немонотонное поведение вакансии в толстой пластине. Это приводит к дополнительному барьеру при реализации стремления анионной вакансии в приповерхностный слой из середины пластины.

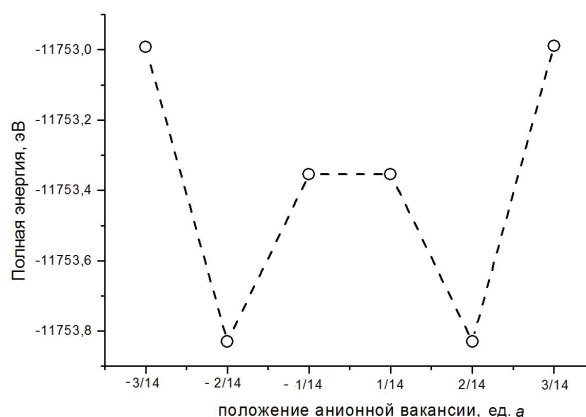


Рис. 2. Полная энергия 6-слойной (100) пластины анатаза при смещении анионной вакансии от центра пластины в направлении [100] по равновесным кислородным узлам кристаллической решетки

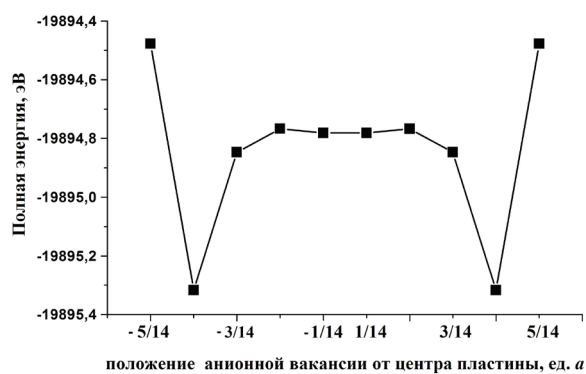


Рис. 3. Полная энергия 10-слойной (100) пластины анатаза при смещении анионной вакансии в направлении [100] по равновесным кислородным узлам кристаллической решетки от центра пластины

Изменение полной энергии отсчитываемое от нижайшего значения при нахождении анионной вакансии в приповерхностном узле (100) пластин анатаза различной толщины представлены на рис. 4.

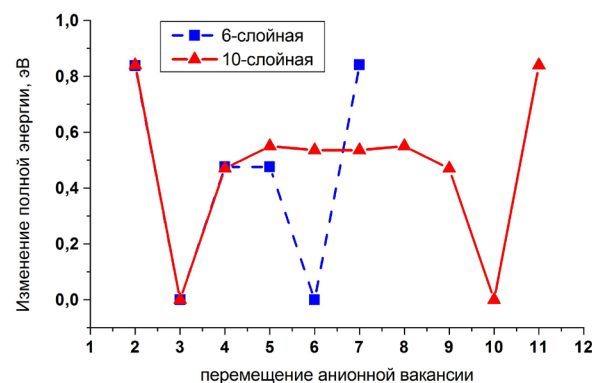


Рис. 4. Изменение полной энергии отсчитываемое от нижайшего значения при нахождении анионной вакансии в приповерхностном узле (100) пластин анатаза различной толщины

В настоящей работе получены зависимости всех составляющих полной энергии ячеек анатаза различной толщины для различных положений анионной вакансии.

К монотонно изменяющимся составляющим относятся энергии E_{loc} - локального электрон-ионного взаимодействия, E_H - Хартри валентных электронов и E_{Ew} - кулоновского ион-ионного взаимодействия. К немонотонно изменяющимся энергиям относятся E_{nonloc} - нелокального электрон-ионного взаимодействия, E_{kin} - кинетическая и E_{xc} - обменно-корреляционной энергии валентных электронов. А также E_{psp} - энергия коррекции ионного остова, которая не изменяется и подтверждает достоверность полученных результатов расчетов.

Выводы. Проведено сравнение двух (100) пластин анатаза с вакансией: шестислойной и десятислойной. Установлено, что вакансии стремятся в приповерхностный слой, но при увеличении толщины возникает немонотонная зависимость, которая приводит к дополнительному барьеру при реализации стремления анионной вакансии в приповерхностный слой из середины пластины. Построенные модели тонкой 6-слойной и толстой 10-слойной (100) пластин анатаза с дефектом, контролирующим электрофизические свойства - анионной вакансией - позволяют сократить сроки в установлении оптимальной толщины пластины новых функциональных материалов.

Л и т е р а т у р а

1. Diebold U., Surface Science Reports 48, 53-229 (2003)
2. Токий В.В., Константинова Т.Е., Токий Н.В., Савина Д.Л., Погибко В.М., Гусакова Л.Г., Спиридонов Н.А., Сб. науч. трудов "Наносистемы, Наноматериалы, Нанотехнологии". 2 (3) 849-854 (2004)
3. J. D. A. Pelletier, J.-M. Basset, Acc. Chem. Res. 49(4), 664-677. (2016).
4. Kashiwaya Sh., Morasch J., Streibel V., Toupance Th., Jaegermann W., Klein A., Surfaces 1, 73-89; (2018)
5. Токий Н.В., Токий В.В. Актуальные проблемы прочности: материалы международной научной конференции, Витебск, 25-29 мая 2020 года / под ред. В.В. Рубаника. - Молодечно: Типография «Победа», 2020. - с.224-226. ISBN 978-985-6967-44-6
6. Токий Н.В., Токий В.В., Гребенюк Н.А., Вестник: «Луганский Государственный Университет имени Владимира Даля» № 10 (40), - С.75-78. (2020).
7. Токий Н.В., Токий В.В., Донецкие чтения 2020: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности: Материалы V Международной научной конференции (Донецк, 17-18 ноября 2020г.). - Том 1, Физико-математические и технические науки. Часть 2/ под общей ред. проф.С.В. Беспаловой. - Донецк: Изд-во ДонНУ, 2020. - с. 141-144
8. Tokiy N.V., Tokiy V.V., ФТВД 29, №2, с.56-62 (2019).
9. Tokiy N. V., Savina D. L., Tokiy V. V., Materials of Mediterranean-East-Europe Meeting "Multifunctional

Nanomaterials (NanoEuroMed 2011)".- Uzhgorod, 2011.- С.165-166.

10. Hohenberg P., Kohn W., Phys. Rev. 136, B864 (1964).
11. <http://www.abinit.org>
12. <http://www.nanohub.org>.
13. Troullier N., Martins J.L., Phys. Rev. B43, 1993 (1991)
14. Токий Н.В., Токий В.В., Гребенюк Н.А., Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Брест, 27-31 мая 2019г./ под ред. чл.-корр. Рубаника В.В. - Витебск: УО «ВГТУ», 2019.- С.264-266.- ISBN 978-985-481-608-1

References

1. Diebold U., Surface Science Reports 48, 53-229 (2003)
2. Tokiy V.V., Konstantinova T.E., Tokiy N.V., Savina D.L., Pogibko V.M., Gusakova L.G., Spiridonov N.A., Sb. nauch. trudov "Nanosistemy, Nanomaterialy, Nanotekhnologii". 2 (3) 849-854 (2004)
3. J. D. A. Pelletier, J.-M. Basset, Acc. Chem. Res. 49(4), 664-677. (2016).
4. Kashiwaya Sh., Morasch J., Streibel V., Toupance Th., Jaegermann W., Klein A., Surfaces 1, 73-89; (2018)
5. Tokiy N.V., Tokiy V.V. Aktual'nye problemy prochnosti: materialy mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii, Vitebsk, 25-29 maja 2020 goda / pod red. V.V. Rubanika. - Molodechno: Tipografija «Pobeda», 2020. - с.224-226. ISBN 978-985-6967-44-6
6. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Grebenjuk N.A., Vestnik: «Luganskij Gosudarstvennyj Universitet imeni Vladimira Dalja» № 10 (40), - S.75-78. (2020).
7. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Doneckie chtenija 2020: obrazovanie, nauka, innovacii, kul'tura i vyzovy sovremennosti: Materialy V Mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii (Doneck, 17-18nojabrja 2020g.). - Tom 1, Fiziko-matematicheskie i tehnicheckie nauki. Chast' 2/ pod obshhej red. prof.S.V. Bespalovoj. - Doneck: Izd-vo DonNU, 2020. - s. 141-144
8. Tokiy N.V., Tokiy V.V., FTVD 29, №2, s.56-62 (2019).
9. Tokiy N. V., Savina D. L., Tokiy V. V., Materials of Mediterranean-East-Europe Meeting "Multifunctional Nanomaterials (NanoEuroMed 2011)".- Uzhgorod, 2011.- С.165-166.
10. Hohenberg P., Kohn W., Phys. Rev. 136, B864 (1964).
11. <http://www.abinit.org>
12. <http://www.nanohub.org>.
13. Troullier N., Martins J.L., Phys. Rev. B43, 1993 (1991)
14. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Grebenjuk N.A., Perspektivnye materialy i tehnologii: materialy mezhdunarodnogo simpoziuma, Brest, 27-31 maja 2019g./ pod red. chl.-korr. Rubanika V.V. - Vitebsk: UO «VGtU», 2019.- S.264-266.- ISBN 978-985-481-608-1

Tokiy N. V., Tokiy V.V., Gebenjuk N.A. BEHAVIOR OF ANYON VACANCY IN (100) ANATASE PLATES OF DIFFERENT THICKNESS

Within the framework of the quantum mechanical approach, the DFT method was used to calculate the total energy of six- and ten-layer (100) anatase plates with an anion vacancy as it moves along the equilibrium oxygen sites of the crystal lattice in the [100] direction. In a thick plate, a

non-monotonic change in the total energy was found with the movement of an anion vacancy in its middle. This leads to an additional barrier when the anion vacancy tends to the surface layer from the middle of the plate. The analysis made it possible to estimate the thermodynamic parameter of the mechanism of realization of the tendency of the anion vacancy in the [100] direction to the surface layer.

Key words: anion vacancy, migration energy, (100) anatase plate, DFT.

Токий Наталья Валентиновна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», Донецк.

E-mail: nvt1976@mail.ru

Tokiy Natalya, PhD, Senior Researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, State Educational Establishment of Higher Professional Education «Donetsk National University». Donetsk.

Токий Валентин Владимирович, д.ф.-м.н., профессор, старший научный сотрудник, ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк.
E-mail: nvt1976@mail.ru

Tokiy Valentine, Doctor of Science, Professor, Senior Researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, Donetsk.

Гребенюк Наталья Андреевна, магистрант, Харьковский Национальный Педагогический Университет имени Г. С. Сковороды, Харьков.

E-mail: nvt1976@mail.ru

Natalya Grebenjuk, postgraduate students, H.S. Skovoroda Kharkiv National Pedagogical University, Kharkiv

Рецензент: Корсунов Константин Аатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 539.3, 539.4, 54.03

ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ОДНОФАЗНОГО ГИБРИДА ДЛЯ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ В ПРИБЛИЖЕНИИ ФОГТА

Токий В. В., Токий Н.В.

THE THREE-COMPONENT MODEL OF A SINGLE-PHASE HYBRID FOR SUBMICROCRYSTALLINE COPPER IN THE VOIGT APPROXIMATION

Tokiy V. V., Tokiy N.V.

В рамках упругого подхода опирающегося на экспериментальный метод измерения модуля сдвига обсуждается возможность применения 2х- и 3х-компонентных моделей однофазных гибридных материалов для объяснения аномальной температурной зависимости модулей упругости меди с субмикроструктурной структурой. Анализ был проведен на основе известных экспериментальных данных. Для изменения ориентации кристаллитов предлагается использовать механизм двойникования.

Проведено сравнение двухкомпонентной и трехкомпонентной моделей. Установлено, что даже небольшая доля третьей компоненты (изотропной) фазы позволяет получить высокомодульный гибрид.

Ключевые слова: двойникование, ультрамелкозернистая медь, гибридные материалы, аномальная температурная зависимость упругости.

Введение. Переход к исследованиям меди с ультрамелкозернистой (нано- и субмикроскопической) структурой, обусловленный ее необычными механическими и физическими свойствами, выявил области аномального поведения температурной зависимости упругих свойств — увеличения модулей с ростом температуры [1]. Конкретный механизм этого явления до сих пор не вполне ясен, хотя его исследованию посвящено значительное число публикаций, ссылки на которые можно найти в [2].

В работах [3-8] нами была предложена двухкомпонентная модель однофазных гибридных материалов для объяснения аномальной температурной зависимости модулей упругости меди с субмикроструктурной структурой. Для изменения ориентации кристаллитов предлагалось использовать механизм двойникования.

Теория. В рамках предлагаемой двухкомпонентной модели мы различали компоненты, отличающиеся кристаллографической ориентацией вдоль оси цилиндрического образца. Первый компонент выходил на поперечное сечение образца плоскостью (111), а второй компонент плоскостью (100).

Величины модулей Юнга, E , и модулей сдвига, G , гибридного ГЦК материала, обозначенные были

как M , заключены в известных пределах Фогта и Ройса [9].

Верхний предел величин получен, постулируя, что при нагрузке эти два компонента подвержены одинаковой деформации; и напряжение рассчитывается усреднением по объему локальных напряжений, а составной модуль следует правилу смесей:

$$M_U(T) = M_{100}(T)f^V(T) + M_{111}(T)(1 - f^V(T)), \quad (1)$$

где $f^V(T)$ - объемная доля [100] ориентированного компонента, $(1 - f^V(T))$ - объемная доля [111] ориентированного компонента, $M_{100}(T)$ и $M_{111}(T)$ - температурные зависимости упругих модулей монокристалла в направлении [100] и в направлении [111] соответственно.

Следовательно, объемная доля [100] ориентированного компонента гибрида в приближении Фогта может быть найдена из (1)

$$f_{100}^V(T) = \frac{M(T) - M_{111}(T)}{M_{100}(T) - M_{111}(T)}, \quad (2)$$

где $M(T)$ - экспериментальная температурная зависимость соответствующего упругого модуля гибрида.

Объемная доля [111] ориентированного компонента гибрида в приближении Фогта может быть найдена как $(1 - f_{100}^V(T))$.

Изменения объемных долей низко модульной $f_{111}^V(\bullet)$ и высоко модульной $f_{100}^V(\circ)$ компонентов чистой меди во время первого нагрева со скоростью 1.05 К/мин [2], рассчитанные в приближении Фогта, представлены на рис. 1.

Изменения объемных долей низко модульной $f_{111}^V(\bullet)$ и высоко модульной $f_{100}^V(\circ)$ компонентов чистой меди во время первого нагрева со скоростью 0.5 К/мин [2], рассчитанные в приближении Фогта, представлены на рис. 2.

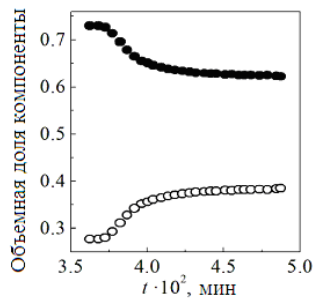


Рис. 1. Изменения объемных долей низкомодульной f'_{111} (●) и высокомодульной f'_{100} (○) компонентов чистой меди во время первого нагрева со скоростью 1.05 К/мин [2], рассчитанные в приближении Фогта.

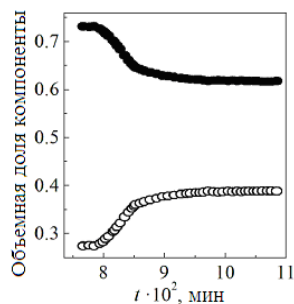


Рис. 2. Изменения объемных долей низкомодульной f'_{111} (●) и высокомодульной f'_{100} (○) компонентов чистой меди во время первого нагрева со скоростью 0.5 К/мин [2], рассчитанные в приближении Фогта.

Обращает внимание, что во всем исследуемом диапазоне температур доля высокомодульной компоненты уступает доли низкомодульной. С целью повышения управляемости прочностными и пластическими свойствами ГЦК гибрида представляет интерес добиться увеличения доли высокомодульной компоненты.

Поэтому целью настоящего исследования было начать рассмотрение температурных зависимостей объемных долей высокомодульной и низкомодульной компонент при наличии малых долей изотропной поликристаллической компоненты в рамках трехкомпонентной модели однофазного гибрида.

В приближении Фогта, аналогично двухкомпонентной модели, путем усреднения локальных деформаций по объему измеряемый модуль сдвига определяется соотношением

$$G_U(T) = G_{100}(T)f^V(T) + G_{111}(T)(1 - f^V(T) - f_{izo}) + G_{izo}(T)f_{izo} \quad (3)$$

причем в этих расчетах мы использовали экспериментальные данные для модуля сдвига меди $G(T)$ из [2]. Температурная зависимость модуля сдвига монокристалла меди в направлении [100] $G_{100}(T)$ и в направлении [111] $G_{111}(T)$ взяты из [10] и представлены на рис. 3.

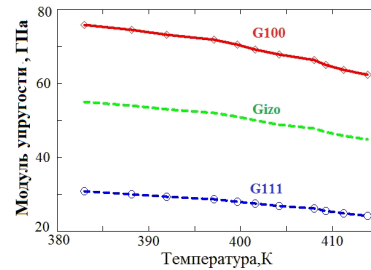


Рис. 3. Температурная зависимость модулей сдвига меди

Для изотропной компоненты в приближении Фогта из работы [9] получаем

$$G_{izo}(T) = \frac{c_{11}(T) - c_{12}(T) + 3c_{44}(T)}{5},$$

где $c_{11}(T)$ и $c_{12}(T)$ - константы упругости из [10].

Матрица упругих постоянных для случая кубических кристаллов имеет вид [11]

$$c_{mn} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix}$$

Температурная зависимость объемной доли высокомодульной компоненты в присутствии f_{izo} объемной доли изотропной компоненты будет определяться из (3) следующим выражением:

$$f^V(T, f_{izo}) = \frac{G(T) - G_{111}(T)(1 - f_{izo}) + G_{izo}(T)f_{izo}}{G_{100}(T) - G_{111}(T)} \quad (4)$$

Изменения объемных долей компонентов, рассчитанные по формуле (4) показаны на рис. 4.

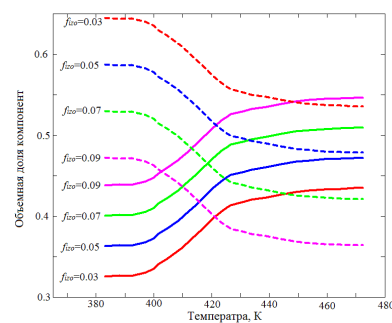


Рис. 4. Температурная зависимость высокомодульной (сплошные линии) и низкомодульной (пунктирные линии) объемных долей в присутствии небольших объемных долей изотропной компоненты

Выводы. Предложена трехкомпонентная модель однофазного гибрида субмикроструктурной меди, обеспечивающая превышение конечной объемной доли

высокомодульной компоненты, определяющей аномальную температурную зависимость модуля сдвига при ИПД и последующим отжигом, над объемной долей низкокомодульной компоненты.

Проведено сравнение двухкомпонентной и трехкомпонентной моделей. Установлено, что даже небольшая доля изотропной фазы позволяет получить высокомодульный гибрид.

Л и т е р а т у р а

1. Ахмадеев Н.А., Валиев Р.З., Кобелев Н.П., Мулюков Р.Р., Соيفер Я.М. Упругие свойства меди с субмикроструктурной структурой // ФТТ. – 1992. – Т. 34. – С. 3155-3160.
2. Kobelev N., Kolyvanov E., and Y. Estrin, Y. Temperature dependence of sound attenuation and shear modulus of ultra fine grained copper produced by equal channel angular pressing. *Acta Mater.* **56**, 1473. (2008)
3. Токий Н.В., Пилипенко А.Н., Токий В.В. Гибридная модель аномальной температурной зависимости модуля сдвига меди, вызванной интенсивной пластической деформацией// Тезисы IV Международной научной конференции «Наноразмерные системы: строение, свойства, технологии. НАНСИС 2013», Киев, Ноябрь 19-22, С.272. (2013). ISBN 978-966-02-6969-9,
4. Токий Н.В., Токий В.В., Пилипенко А.Н., Письменова Н.Е. Температурная зависимость модулей упругости субмикроструктурной меди. ФТТ. -Т. 56, No. 5, стр. 966–969. (2014)
5. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Pilipenko A. N., Pismenova N. E. Temperature dependence of elastic moduli of submicrocrystalline copper. *Physics of the Solid State*, **56**, No. 5, pp. 1002–1005 (2014).
6. Токий Н. В., Пилипенко А. Н., Токий В. В. Металлофизика и новейшие технологии, т. 36, N8, с. 1129-1143 (2014)
7. Tokiy N.V., Tokiy V.V. The activation energy of twinning for copper by Reuss approximation. *Вестник Луганского Национального Университета имени Владимира Даля № 2(4) Ч.1,с.101-104*(2017)
8. Tokiy N.V., Tokiy V.V. The activation energy of twinning for copper in Voigt approximation. *Физика и техника высоких давлений*, том 27, № 1. с. 36-41(2017).
9. Verma J.K.D., Nag B.D. On the Elastic Moduli of a Crystal and Voigt and Reuss Relation. *J.Phys.Soc.Japan* 20. p.635-636 (1965)
10. Chang Y. A. and Himmel L. Temperature Dependence of the Elastic Constants of Cu, Ag, and Au above Room Temperature. *J. Appl. Phys.* 37, 3567. (1966)
11. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. Атомиздат. Москва. 600с. (1972).
- submikrokristallicheskoj medi. *FTT.* -Т. 56, No. 5, str. 966–969. (2014)
5. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Pilipenko A. N., Pismenova N. E. Temperature dependence of elastic moduli of submicrocrystalline copper. *Physics of the Solid State*, **56**, No. 5, pp. 1002–1005 (2014).
6. Tokiy N. V., Pilipenko A. N., Tokiy V. V. *Металлофизика i novejshe tehnologii*, t. 36, N8, s. 1129-1143 (2014)
7. Tokiy N.V., Tokiy V.V. The activation energy of twinning for copper by Reuss approximation. *Vestnik Luganskogo Nacional'nogo Universiteta imeni Vladimira Dalja № 2(4) Ch.1,s.101-104*(2017)
8. Tokiy N.V., Tokiy V.V. The activation energy of twinning for copper in Voigt approximation. *Fizika i tehnika vysokih davlenij*, tom 27, № 1. с. 36-41(2017).
9. Verma J.K.D., Nag B.D. On the Elastic Moduli of a Crystal and Voigt and Reuss Relation. *J.Phys.Soc.Japan* 20. p.635-636 (1965)
10. Chang Y. A. and Himmel L. Temperature Dependence of the Elastic Constants of Cu, Ag, and Au above Room Temperature. *J. Appl. Phys.* 37, 3567. (1966)
11. Hirt Dzh., Lote I. *Teoriya dislokacij*. Atomizdat. Moskva. 600s. (1972).

R e f e r e n c e s

1. Ahmadeev N.A., Valiev R.Z., Kobelev N.P., Muljukov R.R., Sojfer Ja.M. Uprugie svojstva medi s submikrokristallicheskoj strukturoj // FTT. – 1992. – Т. 34. – С. 3155-3160.
2. Kobelev N., Kolyvanov E., and Y. Estrin, Y. Temperature dependence of sound attenuation and shear modulus of ultra fine grained copper produced by equal channel angular pressing. *Acta Mater.* **56**, 1473. (2008)
3. Tokiy N.V., Pilipenko A.N., Tokiy V.V. Gibridnaja model' anomal'noj temperaturnoj zavisimosti modulja sdviga medi, vyzvannoj intensivnoj plasticheskoj deformaciej// Tezisy IV Mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii «Nanorazmernye sistemy: stroenie, svojstva, tehnologii. NANSIS 2013», Kiev, Nojabr' 19-22, S.272. (2013). ISBN 978-966-02-6969-9,
4. Tokiy N.V., Tokiy V.V., Pilipenko A.N., Pis'menova N.E. Temperaturnaja zavisimost' modulej uprugosti

Tokiy V.V., Tokiy N.V.

THE THREE-COMPONENT MODEL OF A SINGLE-PHASE HYBRID FOR SUBMICROCRYSTALLINE COPPER IN THE VOIGT APPROXIMATION

Within the framework of the elastic approach based on the experimental method of measuring the shear modulus, the possibility of using two- and three-component models of single-phase hybrid materials to explain the anomalous temperature dependence of the elastic moduli of copper with a submicrocrystalline structure is discussed. The analysis was carried out on the basis of known experimental data. To change the orientation of crystallites, it is proposed to use the twinning mechanism.

Comparison of two-component and three-component models is carried out. It was found that even a small fraction of the isotropic phase makes it possible to obtain a high-modulus hybrid.

Key words: twinning, ultrafine-grained copper, hybrid materials, anomalous temperature dependence of elasticity.

Токий Наталья Валентиновна, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», Донецк
E-mail: nvt1976@mail.ru

Tokiy Natalya, PhD, Senior Researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, State Educational Establishment of Higher Professional Education «Donetsk National University». Donetsk

Токий Валентин Владимирович д.ф.-м.н., профессор, старший научный сотрудник, ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк.
E-mail: nvt1976@mail.ru

Tokiy Valentine, Doctor of Science, Professor, Senior Researcher, Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, Donetsk.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 535.544

РАСЧЕТ ТОЛЩИНЫ И ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПО СПЕКТРАМ ПРОПУСКАНИЯ

Жидель К.М., Павленко А.В.

CALCULATION OF THE THICKNESS AND OPTICAL CONSTANTS OF THIN FILMS FROM THEIR TRANSMISSION SPECTRA

Zhidel K.M., Pavlenko A.V.

Систематическому изучению оптических свойств тонких пленок и соответствующей корреляции с условиями их обработки уделялось достаточно мало внимания. Вероятно, это связано с тем, что методологическая основа для определения оптических свойств тонких пленок не так широко известна в научном сообществе. Поэтому в настоящей работе мы подробно показываем, как определять оптические свойства тонких пленок с помощью метода Свейнпола.

Ключевые слова: оптические константы, тонкие пленки, пропускание, показатель преломления.

Введение. Оптические свойства тонкой пленки — очень важная тема фундаментальных и прикладных исследований. Например, в фундаментальных исследованиях это получение информации о материале (оптическая ширина запрещенной зоны, коэффициент поглощения, дисперсия показателя преломления). В прикладных исследованиях это получение информации о тонкопленочных транзисторах, солнечных элементах, дисплеях с активной матрицей, датчиках изображения и оптических многослойных интерференционных фильтрах [1–3]. Получение оптических параметров тонкопленочной структуры (обычно полупроводниковый слой, нанесенный на прозрачную подложку) является достаточно активной областью исследований и привлекает широкий спектр экспериментальных методик и новых методов расчетов [4].

Цель данной статьи — представить подход к определению дисперсии показателя преломления $n(\lambda)$ и толщины d тонких пленок с незначительным поглощением и слабой дисперсией.

В терминологии тонких пленок тонкопленочная структура состоит из тонкого поглощающего слоя ($d_{\text{film}} \approx 600\text{--}1200$ нм) обычно полупроводникового материала, нанесенного на толстую подложку ($d_{\text{subs}} \approx 1\text{--}2$ мм). Таким образом, «система» тонких пленок фактически состоит из трех последовательных поверхностей раздела: воздух-пленка, пленка-подложка и подложка-воздух. Из-за многократного отражения и пропускания падающих световых волн на границах раздела слоев пленки образуются полосы равного

хроматического порядка тонкой пленки [5]. Эти полосы равного хроматического порядка наблюдаются как периодические изменения интенсивности в спектрах пропускания или отражения. Такие полосы равного хроматического порядка были тщательно проанализированы для получения обширной информации об оптических свойствах (ширина запрещенной зоны, дисперсия показателя преломления и спектральное поведение коэффициента поглощения) исследуемой тонкой пленки [6–8].

В работе, опубликованной Дж.С. Манифасе и Р. Свейнполом, предложен так называемый метод огибающей. В этом методе они предложили конструкцию двух непрерывных функций, ограничивающих спектры пропускания или отражения, известных как функции огибающей. Показатель преломления пленки рассчитывается путем точного определения точек соприкосновения между верхней и нижней огибающей линиями с максимальной и минимальной интенсивностями полос равного хроматического порядка. Применение огибающего метода требует сложных условий подготовки и измерений, например, исследуемая пленка должна иметь однородную структуру и однородную толщину с очень низкой шероховатостью поверхности [9].

Использование подхода огибающего метода; оптические константы n , k и толщина пленки d были определены при соответствующем максимуме и минимуме полос равного хроматического порядка [10–16]. Однако метод огибающей работает хорошо и дает результат только в области прозрачности (область слабого и среднего поглощения ($k_2 \ll n_2$) [9,11,17]). Таким образом, метод огибающей дает неверный результат для дисперсии показателя преломления в области сильного поглощения. Поэтому большой спрос на новый метод расчета дисперсии показателя преломления тонкой пленки в областях слабого, среднего и сильного поглощения.

Спектр пропускания тонкопленочной системы представляет собой соотношение между интенсивностью проходящего света через пленку в зависимости от длины волны. Большинство

исследовательских групп, использующих метод огибающей, концентрируются на разработке численных алгоритмов для повышения точности определения точек соприкосновения. Следовательно, расчет дисперсии показателя преломления тонкой пленки будет точно идентифицирован. Длина волны (волновые числа), на которой наблюдаются максимумы и минимумы полос равного хроматического порядка, измеряются с высокой точностью. Максимумы и минимумы полос равного хроматического порядка не зависят от какой-либо неоднородности или каких-либо других экспериментальных факторов, которые могут повлиять на интенсивность пиков полос равного хроматического порядка. Следовательно, было бы очень полезно извлечь выгоду из существующей точности измерения длин волн (волновых чисел) максимумов и минимумов полос равного хроматического порядка для извлечения дисперсии показателя преломления $n(\lambda)$ и толщины пленки d до края полосы исследуемой тонкой пленки.

Для многих оптических приложений очень важны физическая толщина d тонкой пленки, ее показатель преломления n (действительная часть комплексного показателя преломления, часто называемая просто «показателем преломления» для краткости) и оптическая дисперсия $n = n(\lambda)$. В некоторых тонкопленочных технологиях трудно определить оптические параметры пленки *in situ* в процессе осаждения. Эти характеристики пленки также непросто определить после осаждения пленки. Причина такой ситуации в том, что даже для объемных материалов прямые измерения показателя преломления n довольно сложны. Однако они сильно зависят от показателя преломления и толщины пленки и подложки, поглощения и гладкости передней и задней сторон подложки. Из-за интерференции света для спектров оптического пропускания / отражения тонких пленок типична осциллирующая структура с максимумами и минимумами. Оптические параметры тонких пленок могут быть извлечены из оптических спектров несколькими стандартными методами [1–15]. Наиболее точную информацию для тонкой пленки можно получить из измерений спектров пропускания при нормальном падении света [9], поскольку эти измерения не зависят от свойств эталонных зеркал и угла падения света (как в случае измерения коэффициента отражения). Когда показатель преломления пленки выше, чем показатель подложки ($n > n_s$), коэффициент пропускания пленки ниже, чем коэффициент пропускания подложки без покрытия [16]. В методах огибающей [1–9] спектральные экстремумы и их положения применяются для определения $n(\lambda)$ и d : эти методы применимы для пленок толщиной в ограниченном диапазоне, например $d > 0,2$ мкм для большинства оксидных пленок [2]. Для более тонких пленок количество экстремумов становится

недостаточным и их очень сложно локализовать [2]. Применение относительно простых уравнений является преимуществом методов огибающей. Эти методы не требуют специального программного обеспечения для определения дисперсии показателя преломления тонких пленок. Однако методы огибающей используют только точки экстремумов в спектрах пропускания / отражения, то есть учитывается только небольшая часть измеренных спектров. Например, тонкие пленки толщиной около 0,5 мкм и незначительным поглощением в видимой области спектра обычно имеют спектры пропускания с числом экстремумов, достаточно большим для точного определения дисперсии показателя преломления. Тонкие пленки толщиной в диапазоне 0,2–0,4 мкм могут иметь спектры с небольшим количеством точек экстремума (3–5), что может увеличивать степень неопределенности конечных результатов. Другим недостатком методов огибающей является использование интерполированных точек (на самом деле не измеренных) между двумя последовательными измеренными максимумами или минимумами [1, 2]. Методы аппроксимации кривых применяют численную оптимизацию для подгонки теоретической модели к измеренным данным с целью определения дисперсии $n(\lambda)$ и толщины d [9–15]. Эти методы нуждаются в специальной и гибкой программной среде для расчетов из-за разнообразия дисперсионных уравнений в литературе [9].

Методы аппроксимации кривых включают все измеренные точки спектров пропускания, но эти методы требуют специального программного обеспечения и очень тщательного отбора исходных данных [9–15].

Фазовая толщина тонкой пленки δ связана с оптической толщиной nd соотношением $\delta = 2\pi nd / \lambda$ (для нормального падения света). Фазовая толщина пленки представляет собой изменение фазы световой волны, когда проходит через пленку.

Основная идея состоит в том, чтобы объединить преимущества обеих упомянутых выше групп методов — применение относительно простого математического обеспечения (преимущество методов огибающей) и обработки всех точек измеренных спектров пропускания (преимущество методов аппроксимации кривой). Для тонких пленок с незначительным поглощением с несколькими максимумами и минимумами в спектрах пропускания можно рассчитать показатель преломления [2], а затем фазовую толщину во всех точках экстремумов. После интерполяции фазовой толщины на всех измеренных длинах волн становятся возможными расчеты толщины пленки и дисперсии показателя преломления. Представленная методика важна для экспериментальных исследований тонких пленок с пренебрежимо малым поглощением в интересующей спектральной области.

Основной метод расчета оптических констант тонких слоев основан на сканировании спектров пропускания и отражения тонкого слоя исследуемого материала, нанесенного на толстую прозрачную подложку. Однако быстрое колебание спектров с изменением длины волны приводит к собственным (несингулярным) решениям системы, содержащей два уравнения — для пропускания T и одно для отражения R относительно показателей преломления и поглощения n и k слоя [1–3]. Есть два способа устранения невырожденности решения без использования сложных итерационных процедур, которые всегда приводят к использованию монотонных функций λ для вычисления оптических постоянных слоя. Первый способ использует различные комбинации спектров пропускания и отражения [4–6]. Второй способ использует их огибающие, которые являются монотонными функциями λ [7], вместо самих спектров.

Методы вычисления n и k только на основе огибающих спектра пропускания представлены Манифасье [8] и Свейнполом [9]. В первом случае подложка считается полубесконечной, а во втором учитываются ее конечные размеры. Кушев и Желева [10] предложили метод расчета с использованием огибающих спектра отражения. Они получили простые аналитические выражения для n и k , но подложка снова считается полубесконечной.

Теория. Практический случай для тонкой пленки на прозрачной подложке показан на рис. 1. Пленка имеет толщину d и комплексный показатель преломления $n = n - ik$, где n — показатель преломления, а k — коэффициент экстинкции, который можно выразить через коэффициент поглощения α .

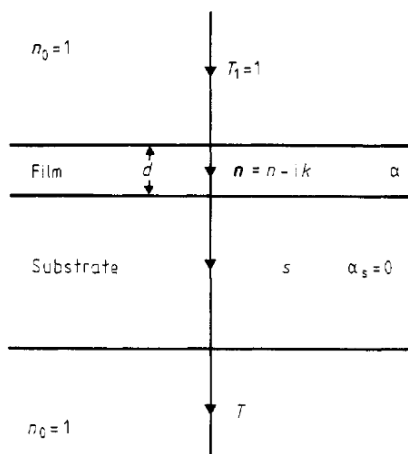


Рис. 1. Система поглощающей тонкой пленки на толстой конечной прозрачной подложке.

Прозрачная подложка имеет толщину на несколько порядков больше, чем d , и имеет показатель преломления s и коэффициент поглощения $\alpha = 0$. Показатель окружающего

воздуха $n_0 = 1$. Строгий анализ должен учитывать все многократные отражения на трех интерфейсах при вычислении T .

Если толщина d неоднородна или слегка сужается, все интерференционные эффекты устраняются, и передача представляет собой плавную кривую, как показано пунктирной кривой T на рис. 2. Спектр можно грубо разделить на четыре области. В прозрачной области $\alpha = 0$ и пропускание определяется n и s за счет многократных отражений. В области слабого поглощения α мало, но начинает уменьшать пропускание. В области среднего поглощения α велико и пропускание уменьшается в основном из-за влияния α . В области сильного поглощения пропускание резко падает почти исключительно из-за влияния α . Плавная кривая пропускания T_α часто используется для определения $\alpha(\lambda)$ в оптическом и инфракрасном диапазонах.

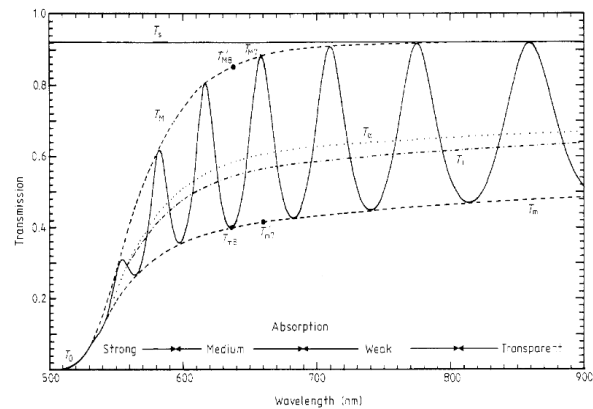


Рис. 2. Смоделированный спектр пропускания с пропусканием T_S .

Если толщина d однородна, интерференционные эффекты приводят к появлению спектра, показанного полной кривой на рис. 2. Эти полосы можно использовать для расчета оптических констант пленки, как это будет показано в этой статье. Рассматривая только толстую подложку в отсутствие пленки, безинтерференционное пропускание дается хорошо известным выражением

$$T_S = \frac{(1-R)^2}{1-R^2}, \text{ где } R = [(s-1)/(s+1)]^2$$

$$\text{или} \quad T_S = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (1)$$

$$\text{и} \quad s = \frac{1}{T_S} + \left(\frac{1}{T_S^2} - 1 \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Основное уравнение для интерференционных полос:

$$2nd = m\lambda, \quad (3)$$

где m — целое число для максимумов и полуцелое число для минимумов. Уравнение (3) содержит

информацию о произведении n и d , и невозможно получить информацию о n или d отдельно, используя только это уравнение.

Пропускание T для случая, показанного на рисунке 2, является сложной функцией и приведено далее

$$T = T(\lambda, s, n, d, \alpha).$$

Если s известно, удобно записать приведенное выше уравнение через $n(\lambda)$ и оптическую плотность $x(\lambda)$,

$$T = T(n, x).$$

Выражение станет намного проще, если мы положим $k = 0$, приближение, которое действительно справедливо для большей части области спектра на рисунке 2. Тогда

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx^2}. \quad (4)$$

Экстремумы интерференционных полос можно записать как

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2}, \quad (6)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2}. \quad (7)$$

Для дальнейшего анализа T_M и T_m теперь считаются непрерывными функциями от λ и, следовательно, от $n(\lambda)$ и $x(\lambda)$, как показано огибающими на рис. 2. Для любых λ , T_M имеет соответствующее значение T_m .

Прозрачная область. В прозрачной области $\alpha = 0$ или $x = 1$ в уравнениях (6) и (7). Подставляя уравнения (5) в (6), получаем

$$T_M = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (8)$$

Уравнение (8) идентично уравнению (1), а максимумы интерференционных полос являются функцией только s и совпадают с T_s . Когда максимумы отклоняются от T_s , это означает начало поглощения, уравнение (8) можно использовать для вычисления s в прозрачной области, используя форму уравнения (2). Подставляя уравнение (5) в уравнение (7) для $x = 1$, получаем

$$T_m = \frac{4n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2}, \quad (9)$$

$$M = \frac{2s}{T_m} - \frac{s^2 + 1}{2}.$$

Таким образом, T является функцией как n , так и s , причем n может быть вычислен из T с использованием уравнения (9).

Область слабого и среднего поглощения среды. В этой области $\alpha \neq 0$ и $x < 1$. Вычитание обратной величины уравнения (6) из обратной величины уравнения (7) дает выражение, которое не зависит от x

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A}. \quad (10)$$

Подставляя уравнение (5) в (10) и решая относительно n , получаем

$$n = \left[N + (N^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (11)$$

$$\text{где } N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2}$$

Уравнение (11) можно использовать для вычисления $n(\lambda)$ из T_M и T_m . Оно идентично формуле, полученной Манифасье с использованием теории для бесконечной подложки. Как только $n(\lambda)$ известна, все константы в уравнении (5) известны, и x можно вычислить различными способами. И (6), и (7) являются квадратными уравнениями относительно x , которые можно решить относительно x , а результаты можно упростить с помощью уравнения (5). Решение уравнения (6) дает

$$x = \frac{E_M - \left[E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)}. \quad (12)$$

Решение уравнения (7) дает

$$x = \frac{E_m - \left[E_m^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)}. \quad (13)$$

Добавление обратных величин к уравнениям (6) и (7) дает

$$\frac{2T_M T_m}{T_M + T_m} = \frac{Ax}{B + Dx^2}. \quad (14)$$

Решение для x дает

$$x = \frac{F - \left[F^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)}. \quad (15)$$

Пропускание T_α без интерференции может быть рассчитано по интерференционным полосам путем интегрирования уравнения (4) между максимумом и соседним минимумом.

Предполагая узкую область интегрирования, где все параметры постоянны, интеграл дает

$$T_\alpha = \frac{Ax}{\left[(B - Cx + Dx^2)(B + Cx + Dx^2) \right]^{1/2}}. \quad (17)$$

Подстановка уравнений (6) и (7) в (17) дает

$$T_\alpha = \sqrt{T_M T_m} \quad (18)$$

T_α , таким образом, является просто геометрическим средним T_M и T_m .

Манифасье и др. (1976) также вывели уравнение для x , используя теорию для бесконечной подложки. Их формула

$$x = \frac{(n+1)(s+n) \left[1 - (T_M / T_m)^{1/2} \right]}{(n-1)(s-n) \left[1 + (T_M / T_m)^{1/2} \right]}. \quad (19)$$

В отличие от случая с показателем преломления, уравнение (19) не эквивалентно уравнениям (12), (13), (15).

Область сильного поглощения. В области сильного поглощения интерференционные полосы исчезают. Невозможно вычислить n и x независимо только по спектру пропускания в этой области. Значения n можно оценить путем экстраполяции значений, вычисленных в других частях спектра. Затем значения x могут быть рассчитаны с использованием любой из четырех формул, представленных в предыдущем разделе, с соответствующими кривыми. Для очень больших α четыре кривые T_M и T_m , T_α и T_i сходятся к одной кривой T_0 . Если игнорировать интерференционные эффекты, уравнение (4) можно записать для $x \ll 1$ как

$$T_0 \approx Ax/B.$$

Определение показателя преломления n .

Показатель преломления подложки можно определить путем измерения спектра пропускания только чистой подложки и использования уравнения (2) для вычисления s . Если присутствует значительный разброс, данные можно подогнать к простой линейной функции, чтобы получить s (d). Для расчета n в области слабого и среднего поглощения должны быть получены значения T_M и T_m при различных d . Эти два значения устанавливают пределы точности вычисленных значений n и α .

Определение толщины d . Если n и n_2 — показатели преломления в двух соседних максимумах (или минимумах) в λ_1 и λ_2 из уравнения (3) следует, что толщина определяется выражением

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)}. \quad (20)$$

Уравнение (20) очень чувствительно к ошибкам в n и не очень точное. Как правило, в уравнении (11) не следует использовать последние два крайних значения спектра. Используя точные значения m и d , n снова можно вычислить для каждой λ , используя уравнение (3).

Выводы. Были представлены формулы и процедуры для расчета $n(\lambda)$ и d для пленок с использованием данных только спектров пропускания. Все формулы имеют закрытый вид и могут быть легко использованы в пакетах прикладных программ. Данная методика была использована на пленках ниобатов бария-стронция с использованием с помощью спектрального комплекса (ЭЛЛИПС-1991) в диапазоне длин волн 350–1000 нм, и результаты будут представлены нами в дальнейших работах.

Благодарности. Использовано оборудование ЦКП «Объединенный центр научно-

технологического оборудования ЮНЦ РАН (исследование, разработка, апробация)».

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, научный проект № (0852-2020-0032) / (БА30110/20-3-07ИФ)).

Л и т е р а т у р а

1. J. Singh, Optical Properties of Condensed Matter and Application, JohnWiley&Sons, West Sussex, England, 2005.
2. O. Stenzel, Optical Coatings Material Aspects in Theory and Practice, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 2014.
3. M.H. Francombe, J.L. Vossen, Thin Films for Advanced Electronic Devices, Academic Press, INC, 1991.
4. D. Poelman, P.F. Smet, J. Phys. D. Appl. Phys. 36 (2003) 1850.
5. S. Tolansky, Multiple Beam Interferometry of Surface and Films, Dover publication, New York, 1970.
6. M. Emam-Ismael, E.R. Shaaban, M. El-hagary, I. Shaltout, Philos. Mag. 90 (2010) 3499.
7. Perkin Elmer 2010 Demonstrating the Accuracy of Transmittance Measurements for High Refractive Index Materials (London: Perkin Elmer Inc.) p 4.
8. Dobierzewska-Mozrzymas E, Lewanowicz S and Mozrzymas J 1972 Acta Phys. Pol. A 41 251.
9. Nilsson P 0 1968 J. Appl. Opt. 7 435.
10. Krisciunas V and Rinkevicius V 1975 Liet. Fiz. Rinkiny 15 447.
11. Tomlin S G 1968 J. Phys. D: Appl. Phys. 1 1667.
12. Borgogno J F, Lazarides B and Pelletier E 1982 Appl. Opt. 21 4020.
13. Kurik M V and Rozhko A Kh 1973 Opt. Spectrosc. 34 532.
14. Lyashenko S P and Miloslavskii V K 1964 Opt. Spectrosc. 16 8.
15. Manificier J C, Casiot J and Fillard J P 1976 J. Phys. E: Sei. Instrum. 9 1002.
16. Swanepoel R 1983 J. Phys. E: Sci. Instrum. 16 1214.
17. Kushev D B, Zheleva N N, Demakopoulou Y and Siapkis D 1986 Infrared Phys. 26 385.
18. Minkov D, Vateva E, Skordeva E, Arsova D and Nikiforova M 1987 J. Non-Cryst. Solids 90 481.

R e f e r e n c e s

1. J. Singh, Optical Properties of Condensed Matter and Application, JohnWiley&Sons, West Sussex, England, 2005.
2. O. Stenzel, Optical Coatings Material Aspects in Theory and Practice, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 2014.
3. M.H. Francombe, J.L. Vossen, Thin Films for Advanced Electronic Devices, Academic Press, INC, 1991.
4. D. Poelman, P.F. Smet, J. Phys. D. Appl. Phys. 36 (2003) 1850.
5. S. Tolansky, Multiple Beam Interferometry of Surface and Films, Dover publication, New York, 1970.
6. M. Emam-Ismael, E.R. Shaaban, M. El-hagary, I. Shaltout, Philos. Mag. 90 (2010) 3499.
7. Perkin Elmer 2010 Demonstrating the Accuracy of Transmittance Measurements for High Refractive Index Materials (London: Perkin Elmer Inc.) p 4.
8. Dobierzewska-Mozrzymas E, Lewanowicz S and Mozrzymas J 1972 Acta Phys. Pol. A 41 251.

9. Nilsson P O 1968 J. Appl. Opt. 7 435.
10. Krisciunas V and Rinkevicius V 1975 Liet. Fiz. Rinkiny 15 447.
11. Tomlin S G 1968 J. Phys. D: Appl. Phys. 1 1667.
12. Borgogno J F, Lazarides B and Pelletier E 1982 Appl. Opt. 21 4020.
13. Kurik M V and Rozhko A Kh 1973 Opt. Spectrosc. 34 532.
14. Lyashenko S P and Miloslavskii V K 1964 Opt. Spectrosc. 16 8.
15. Manificier J C, Casiot J and Fillard J P 1976 J. Phys. E: Sci. Instrum. 9 1002.
16. Swanepoel R 1983 J. Phys. E: Sci. Instrum. 16 1214.
17. Kushev D B, Zheleva N N, Demakopoulou Y and Siapkis D 1986 J. Infrared Phys. 26 385.
18. Minkov D, Vateva E, Skordeva E, Arsova D and Nikiforova M 1987 J. Non-Cryst. Solids 90 481.

Zhidel K.M., Pavlenko A.V.

CALCULATION OF THE THICKNESS AND OPTICAL CONSTANTS OF THIN FILMS FROM THEIR TRANSMISSION SPECTRA.

Little attention has been paid to the systematic study of the optical properties of thin films and the corresponding correlation with the conditions of their processing. This is probably due to the fact that the methodological basis for determining the optical properties of thin films is not so widely known in the scientific community. Therefore, in this work, we show in detail how to determine the optical properties of thin films using the Swanepoel method.

Key words: optical constants, thin films, transmission, refractive index.

Жидель Карина Михайловна, аспирант 2 года обучения физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: karinagidel@mail.ru

Zhidel Karina Mihajlovna, 2nd year PhD student of Physics Faculty at Southern Federal University.

Павленко Анатолий Владимирович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник отдела интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета; заведующий лабораторией наноразмерных активных сред и материалов отдела физики, химии, информатики Южного научного центра РАН, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: tolik_260686@mail.ru

Pavlenko Anatoly Vladimirovich, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Leading Researcher of the Department of Intellectual Materials and Nanotechnologies, Research Institute of Physics, Southern Federal University; Head of the Laboratory of Nanoscale Active Media and Materials, Department of Physics, Chemistry, Informatics, Southern Scientific Center of the Russian Academy of Sciences.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 539.5

ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Малашенко В.В.

DYNAMIC EFFECTS UNDER HIGH STRAIN RATE DEFORMATION OF METALS AND ALLOYS

Malashenko V.V.

Теоретически проанализировано надбарьерное скольжение краевых дислокаций при высокоскоростной деформации металлов и сплавов, содержащих неподвижные дислокационные петли. Получены аналитические выражения силы динамического торможения движущихся дислокаций различными типами дислокационных петель. Проанализирован ориентационный эффект динамического взаимодействия движущейся дислокации с дислокационными петлями. Показано влияние коллективных эффектов на характер динамического торможения дислокаций. Сила динамического торможения дислокаций неподвижными дислокационными петлями уменьшается при увеличении концентрации точечных дефектов.

Ключевые слова: высокоскоростная деформация, дислокационные петли, точечные дефекты, дислокации, пластичность, динамическое торможение.

Введение. Высокоскоростная деформация на протяжении последних лет привлекает все большее внимание исследователей, поскольку научно-технический прогресс значительно увеличил количество технологических процессов, в ходе которых она реализуется. Высокоскоростная деформация имеет место при создании ударопрочных материалов, при высокоскоростной обработке, при обработке и сварке взрывом, при воздействии мощных корпускулярных потоков и лазерных импульсов, при пробивании оболочек летательных аппаратов, при использовании динамического канально-углового прессования [1-5]. Дислокации, являющиеся основными носителями пластической деформации, совершают при этом надбарьерное скольжение, а их скорость достигает от нескольких десятков до тысяч метров в секунду. Весьма эффективным инструментом исследования процессов, происходящих при высокоскоростной деформации, является развитая нами теория динамического взаимодействия структурных дефектов, позволяющая в рамках единого подхода решить аналитически широкий круг задач динамики дислокаций, объяснить ряд имеющихся экспериментальных данных, предсказать новые динамические эффекты, а также выявить общие

черты протекания процессов в совершенно разных физических системах [6-10]. Целью данной работы является получение аналитического выражения силы динамического торможения дислокации неподвижными дислокационными петлями.

Изложение основных материалов. Рассмотрим ансамбль бесконечных краевых дислокаций со средней плотностью ρ_{dis} , движущийся в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v в кристалле, содержащем хаотически распределенные дислокационные петли. Линии дислокаций параллельны оси OZ , их векторы Бюргерса $\mathbf{b} = (b, 0, 0)$ одинаковы и параллельны оси OX . Плоскость скольжения дислокаций совпадает с плоскостью XOZ . Дислокационные петли будем считать одинаковыми, имеющими радиус R и распределенными случайным образом в плоскостях параллельных плоскости скольжения дислокации XOZ . Движение каждой дислокации ансамбля может быть описано волновым уравнением с правой частью, содержащей силы, действующие на дислокацию со стороны других структурных дефектов. При вычислении упрочнения сплава структурными дефектами мы производим усреднение по их хаотическому распределению и по длине дислокации.

Исследуемый механизм диссипации заключается в необратимом переходе кинетической энергии дислокации, совершающей надбарьерное скольжение, в энергию ее поперечных колебаний в плоскости скольжения. Эффективность действия такого механизма может быть проверена экспериментально. Для этого необходимо вычислить корреляционную функцию $G(\tau) = \langle w(z, t)w(z, t + \tau) \rangle$, где функция $w(z, t)$ описывает смещение единичного участка дислокации при ее колебаниях в процессе скольжения по кристаллу. Последняя может быть определена экспериментально через пропорциональную ей корреляционную функцию неупругого рассеяния света $\langle E(t)E(t + \tau) \rangle$, которая может быть измерена с помощью спектроскопии оптического смещения. Упомянутый

экспериментальный метод дает возможность измерить флуктуации поля через флуктуации тока за времена, меньшие характерного периода колебаний дислокации, благодаря чему значительно расширяются возможности традиционных оптических методов, широко используемых при экспериментальном исследовании дислокационных структур. Амплитуда раскачки дислокации может на несколько порядков превзойти амплитуду тепловых колебаний, при этом раскачка собственных колебаний происходит тем эффективней, чем большее искажение вносят точечные дефекты в решетку кристалла, то есть возрастает с увеличением параметра несоответствия.

Воспользовавшись результатами теории динамического взаимодействия структурных дефектов, будем вычислять силу динамического торможения движущейся дислокации неподвижными дислокационными петлями по формуле

$$F_L = \frac{n_L b^2}{4\pi^2 m c v} \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \cdot \int_{\frac{\Delta}{v}}^{\infty} dq_x q_x \frac{|\sigma_{xy}^L(q_x, q_y, 0)|^2}{\sqrt{q_x^2 - \frac{\Delta^2}{v^2}}} \quad (1)$$

Здесь c – скорость поперечных звуковых волн, m – масса единицы длины дислокации, n_L – объемная концентрация дислокационных петель, Δ – щель в спектре дислокационных колебаний, $\sigma_{xy}^L(q_x, q_y, 0)$ – Фурье-образ компоненты тензора напряжений, создаваемых неподвижной дислокационной петлей на линии дислокации.

Результаты исследований. Поскольку исследуемый механизм диссипации связан с возбуждением дислокационных колебаний, его эффективность может зависеть от вида упругих напряжений, создаваемых структурными дефектами. Наличие анизотропии поля упругих напряжений может привести к возникновению ориентационного эффекта динамического взаимодействия движущейся краевой дислокации со структурными дефектами решетки. Такой эффект может возникнуть при скольжении дислокации в кристалле, содержащем кольцевые дислокационные петли. Эти петли могут образовываться, например, при закалке алюминия, очищенного зонной плавкой, при ковке и штамповке, но особенно много петель образуется при радиационном облучении. При движении дислокации в таком кристалле сила динамического торможения дислокационными петлями зависит не от типа петли (призматическая или петля скольжения), а от взаимной ориентации линии дислокации и вектора Бюргерса петли. Если они перпендикулярны, сила торможения обратно пропорциональна скорости движения дислокации

$$F_{\perp} = k_1 n_{\perp} \frac{c}{v} \quad (2)$$

В случае параллельной ориентации сила торможения пропорциональна скорости

$$F_{\parallel} = k_2 n_{\parallel} \frac{v}{c} \quad (3)$$

Здесь k_1, k_2 – коэффициенты, зависящие от упругих модулей кристалла, $n_{\perp}$ и $n_{\parallel}$ – концентрации петель с соответствующей ориентацией. Отношение силы динамического торможения краевой дислокации неподвижными дислокационными петлями в случае параллельной и перпендикулярной ориентации определяется выражением

$$\frac{F_{\parallel}}{F_{\perp}} = K \frac{v^2}{c^2}, \quad (4)$$

где коэффициент K зависит от соотношения концентраций петель различной ориентации. Таким образом, имеет место ориентационный эффект динамического взаимодействия дислокации с дислокационными петлями.

Наличие щели, возникающей в результате коллективного взаимодействия дефектов в спектре колебаний дислокации, которая движется в упругом поле круговых дислокационных петель, при определенных условиях приводит к возникновению сухого трения, т.е. силы динамического торможения, не зависящей от скорости движения дислокации. В рассматриваемом нами случае спектр дислокационных колебаний имеет вид

$$\omega^2(q_z) = c^2 q_z^2 + \Delta^2 \quad (5)$$

Если щель Δ в колебательном спектре возникает благодаря коллективному взаимодействию дефектов с дислокацией, она описывается формулой

$$\Delta = \Delta_{def} = \frac{c}{b} (n_{0d} \chi^2)^{1/4}, \quad (6)$$

где χ – параметр несоответствия точечных дефектов, n_{0d} – их безразмерная концентрация.

Эффект сухого трения возникает в интервале скоростей $v < v_L$, где величина характерной скорости v_L определяется выражением $v_L = R\Delta$, где R – средний радиус петли. Для случая, когда щель создается коллективным взаимодействием точечных дефектов, выражение для этой скорости примет вид

$$v_L = R\Delta_d = c \frac{a}{b} (n_{0d} \chi^2)^{1/4} \quad (7)$$

Сила торможения в этом интервале скоростей может быть описана следующим выражением

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 R c}{(1 - \gamma)^2 \Delta}, \quad (8)$$

Здесь μ – модуль сдвига, γ – коэффициент Пуассона. Это и есть сила сухого трения, т.е. сила торможения, не зависящая от величины скорости. Возникновение эффекта сухого трения при торможении движущихся дислокаций дислокационными петлями определяется двумя главными факторами: видом упругого поля

дислокационных петель и наличием щели в спектре колебаний движущейся дислокации. Величина щели должна быть такой, чтобы выполнялось условие $v < v_L$, но при этом скорость дислокационного скольжения должна попадать в область динамического торможения, т.е. должны быть справедливыми неравенства

$$10^{-2}c < v < v_L = R\Delta \quad (9)$$

Таким образом, для возникновения эффекта сухого трения существенным является наличие и величина спектральной щели, происхождение же этой щели принципиального значения не имеет. Если щель возникает в результате коллективного взаимодействия точечных дефектов с движущейся краевой, то сила динамического торможения в этом случае может быть описана выражением

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 R}{(1-\gamma)^2 (n_{0d} \chi^2)^{1/4}} \quad (10)$$

Как следует из полученного выражения, сила динамического торможения краевой дислокации призматическими петлями в исследуемой области скоростей зависит не только от концентрации петель, но и от концентрации точечных дефектов: увеличение концентрации этих дефектов приводит к увеличению размеров спектральной щели, а, следовательно, к уменьшению силы торможения дислокации петлями.

Щель в дислокационном спектре может быть создана коллективным взаимодействием движущихся дислокаций ансамбля. В этом случае выражение для щели имеет следующий вид

$$\Delta = \Delta_{dis} = b \sqrt{\frac{\rho M}{m}} = c \sqrt{\frac{2\rho}{\ln(D/l_{dis})}}; \quad (11)$$

$$M = \frac{\mu}{2\pi(1-\gamma)}, \quad (12)$$

где l_{dis} – длина дислокации, D – величина порядка размеров кристалла.

Выполняя необходимые вычисления, получим выражение для силы динамического торможения дислокаций призматическими петлями в рассматриваемом случае

$$F_L = \frac{n_L \mu b_0^2 R}{(1-\gamma)^2} \sqrt{\frac{\ln(D/l_{dis})}{2\rho}}. \quad (13)$$

Как следует из полученной формулы, эта сила уменьшается при увеличении плотности дислокаций.

Выводы. Проведенный анализ показывает, что коллективные эффекты в условиях высокоскоростной деформации отличаются от эффектов коллективного взаимодействия при квазистатической деформации, в частности, их проявление и область существования зависят от скорости дислокационного движения. Учет коллективного взаимодействия дефектов в области высоких скоростей необходим для правильного описания динамики дислокаций при их

надбарьерном скольжении и получения корректной оценки динамического предела текучести.

Л и т е р а т у р а

1. Tramontina D., Bringa E., Erhart P., Hawrelak J., Germann T., Ravelo R., Higginbotham A., Suggit M., Wark J., Park N., Stukowski A., Tang Y. Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum // *High Energy Density Physics*.- 2014. -V. 10.- P. 9-15.
2. Batani D. Matter in extreme conditions produced by lasers // *Europhysics Letters*.- 2016.- V. 114.- P. 65001(1-7).
3. Yanilkin A.V., Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A. E. Dynamics and kinetics of dislocations in Al and Al-Cu alloy under dynamic loading // *International Journal of Plasticity*. - 2014. -V. 55. -P. 94-107.
4. Lee J., Veyssset D., Singer J., Retsch M., Saini G., Pezeril T., Nelson K., Thomas E. High strain rate deformation of layered nanocomposites // *Nature Communications*. - 2012.- No. 3.- P.1164.
5. Smith R. F., J. H. Eggert, Rudd R. E., Swift D. C., Bolme C. A. High strain-rate plastic flow in Al and Fe Collins // *Journal of Applied Physics*.-2011. -V. 110. – P. 123515(1–11).
6. Malashenko V.V. Dependence of Dynamic Yield Stress of Binary Alloys on the Dislocation Density under High-Energy Impacts // *Physics of the Solid State*.- 2020.-V. 62.- № 10.- P. 1886-1888.
7. Malashenko V.V. The Influence of Collective Effects on the Concentration Dependence of the Yield Stress of Alloys under High-Energy Impacts. *Technical Physics Letters*, 2020, Vol. 46, No. 9, pp. 925–927
8. Malashenko V.V. Influence of the Guinier–Preston Zones on the Concentration Dependence of the Yield Point of the Aged Two-Component Alloys in Conditions of High-Speed Deformation // *Physics of the Solid State*.- 2019.-V. 61.- № 10.- P. 1800-1803.
9. Malashenko V.V. Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer // *Modern Phys. Lett. B*. – 2009. – Vol. 23, № 16. – P. 2041–2047.
10. Malashenko V.V. Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects // *Physica B: Phys. Cond. Mat.* 2009. V. 404, № 2. P. 3890–3892.

R e f e r e n c e s

1. Tramontina D., Bringa E., Erhart P., Hawrelak J., Germann T., Ravelo R., Higginbotham A., Suggit M., Wark J., Park N., Stukowski A., Tang Y. Molecular dynamics simulations of shock-induced plasticity in tantalum // *High Energy Density Physics*.- 2014. -V. 10.- P. 9-15.
2. Batani D. Matter in extreme conditions produced by lasers // *Europhysics Letters*.- 2016.- V. 114.- P. 65001(1-7).
3. Yanilkin A.V., Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A. E. Dynamics and kinetics of dislocations in Al and Al-Cu alloy under dynamic loading // *International Journal of Plasticity*. - 2014. -V. 55. -P. 94-107.
4. Lee J., Veyssset D., Singer J., Retsch M., Saini G., Pezeril T., Nelson K., Thomas E. High strain rate deformation of layered nanocomposites // *Nature Communications*. - 2012.- No. 3.- P.1164.
5. Smith R. F., J. H. Eggert, Rudd R. E., Swift D. C., Bolme C. A. High strain-rate plastic flow in Al and Fe Collins // *Journal of Applied Physics*.-2011. -V. 110. – P. 123515(1–11).
6. Malashenko V.V. Dependence of Dynamic Yield Stress of Binary Alloys on the Dislocation Density under High-Energy Impacts // *Physics of the Solid State*.- 2020.-V. 62.- № 10.- P. 1886-1888.

7. Malashenko V.V. The Influence of Collective Effects on the Concentration Dependence of the Yield Stress of Alloys under High-Energy Impacts. Technical Physics Letters, 2020, Vol. 46, No. 9, pp. 925–927

8. Malashenko V.V. Influence of the Guinier–Preston Zones on the Concentration Dependence of the Yield Point of the Aged Two-Component Alloys in Conditions of High-Speed Deformation // Physics of the Solid State.- 2019.-V. 61.- № 10.- P. 1800-1803.

9. Malashenko V.V. Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer // Modern Phys. Lett. B. – 2009. – Vol. 23, № 16. – P. 2041–2047.

10. Malashenko V.V. Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects // Physica B: Phys. Cond. Mat. 2009. V. 404, № 2. P. 3890–3892.

Malashenko V.V.

DYNAMIC EFFECTS UNDER HIGH STRAIN RATE DEFORMATION OF METALS AND ALLOYS

The above-barrier sliding of edge dislocations under high strain rate deformation of metals and alloys containing immobile dislocation loops is theoretically analyzed. Analytical expressions for the force of dynamic drag of moving dislocations by various types of dislocation loops are obtained. The orientational effect of the dynamic interaction of

a moving dislocation with dislocation loops is analyzed. The influence of collective effects on the character of dynamic drag is shown. The force of dynamic drag of dislocations by immobile dislocation loops decreases with an increase of the defects concentration.

Key words: *high strain rate deformation, dislocation loops, point defects, dislocations, plasticity, dynamic drag.*

Малашенко Вадим Викторович, доктор физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник Донецкого физико-технического института имени А.А. Галкина.

E-mail: malashenko@donfti.ru

Malashenko Vadim Viktorovich, doctor of physical and mathematical sciences, professor, chief researcher of the Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A.Galkin.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 538.9

ОПТИМИЗАЦИЯ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ НИОБАТА НАТРИЯ-КАЛИЯ ПУТЕМ ПРИМЕНЕНИЯ МЕХАНОАКТИВАЦИИ

Глазунова Е.В., Шилкина Л.А., Вербенко И.А., Ситало Е.И., Нагаенко А.В., Резниченко Л.А.

OPTIMIZATION OF THE PROPERTIES OF SOLID SOLUTIONS MULTICOMPONENT SYSTEM BASED ON SODIUM-POTASSIUM NIOBATE USING MECHANOACTIVATION

Glazunova E.V., Shilkina L.A., Verbenko I.A., Sitalo E.I., Nagaenko A. V., Reznichenko L.A.

В работе применен метод механоактивации с целью определения ее влияния на микроструктуру и свойства твердого раствора многокомпонентной системы на основе ниобата натрия-калия. Определено оптимальное время механоактивации. Выявлено, что воздействие механоактивации способствует формированию более однородной микроструктуры и приводит к увеличению значений диэлектрической проницаемости в 1,5 раза.

Ключевые слова: бессвинцовая пьезокерамика, ниобат натрия-калия, механоактивация, диэлектрическая проницаемость.

Введение. Разработка и создание бессвинцовой сегнетопьезокерамики в настоящее время является одним из передовых направлений науки и техники. Это связано с тем, что основу ныне используемой в промышленности керамики составляют материалы на основе токсичных соединений свинца (цирконата - титаната свинца (ЦТС))[1]. Для которых, помимо неэкологичности, также свойственны технологические трудности, приводящие в ряде случаев к саморазрушению керамик. Одним из наиболее привлекательных бессвинцовых материалов, способных потенциально стать заменой ЦТС-керамике являются твердые растворы (ТР) ниобатов щелочных металлов. Система $K_{1-x}Na_xNbO_3$ (KNN) обладает преимуществами по сравнению с другими бессвинцовыми пьезоэлектрическими материалами из-за ее достаточно высокой диэлектрической проницаемости и пьезоактивности, технологичности синтеза и спекания, температур Кюри ($T_c > 400$ K), подходящих для многих классических применений [2,3]. Тем не менее, на данный момент бессвинцовые пьезоматериалы на основе ниобатов щелочных металлов не могут составить конкуренцию классическим свинецсодержащим аналогам. В связи с этим многими учеными предпринимаются попытки ее модифицирования и улучшения эксплуатационных свойств разными технологическими методами. Одним из наиболее привлекательных и менее затратных способов

влияния на структуру и свойства материалов является механоактивация (МА)[4,5].

В связи с этим целью данной работы стала оптимизация свойств многокомпонентной системы на основе ниобата натрия-калия путем МА.

Объекты, и методы получения. Объектами исследования стали ТР системы $(1-x)K_{0.46}Na_{0.54}Nb_{0.9}Ta_{0.1}O_3 - x LiSbO_3$, где $x = 0.06$, модифицированные 1,5 масс.% ($Fe_2O_3 + Bi_2O_3$) и $CuNb_2O_6$. В качестве реагентов использовались $NHCO_3$ (х.ч.), $KHCO_3$ (ч.д.а.), Li_2CO_3 (ч.), Nb_2O_5 (ч.), Ta_2O_5 (х.ч.), Sb_2O_5 (х.ч.), Fe_2O_3 (ч.д.а.), Bi_2O_3 (х.ч.), CuO (осч). ТР были получены методом твердофазных реакций в две стадии при $T_1=1000^\circ C - 6ч.$, $T_2=1100^\circ C$ с последующим спеканием по обычной керамической технологии $T_{сп.}=1100^\circ C$ в течение 2ч.

Условия синтеза и спекания подбирались на серии экспериментальных образцов по результатам рентгенофазового анализа (РФА) и измерения относительной плотности керамических образцов. Рентгенографические исследования выполнялись на дифрактометре ДРОН 3.0 (CoK_α – излучение, фокусировка по Брэггу – Брентано).

МА применялась к синтезированному материалу перед спеканием. МА осуществлялась в планетарной мельнице АГО-2 в спиртовой среде с использованием помольных шаров из ZrO_2 (скорость вращения барабанов 1800 об/мин). Время МА варьировалось 5-20 мин с шагом 5 мин.

Исследование микроструктуры сколов образцов осуществляли с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM-6390L. Измерение диэлектрических характеристик ТР проводили с использованием Диэлектрического спектрометра Novocontrol в интервале $T=(100 \div 600)^\circ C$, на частоте 1кГц.

Экспериментальные результаты. Рентгенофазовый анализ ТР изучаемой системы показал, что ТР имеют структуру типа перовскита.

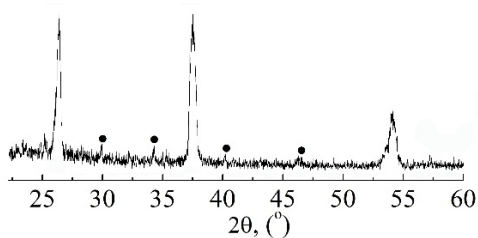


Рис. 1. Рентгенограмма ТР $K_{0.4324}Na_{0.5076}Li_{0.06}Nb_{0.864}Ta_{0.094}Sb_{0.06}O_3$, модифицированные 1,5 масс.% ($Fe_2O_3 + Bi_2O_3$) и $CuNb_2O_6$ после спекания (кружком помечены линии $Li_2K_3Ta_5O_{15}$.)

Образец также содержит линии примесной фазы - $Li_2K_3Ta_5O_{15}$ (интенсивность линии составляет 14%) от которой не удастся избавиться путем варьирования технологических режимов (рис.1).

Далее (рис. 2) представлена зависимость относительной плотности от времени МА. Из зависимости видно, что увеличение времени МА до 15 мин позволяет повысить плотность керамики, а дальнейшее повышение времени (20 мин.) приводит к ее значительному снижению. Максимум плотности достигается при МА в течение 15 мин (рис. 2, а).

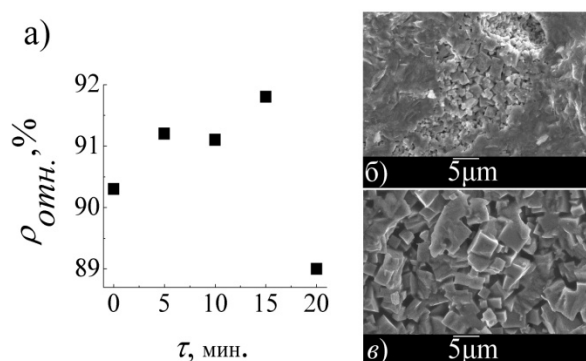


Рис. 2. Зависимость относительной плотности от времени МА(а), фрагменты микроструктур ТР полученных без МА (б), с применением МА в течение 15мин (в) для ТР $K_{0.4324}Na_{0.5076}Li_{0.06}Nb_{0.864}Ta_{0.094}Sb_{0.06}O_3$, с 1.5 масс. % ($Fe_2O_3 + Bi_2O_3$) и $CuNb_2O_6$.

Сравнение фрагментов микроструктур образцов, полученных без МА (рис. 2, б) и механоактивированного в течение 15 мин показывает, что использование МА приводит к уменьшению неоднородности микроструктуры, а также к формированию зерен правильной формы, что способствует повышению качества керамики (рис. 2, в) и способствует увеличению ее плотности. Наблюдаемое, по-видимому, связано с реализацией накопленной поверхностной энергии в снижении активационного барьера при рекристаллизации зерен и формировании квазиравновесных условий образования микроструктуры поликристаллического тела.

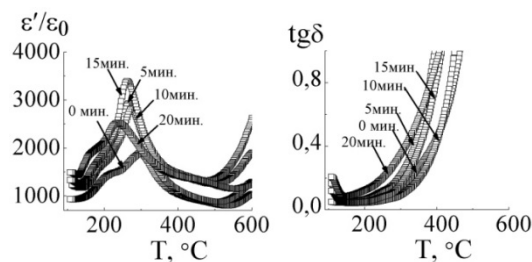


Рис. 3. Зависимость диэлектрической проницаемости ϵ'/ϵ_0 и тангенса угла диэлектрических потерь $\tan\delta$ от температуры для ТР, полученных при разных временах МА

Анализ зависимости диэлектрической проницаемости показал, что применение МА позволяет повысить значения диэлектрической проницаемости при всех временах МА, при сохранении прежнего уровня диэлектрических потерь. При этом, наблюдается снижение температуры максимума диэлектрической проницаемости. При МА в течение 10 мин на всех зависимостях наблюдается аномальное поведение (рис.2, а и рис.4), что может быть связано с дефектной ситуацией в изученных ТР).

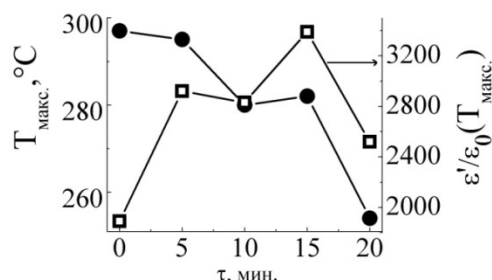


Рис. 4. Зависимость температуры максимума диэлектрической проницаемости и значение диэлектрической проницаемости в максимуме от времени МА

Выводы. Установлено, что применение МА позволяет варьировать как технологические, так и электрофизические свойства многокомпонентной системы на основе ниобата натрия-калия в широких пределах. Определено, что оптимальное время МА для многокомпонентной системы ТР $K_{0.4324}Na_{0.5076}Li_{0.06}Nb_{0.864}Ta_{0.094}Sb_{0.06}O_3$ равно 15 мин., при этом наблюдаются максимумы всех свойств ТР. Показано, что МА в течение 15 мин приводит к кристаллизации правильной формы зерен и формированию более однородной микроструктуры, а также способствует увеличению значений диэлектрической проницаемости в 1,5 раза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект №0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ) при использовании оборудования Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и

тепловые свойства твердых тел» НИИ физики ЮФУ.

Л и т е р а т у р а

1. D. Kajewski, P. Zajdel, A. Soszyński, J. Koperski, I. Lazar, K. Roleder Bismuth doped PbZr_{0.70}Ti_{0.30}O₃ ceramics and their properties driven by high temperature local polarity // *Ceramics International*. 2019. Vol. 45. № 8. PP. 9871-9877.
2. Reznichenko L.A., Verbenko I.A., Andryushin K.P., Dudkina S.I., Sakhnenko V.P. Lead-Free Long Ago. // Monograph «Piezoceramic Materials and Devices». Nova Science Publishers. 2010. Chapter 1. P. 1-69 (328).
3. Резниченко Л.А., Вербенко И.А. Развитие бесвинцового сегнетопьезоматериаловедения на рубеже тысячелетий. // Сборник материалов первого Международного Междисциплинарного симпозиума «Бесвинцовая сегнетопьезокерамика и родственные материалы: получение, свойства, применения (ретроспектива – современность – прогнозы)» («LFFC - 2012»). Ростов-на Дону-Б.Сочи. 2012. С. 9 – 19.
4. Болдырев В.В. Механохимический синтез в неорганической химии // Наука: Новосибирск. 1991. – 284с.
5. Русанов, А.И. Термодинамические основы механохимии // Журнал общей химии. 2000. Т.70. № 3. С.353–382.

R e f e r e n c e s

6. Bokov, A. A. & Ye, Z.-G. Recent progress in relaxor ferroelectrics with perovskite structure // *J. Mater. Sci.* 2006.V.41. PP. 31–52.
7. D. Kajewski, P. Zajdel, A. Soszyński, J. Koperski, I. Lazar, K. Roleder Bismuth doped PbZr_{0.70}Ti_{0.30}O₃ ceramics and their properties driven by high temperature local polarity // *Ceramics International*. 2019. Vol. 45. № 8. PP. 9871-9877.
8. Reznichenko L.A., Verbenko I.A. Development of lead-free ferroelectric materials science at the turn of the millennium. // Proceedings of the first International Interdisciplinary Symposium "Lead-free ferroelectric ceramics and related materials: production, properties, applications (retrospective - modernity - forecasts)" ("LFFC - 2012"). Rostov-on-Don-B. Sochi. 2012. S. 9 - 19.
9. Boldyrev V.V. Mechanochemical synthesis in inorganic chemistry // Science: Novosibirsk. 1991. - 284 p.
10. Rusanov, A.I. Thermodynamic foundations of mechanochemistry // *Journal of General Chemistry*. 2000. Vol. 70. No. 3. P.353–382.

Glazunova E.V., Shilkina L.A., Verbenko I.A.,
Sitalo E.I., Nagaenko A. V., Reznichenko L.A.

OPTIMIZATION OF THE PROPERTIES OF SOLID SOLUTIONS MULTICOMPONENT SYSTEM BASED ON SODIUM-POTASSIUM NIOBATE USING

It has been established that the use of mechanical activation makes it possible to vary both technological and electrophysical properties of a multi-component system based

on sodium niobate-potassium niobate over a wide range. The mechanical activation was applied to determine its impact on the microstructure and properties of a solid solution of a multi-component system based on sodium-potassium niobate. The optimal time of mechanical activation was determined. It was revealed that the impact of mechanical activation contributes to the formation of a more homogeneous microstructure and leads to an increase in the values of the dielectric constant by 1.5 times.

Key words: lead-free piezoceramics, sodium-potassium niobate, mechanical activation, dielectric constant.

Глазунова Екатерина Викторовна, аспирант,
Физический факультет ЮФУ
E-mail: kate93g@mail.ru

Glazunova Ekaterina Viktorovna, postgraduate student, Faculty of Physics, Southern Federal University.

Шилкина Лидия Александровна, н.с., НИИ физики ЮФУ.
E-mail: lid-shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidia Aleksandrovna, Researcher, Research Institute of Physics, Southern Federal University.

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н., директор НИИ физики ЮФУ, ilich001@yandex.ru

Verbenko Ilya Aleksandrovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Director of the Research Institute of Physics, Southern Federal University.

Ситало Евгений Иванович, н.с., НИИ физики ЮФУ.
E-mail: e_sitalo@mail.ru

Sitalo Evgeniy Ivanovich, Ph.D, Researcher, Research Institute of Physics, Southern Federal University.

Нагаенко Александр Владимирович, к.т.н., Институт высоких технологий и пьезотехники.
E-mail: nagaenko@sfned.ru

Nagaenko Alexander Vladimirovich, Ph.D., Institute of High Technologies and Piezotechnics.

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., зав. ОИМНТ, НИИ физики ЮФУ.
E-mail: lareznichenko@sfned.ru

Reznichenko Larisa Andreevna, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head. Department of Intellectual Materials and Nanotechnology, Research Institute of Physics, Southern Federal University.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 538.911

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ФАЗЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $ABO_3 - LiNbO_3$ ($ABO_3 - BiFeO_3, LaMnO_3$ И $LaFeO_3$)

Рудский Д.И., Лебединская А.Р., Кабиров Ю.В., Кофанова Н.Б., Рудская А.Г.

CRYSTALLINE PHASES OF $ABO_3 - LiNbO_3$ ($ABO_3 - BiFeO_3, LaMnO_3$ AND $LaFeO_3$) SOLID SOLUTIONS

Rudsky D.I., Lebedinskaya A.R., Kofanova N.B., Kabirov Yu.V., Rudskaya A.G.

В работе приведены результаты исследований структур твердых растворов $(1-x)BiFeO_3 - xLiNbO_3$ с $0.05 < x < 0.70$, $(1-x)LaMnO_3 - xLiNbO_3$ с $x = 0.3; 0.5; 0.7$ и $(1-x)LaFeO_3 - xLiNbO_3$ с $x = 0.3; 0.5; 0.7$, приготовленных методом твердофазного синтеза, при разных температурах. Установлено, что образование аниондефицитной пироклороподобной фазы $A_2B_2O_6$ между перовскитовой фазой $BiFeO_3$ и псевдоильменитовой фазой $LiNbO_3$ в твердом растворе состава $(Bi_{0.5}Li_{0.5})(Fe_{0.5}Nb_{0.5})O_3$ при $x = 0.5$ системы $(1-x)BiFeO_3 - xLiNbO_3$ происходит путём формирования флюоритоподобной структуры Bi_3NbO_7 с частичными замещениями ионов Bi на ионы Li в позициях A и на ионы Fe в позициях B . В составах систем $(1-x)LaMnO_3 - xLiNbO_3$ обнаружены как ильменитового типа фазы, так и перовскитового типа в зависимости от температур обжига. Во всех образцах твердых растворов $(1-x)LaFeO_3 - xLiNbO_3$ после отжига при T_1 присутствуют фазы типа ильменита и типа перовскита. После отжига при более высоких температурах T_2 и T_3 в образцах присутствуют фазы типа $LaNbO_4$. Концентрации наблюдаемых фаз изменяются как с изменением x , так и с изменением температур отжига.

Ключевые слова: твердые растворы, кристаллические фазы, $ABO_3 - LiNbO_3$, $BiFeO_3$, $LaMnO_3$, $LaFeO_3$

Введение. Как показывает анализ публикаций по результатам поиска и исследования новых ферроиков, в основной массе работ проводится изучение эффектов модифицирования структуры и свойств $BiFeO_3$, $LaMnO_3$ и $LaFeO_3$ путем ограниченных замещений катионов. Попытки создания твердых растворов на основе соединений с разными структурными типами (типа перовскита и типа ильменита) хорошо известны [1, 2]. Изучение твердых растворов «перовскит-ильменит» представляет интерес как с точки зрения особенностей концентрационных реконструктивных переходов, так и для разработки и создания новых функциональных материалов. С одной стороны, например, в твердом растворе $0.5LaFeO_3 - 0.5LiNbO_3$ можно ожидать проявления сегнетоэлектрических свойств, подобных наблюдаемым в сегнетоэлектрике-релаксоре $La_{0.5}Li_{0.5}TiO_3$ в котором два иона Ti^{4+}

замещаются на ионы Fe^{3+} и Nb^{5+} . Кроме того, ионы Fe^{3+} в структурах оксидов могут обуславливать наличие магнитного упорядочения. С другой стороны, в структурах ниобатов лантана ($LaNbO_4$ и La_3MnO_7) обнаруживаются явления протонной проводимости [3]. Кроме того, не ослабевает интерес к составам твердых растворов мультиферроиков (например, $BiFeO_3$) и сегнетоэлектриков (например, $KNbO_3$, $NaNbO_3$). Составы твердых растворов со структурами соответствующих типов могут быть основой новых функциональных материалов для твердых электролитов [4].

В работе изучили ряд составов твердых растворов $ABO_3 - LiNbO_3$ с $A - Bi, La; B - Fe, Mn$. Такие твердые растворы отличаются тем, что в качестве крайних компонентов использованы соединения разных структурных типов. Соединения $BiFeO_3$, $LaMnO_3$, $LaFeO_3$ характеризуются перовскитовой структурой, а $LiNbO_3$ – ильменитоподобной структурой.

Методы синтеза и исследования образцов. Составы твердых растворов $(1-x)BiFeO_3 - xLiNbO_3$ ($x = 0.05; 0.10; 0.15; 0.20; 0.25; 0.30; 0.50; 0.70$). приготавливались методом твердофазных реакций последовательным обжигом при температурах $T_1 = 780^\circ C$ (4 час.), $T_2 = 820^\circ C$ (4 час.) и $T_3 = 1000^\circ C$. В качестве исходных реактивов использовались оксиды висмута (Bi_2O_3), железа (Fe_2O_3), ниобия (Nb_2O_5) и карбонат лития Li_2CO_3 . Составы твердых растворов $(1-x)LaMnO_3 - xLiNbO_3$ ($x = 0.3; 0.5; 0.7$) приготавливались методом твердофазных реакций последовательным обжигом при температурах $T_1 = 780^\circ C$ (4 час.), $T_2 = 1000^\circ C$ (4 час.). В качестве исходных реактивов использовались марганца (Mn_2O_3) и ниобия (Nb_2O_5), гидроксид $La(OH)_3$, карбонат лития Li_2CO_3 . Составы твердых растворов $(1-x)LaFeO_3 - xLiNbO_3$ ($x = 0.3; 0.5; 0.7$) приготавливались методом твердофазных реакций последовательным обжигом при температурах $T_1 = 780^\circ C$ (4 час.), $T_2 = 1000^\circ C$ (4 час.), $T_3 = 1150^\circ C$ (4 час.). В качестве исходных реактивов использовались оксиды железа (Fe_2O_3) и ниобия (Nb_2O_5), гидроксид $La(OH)_3$, карбонат лития Li_2CO_3 . Перед приготовлением

соответствующих стехиометрических смесей исходные реактивы проверялись методом рентгеноструктурного анализа.

Все образцы изучались при комнатной температуре методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α -излучение, Ni фильтр) с фокусировкой по Бреггу-Брентано ($\theta - 2\theta$). Регистрация дифракционных профилей проводилась в интервале углов $20 \leq 2\theta \leq 60^\circ$ в режиме пошагового сканирования образец-детектор с шагом 0.02° град и временем набора импульсов в каждой точке $\tau = 2$ с.

Результаты и обсуждение. Система $\text{BiFeO}_3 - \text{LiNbO}_3$. Для этих твердых растворов установлено, что в широкой области концентраций между перовскитовой (при $x \leq 0.2$) и псевдоильменитовой (при $x \geq 0.7$) структурами существует кубическая флюоритоподобная (пироклороподобная, аниондефицитная пироклороподобная фаза) структура с параметром решетки $a = 5.25 \text{ \AA}$. Наиболее чистая флюоритоподобная структура наблюдается в составе с $x = 0.5$. Флюоритоподобная структура характерна для чистой модификации $\delta\text{-Bi}_2\text{O}_3$ и Bi_3NbO_7 с параметрами кубической ячейки $a = 5.648$ и $a = 5.479 \text{ \AA}$, соответственно. Поэтому для сравнения мы синтезировали Bi_3NbO_7 при температурах 780 и 1000°C . Параметр кубической ячейки оказался равным $a = 5.468 \text{ \AA}$, что хорошо согласуется с литературными данными. Уменьшенный параметр в твердом растворе $0.5\text{BiFeO}_3 - 0.5\text{LiNbO}_3$ ($a = 5.250 \text{ \AA}$) с флюоритоподобной структурой по сравнению с параметром флюоритоподобной структуры Bi_3NbO_7

($a = 5.468 \text{ \AA}$) свидетельствует о частичном замещении ионов Bi ионами Li в области $x \leq 0.05$. При больших величинах x параметры решетки флюоритоподобной структуры практически не изменяются, что свидетельствует о пределе растворимости ионов Li в структуре и образовании ограниченных твердых растворов. Твердый раствор $0.5\text{BiFeO}_3 - 0.5\text{LiNbO}_3$ по составу может быть подобен, с одной стороны, сегнетоэлектрику-релаксору $(\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5})\text{TiO}_3$, где Ti заменяет $(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})$ и, с другой стороны, – мультиферроику $\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$, где Pb заменяет $(\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5})$.

Авторы [5] привели результаты исследований структуры, электрических и магнитных свойств одного состава твердого раствора $0.5\text{BiFeO}_3 - 0.5\text{LiNbO}_3$. Однако в данной работе дана неправильная интерпретация структуры тетрагональной фазой с параметрами ячейки $a = 6.8962(24)$, $c = 14.15(24) \text{ \AA}$. На самом деле эта рентгенограмма соответствует пироклороподобной фазе с параметром кубической ячейки $a = 10.41(1) \text{ \AA}$.

В настоящей работе приведены результаты исследования структур составов системы $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ ($x = 0.05; 0.10; 0.15; 0.20; 0.25; 0.30; 0.50; 0.70$) при комнатной температуре после их синтеза при $T_1 = 780^\circ\text{C}$ (4 час.), $T_2 = 820^\circ\text{C}$ (4 час.) и $T_3 = 1000^\circ\text{C}$ (4 час.). Результаты уточнения структур фаз типа перовскита, пироклора и ильменита, образующихся в результате обжига при разных температурах образцов этих составов приведены в табл. 1. Точность определения параметров составляла $0.001 \text{ \AA}$. В скобках указаны концентрации фаз.

Таблица 1

Структурные характеристики составов системы $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ при комнатной температуре

$T, ^\circ\text{C}$	Фазы	$x = 0.05$	$x = 0.10$	$x = 0.15$	$x = 0.20$	$x = 0.25$	$x = 0.30$	$x = 0.50$	$x = 0.70$
780	Фаза типа перовскит а $Pbnm$	$a = 5.579$ $c = 13.862$ (94.4 %)	$a = 5.583$ $c = 13.866$ (80.4 %)	$a = 5.585$ $c = 13.874$ (60.7 %)	$a = 5.566$ $c = 13.844$ (4.4 %)	–	–	–	–
	Фаза типа пироклора $Fd3m$	$a = 10.511$ (3.7 %)	$a = 10.509$ (17.1 %)	$a = 10.510$ (25.5 %)	$a = 10.500$ (59.2 %)	$a = 10.502$ (70.1 %)	$a = 10.515$ (82 %)	$a = 10.499$ (95 %)	$a = 10.499$ (80 %)
	Фаза типа ильменита $R3c$	–	–	–	–	–	–	$a = 5.176$ $c = 13.709$ (5 %)	$a = 5.150$ $c = 13.824$ (20 %)
	$R_p, \%$	4.04	3.68	4.52	4.61	4.8	3.69	4.47	3.90
820	Фаза типа перовскит а $Pbnm$	$a = 5.582$ $c = 13.867$ (91.7 %)	$a = 5.586$ $c = 13.877$ (69 %)	$a = 5.582$ $c = 13.866$ (44 %)	$a = 5.572$ $c = 13.840$ (7.9 %)	–	–	–	–
	Фаза типа пироклора $Fd3m$	$a = 10.512$ (5.3 %)	$a = 10.515$ (28.7 %)	$a = 10.509$ (41 %)	$a = 10.504$ (53.5 %)	$a = 10.510$ (60.5 %)	–	–	–
	$R_p, \%$	4.48	4.22	4.85	4.69	4.53	–	–	–
1000	Фаза типа пироклора $Fd3m$	–	–	–	–	–	$a = 10.503$ (90 %)	$a = 10.484$ (92 %)	$a = 10.484$ (70 %)
	Фаза типа ильменита $R3c$	–	–	–	–	–	–	–	$a = 5.150$ $c = 13.858$ (21 %)
	$R_p, \%$	–	–	–	–	–	4.25	5.00	4.62

Проведенные исследования твердых растворов $(1-x)\text{BiFeO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ показывают, что концентрация сегнетоэлектрической фазы,

характерной для BiFeO_3 уменьшается с увеличением x , при этом концентрация пироклороподобной фазы увеличивается. Состав с $x = 0.5$ представляет особый

интерес в связи с тем, что он является, с одной стороны, аналогом сегнетоэлектрика-релаксора ($\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5}\text{TiO}_3$). С другой стороны, он является аналогом мультиферроика $\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$. Образование пироклороподобной фазы в широком интервале x может быть связано с тем, что при выбранных термодинамических условиях синтеза образуются фазы подобные Bi_3NbO_7 .

Система $\text{LaMnO}_3 - \text{LiNbO}_3$. Все дифракционные профили составов системы $(1-x)\text{LaMnO}_3 - x\text{LiNbO}_3$, после последовательного обжига при $T_1 = 780^\circ\text{C}$ и $T_2 = 1000^\circ\text{C}$ использовались для уточнения структур существующих в образцах фаз. На рис. 1 для примера показаны результаты обработки экспериментального профиля состава $0.3\text{LaMnO}_3 - 0.7\text{LiNbO}_3$ после обжига при $T_2 = 1000^\circ\text{C}$.

В табл. 2 приведены результаты обработки рентгенодифракционных профилей образцов $(1-x)\text{LaMnO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ после их обжига при температурах $T_1 = 780^\circ\text{C}$ и $T_2 = 1000^\circ\text{C}$. Параметры ячеек приведены в $\text{\AA}$. Точность определения параметров составляла $0.001 \text{ \AA}$. В скобках указаны концентрации фаз.

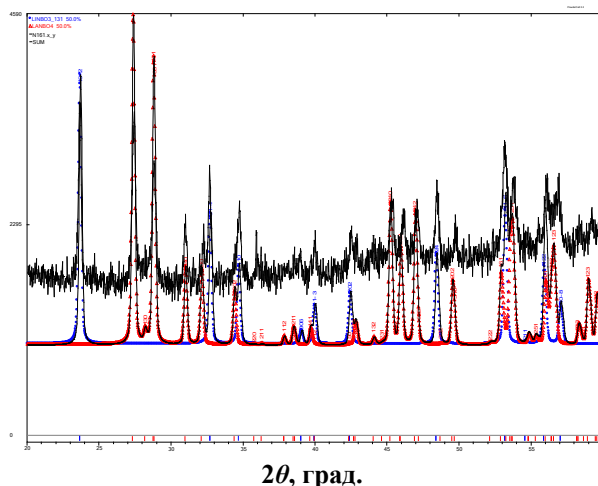


Рис. 1. Результаты обработки экспериментального профиля состава $0.3\text{LaMnO}_3 - 0.7\text{LiNbO}_3$ после обжига при $T_2 = 1000^\circ\text{C}$: кружками изображен расчетный дифракционный профиль ильменитной фазы, треугольниками – расчетный дифракционный профиль фазы LaNbO_4

Таблица 2

Структурные характеристики составов системы $(1-x)\text{LaMnO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ при комнатной температуре

После $T_1 = 780^\circ\text{C}$				После $T_2 = 1000^\circ\text{C}$			
	$x = 0.3$	$x = 0.5$	$x = 0.7$		$x = 0.3$	$x = 0.5$	$x = 0.7$
Фаза типа ильменита $R3c$	$a = 5.159$ $c = 13.905$ (24 %)	$a = 5.163$ $c = 13.847$ (35 %)	$a = 5.153$ $c = 13.830$ (50 %)	Фаза типа ильменита $R3c$	–	$a = 5.150$ $c = 13.838$ (11 %)	$a = 5.156$ $c = 13.853$ (48 %)
$\text{La}(\text{OH})_3$	(74 %)	(63 %)	(48 %)	LaNbO_4	(63 %)	(78 %)	(52 %)
La_2O_3	(2 %)	(2 %)	(2 %)	LiMn_2O_4	(17 %)	(11 %)	–
				Фаза типа перовскита $Pnma$	$a = 5.487$ $b = 7.766$ $c = 5.509$ (20 %)	–	–
$R_p, \%$	3.46	3.24	2.79	$R_p, \%$	4.63	4.18	3.89

В составах системы $(1-x)\text{LaMnO}_3 - x\text{LiNbO}_3$ (табл. 2) область существования фазы типа ильменита после отжига при T_2 сдвигается к большим значениям x . Количество этой фазы после T_1 увеличивается с увеличением x , то после T_2 данная фаза не наблюдается в составе с $x = 0.3$, а в составах с $x = 0.5$ и $x = 0.7$ ее содержание уменьшается. Вместе с тем в составе с $x = 0.3$ обнаруживается фаза типа перовскита. Наблюдаемые фазовые изменения связаны с тем, что $\text{La}(\text{OH})_3$ переходит в La_2O_3 при температурах порядка 1000°C . Такому переходу соответствует образование фаз LaNbO_4 и LiMn_2O_4 .

Система $\text{LaFeO}_3 - \text{LiNbO}_3$. Рентгенодифракционные профили составов $(1-x)\text{LaFeO}_3 - x\text{LiNbO}_3$, после обжигов при $T_1 = 780^\circ\text{C}$, $T_2 = 1000^\circ\text{C}$ и после обжига при $T_3 = 1150^\circ\text{C}$ использовались для уточнения структур существующих в образцах фаз (табл. 3). Параметры ячеек приведены в $\text{\AA}$. Точность определения

параметров составляла $0.001 \text{ \AA}$. В скобках указаны концентрации фаз.

Можно видеть, что после отжига при $T_1 = 780^\circ\text{C}$ количество фазы типа ильменита (LiNbO_3) увеличивается с увеличением x . А параметры c элементарной ячейки уменьшаются, что может соответствовать уменьшению спонтанной поляризации. Количество перовскитовой фазы уменьшается с увеличением x . Концентрация перовскитовой фазы в составах с $x = 0.3$ увеличивается с увеличением температур отжига. При этом также увеличиваются объемы перовскитовых подъячеек. Вместе с тем, после отжига при T_2 и T_3 в составах с $x = 0.5$ и $x = 0.7$ появляется фаза со структурой типа шеелита, характерная для LaNbO_4 . Можно предположить, что структуры типа ильменита и перовскита переходят после отжигов при T_2 и T_3 в структуру типа шеелита из-за ближнего порядка ионов разного сорта в соответствующих подрешетках.

В системе твердых растворов $(1-x)\text{LaFeO}_3-x\text{LiNbO}_3$ эффекты замещения ионов Li^{1+} на La^{3+} и ионов Nb^{5+} на Fe^{3+} в ильменитового типа структуре, с одной стороны, и, с другой стороны, эффекты замещения ионов La^{3+} на ионы Li^{1+} и ионов Fe^{3+} на

ионы Nb^{5+} в перовскитового типа структуре после синтеза при $T_1 = 780^\circ\text{C}$ проявляются в смешанных фазовых состояниях «перовскит + ильменит». Повышение температур отжига переводит эти фазы в фазы типа шеелита.

Таблица 3

Структурные характеристики составов системы $(1-x)\text{LaFeO}_3-x\text{LiNbO}_3$ при комнатной температуре

$T_{\text{обж}}, ^\circ\text{C}$	Фаза	$x = 0.3$	$x = 0.5$	$x = 0.7$
780	Типа ильменита LiNbO_3 $R3c$	$a = 5.148$ $c = 13.851$ (17 %)	$a = 5.149$ $c = 13.837$ (33 %)	$a = 5.147$ $c = 13.825$ (79 %)
	Типа перовскита LaFeO_3 $Pbnm$	$a = 5.566$ $b = 5.552$ $c = 7.841$ (48 %)	$a = 5.559$ $b = 5.566$ $c = 7.835$ (40 %)	$a = 5.568$ $b = 5.553$ $c = 7.838$ (18 %)
	$R_p, \%$	3.18	3.20	3.22
1000	Типа ильменита LiNbO_3 $R3c$	—	—	$a = 5.151$ $c = 13.873$ (42 %)
	Типа перовскита LaFeO_3 $Pbnm$	$a = 5.572$ $b = 5.553$ $c = 7.844$ (51 %)	—	$a = 5.543$ $b = 5.592$ $c = 7.85$ (4 %)
	Типа шеелита LaNbO_4 $I112/b$	$a = 5.562$ $b = 5.214$ $c = 11.523$ $\gamma = 86.01^\circ$ (49 %)	$a = 5.563$ $b = 5.219$ $c = 11.555$ $\gamma = 86.02^\circ$ (94 %)	$a = 5.560$ $b = 5.217$ $c = 11.549$ $\gamma = 85.97^\circ$ (54 %)
	$R_p, \%$	3.51	3.59	3.30
1150	Типа перовскита LaFeO_3 $Pbnm$	$a = 5.582$ $b = 5.558$ $c = 7.857$ (67 %)	—	—
	Типа шеелита LaNbO_4 $I12/a1$	$a = 5.571$ $b = 11.534$ $c = 5.203$ $\beta = 94.06^\circ$ (33 %)	$a = 5.565$ $b = 11.517$ $c = 5.200$ $\beta = 94.10^\circ$ (68 %)	$a = 5.566$ $b = 11.521$ $c = 5.200$ $\beta = 94.11^\circ$ (100 %)
	$R_p, \%$	4.08	3.68	4.07

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032), (БА30110/20-3-07ИФ).

Л и т е р а т у р а

- Кабилов Ю.В. Структурообразование и фазовые переходы титаната кадмия / Ю.В. Кабилов, Б.С. Кульбужев, М.Ф. Куприянов // Журнал структурной химии. – 2001. – Т. 42. – № 5. – С. 972–976.
- Кабилов Ю.В. Структурные фазовые переходы CdTiO_3 / Ю.В. Кабилов, Б.С. Кульбужев, М.Ф. Куприянов // Физика твердого тела. – 2001. – Т. 43. – № 10. – С. 1890–1893.
- Chesnaud, A. High-temperature anion and proton conduction in RE_3NbO_7 (RE = La, Gd, Y, Yb, Lu) compounds / A. Chesnaud, M.-D. Braid, S. Estrade, F. Peiro, A. Tarancon, A. Morata, G. Dezanneau // J. Europ. Ceram. Soc. – 2015. – V. 35. – P. 3051–3061.
- Krok, F. A new highly conducting fluorite phase in the bismuth–zirconium–niobate system / F. Krok, I. Abrahams, W. Wrobel, S.C.M Chan, A. Kozanecka, T.

Ossowski, J.R. Dygas // Solid State Ionics. – 2004 – V. 175. – P. 335–339.

- Dash, S. Dielectric and impedance spectroscopy of $(\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5})(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$ multiferroics / S. Dash, R. Padhee, P.R. Das, R.N.P. Choudharya // Phase Transitions. – 2014. – V. 87. – N 3. – P. 223–235.

R e f e r e n c e s

- Kabirov, Yu.V. Strukturoobrazovanie I fazovie perehodi titanata kadmiya / Yu.V. Kabirov, B.S. Kulbuzhev, M.F. Kupriyanov // Zhurnal strukturnoi khimii. – 2001. – V. 42. – N 5. – P. 972–976.
- Kabirov, Yu.V. Strukturnie fazovie perehodi CdTiO_3 / Yu.V. Kabirov, B.S. Kulbuzhev, M.F. Kupriyanov // Fizika tverdogo tela. – 2001. – V. 43. – N 10. – P. 1890–1893.
- Chesnaud, A. High-temperature anion and proton conduction in RE_3NbO_7 (RE = La, Gd, Y, Yb, Lu) compounds / A. Chesnaud, M.-D. Braid, S. Estrade, F. Peiro, A. Tarancon, A. Morata, G. Dezanneau // J. Europ. Ceram. Soc. – 2015. – V. 35. – P. 3051–3061.
- Krok, F. A new highly conducting fluorite phase in the bismuth–zirconium–niobate system / F. Krok, I. Abrahams, W. Wrobel, S.C.M Chan, A. Kozanecka, T.

Ossowski, J.R. Dygas // Solid State Ionics. – 2004 – V. 175. – P. 335–339.

5. Dash, S. Dielectric and impedance spectroscopy of $(\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5})(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$ multiferroics / S. Dash, R. Padhee, P.R. Das, R.N.P. Choudharya // Phase Transitions. – 2014. – V. 87. – N 3. – P. 223–235.

Rudsky D.I., Lebedinskaya A.R., Kofanova N.B., Kabirov Yu. V., Rudskaya A.G.

CRYSTALLINE PHASES OF ABO_3 – LiNbO_3 (ABO_3 – BiFeO_3 , LaMnO_3 AND LaFeO_3) SOLID SOLUTIONS

The paper presents the results of studies of the structures of $(1-x)\text{BiFeO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ with $0.05 < x < 0.70$, $(1-x)\text{LaMnO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ with $x = 0.3; 0.5; 0.7$ and $(1-x)\text{LaFeO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ with $x = 0.3; 0.5; 0.7$ solid solutions with $x = 0.3; 0.5; 0.7$, prepared by solid-phase synthesis. at different temperatures. It was found that the formation of an anion-deficient pyrochlore-like phase $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_6$ between the perovskite phase BiFeO_3 and the pseudoilmenite phase LiNbO_3 in a solid solution of the composition $(\text{Bi}_{0.5}\text{Li}_{0.5})(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3$ for $x = 0.5$ of the system $(1-x)\text{BiFeO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ the formation of a fluorite-like structure of Bi_3NbO_7 with partial substitutions of Bi ions for Li ions in the A positions and for Fe ions in the B positions. In the compositions of the $(1-x)\text{LaMnO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ systems, both the ilmenite type of the phase and the perovskite type were found, depending on the firing temperatures. All samples of $(1-x)\text{LaFeO}_3$ – $x\text{LiNbO}_3$ solid solutions after annealing at T_1 contain phases of the ilmenite and perovskite types. After annealing at higher temperatures T_2 and T_3 , the samples contain phases of the LaNbO_4 type. The concentrations of the observed phases change both with a change in x and with a change in the annealing temperatures.

Key words: solid solutions, crystalline phases, ABO_3 – LiNbO_3 , BiFeO_3 , LaMnO_3 , LaFeO_3

Рудский Даниил Игоревич, аспирант Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: rudskiy@sfedu.ru

Rudsky Daniil Igorevich, 2-st post-graduate student of the Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Southern Federal University», Rostov-on-Don.

Лебединская Алла Робертовна, к.ф.-м.н., докторант Научно-исследовательского института физики

ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону
E-mail: arlebedinskaya@sfedu.ru

Lebedinskaya Alla Robertovna, Ph.D., doctoral student of the Scientific Research Institute of Physics, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Southern Federal University», Rostov-on-Don

Кофанова Наталья Борисовна, к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры общей физики физического факультета ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону
E-mail: nbkofanova@sfedu.ru

Kofanova Natalia Borisovna, Ph.D., associate professor, associate professor of the Physics Department, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Southern Federal University», Rostov-on-Don

Кабилов Юрий Вапшзович, к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики физического факультета ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону.
E-mail: uvkabirov@sfedu.ru

Kabirov Yurii Vagizovich, Ph.D., associate professor, associate professor of the Physics Department, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Southern Federal University», Rostov-on-Don.

Рудская Анжела Григорьевна, д.ф.-м.н., профессор кафедры «Нанотехнология» физического факультета ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону
E-mail: agrudskaya@sfedu.ru

Rudskaya Angela Grigorievna, Doctor of Physics and Mathematics, Professor of the Department of Nanotechnology, Physical Faculty, Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Southern Federal University», Rostov-on-Don

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 538.9

МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА-ВИСМУТА: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И ВОЗМОЖНЫЕ МЕХАНИЗМЫ

Волков Д.В., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Павленко А.В., Павелко А.А.

MAGNETORESISTANCE IN SOLID SOLUTIONS BASED ON LANTHANUM- BISMUTH MANGANITE: EXPERIMENTAL VALUES AND POSSIBLE MECHANISMS

Volkov D.V., Verbenko I.A., Shilkina L.A., Pavlenko A.V., Pavelko A.A.

В физике магнитоэлектрических явлений идет активный поиск материалов, в которых проявляется тесная взаимосвязь электрических и магнитных свойств. Одним из проявлений такой взаимосвязи является эффект гигантского магнетосопротивления (ГМС). ГМС может иметь под собой различную природу происхождения. В данной работе обсуждаются возможные причины возникновения ГМС в твердых растворах (ТР) на основе известного мультиферроика $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$ модифицированного оксидом железа Fe_2O_3 . Все объекты исследования получены двухстадийным твердофазным синтезом с последующим спеканием. Предварительные данные указывают на наличие в исследуемом материале значительного отрицательного магнетосопротивления (МС), величина которого зависит от концентрации используемого модификатора и технологии получения керамик.

Ключевые слова: магнетосопротивление, манганит лантана, магнетодиэлектрический эффект, мультиферроик.

Введение. Сложные оксиды на основе манганита лантана могут демонстрировать большой набор различных физических эффектов, таких как: эффект магнетосопротивления, орбитальное и зарядовое упорядочения, концентрационные и температурные переходы, антиферромагнетик-ферромагнетик. Изучение и объяснение этих свойств материалов, все еще является одним из приоритетных направлений физики конденсированного состояния. Одной из наиболее интересных, и в то же время не в полной степени изученной является бинарная система ТР $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_{3+\delta}$. К дискуссионным вопросам относится проблема объяснения их магнитных свойств и наблюдаемого в них магнетодиэлектрического эффекта. Наличие такого эффекта может быть тесно связано с сопутствующими явлениями такими как магнитоэлектрический эффект, Максвелл-Вагнеровская релаксация и МС. Оценка влияния последнего является одной из задач этого исследования.

Экспериментальная часть. В данной работе синтезированы ТР на основе $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$,

модифицированные стехиометрически оксидом Fe_2O_3 . Модификацию ТР проводили в соответствии с формулой $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ с шагом $x = 0.05, 0.1, 0.15$. Все объекты исследования получены двухстадийным твердофазным синтезом ($T_1=800^\circ\text{C}$, $t=10$ ч и $T_2=950^\circ\text{C}$, $t=10$ ч) с последующим спеканием ($T_{\text{сп}}=1020^\circ\text{C}$, $t=2,5$ ч). Фазовый состав и полноту синтеза контролировали при помощи рентгеновской дифракции на длине волны $\text{CoK}\alpha$, с помощью дифрактометра ДРОН-3. На каждой стадии технологического процесса проводилась поэтапная оптимизация условий получения ТР. Выбор в качестве модификатора оксида железа обусловлен строением его электронной оболочки, отличающимся от конфигурации магнитоактивных d-орбиталей Янн-Теллеровского катиона – Mn^{3+} . Увеличение содержания ионов железа может привести к появлению участков с более слабым сверхобменным взаимодействием и нарушениям магнитной симметрии объемного материала, что кроме снижения температуры Нееля, будет способствовать возникновению новых магнитных явлений, в том числе, связанных с магнетосопротивлением.

Магнетосопротивление. Измерения МС образцов проводили в немагнитной ячейке, помещенной между полюсами магнита в защитной камере. Камера заполняется жидким азотом и постепенно охлаждается, по мере испарения жидкий азот доливался в камеру. Ячейка состоит из держателя в виде керамической трубки диаметром 4 мм и высотой 300–400 мм с двумя полостями по всей длине и цилиндрической медной колбы. Образец располагается посередине между полюсами магнита, при этом электрическое и магнитные поля параллельны плоскости образца. К серебряным электродам образца были подведены соответствующие контакты, проходившие внутри керамической трубки и подключенные к Highresistancemeter Agilent 4339B. Измерения электрического сопротивления в отсутствие и в присутствии постоянной магнитной индукции $B = \mu_0 H = 0.86$ Т проводились на образцах

диаметром 11-12 мм и толщиной 1 мм при напряженности электрического поля $E = 1$ В/мм.

Рентгеноструктурный анализ.

Рентгенограммы представлены на рис. 1, структурные параметры приведены в табл. 1.

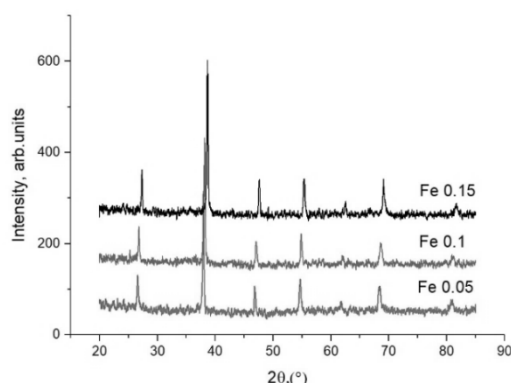


Рис. 1. Рентгенограмма $\text{TPLa}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$, после спекания при 1020°C в течение 2.5 часов, $\text{CoK}\alpha$

Таблица 1

Параметра, объем V ячейки плотности керамики: экспериментальная, $\rho_{\text{эксп}}$, рентгеновская, $\rho_{\text{рент}}$ и относительная, $\rho_{\text{отн}}$.

x	$a, \text{\AA}$	$V, \text{\AA}^3$	$\rho_{\text{эксп}}, \text{г/см}^3$	$\rho_{\text{рент}}, \text{г/см}^3$
0.05	3.907	59.66	6.53	7.70
0.10	3.906	59.61	6.49	7.71
0.15	3.905	59.55	6.47	7.72

Анализ данных рентгеновской дифракции показывает, что изученные в работе керамические образцы однофазны, практически беспримесны. При комнатной температуре наблюдается следующая последовательность фаз: при $x=0.05$ и $x=0.1$ – псевдокубическая, при $x=0.15$ – кубическая.

На рис. 2 представлены фрагменты микроструктуры скола исследуемых керамик ТР. Хорошо видно, что структура образцов пористая мелкозернистая с размером зерен ($6\div 17$) мкм. Зерна имеют форму многогранников, границы зерен преимущественно плоские, а при малых размерах зерен их топология близка к шаровидной. Размеры и форма зерен у границы пор и в объеме материала не имеют характерных отличий по форме и размеру (не наблюдается скопления более мелких зерен у границы пор). У всех образцов ТР, при используемых концентрациях модификатора, скол керамики проходит как по зерну, так и по объему зерна, что свидетельствует о схожей прочности самого зерна и межзеренной прослойкой. Средний диаметр зерен ($D_{\text{ср}}$) для концентрации $x=0.05$ $D_{\text{ср}} = 11,6$ мкм, $x=0.1$ $D_{\text{ср}} = 11,1$ мкм и $x=0.15$ $D_{\text{ср}} = 10,3$ мкм. Уменьшение $D_{\text{ср}}$ может свидетельствовать об изменении кинетики спекания, появлением дополнительных центров кристаллообразования и увеличением скорости зародышеобразования.

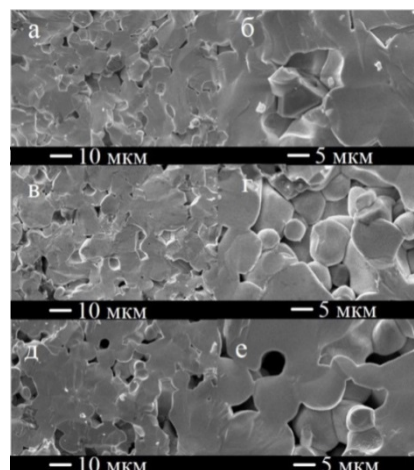


Рис. 2. Фрагменты микроструктур поверхностей керамик ТР состава $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ (а, б), $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}\text{O}_3$ (в, г), $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (д, е). Маркеры на фрагментах а, в, г – 10 мкм; б, д, е – 5 мкм

Результаты и обсуждение. В результате измерений были получены данные об электрическом сопротивлении образцов R в зависимости от индукции B магнитного поля. Для оценки МС значения R были пересчитаны в удельное сопротивление ρ и была построена зависимость $\Delta\rho/\rho$ от B , где $\Delta\rho = \rho(H) - \rho(0)$ – изменение сопротивления, $\rho = \rho(0)$ – значение сопротивления в отсутствии поля. Соответствующие зависимости представлены на рис. 3.

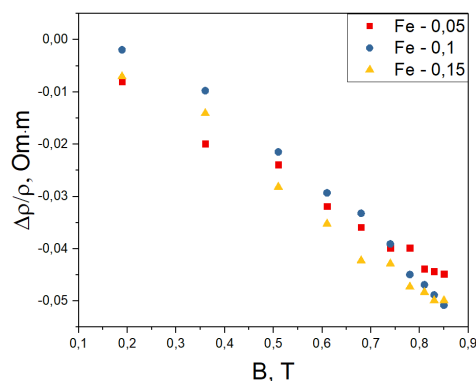


Рис. 3. Зависимость удельного сопротивления $\Delta\rho/\rho$ от индукции поля B при 80К

Как видно из рисунка, значения $\Delta\rho/\rho$ имеют отрицательный знак во всем интервале измерений, что свидетельствует о наличии в материале отрицательного МС, величина которого увеличивается с ростом содержания Fe^{3+} . Снижение ρ под действием поля $B=0,86$ Т составило: $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ (ρ)- 4,4%, $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}\text{O}_3$ (ρ)- 5,1%, $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{0.85}\text{Fe}_{0.15}\text{O}_3$ (ρ)- 5,3%. Величина МС позволяет предположить связь его природы с механизмом, подобным описанному для ГМС.

Выводы. В ходе работы установлена возможность получения ТР $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ по обычной керамической технологии, с использованием двухстадийного твердофазного

синтеза. Экспериментально определена величина отрицательного МС в ТР состава $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$, увеличивающаяся с ростом доли модификатора. Повышение содержания модификатора приводит к изменению кинетики спекания, сопровождающимся уменьшением среднего размера зёрен и ростом МС. Величина МС и характер его зависимости от строения керамики позволяет предположить связь его природы с механизмом подобным описанному для гигантского МС.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032), (БА30110/20-3-07ИФ) с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ физики Южного федерального университета.

Л и т е р а т у р а

1. Husain, Shahid & Bhat, Irshad & Khan, Wasi&Alkhtaby, Lila. Structural and dielectric properties of $\text{La}_{0.8}\text{Te}_{0.2}\text{MnO}_3$. Solid State Communications. 157. 29. (2013).
2. S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, L. H. Chen. Thousandfold Change in Resistivity in Magnetoresistive La-Ca-Mn-O Films. Science 264, 413, (1994)
3. R. Mahesh, R. Mahendiran, A. K. Raychaudhuri, and C. N. R. Rao, Giant magnetoresistance in bulk samples of $\text{La}_{1-x}\text{AxMnO}_3$ (A= Sr or Ca). J. Solid State Chem., 114, 297, (1995)
4. A. Seffar, J. Fontcuberta, B. Martlnez, J.L. Garcla-Mufioz, S. Pifiol, X. Obradors Giant magnetoresistance in ceramic perovskites La-L-Ca-MnO (L = Y,ad) J. of Magnetism and Magnetic Materials, 157/158, 260-261, (1996)
5. А.В. Павленко, А.В. Турик, Л.А. Резниченко, Л.А. Шилкина, Г.М. Константинов Магнитодielekтрический эффект в керамике $\text{Bi}_{1/2}\text{La}_{1/2}\text{MnO}_3$, Письма в ЖТФ, том 39, вып. 1, (2013)
6. Электронный транспорт и магнитная структура систем наноостровов из ферромагнитных материалов. Шерстнев И. А. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук. стр. 11-17. Москва (2014).

R e f e r e n c e s

1. Husain, Shahid & Bhat, Irshad & Khan, Wasi&Alkhtaby, Lila. Structural and dielectric properties of $\text{La}_{0.8}\text{Te}_{0.2}\text{MnO}_3$. Solid State Communications. 157. 29. (2013).
2. S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, L. H. Chen. Thousandfold Change in Resistivity in Magnetoresistive La-Ca-Mn-O Films. Science 264, 413, (1994)
3. R. Mahesh, R. Mahendiran, A. K. Raychaudhuri, and C. N. R. Rao, Giant magnetoresistance in bulk samples of $\text{La}_{1-x}\text{AxMnO}_3$ (A= Sr or Ca). J. Solid State Chem., 114, 297, (1995)
4. A. Seffar, J. Fontcuberta, B. Martlnez, J.L. Garcla-Mufioz, S. Pifiol, X. Obradors Giant magnetoresistance in ceramic perovskites La-L-Ca-MnO (L = Y,ad) J. of Magnetism and Magnetic Materials, 157/158, 260-261, (1996)
5. А.В. Павленко, А.В. Турик, Л.А. Резниченко, Л.А. Шилкина, Г.М. Константинов Магнитодielekтрический эффект в керамике $\text{Bi}_{1/2}\text{La}_{1/2}\text{MnO}_3$, Letters to ZhTF, vol. 39, no. 1, (2013)
6. Electronic transport and magnetic structure of nanoisland systems made of ferromagnetic materials. Sherstnev I.A. Specialty

04/01/07 - Condensed matter physics. Federal State Budgetary Institution of Science Physics Institute named after P.N. Lebedev of the Russian Academy of Sciences. pp. 11-17. Moscow (2014)

Volkov D.V., Verbenko I.A., Shilkina L.A.,
Pavlenko A.V., Pavelko A.A.

MAGNETORESISTANCE IN SOLID SOLUTIONS BASED ON LANTHANUM-BISMUTH MANGANITE: EXPERIMENTAL VALUES AND POSSIBLE MECHANISMS.

In the physics of magnetoelectric phenomena, there is an active search for materials in which a close relationship of electrical and magnetic properties is manifested. One of the manifestations of this relationship is the effect of giant magnetoresistance (GMR). GMR can have a different nature of origin. This paper discusses the possible reasons for the occurrence of GMR in solid solutions (SS) based on the well-known multiferroic $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$ modified with iron oxide Fe_2O_3 . All research objects were obtained by two-stage solid-phase synthesis followed by sintering. Preliminary data indicate the presence of a significant negative magnetoresistance (MR) in the material under study, the value of which depends on the concentration of the modifier used and the technology for producing ceramics.

Key words: magnetoresistance, lanthanum manganite, magnetodielectric effect, multiferroic

Волков Дмитрий Вячеславович, аспирант, Физический факультет «Южно-федеральный университет».
E-mail: werhider@yandex.ru

Volkov Dmitry Vyacheslavovich, postgraduate student, Faculty of Physics, SFU.

Шилкина Лидия Александровна, н.с., НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: lid-shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidia Aleksandrovna, researcher, Research Institute of Physics, SFU.

Вербенко Илья Александрович, д.ф.-м.н., директор НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: ilich001@yandex.ru

Verbenko Ilya Aleksandrovich, PhD, Director of the Research Institute of Physics, SFU.

Павленко Анатолий Владимирович, н.с. НИИ физики ЮФУ
E-mail: avpavlenko.@sfedu.ru

Pavlenko Anatoly Vladimirovich, researcher, Research Institute of Physics, SFU.

Павелко Алексей Александрович, в.н.с. НИИ физики «Южно-федеральный университет».

Pavelko Alexey, Leading researcher, Research Institute of Physics SFU.

Рецензент: Кривоколыско Сергей Геннадиевич, д.х.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 538.9

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И СВОЙСТВА КЕРАМИКИ (0.5-x)BiFeO₃-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-xPbTiO₃

Болдырев Н.А., Ситало Е.И., Шилкина Л.А., Назаренко А.В., Резниченко Л.А.

PHASE DIAGRAM AND PROPERTIES OF (0.5-x)BiFeO₃-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-xPbTiO₃ CERAMICS

Boldyrev N.A., Sitalo E.I., Shilkina L.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A.

Методом твердофазных реакций с последующим спеканием по обычной керамической технологии получены образцы керамики твердых растворов тройной системы (0.5-x)BiFeO₃-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-xPbTiO₃ (0.1 ≤ x ≤ 0.2, Δx = 0.025). При помощи рентгенографических исследований определен фазовый состав исследуемых объектов. Установлены закономерности формирования структурных и электрофизических свойств керамики. Исследование диэлектрических характеристик выявило поведение, характерное для сегнетоэлектриков-релаксоров, а также наличие устойчивого пьезоэлектрического отклика (до 260 пКл/Н) в ряде исследуемых образцов.

Ключевые слова: мультиферроики, твердые растворы, диэлектрические характеристики, фазовая диаграмма, микроструктура.

Введение. Мультиферроики с сосуществующим электрическим, магнитным или упругим упорядочением в настоящее время являются одними из наиболее интенсивно изучаемых объектов в материаловедении [1] из-за широкого спектра их возможных применений, включая производство датчиков переменного и постоянного магнитного поля, элементов памяти и устройств спинтроники [2-4]. Феррониобат свинца PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃ (PFN) - хорошо известный мультиферроик со структурой типа перовскита (общая химическая формула – A(B_{0.5}B'_{0.5})O₃) с размытым фазовым переходом из параэлектрической фазы (ПЭ) в сегнетоэлектрическую (СЭ) при T_C ~ 370 К. В PFN сосуществуют СЭ и антиферромагнитное (АФМ) упорядочение ниже T_N ~ 120–150 К, (T_N - температура Нееля) [5]. Еще одним перспективным мультиферроиком является феррит висмута BiFeO₃ (BFO) (T_C ~ 1103 К, T_N ~ 643 К), обладающий антиферромагнетным упорядочением G-типа [6]. Оба материала в настоящее время рассматриваются как основа для новых магнитоэлектрических структур. Однако их широкое применение ограничено рядом факторов. Для феррита висмута это сложность получения в однофазном состоянии и чрезвычайно высокое коэрцитивное поле (E_C), необходимое для переориентации сегнетоэлектрических доменов.

Кроме того, как PFN, так и BF характеризуются повышенной электропроводностью, обусловленной наличием в их структуре ионов переменной валентности (Fe²⁺/Fe³⁺) и кислородных вакансий. Тем не менее модифицирование [7, 8] или создание твердых растворов [9, 10] на основе BF или PFN позволяет стабилизировать структуру и улучшить характеристики получаемой керамики. Бинарные системы на основе мультиферроиков долгое время были предметом активного изучения, как, например, система (1-x)BiFeO₃-xPbTiO₃, которой до сих пор уделяется большое внимание. Введение титаната свинца PbTiO₃ (PT) стабилизирует фазу перовскита и формирует морфотропную область (МО) вблизи x ~ 0.3. В этой области система (1-x)BF-xPT демонстрирует достаточно высокие пьезоэлектрические характеристики, однако, при этом сохраняет высокую электропроводность. В связи с этим в последние годы значительное внимание уделяется получению новых мультиферроидных материалов путем создания твердых растворов более сложных тройных систем на основе BF и PT [11-16]. Одной из наиболее перспективных систем является тройная система (1-x-y)BF-yPFN-xPT, в которой, согласно литературным данным [16, 17] и нашим предварительным исследованиям [18], присутствует МО с сосуществующими ромбоэдрической (Рэ) и тетрагональной (Т) фазами. Как известно, материалы с МО могут демонстрировать экстремальные свойства и улучшенные электрофизические характеристики. Ранее было установлено [16], что в области фазовой диаграммы с высокой концентрацией PFN (0,25BF - 0,63PFN - 0,12PT) образцы этой системы проявляют относительно высокую пьезоактивность (до 350 пКл/Н) и демонстрируют высокие значения остаточной поляризации при относительно низком коэрцитивном поле. В связи с этим представляется целесообразным установить закономерности формирования структурных, диэлектрических и пьезоэлектрических характеристик образцов тройной системы (1-x-y)BF-yPFN-xPT в области

фазовой диаграммы с высоким содержанием PFN, что и стало целью данной работы.

Объекты. Методы исследования. Объектами исследования явились керамические образцы TP тройной системы $(0.5-x)\text{BiFeO}_3-0.5\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$ ($0.1 \leq x \leq 0.2$, $\Delta x = 0.10$). Образцы были получены путём двукратного твердофазного синтеза при $T_1 = 1093$ К ($\tau_1 = 10$ ч.), $T_2 = 1143$ К ($\tau_2 = 10$ ч.) с последующим спеканием при температуре при температурах, $T_{\text{сп.}}$, равных 1273 К и $\tau_{\text{сп.}} = 2$ ч. Исходными реагентами служили Bi_2O_3 , Fe_2O_3 , PbO , TiO_2 , Nb_2O_5 с содержанием основного вещества не менее 99.95 %. Образцы спекались в виде дисков $\varnothing = 10$ мм и $h = 1$ мм. После механической обработки на плоские поверхности дисков наносились электроды ступенчатым вжиганием серебросодержащей пасты: при 473 К в течение 20 мин, при 773 К в течение 30 мин и при 1073 К в течение 20 мин. Рентгенографическое исследование выполнено методом порошковой дифракции на дифрактометре ДРОН-3 (фокусировка по Брэггу-Брентано) с использованием $\text{Co}_{\text{K}\alpha}$ излучения. Температурные зависимости относительной комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*/\varepsilon_0 = \varepsilon'/\varepsilon_0 - i\varepsilon''/\varepsilon_0$ ($\varepsilon'/\varepsilon_0$ и $\varepsilon''/\varepsilon_0$ – действительная и мнимая части $\varepsilon^*/\varepsilon_0$, соответственно; ε_0 – электрическая постоянная) в интервале температур (300 ÷ 900) К и диапазоне частот $f = (25 \div 2 \cdot 10^6)$ Гц получали с помощью измерительного стенда на базе LCR - метра Agilent 4980A и установки для комплексного измерения диэлектрических свойств NovocontrolConcept 40. Измерения пьезоэлектрических коэффициентов проводились при помощи измерителя пьезохарактеристик YE2730Ad33 METER на частоте 110 Гц.

Результаты. Рентгенофазовый анализ показал, что все исследуемые твердые растворы кристаллизуются в структуре перовскита без посторонних фаз (рис. 1). В исходном твердом растворе с $x = 0$ (бинарная система 0.5BF-0.5PFN) присутствуют следы пирохлорной фазы, которая при введении PbTiO_3 исчезает.

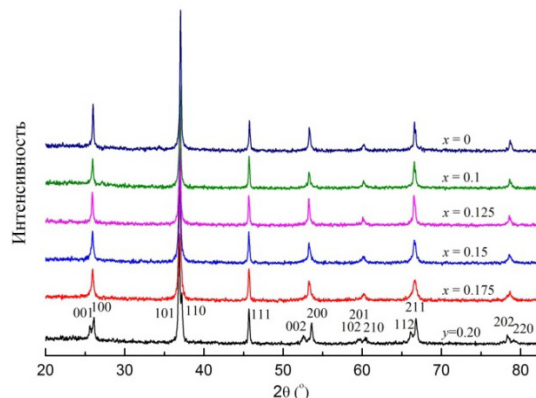


Рис. 1. Рентгенограммы твердых растворов $(0.5-x)\text{BiFeO}_3-0.5\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$

Можно отметить две особенности рентгенограмм твердых растворов: концентрация

диффузного рассеяния вблизи основных дифракционных пиков и раздвоение пика (200) в твердых растворах с $x = 0.10, 0.15, 0.175$. Первая особенность является признаком сегрегации атомов одного сорта, вторая может указывать на существование двух когерентно связанных фаз с одинаковой симметрией и очень близкими параметрами элементарной ячейки. Исходный твердый раствор 0.5BFO-0.5PFN имеет кубическую симметрию с параметрами элементарной ячейки $a = 3.992$ Å. На рентгенограмме этого твердого раствора рядом с дифракционным пиком 220 со стороны меньших углов 2θ присутствует побочный пик. Учитывая то, что остальные дифракционные пики этого твердого раствора одиночные, мы полагаем, что появление побочного пика не связано с понижением симметрии кристаллической решетки, а является следствием модуляции структуры волной плотности дефектов в направлении $\langle 110 \rangle$. В структуре перовскита, содержащей в B позиции ионы с переменной валентностью Nb и Ti, всегда присутствуют такие планарные дефекты, как плоскости кристаллографического сдвига (ПКС). При их упорядочении зачастую [20] происходит модуляция структуры в направлении перпендикулярном ПКС, в результате чего на рентгенограмме вблизи дифракционных пиков появляются сателлиты. На рис. 1 также видно, что профили дифракционных пиков твердых растворов с $y = 0.10, 0.15, 0.175$ сильно искажены диффузным рассеянием, при этом сами пики не расщепляются, за исключением пика (200), как отмечалось выше. В твердом растворе с $x = 0.20$ дифракционные пики расщепляются в соответствии с тетрагональным искажением элементарной ячейки, а размытый максимум между пиками 002 и 200 может говорить о присутствии в образце некоторого количества кубической фазы. Таким образом, фазовая диаграмма системы $(0.5-x)\text{BiFeO}_3-0.5\text{Pb}(\text{Fe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5})\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$ имеет следующий вид: кубическая фаза сохраняется в интервале $0.0 \leq x \leq 0.20$, тетрагональная фаза существует в интервале $0.15 < x \leq 0.20$, при $0.15 < x \leq 0.20$ эти фазы сосуществуют.

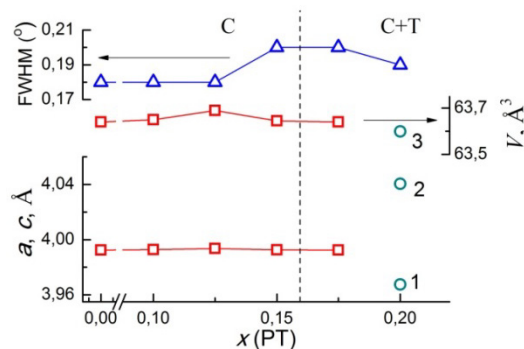


Рис. 2. Концентрационные зависимости параметров и объема кубической и тетрагональной: а - (1), с - (2), V - (3) элементарной ячейки и полуширины дифракционного пика 111, FWHM твердых растворов

На рис. 2 приведены зависимости параметров, объема элементарной ячейки и полуширины одиночного дифракционного пика (111) образцов от концентрации РТ. Изменения параметров и объема элементарной ячейки с увеличением y не происходит, как и ожидалось, так как ионные радиусы взаимозаменяемых ионов очень близки. Небольшое увеличение V при $x = 0.125$ не превышает ошибки измерения и может быть обусловлено меньшей дефектностью структуры этого твердого раствора по сравнению с остальными твердыми растворами тройной системы. Существенное увеличение полуширины дифракционного пика (111) при $x = 0.15$ и $x = 0.175$ однозначно связано с появлением кластеров тетрагональной фазы.

При помощи данных, полученных в данной работе и в [21], можно уточнить фазовую диаграмму системы, построенную ранее в [18] (рис. 3). Как видно из рисунка, фазовая диаграмма содержит две соседствующие МО, в одной из которых Рэ фаза заменена на кубическую (К).

На рис. 4 представлены микрофотографии сколов образцов исследуемой тройной системы. Микроструктура керамики с $x = 0.10$ умеренно неоднородная (рис. 4, а) и состоит, в основном, из крупных кристаллитов в форме выпуклых неправильных многогранников. Скол проходит как по межзеренной границе, так и по самим зернам, что говорит о том, что прочности зерен и зеренных

границ (или межкристаллитных прослоек) примерно равны. Размер кристаллитов, $\bar{D}$, варьируется от ~ 15 мкм до ~ 25 мкм. Также стоит отметить, что на микрофотографиях скола образца с $x = 0.10$ (и остальных образцов тоже) присутствуют более темные коричневые области.

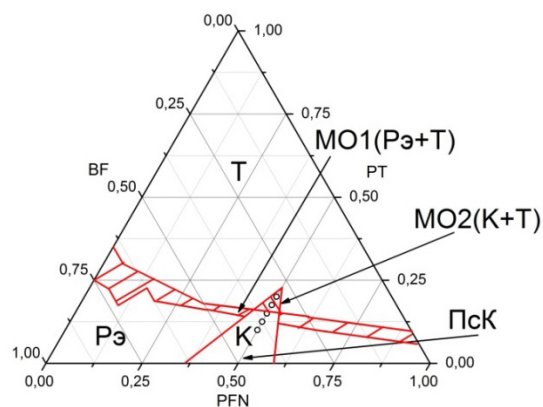


Рис. 3. Фазовая диаграмма тройной системы BF-PFN-РТ с нанесенным исследовательским разрезом

Наличие данных включений является следствием флуктуаций состава в исследуемой керамике. Кластеры с тетрагональной симметрией, которые упоминались в обсуждении данных РФА, скорее всего, локализуются именно в этих областях и довольно сильно влияют на свойства образцов.

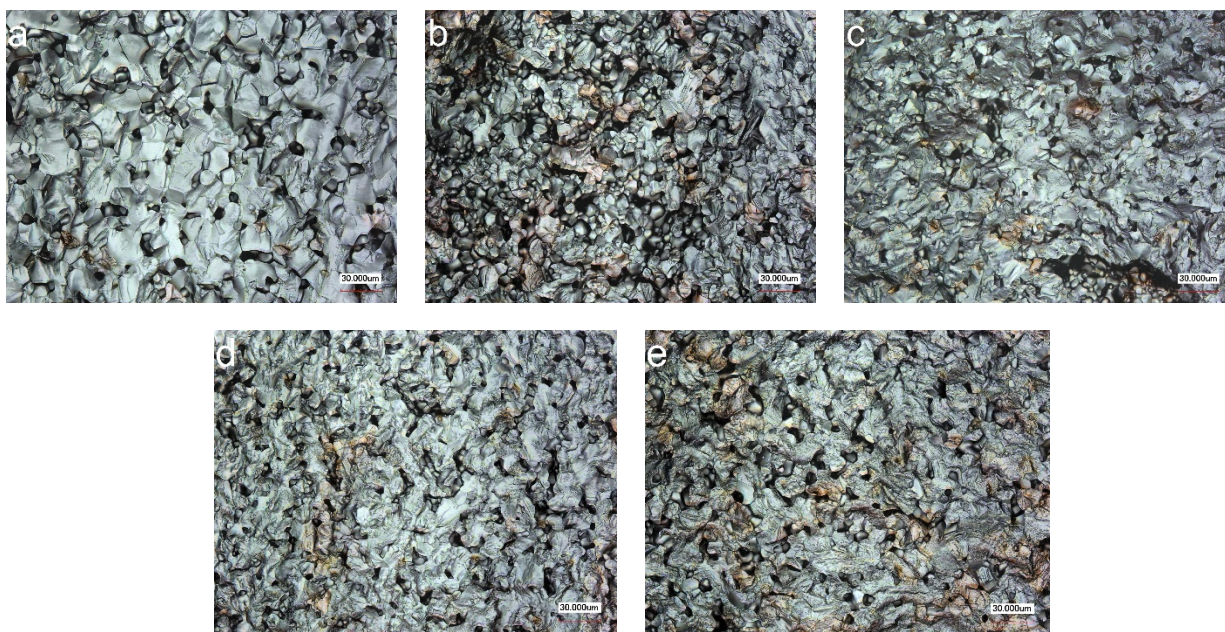


Рис. 4. Микрофотографии сколов исследуемых керамик
(а – $x = 0.10$, б – $x = 0.125$, в – $x = 0.15$, д – $x = 0.175$, е – $x = 0.20$)

При увеличении концентрации РТ средний размер зерен резко уменьшается до 10 мкм (рис. 4, б), а коричневых областей становится больше. Скол проходит по межзеренным пространствам, что говорит о более высокой, по сравнению с границами

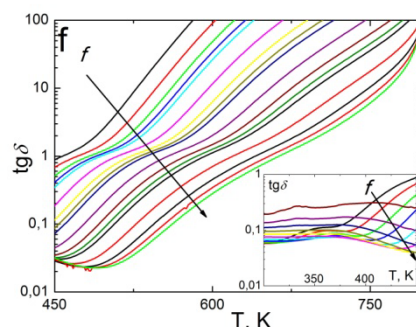
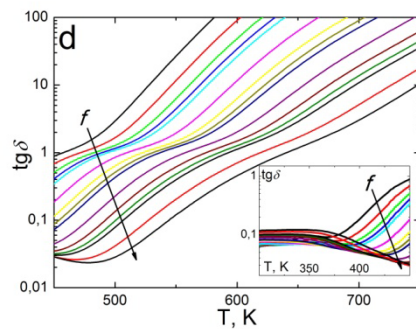
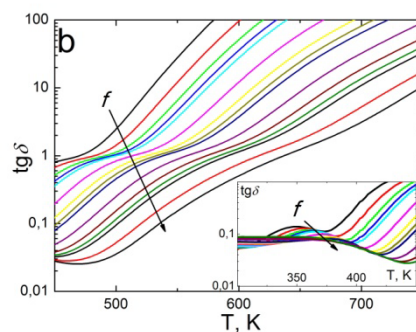
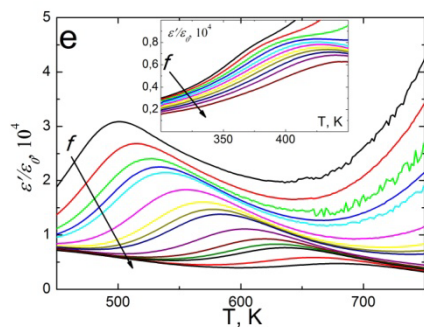
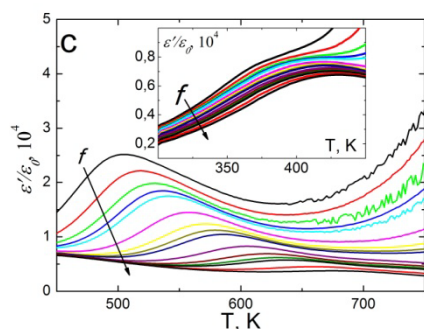
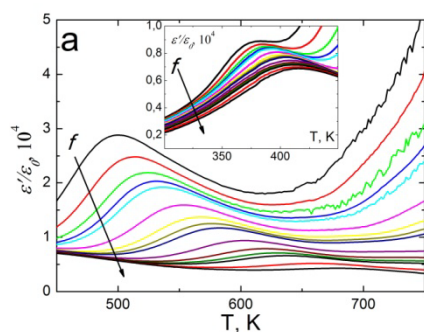
и межкристаллитными прослойками, прочности зерен. Также стоит отметить, что на микрофотографиях образца с $x = 0.125$ появляются плавни и межкристаллитные прослойки, которые, скорее всего, являются продуктом изменения

характера спекания. В данном случае спекание с участием жидкой фазы (ЖФ) заменяет обычное твердофазное. Источником ЖФ являются легкоплавкие Вi-содержащие соединения эвтектического происхождения, образующиеся в процессе синтеза и спекания керамики, либо относительно легкоплавкий оксид свинца с температурой плавления 838 °С (в композиции $0,5\text{PbO} - 0,5\text{TiO}_2$ [22]). В пользу второго свидетельствует тот факт, что при дальнейшем увеличении концентрации РТ количество плавней увеличивается.

Дальнейшее обогащение ТР титанатом свинца ($0.15 \leq x \leq 0.20$) приводит к уменьшению размеров зёрен всех типов увеличению количества плавней и некоторому упрочнению керамики (рис. 4, с-е). При этом хорошо видно, что при исследовании микроstructures скол проходит уже не по границам зёрен, а опять по самому зерну, обнажая его внутреннюю структуру. Измельчение зёрен может быть связано и с повышенной неоднородностью кристаллической структуры, стимулирующей рекристаллизационные процессы с одновременным образованием многих центров первичной

рекристаллизации пониженной массовости. Кроме того, близость фазового перехода в более “жесткую”, чем кубическая, нецентросимметричную тетрагональную фазу по мере увеличения содержания PbTiO_3 в системе (рис. 2) также может способствовать измельчению зёрен в силу существующей обратной зависимости $\bar{D}$ от спонтанной деформации кристаллической ячейки [23].

Отметим немаловажный факт присутствия в составе керамик ионов переменной валентности ($\text{Ti}^{4+}, \text{Ti}^{3+}$), оказывающих влияние на формирование микроstructures следующим образом. В процессе синтеза и последующего спекания керамик возможно восстановление $\text{Ti}^{4+} \rightarrow \text{Ti}^{3+}$ при 550 °С с образованием кислородных вакансий ($\square$) по схеме $\text{PbTi}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_{3-x/2}\square_{x/2}$. Поскольку вакансии связаны с формульными ионами кулоновским взаимодействием, вследствие которого происходит их адсорбция границами кристаллитов, это замедляет рост последних и увеличивает протяженность межкристаллитных границ.



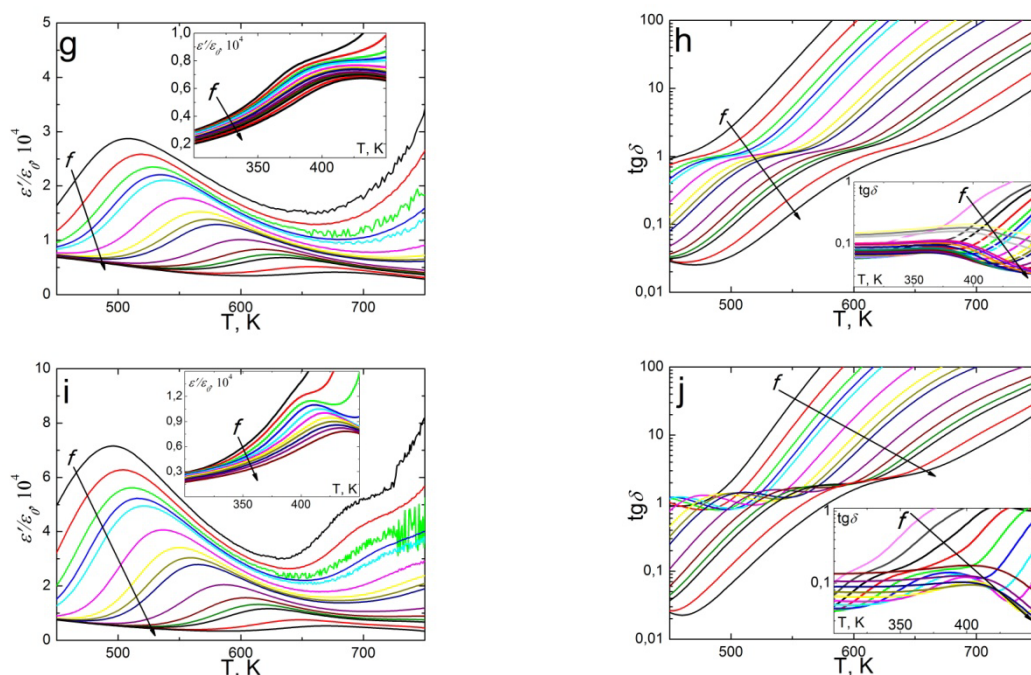


Рис. 5. Температурные зависимости $\varepsilon'/\varepsilon_0$ и $\text{tg } \delta$ исследованных керамик (а, б – $x = 0.10$, с, д – $x = 0.125$, е, ф – $x = 0.15$, г, h – $x = 0.175$, и, j – $x = 0.20$)

На температурных зависимостях $\varepsilon'/\varepsilon_0$ присутствуют два максимума (рис. 5, а,с,е,г,и). В температурном интервале (385÷435) К на малых частотах наблюдается формирование «горба», который потом трансформируется в первый сильно размытый максимум при увеличении f на частоте 10 Гц ($x = 0.10$), 250 Гц ($0.125 \leq x \leq 0.175$) и 100 Гц ($x = 0.20$). Второй еще более размытый максимум формируется в интервале (500÷700) К. Во всех образцах и первый, и второй максимумы, T_{m1} и T_{m2} , сдвигаются в область более высоких температур по мере увеличения f , при этом степень размытия и значения диэлектрической проницаемости в точке максимума у второго значительно выше.

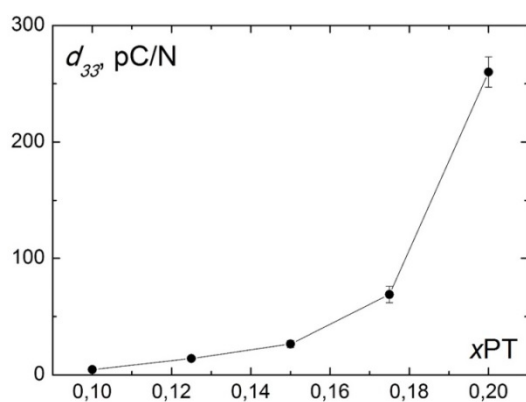


Рис. 6. Зависимость пьезомодуля d_{33} от концентрации РТ

В рамках исследования также были проведены работы по созданию в исследуемых керамиках поляризованного состояния с использованием метода «горячей» поляризации. У ряда образцов

удалось зафиксировать высокие и стабильные по времени пьезоотклики (рис. 6). Максимальные значения пьезомодуля наблюдались в образце 0.3BF-0.5PFN-0.2PT (~260 пКл/Н).

Данные исследования пиротока в исследуемых объектах показали, что при нагреве пиросигнал в образцах пропадал в районе ~430 К. Это говорит о том, что первый максимум на зависимостях $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$ скорее всего, связан с фазовым переходом из сегнетоэлектрической в параэлектрическую фазу, который происходит в кластерах Т фазы (в объектах с $0.10 \leq x \leq 0.15$) и в морфотропной области ($x = 0.175, 0.20$). Второй максимум на зависимостях $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$ связан с эффектами Максвелл-Вагнеровской поляризации и релаксацией носителей зарядов на межзеренных границах. Размытие СЭ→ПЭ перехода может быть следствием усиления кристаллохимического беспорядка из-за встраивания ионов металлов переменной валентности (Fe, Ti) в кристаллическую структуру базового соединения (PFN) и возможности их расселения в нерегулярных позициях и межкристаллитных прослойках.

Выводы. Методом твердофазных реакций с последующим спеканием по обычной керамической технологии получены образцы керамики твердых растворов тройной системы $(0.5-x)\text{BiFeO}_3-0.5\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$ ($0.1 \leq x \leq 0.2$, $\Delta x = 0.025$). При помощи рентгенографических исследований установлено, что при $0.10 \leq x \leq 0.15$ объекты имеют кубическую кристаллическую структуру, содержащую сегрегации (кластеры) с тетрагональной симметрией кристаллической решетки, а при $x = 0.175, 0.20$ структура

формируется морфотропная область с сосуществующими Т и К фазами. Местом их локализации, как показал анализ микроструктуры, являются темные коричневые области на поверхности исследуемой керамики. Исследование диэлектрических характеристик выявило поведение, характерное для сегнетоэлектриков-релаксоров, а также наличие устойчивого пьезоэлектрического отклика в ряде исследуемых образцов. Размытый фазовый переход, которому соответствует первый максимум на зависимостях $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$, происходит в интервале (385–435) К в кластерах Т фазы ($0.10 \leq x \leq 0.15$), так и в тетрагональной части морфотропной области ($x = 0.175, 0.20$). Второй максимум на зависимостях $\varepsilon'/\varepsilon_0(T)$ связан с эффектами Максвелл-Вагнеровской поляризации и релаксацией носителей зарядов на межзеренных границах. У ряда образцов удалось зафиксировать высокие и стабильные по времени пьезоотклики. Максимальные значения пьезомодуля наблюдались в образце 0.3BF-0.5PFN-0.2PT (~260 пКл/Н) из морфотропной области. Полученные данные целесообразно использовать при разработке новых материалов на основе мультиферроиков

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание Минобрнауки России научный проект № 0852-2020-0032 по (ЮФУ № БАЗ0110/20-3-07ИФ).) с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ Физики Южного федерального университета и Центра коллективного пользования ЮНЦ РАН.

Л и т е р а т у р а

1. Пятакова.П., Звездин А.К. Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики // УФН 2012. Т.182. РР. 593–620.
2. J. Zhai, Z. Xing, S. Dong, J. Li, D. Viehland, Detection of pico-Tesla magnetic fields using magnetoelectric sensors at room temperature, Appl. Phys. Lett., 88, 062510 (2006).
3. S. Tehrani, J. M. Slaughter, M. Deherrera, B. N. Engel, N. D. Rizzo, J. John Salter, M. Durlam, R.W. Dave, J. Janesky, B. Butcher, K. Smith, G. Grynkewich, Magnetoresistive random access memory using magnetic tunnel junctions, Proceedings of the IEEE, 91(5), pp. 703-72. (2003).
4. W.A.Borders, H. Akima, S. Fukami, S. Moriya, S. Kurihara, Y. Horio, S. Sato, H. Ohno, Analogue spin-orbit torque device for artificial-neural-network-based associative memory operation, Applied Physics Express, 10(1), 013007, (2008).
5. Yu. N. Venevtsev, V. V. Gagulin, and V. N. Lyubimov, Ferroelectromagnets (Nauka, Moscow, 1982).
6. A. M. Kadomtseva, Yu. F. Popov, A. P. Pyatakov, G. P. Vorob'ev, A. K. Zvezdin, and D. Viehland, Phase transitions in multiferroic BiFeO₃ crystals, thin-layers, and ceramics: enduring potential for a single phase, room-temperature magnetoelectric 'holy grail' Phase Trans. 79(12), pp. 1019 (2006).
7. S.V. Khasbulatov, A.A. Pavelko, L.A. Shilkina, L.A. Reznichenko, G.G. Gadjeiev, A.G. Bakmaev, M.-R.M.Magomedov, Z.M. Omarov, V.A. Aleshin, Phase composition, microstructure, and thermophysical and dielectric properties of multiferroic Bi_{1-x}DyxFeO₃, Thermophysics and Aeromechanics 23(3) pp. 445-450, (2016).
8. Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Reznichenko, L.A., Verbenko, I.A., Konstantinov, G.M., Shilkina, L.A., Effect of lithium carbonate on the ferroelectric properties of lead ferroniobate ceramics Inorganic Materials, 52 (1), pp. 76-82, (2016).
9. Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Shilkina, L.A., Reznichenko, L.A., Miller, A.I. Structure and dielectric characteristics of (1 - x)BiFeO₃-xPbTiO₃ solid solutions Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 80(6), pp. 733–735, (2016).
10. J. Zhuang, L.-W. Su, H. Wu, A.A. Bokov, M. Liu, W. Ren, Z.-G. Ye, Coexisting ferroelectric and magnetic morphotropic phase boundaries in Dy-modified BiFeO₃-PbTiO₃ multiferroics, Applied Physics Letters, 107(18), 182906, (2015).
11. J. Zhuang, J. Zhao, L.-W. Su, H. Wu, A.A. Bokov, W. Ren, Z.-G. Ye, Structure and local polar domains of Dy-modified BiFeO₃-PbTiO₃ multiferroic solid solutions, Journal of Materials Chemistry C, 3(48), pp. 12450-12456, (2015).
12. Q. Lin, C. He, X. Long, Structural, electric and magnetic properties of BiFeO₃-Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃ ternary ceramics, J. Electroceram., 36 pp. 8–15, (2016).
13. A. Ahlawat, S. Satapathy, R.J. Choudhary, M.K. Singh, P.K. Gupta, Observation of magnetoelectric coupling in BiFeO₃-(Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃) composites, Mater. Lett., 181, pp. 123–126, (2016).
14. J. J. Abhilash, S. Goel, A. Hussain, B. Kumar, Ferro-/pyroelectric response of 0.57BF-0.31PMN-0.12PT ternary ceramic faraway from morphotropic phase boundaries, Ceramics International 43(18) pp. 16676-16683, (2017).
15. W. Hu, X. Tan, K. Rajan, Piezoelectric ceramics with compositions at the morpho-tropic phase boundary in the BiFeO₃-PbZrO₃-PbTiO₃ ternary system, J. Am. Ceram. Soc., 94 pp. 4358–4363. (2011).
16. D. Pang, C. He, S. Han, S. Pan, X. Long, H. Tailor, A new multiferroic ternary solid solution system of BiFeO₃-Pb(Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃, J. Eur. Ceram. Soc. 35 pp. 2033–2040, (2015).
17. D. Pang, C. He, X. Long Ferroelectric and antiferromagnetic properties of a ternary multiferroic BiFeO₃-Pb(Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃ single crystal, Ceramics International, 42(16), pp. 19433-19436, (2016).
18. Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Shilkina, L.A., Nazarenko, A.V., Bokov, A.A., Reznichenko, L.A., Rudskaya, A.G., Panchenko, E.I. Structure, microstructure, dielectric and piezoelectric properties of (1-x-y)BiFeO₃-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-yPbTiO₃ ceramics, Ceramics International, 45(12), pp. 14768-14774, (2019).
19. Guinier A. X-ray diffraction of crystals. (M.: Publishing house of physics and mathematics. literature, 1961)
20. L. A. Reznichenko, L. A. Shilkina, E. S. Gagarina, Yu. I. Yuzyuk, O. N. Razumovskaya, and A. V. Kozinkin, Crystallographic Shear in Niobium Oxides of Different Compositions, Crystallogr. Rep. 49, (5) pp. 820–827, (2004).
21. L.A. Shilkina, A.V. Pavlenko, L.A. Reznichenko, I.A. Verbenko, 2016, Phase diagram of the system of (1-x)BiFeO₃-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃ solid solutions at room temperature, Crystallogr. Rep., 61(2), pp. 262–269, (2016).
22. Jaffe B., Cook Jr., W. R and Jaffe H. Piezoelectric Ceramics (Academic Press. London and New York. 1971)/
23. Dantsiger A.Ya., Reznichenko L.A., Dudkina S.I.,

Razumovskaya O.N., Shilkina S.I. Correlation between the microstructure of ferroelectric ceramics and their chemical and phase composition, the degree of perfection of the crystal structure and the preparation conditions, *Ferroelectrics*, 214(1), pp. 255-259, (1998).

References

- Pyatakov A.P., Zvezdin A.K. Magnetoelectric and multiferroic media // *Phys. Usp.* 2012.V.55 . PP. 557–581.
- J. Zhai, Z. Xing, S. Dong, J. Li, D. Viehland, Detection of pico-Tesla magnetic fields using magnetoelectric sensors at room temperature, *Appl. Phys. Lett.*, 88, 062510 (2006).
- S. Tehrani, J. M. Slaughter, M. Deherrera, B. N. Engel, N. D. Rizzo, J. John Salter, M. Durlam, R.W. Dave, J. Janesky, B. Butcher, K. Smith, G. Grynkewich, Magnetoresistive random access memory using magnetic tunnel junctions, *Proceedings of the IEEE*, 91(5), pp. 703-72. (2003).
- W.A.Borders, H. Akima, S. Fukami, S. Moriya, S. Kurihara, Y. Horio, S. Sato, H. Ohno, Analogue spin-orbit torque device for artificial-neural-network-based associative memory operation, *Applied Physics Express*, 10(1), 013007, (2008).
- Yu. N. Venevtsev, V. V. Gagulin, and V. N. Lyubimov, *Ferroelectromagnets* (Nauka, Moscow, 1982).
- A. M. Kadomtseva, Yu. F. Popov, A. P. Pyatakov, G. P. Vorob'ev, A. K. Zvezdin, and D. Viehland, Phase transitions in multiferroic BiFeO₃ crystals, thin-layers, and ceramics: enduring potential for a single phase, room-temperature magnetoelectric 'holy grail' *Phase Trans.* 79(12), pp. 1019 (2006).
- S.V. Khasbulatov, A.A. Pavelko, L.A. Shilkina, L.A. Reznichenko, G.G. Gadjeiev, A.G. Bakmaev, M.-R.M. Magomedov, Z.M. Omarov, V.A. Aleshin, Phase composition, microstructure, and thermophysical and dielectric properties of multiferroic Bi_{1-x}Dy_xFeO₃, *Thermophysics and Aeromechanics* 23(3) pp. 445-450, (2016).
- Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Reznichenko, L.A., Verbenko, I.A., Konstantinov, G.M., Shilkina, L.A., Effect of lithium carbonate on the ferroelectric properties of lead ferroniobate ceramics *Inorganic Materials*, 52 (1), pp. 76-82, (2016).
- Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Shilkina, L.A., Reznichenko, L.A., Miller, A.I. Structure and dielectric characteristics of (1 - x)BiFeO₃-xPbTiO₃ solid solutions *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 80(6), pp. 733–735, (2016).
- J. Zhuang, L.-W. Su, H. Wu, A.A. Bokov, M. Liu, W. Ren, Z.-G. Ye, Coexisting ferroelectric and magnetic morphotropic phase boundaries in Dy-modified BiFeO₃-PbTiO₃ multiferroics, *Applied Physics Letters*, 107(18), 182906, (2015).
- J. Zhuang, J. Zhao, L.-W. Su, H. Wu, A.A. Bokov, W. Ren, Z.-G. Ye, Structure and local polar domains of Dy-modified BiFeO₃-PbTiO₃ multiferroic solid solutions, *Journal of Materials Chemistry C*, 3(48), pp. 12450-12456, (2015).
- Q. Lin, C. He, X. Long, Structural, electric and magnetic properties of BiFeO₃-Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃ ternary ceramics, *J. Electroceram.*, 36 pp. 8–15, (2016).
- A. Ahlawat, S. Satapathy, R.J. Choudhary, M.K. Singh, P.K. Gupta, Observation of magnetoelectric coupling in BiFeO₃-(Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃) composites, *Mater. Lett.*, 181, pp. 123–126, (2016).
- J. J. Abhilash, S. Goel, A. Hussain, B. Kumar, Ferro-/pyroelectric response of 0.57BF-0.31PMN-0.12PT ternary ceramic faraway from morphotropic phase boundaries, *Ceramics International* 43(18) pp. 16676-16683, (2017).
- W. Hu, X. Tan, K. Rajan, Piezoelectric ceramics with compositions at the morpho-tropic phase boundary in the BiFeO₃-PbZrO₃-PbTiO₃ ternary system, *J. Am. Ceram. Soc.*, 94 pp. 4358–4363. (2011).
- D. Pang, C. He, S. Han, S. Pan, X. Long, H. Tailor, A new multiferroic ternary solid solution system of BiFeO₃-Pb(Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃, *J. Eur. Ceram. Soc.* 35 pp. 2033–2040, (2015).
- D. Pang, C. He, X. Long Ferroelectric and antiferromagnetic properties of a ternary multiferroic BiFeO₃-Pb(Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃ single crystal, *Ceramics International*, 42(16), pp. 19433-19436, (2016).
- Boldyrev, N.A., Pavlenko, A.V., Shilkina, L.A., Nazarenko, A.V., Bokov, A.A., Reznichenko, L.A., Rudskaya, A.G., Panchenko, E.I. Structure, microstructure, dielectric and piezoelectric properties of (1-x-y)BiFeO₃-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-yPbTiO₃ ceramics, *Ceramics International*, 45(12), pp. 14768-14774, (2019).
- Guinier A. X-ray diffraction of crystals. (M.: Publishing house of physics and mathematics. literature, 1961)
- L. A. Reznichenko, L. A. Shilkina, E. S. Gagarina, Yu. I. Yuz'yuk, O. N. Razumovskaya, and A. V. Kozinkin, Crystallographic Shear in Niobium Oxides of Different Compositions, *Crystallogr. Rep.* 49, (5) pp. 820–827, (2004).
- L.A. Shilkina, A.V. Pavlenko, L.A. Reznichenko, I.A. Verbenko, 2016, Phase diagram of the system of (1-x)BiFeO₃-xPbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃ solid solutions at room temperature, *Crystallogr. Rep.*, 61(2), pp. 262–269, (2016).
- Jaffe B., Cook Jr., W. R and Jaffe H. *Piezoelectric Ceramics* (Academic Press. London and New York. 1971)/
- Dantsiger A.Ya., Reznichenko L.A., Dudkina S.I., Razumovskaya O.N., Shilkina S.I. Correlation between the microstructure of ferroelectric ceramics and their chemical and phase composition, the degree of perfection of the crystal structure and the preparation conditions, *Ferroelectrics*, 214(1), pp. 255-259, (1998).

Boldyrev N.A., Sitalo E.I., Shilkina L.A., Nazarenko A.V., Reznichenko L.A.

PHASE DIAGRAM AND PROPERTIES OF (0.5-x)BiFeO₃-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-xPbTiO₃ CERAMICS

Ceramics of quasi-binary concentration section (0.1 ≤ x ≤ 0.2, Δx = 0.025) of the ternary solid solution system (0.5-x)BiFeO₃-0.5PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O₃-xPbTiO₃ were prepared by the conventional solid-phase reaction method. By using x-ray diffraction technique, the phase diagram of the system was constructed, which was shown to contain the regions of cubic and tetragonal symmetry and the morphotropic phase boundary between them. Grain morphology, dielectric and piezoelectric properties of the selected solid solutions were investigated. The highest piezoelectric coefficient d₃₃ = 260 pC/N was obtained. Dielectric characteristics of ceramics revealed ferroelectric relaxor behavior, a region of diffuse phase transition from the paraelectric to ferroelectric phase in the temperature range of 350 - 500 K.

Key words: multiferroics, solid solutions, dielectric properties, phase diagram, microstructure.

Болдырев Никита Анатольевич, с.н.с., НИИ физики «Южно-федеральный университет».
E-mai: lnboldyrev@sfedu.ru

Boldyrev Nikita Anatolievich, senior researcher, Research Institute of Physics, Southern Federal University.

Ситало Евгений Иванович, н.с., НИИ физики
«Южно-федеральный университет».
E-mail: sitalo@sfedu.ru

Sitalo Evgeny Ivanovich, researcher, Research Institute
of Physics, Southern Federal University.

Шилкина Лидия Александровна, н.с., НИИ
физики «Южно-федеральный университет».
E-mail: lid-shilkina@yandex.ru

Shilkina Lidia Aleksandrovna, researcher, Research
Institute of Physics, Southern Federal University.

Назаренко Александр Владимирович, к.ф.-м.н.,
Лаборатория механики активных материалов, ФГБУН
"Федеральный исследовательский центр Южный научный
центр Российской академии наук".
E-mail: avnazarenko1@gmail.com

Nazarenko Alexandr, Canditate of Physics and
Mathematics, Mechanics of Active Materials Laboratory, SSC
RAS.

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., зав.
ОИМНТ, НИИ физики «Южно-федеральный
университет».
E-mail: lareznichenko@sfedu.ru

Reznichenko Larisa Andreevna, Doctor of Physical
and Mathematical Sciences, Head. Department of Intellectual
Materials and Nanotechnology, Research Institute of Physics,
Southern Federal University.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н.,
проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный
университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 539.2.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛОВ Ne И Ar ПОД ДАВЛЕНИЕМ**Горбенко Е.Е., Пилипенко Е.А., Ткачева А.О.****EQUATION OF STATE Ne AND Ar CRYSTALS UNDER PRESSURE****Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Tkacheva A.O.**

Исследуются неэмпирические уравнения состояния сжатых кристаллов неона и аргона на основе адиабатического потенциала. Парный и трёхчастичный короткодействующие потенциалы отталкивания рассчитаны методом Хартри-Фока в базисе локализованных функций с точной ортогонализацией их друг к другу и не содержат экспериментально определяемых параметров. Проведено сравнение теории с экспериментом и результатами расчётов других авторов. Анализ предложенных уравнений состояния при больших сжатиях показал важность учёта трёхчастичного взаимодействия и слагаемых с высшими степенями по интегралу перекрытия в сжатом неоне.

Ключевые слова: кристаллы инертных газов, многочастичное короткодействующее взаимодействие, деформация электронных оболочек, уравнение состояния, приближение Хартри-Фока, высокое давление.

Введение. Ne и Ar относятся к лёгким кристаллам инертных газов (КИГ) и являются простейшими молекулярными кристаллами, поэтому их часто используют в качестве модельных объектов для изучения ряда фундаментальных проблем физики твёрдого тела, относящихся к динамике решетки, многоэлектронным эффектам, фазовым превращениям, наук о Земле и планетах, а также для разработки и усовершенствования новых расчетных методов.

Особое внимание привлекает исследование упругих свойств сжатых КИГ, поскольку они применяются в качестве передаточных сред в ячейках алмазных наковален (diamond-anvil cell – DAC). Давление создаваемое в DAC составляет 300 GPa [1] и продолжает увеличиваться, поэтому изучение при высоких давлениях свойств лёгких КИГ представляет научный и практический интерес.

Для анализа данных по состоянию кристалла, подвергнутому большому сжатию необходимо разработать общее уравнение состояния (equation of state – EOS), связывающее конечные деформации кристалла с внешними напряжениями.

При комнатной температуре уравнение состояния кристаллического Ne экспериментально изучалось с использованием техники DAC в работах [2] до $p = 14.4$ GPa, в [3] до $p = 110$ GPa, в [4] до $p = 208$ GPa. В 2010 г. вышла работа [5], в которой

были проведены исследования структуры и уравнения состояния Ne под давлением до 237 GPa.

Теоретические описания изотерм в широкой области давлений основываются на полуэмпирических уравнениях состояния с параметрами, определяемыми при нормальном давлении [6–14]. Наиболее успешным считается уравнение состояния Винета [7] для которого необходимо знание четырёх параметров: 1) изотермического объёмного модуля при нулевом давлении, 2) его производной по давлению, 3) объёма при $p = 0$ и 4) термического расширения при $p = 0$. Надежность этих уравнений ограничена тем давлением, до которого справедливы использованные при их выводе экспериментальные величины и соотношения. В области давлений, пока не доступных эксперименту, предсказательную ценность будут иметь первопринципные EOS.

Ab initio расчеты уравнения состояния КИГ на основе теории функционала плотности (density functional theory – DFT) в приближении локальной плотности (local density approximation – LDA) или обобщенного градиентного приближения (generalized gradient approximation – GGA) для обменно-корреляционного потенциала дают результаты, близкие к эксперименту [15–18]. Причем результаты DFT – LDA лежат несколько ниже экспериментальных данных, а результаты DFT – GGA, наоборот, завышены [18]. Однако, как показано в [16], метод QMC (quantum Monte Carlo method) обеспечивает адекватное описание взаимодействия Ван-дер-Ваальса и EOS, рассчитанное этим методом, хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

В работе [19] на основе расчетов из первых принципов адиабатического потенциала получено неэмпирическое уравнение состояния. Энергия парного короткодействующего потенциала отталкивания была рассчитана в приближении Хартри-Фока в базисе локализованных функций с точной ортогонализацией их друг к другу и кластерным разложением для ортогонализующей матрицы. Такой способ вычисления ортогонализующей матрицы достигается суммированием определенных

подпоследовательностей ряда по S . Это позволяет снять ограничение $S \ll 1$ и получить EOS и другие характеристики кристаллов при относительных сжатиях $u = \Delta V / V_0$ ($\Delta V = V_0 - V(p)$, $V_0 = V$ при $p = 0$), близких к единице.

Общая форма уравнения состояния. Под уравнением состояния тела в самом общем случае будем понимать связь между тензорами напряжений t_{ij} и дисторсии u_{ij} при заданной температуре (или энтропии, см., например, [20] с. 25–27)

$$t_{ij}(x) = \rho(x) \left[\frac{\partial F(T, x')}{\partial u'_{ij}} \right]_{T, u'=0}, \quad (1)$$

где $\rho(x)$ – плотность вещества в произвольном напряженном состоянии $\{x\}$, $F(T, x')$ – свободная энергия единицы массы при температуре T в состоянии $\{x'\}$, бесконечно мало отличающемся от $\{x\}$.

Свободная энергия $F(x)$ является функцией тензора дисторсии $F(T, x) = F(T, X, u_{ij})$, описывающего переход от начального состояния $\{X\}$ к состоянию $\{x\}$. В общем случае в любой микроскопической модели свободная энергия является функцией объема элементарной ячейки Ω и векторов прямой ($\mathbf{R}$) и обратной ($\mathbf{g}$) решеток $F(T, x) = F(\Omega, \mathbf{R}, \mathbf{g})$. Уравнение состояния (1) приобретает форму

$$\Omega \frac{\partial F}{\partial \Omega} - \sum_{\mathbf{g}} g_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial g_{\alpha}} + \sum_{\mathbf{R}} R_{\alpha} \frac{\partial F}{\partial R_{\alpha}} = \Omega t_{\alpha\alpha}. \quad (2)$$

Для кристаллов с ГПУ- (или ГЦК)-структурой свободная энергия зависит только от двух параметров: объема ячейки Ω и отношения c/a , и уравнение состояния принимает вид

$$p = - \frac{\partial F(T, \Omega, c/a)}{\partial \Omega}, \quad \frac{\partial F(T, \Omega, c/a)}{\partial (c/a)} = 0. \quad (3)$$

Для кубического кристалла $c/a \equiv 1$, и второе уравнение в (3) обращается в тождество. Выведем уравнение состояния $p(u)$ при $T = 0$, пригодное при больших гидростатических сжатиях. Выражение для энергии кристалла U получим в виде (детали расчета см. в работах [21,22])

$$U = \min \bar{H} = \text{const} + \left\{ \frac{(\mathbf{P}')^2}{2\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{2\beta_{44}} (Q'_{\alpha\beta})^2 + \mathbf{P}' \cdot \mathbf{P}' + \right. \\ \left. + \sum_l \left\{ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D'_{\alpha\beta} Q'_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \sum_{l'} \left[\frac{C}{|\mathbf{r}^{ll'}|^6} + \frac{C'}{|\mathbf{r}^{ll'}|^8} + \frac{C''}{|\mathbf{r}^{ll'}|^{10}} \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} \sum_{l'} K(\mathbf{P}', Q'_{\alpha\beta}, \mathbf{P}'', Q'_{\alpha\beta}) + \frac{1}{2} \sum_{l'}^{n.n.} U_{sr}(|\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}|) \right\} \right\}. \quad (4)$$

В этом выражении $\mathbf{P}^l$ и $Q'_{\alpha\beta}$ – индуцированные движением ядер дипольный и квадрупольный моменты атома в узле $\mathbf{l}$. Первые четыре члена описывают деформацию электронных оболочек (α и

β_{44} – коэффициенты дипольной и квадрупольной поляризуемостей). Следующие три члена дают силы Ван-дер-Ваальса. K – кулоновское взаимодействие всех диполей $\mathbf{P}^l$ и квадруполей $Q'_{\alpha\beta}$ между собой. Наконец, короткодействующие силы определены формулой

$$E_{sr} = \frac{1}{2} \sum_{l'}^{n.n.} U_{sr}(|\mathbf{r}^l - \mathbf{r}^{l'}|) = \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}_{sr}'' | 00 \rangle + \\ + \alpha(\mathbf{P}^l)^2 + \sum_{\alpha\beta}^9 \beta_{44} (D'_{\alpha\beta})^2 - 2 \left(\sum_i \frac{1}{\Delta_i} \sum_{l'} \langle 00 | \hat{H}_{sr}'' | i0 \rangle \right)^2, \quad (5)$$

$$\mathbf{P}^l = \frac{1}{\alpha} \sum_i \sum_{l'}^{n.n.} \frac{\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle \langle i0 | \hat{H}_{sr}'' | 00 \rangle}{E_i - E_0} + c.c.,$$

$$D'_{\alpha\beta} = \frac{1}{\beta_{44}} \sum_i \sum_{l'}^{n.n.} \frac{\langle 0 | \hat{Q}'_{\alpha\beta} | i \rangle \langle i0 | \hat{H}_{sr}'' | 00 \rangle}{E_i - E_0} + c.c.$$

Матричные элементы дипольных и квадрупольных моментов:

$$\langle 0 | \mathbf{P}^l | i \rangle = \int \psi_0^l \cdot \mathbf{P}^l \psi_i^l d\tau, \quad \langle 0 | \hat{Q}'_{\alpha\beta} | i \rangle = \int \psi_0^l \hat{Q}'_{\alpha\beta} \psi_i^l d\tau.$$

Многочастичное короткодействующее взаимодействие в приближении Хартри-Фока. Выражение для энергии кристалла, состоящего из нейтральных атомов, записанное в приближении Хартри-Фока через одноэлектронную матрицу плотности $\rho(\mathbf{r} | \mathbf{r}'; \{\mathbf{l}\})$, где $\mathbf{r}$ – координата электрона, $\{\mathbf{l}\}$ – положение ядер решетки, имеет вид [23]

$$E_{sr} = T_e + U_C + U_{ex} + U_{en} + U_{nn}, \quad (6)$$

где $T_e(\{\mathbf{l}\})$ – кинетическая энергия электронов кристалла; $U_C(\{\mathbf{l}\})$ и $U_{ex}(\{\mathbf{l}\})$ – энергия электрон-электронного кулоновского и обменного взаимодействий; U_{en} и U_{nn} – энергия электрон-ядерного и межъядерного взаимодействий.

В базисе атомных орбиталей, точно ортогонализованных друг к другу по Левдину, матрица плотности $\rho(\mathbf{r} | \mathbf{r}'; \{\mathbf{l}\})$ примет вид [23,24]

$$\rho(\mathbf{r} | \mathbf{r}'; \{\mathbf{l}\}) = 2 \sum_{\mathbf{l}s} \left\{ \varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{l}) \varphi_s^*(\mathbf{r} - \mathbf{l}') - \right. \\ \left. - \sum_{\mathbf{l}'s'} \varphi_{s'}(\mathbf{r} - \mathbf{l}') P_{s's}^{l'l} \varphi_s^*(\mathbf{r} - \mathbf{l}) \right\}, \\ \mathbf{P} = \mathbf{I} - (\mathbf{I} + \mathbf{S})^{-1}, \quad (7)$$

где $\varphi_s(\mathbf{r} - \mathbf{l}) = |\mathbf{l}s\rangle$ – волновая функция электрона изолированного атома (атомная орбиталь), центрированная на узле $\mathbf{l}$ решетки кристалла в состоянии с номером s ($\mathbf{l}$ и $\mathbf{l}'$ пробегают все N узлов), $\mathbf{P}$ – ортогонализирующая матрица, $\mathbf{I}$ – единичная матрица, $\mathbf{S}$ – матрица интегралов перекрытия с элементами

$$S_{s's}^{l'l} = \langle \mathbf{l}'s' | \mathbf{l}s \rangle \text{ при } \mathbf{l} \neq \mathbf{l}'; \quad S_{s's}^{l'l} = 0 \text{ при } \mathbf{l} = \mathbf{l}'. \quad (8)$$

Записанное через орбитали электронов изолированных атомов $|\mathbf{l}s\rangle$ и ортогонализирующую

матрицу, выражение для энергии короткодействующего отталкивания атомов кристалла будет [24] иметь вид:

$$E_{sr} = E^{(0)} + \Delta E(\mathbf{P}) + \Delta E(\mathbf{P}^2), \quad (9)$$

где $E^{(0)}$ – энергия межатомного взаимодействия в пренебрежении ортогонализацией орбиталей соседних атомов, $\Delta E(\mathbf{P})$ – ортогонализационная поправка, линейная по $\mathbf{P}$, $\Delta E(\mathbf{P}^2)$ – поправка, квадратичная по $\mathbf{P}$. В выражении для E_{sr} (9)

$$E^{(0)} = \sum_l E_a^l + \sum_{l,m} \langle l_s | V_{en}^m + V_0^m + V_{ex}^m | l_s \rangle. \quad (10)$$

Здесь штрих у знака суммы означает $m \neq l$; далее по тексту $l \neq l' \neq m$, $l \neq l' \neq m \neq m'$.

Первое слагаемое в (10) представляет сумму энергий изолированных атомов, не зависящую от межатомных расстояний в кристалле. Ее можно включить в начало отсчета энергии. Второе слагаемое в (10) состоит из двухцентровых интегралов – матричных элементов от потенциала электрон-ионного взаимодействия V_{en}^m , потенциала нейтрального изолированного атома V_0^m и потенциала обменного межатомного взаимодействия V_{ex}^m , построенных на атомных орбиталях $|l_s\rangle$.

Выражения для энергии кристалла (9) содержат различные типы многоцентровых интегралов, соответствующие различным видам межатомных сил в кристалле. Слагаемое $E^{(0)}$ (10) содержит только парные силы, т.е. двухцентровые интегралы; поправка $\Delta E(\mathbf{P})$ – как двухцентровые интегралы, так и трехцентровые. Поправка $\Delta E(\mathbf{P}^2)$ содержит интегралы, начиная от одноцентровых и кончая четырехцентровыми.

Тогда выражение для энергии E_{sr} (9) электронов кристалла можно записать в виде разложения по степеням интеграла перекрытия S

$$E_{sr} = E^{(0)} + W_2 + W_3 + W_4 + W_5 + W_6. \quad (11)$$

Здесь W_2 – ортогонализационная поправка, квадратичная по S

$$W_2 = -2 \sum_{ll'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{ll'} \langle l's' | V_0^l + V_{ex}^l | l_s \rangle - \sum_{lm} \sum_{ss'tt'} P_{ss'}^{ml} P_{tt'}^{lm} \langle l's' | m't' | v_C | mslt \rangle. \quad (12)$$

Поправка W_2 содержит только двухцентровые интегралы и соответствует двухчастичным взаимодействиям в кристалле. Слагаемое W_3 – поправка третьей степени по S , содержащая трехцентровые интегралы

$$W_3 = -2 \sum_{ll'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{ll'} (I - S)_{s's}^{l'l} \varepsilon_{l_s} - 2 \sum_{ll'} \sum_{ss'} P_{ss'}^{ll'} \left\langle l's' \left| \sum_{m \neq l, m \neq l'} (V_0^m + V_{ex}^m) \right| l_s \right\rangle - 2 \sum_{ll'm} \sum_{ss'tt'} P_{ss'}^{ll'} P_{tt'}^{lm} \langle l's' | m't' | v_C | lsl't' \rangle, \quad (13)$$

где ε_{l_s} – энергия хартри-фоковской орбитали $\varphi_s(\mathbf{r}-\mathbf{l})$.

Неэмпирический трехчастичный короткодействующий потенциал отталкивания. В [25] энергия E_{sr} рассчитывалась в прямом пространстве со следующими приближениями: 1) атомные орбитали на разных узлах ортогонализированы с точностью до S^2 включительно; 2) отличным от нуля считается только самый большой интеграл перекрытия $S_\sigma = S_{np_z}^l S_{np_z}^{l'}$ ($n = 2, 3, 4, 5$); 3) из всех многоцентровых матричных элементов выделялись двухцентровые и парное взаимодействие между атомами; 4) всюду применено приближение ближайших соседей.

Выходом за рамки приближений 1 и 3 является использование точной ортогонализации по Левдину в W_2 (12) и учет трехчастичного взаимодействия W_3 (13).

В работе [19] потенциал короткодействующего отталкивания $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$ для Ne рассчитывается из первых принципов в приближении Хартри-Фока и в базисе точно ортогонализированных атомных орбиталей с помощью кластерного разложения (cluster expansion – CE) Абаренкова-Антоновой, впервые предложенного для расчета матрицы электронной плотности в ионных кристаллах [26]. Нижайший порядок кластерного разложения – приближение двухчастичных кластеров, выборочно учитывает слагаемые всех порядков по S , поскольку содержит матрицу $\mathbf{P}$ (7).

В расчетах были использованы таблицы атомных орбиталей Клименти-Розетти [27]. Для кристалла Ag достаточно провести ортогонализацию атомных орбиталей в приближении S^2 [19].

Зависимость $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$ (10), (12) от межатомного расстояния в кристалле интерполируется методом наименьших квадратов в виде удобного выражения (погрешность составляет 1%).

$$V_{sr} = E^{(0)} + W_2 = V_{sr}(y) = (A_4 y^4 + A_3 y^3 + A_2 y^2 + A_1 y + A_0) \exp(-\alpha y), \quad (14)$$

где $y = r/r_0 - 1$, $r_0 = a\sqrt{2}$ – расстояние между ближайшими соседями в несжатом кристалле.

Энергия притяжения между двумя атомами рассчитана в [25] и представлена в виде

$$V_{lr}(y) = -\frac{C}{r^6} [1 + f(y)], \quad f(y) = A \exp(-\beta y), \quad (15)$$

где C – константа Ван-дер-Ваальса, $f(y)$ – функция, обусловленная перекрытием электронных оболочек атомов. Результаты расчетов приведены в Таблице 1 [28].

Двухцентровые кулоновские интегралы, входящие в W_3 (13), также были рассчитаны точно на основе таблиц [27]. Найденные при этом закономерности были использованы для аппроксимации трех- и четырехцентровых интегралов произведениями соответствующих интегралов перекрытия.

Тогда для случая, когда атомы l, l', l'' образуют равносторонний треугольник и для $S \ll 1$ выражение W_3 (13) можно привести к виду [24]

$$W_3 = -\sum_{ll''} \left(S(r^{ll''}) \right)^2 f(r_1), \quad f(r_1) = \frac{S(r_1)}{r_1}, \quad r_1 = \left| \mathbf{r}^{l'} - \frac{1}{2} \mathbf{r}^{ll''} \right|, \quad (16)$$

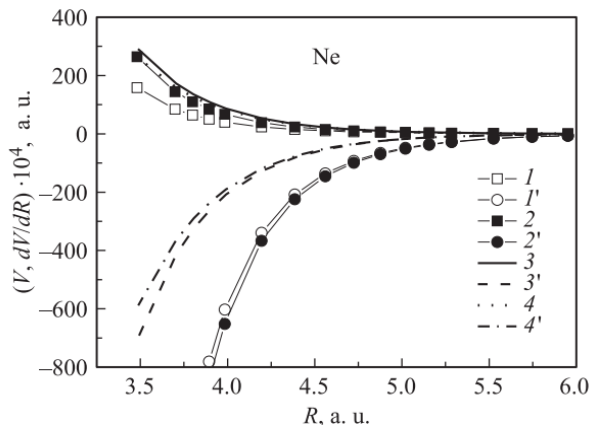


Рис. 1. Межатомные короткодействующие потенциалы и их производные для Ne. 1 – неэмпирический парный короткодействующий потенциал $V_{sr} = E^{(0)} + W_2$, рассчитанный в модели М4 [19]; 1' – его первая производная по расстоянию; 2 – неэмпирический суммарный потенциал $V_{sr} = E^{(0)} + W_2 + W_3$ с учетом трехчастичного взаимодействия; 2' – его первая производная по расстоянию; 3 – короткодействующая часть парного эмпирического потенциала Азиза-Слэймана U_p [29]; 3' – его первая производная по расстоянию; 4 – эмпирический суммарный потенциал, включающий в себя короткодействующие части парного потенциала Азиза-Слэймана и трехчастичного потенциала Слетера-Кирквуда [11,29,30] $U = U_p - U_{lr} = U_p - A \exp[-\alpha_{lr}(3a\sqrt{2})] \times (1 + 3 \cos^3(\pi/3))$; 4' – первая производная суммарного потенциала по расстоянию.

где $S = S_{np_z np_z}^{ll'}$ – наибольший из интегралов перекрытия между внешними np -орбиталями электронов. В отличие от парного потенциала

$W_2(r^{ll'})$ трехчастичный потенциал W_3 зависит не только от $r^{ll'}$ и $r^{ll''}$, но и от $(\mathbf{r}^{ll'} \cdot \mathbf{r}^{ll''})$.

Как показано на рис.1, наши короткодействующие потенциалы (двухчастичный $V_{sr}(S^2) = E^{(0)} + W_2$ и трехчастичный $V_{sr}(S^3) = E^{(0)} + W_2 + W_3$) хорошо согласуются с соответствующими лучшими эмпирическими потенциалами [11,29,30] в широкой области сжатия. Однако мы видим, что их первые производные значительно отличаются, начиная с давления $p \approx 30$ GPa.

Расчет и обсуждение уравнений состояний кристаллов инертных газов. В общем случае при конечной температуре T уравнение состояния (3) можно представить в виде

$$p(T, V) = p_{stat}(V) + p_e^*(T, V) + p^*(T, V) + p_{zp}(V) + p_{na}(T, V). \quad (17)$$

Давление p_{stat} есть давление, создаваемое в покоящейся решетке,

$$p_{stat} = p_{sr} + p_{lr},$$

где p_{sr} и p_{lr} – соответствующие производные (с обратным знаком) по объему от короткодействия V_{sr} и дального действия V_{lr} . Давление p_e^* газа электронов проводимости мало в силу малости T по сравнению с фундаментальной щелью. Также мало термическое давление фононов $p^* \sim (T/\theta)^2$ ($\theta = \theta(p)$ – температура Дебая). Отношение (T/θ) всегда мало при больших давлениях, так как θ резко растет с ростом давления. По этой же причине малы вклады электрон-фононного и ангармонического взаимодействий, входящих в неадиабатическую часть давления p_{na} .

Таким образом, остаются не зависящие от T вклады нулевых колебаний от гармонической p_{zp} и ангармонической p_{na} ($T=0$) частей энергии. Из определения следует [20]

$$p_{zp} = -\frac{\partial}{\partial \Omega} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q}\lambda} = \frac{\hbar}{2\Omega N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \omega_{\mathbf{q}\lambda} \gamma_{\mathbf{q}\lambda},$$

где $\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ и $\gamma_{\mathbf{q}\lambda}$ – частота и микроскопический параметр Грюнайзера фонона с волновым вектором $\mathbf{q}$ и поляризацией λ . Как показывают оценки (см. приближенную формулу для γ в [31]), параметр Грюнайзера мал (по сравнению с масштабами изменения давления) и меняется с объемом, как логарифм. Фононные частоты меняются сильнее, чем $\gamma_{\mathbf{q}\lambda}$, но слабее, чем по линейному закону [20].

Поэтому давление нулевых колебаний незначительно по сравнению с p_{stat} , и его относительный вклад уменьшается с ростом сжатия. Например, в [17] вклад нулевых колебаний в Ne при 6 GPa и 600 GPa составляют 10% и 1%, соответственно. Это также хорошо заметно по сближению изотерм с ростом давления,

наблюдаемому экспериментально во многих материалах (см., например, [31]).

Аналогичное поведение имеет давление $p_{\text{на}}$ ($T=0$), но оно еще меньше за счет наличия фононных частот в знаменателях интегралов [20].

Окончательно можно заключить, что при больших сжатиях определяющий вклад вносит статическая решетка при $T=0$. Для кубического кристалла энергия связи с учетом вторых соседей и трехчастичного короткодействующего отталкивания примет вид

$$E_{\text{coh}} = 6E_{sr}(a\sqrt{2}) + 3E_{sr}(2a) + W_3(a) - \frac{1}{2a^4} \left[F_6(0,0)C + \frac{1}{a^2} F_8(0,0)C' + \frac{1}{a^4} F_{10}(0,0)C'' \right], \quad (18)$$

где $E_{sr} = E^{(0)} + W_2$; $F_n(0,0)$ представляют решеточные суммы от $1/r^n$ ($n=6, 8, 10$) и равны соответственно 1,80674; 0,80001 и 0,38472 [22].

Тогда EOS определяется выражением:

$$p = -\frac{\partial E}{\partial \Omega} = -\frac{e^2}{2a^4} \left[\frac{H(a) + \delta H - 2R_t + 0.30112B +}{+0.13335B' + 0.06412B''} \right], \quad (19)$$

где $R_t = -\frac{a}{6e^2} \frac{dW_3(a)}{da}$; $W_3(a) = -24S^2(a\sqrt{2})f(\frac{\sqrt{6}}{2}a)$;

$$B = \frac{6C}{a^5 e^2}; \quad B' = \frac{8C'}{a^7 e^2}; \quad B'' = \frac{10C''}{a^9 e^2}.$$

$$\delta H = -\frac{16a^3}{e^2} S(r_0) \left[2S_2(r_0)f(r_1) + 3S(r_0)f_2(r_1) - \right. \\ \left. - 2S_1(r_0)f_1(r_1) \right].$$

S_i , f_i выражаются через первые и вторые производные от интеграла перекрытия $S(r^{II})$ по модулю аргумента [32,33].

В модели M2 считается $C \rightarrow C[1+f(y)]$ согласно (15)

$$H(a) = \frac{2a^2}{e^2} \frac{dV_{sr}}{dr} - AB \frac{6+\beta y}{24} \exp[-\beta(y-1)].$$

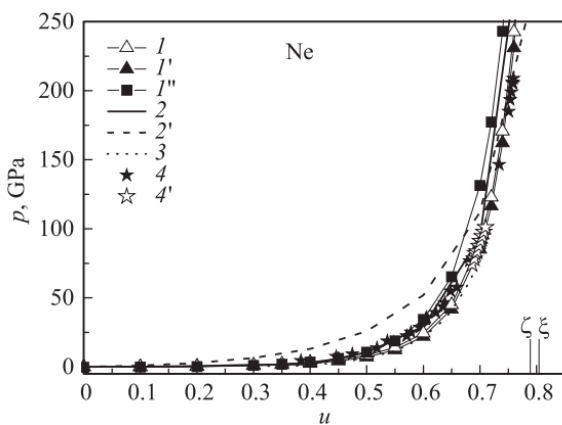


Рис. 2. Уравнения состояния для кристаллического Ne. 1 – расчет EOS в модели M4 на основе парного потенциала; 1' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M4; 1'' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M2; 2 и 2' – эмпирический

расчет EOS Винета [7] и Поириера [34] соответственно; 3 – *ab initio* расчет EOS с помощью DFT-LDA [15]; 4 – эксперимент [4]; 4' – эксперимент [3]. Вертикальными линиями обозначены расчетные величины сжатия металлизации: ζ – расчет [35] (соответствующее давление $p_m = 540$ GPa), ξ – расчет [36] (соответствующее давление $p_m \approx 1$ TPa).

В работе [19] для неона даны параметры двухчастичного взаимодействия в зависимости от сжатия, рассчитанные с учетом точной ортогонализации атомных орбиталей (модель M4) и во втором порядке по S (модель M2) [37]. Показано, что до сжатий $u \approx 0.3$ величина H примерно одинакова в обеих моделях, при $u \approx 0.7$ величина $H(CE)$, рассчитанная в M4, меньше $H(S^2)$ на $\sim 30\%$.

Для Ne и Ag были выполнены расчеты изотерм при больших сжатиях в работе [19] с парным неэмпирическим короткодействующим потенциалом.

На рис.2–3 приведены уравнения состояния кристаллов Ne и Ag, рассчитанные по формуле (19), экспериментальные значения [3,4,38–44] и результаты расчетов других авторов [7,15,34]. Для сравнения мы привели результаты расчетов работы [19]. Для обоих кристаллов при небольших сжатиях $u \leq 0.45$ результаты наших расчетов EOS во всех моделях и расчеты других авторов совпадают с экспериментом.

Как видно из рис.2 [35,36], для сжатия $0.45 \leq u \leq 0.65$ результаты расчетов EOS в модели M2 с короткодействующим потенциалом $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(S^2) + W_3(S^3)$ лежат выше экспериментальных данных, и с ростом давления погрешность увеличивается. Для того же интервала сжатий результаты расчетов EOS в модели M4 с потенциалом $V_{sr} = E^{(0)} + W_2(CE) + W_3(S^3)$ (

$W_2(CE)$ учитывает точную ортогонализацию волновой функции по формуле (12) с помощью кластерного разложения Абаренкова-Антоновой [26]), идут несколько ниже эксперимента и вклад трехчастичного взаимодействия почти незаметен. При сжатии $u \geq 0.65$ лучше всего согласуется с экспериментом настоящие расчеты EOS в модели M4 с учетом вклада трехчастичного взаимодействия.

В Ag (рис.3) [45] EOS лучше всего описывается в самой простой модели M1 ($A = \beta = 0$, учет только первых соседей) на основе парного $V_{sr}(S^2) = E^{(0)} + W_2$ или трехчастичного $V_{sr}(S^3) = E^{(0)} + W_2 + W_3$ короткодействующих потенциалов отталкивания. Эти результаты близки между собой, но в интервале сжатий $0.45 \leq u \leq 0.65$ расчет с парным потенциалом ложиться немного ниже экспериментальных значений, а учет вклада

трехчастичного взаимодействия улучшает согласие с экспериментом. При $u \geq 0.6$ расчеты EOS на основе парного V_{sr} немного лучше согласуется с экспериментом.

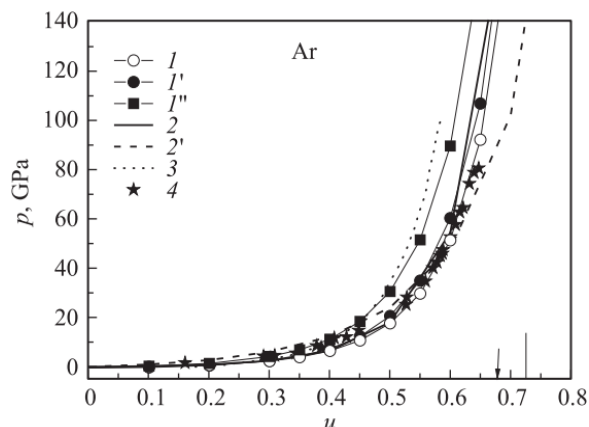


Рис. 3. Уравнения состояния для кристаллического Ar. 1 – расчет EOS в модели M1 на основе парного потенциала; 1' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M1; 1'' – расчет EOS настоящей работы с учетом трехчастичного взаимодействия в модели M2; 2, 2' и 3 – то же, что на рис. 2; 4 – эксперимент [38]. Стрелкой обозначена расчетная величина сжатия структурного ГЦК-ГПУ перехода [45] ($p = 220$ GPa). Вертикальной линией обозначена расчетная величина сжатия металлизации [45] ($p_m = 510$ GPa).

Выводы. Наилучшее согласие с имеющимся экспериментом демонстрирует уравнение состояния Винета [7] для Ne до сжатий $u \leq 0.7$, для Ar – до $u \leq 0.6$. При более сильном сжатии наблюдается заметное отклонение (завышение) от эксперимента. Чтобы улучшить согласие теории и эксперимента при больших сжатиях, авторы [34] предлагают новое уравнение состояния, основанное на EOS Бирча-Мурнагана [6]. Уравнение состояния в работе [34] выводится с использованием логарифмического напряжения Генки и, по мнению авторов, должно быть эквивалентно EOS типа Винета [7] при малых деформациях, но вести себя лучше при больших. Как видно из рис. 2 и 3, можно согласиться с этим в случае Ar, но не в случае Ne.

Учет трехчастичного взаимодействия в EOS Ne визуально трудно классифицировать, поэтому мы рассчитали относительную погрешность для 14 экспериментальных точек в различных моделях. Как оказалось, для сжатий $0.518 \leq u \leq 0.606$ наилучшие результаты (погрешность 2,6%) получаются при расчете EOS с использованием парного потенциала и точно ортогонализированных волновых функций ($W_2(CE)$) с учетом вторых соседей и трехчастичного взаимодействия. Для сжатий $0.698 \leq u \leq 0.758$ также нужен парный потенциал $W_2(CE)$, трехчастичное взаимодействие и достаточно первых соседей (погрешность 5,8%). Фактически это означает, что наши результаты в том и другом случаях ложатся в пределах погрешности эксперимента.

Литература

1. Hemley R.J. and Ashcroft H.K. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // *Phys. Today*. 1998. V. 51, P. 26.
2. Finger L.W., Hazen R.M., Zou G., Mao H.K., Bell P.M. Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature // *Appl. Phys. Lett.* 1981. V. 39, P. 892.
3. Hemley R.J., Zha C.S., Jephcoat A.P., Mao H.K., Finger L.W., Cox D.E. X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39, P. 11820.
4. Dewaele A., Datchi F., Loubeyre P., Mezouar M. High pressure – high temperature equations of state of neon and diamond // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77, P. 094106.
5. Takemyra K., Watanuki T., Ohwada K., Machida A., Ohmura A., Aoki K. Powder x-ray diffraction study of Ne up to 240 GPa // *J. Phys.: Conference Series*. 2010. V. 215, P. 012017.
6. Birch F. Elasticity and constitution of the Earth's interior // *J. Geophys. Res.* 1952. V. 57, P. 227.
7. Vinet P., Rose J.H., Ferrante J., Smith L.R. Universal features of the equation of state of solids // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1989. V. 1, P. 1941.
8. Kumar M. High pressure equation of state for solids // *Physica B*. 1995. V. 212, P. 391.
9. Fang Z.H. Extension of the universal equation of state for solids in high-pressure phases // *Phys. Rev. B*. 1998. V. 58, P. 20.
10. Gaurav S., Sharmu B.S., Sharma S.B., Upadhyaya S.C. Analysis of equations of state for solids under high compressions // *Physica B*. 2002. V. 322, P. 328.
11. Freiman Yu.A., Tretyak S.M. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas crystals // *Low Temp. Phys.* 2007. V. 33, P. 719.
12. Gupta S., Goyal S.C. Seismic wave velocities of rare gas solids through elastic properties in Earth's lower mantle // *Sci. China Ser D-Earth Sci*. 2009. V. 52, P. 1599.
13. Bonnet P. Equation of state for solid rare gases and alkali metals under pressure // *Physica B*. 2016 V. 492, P. 50.
14. Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense rare gases // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37, P. 5432.
15. Tsuchiya T., Kawamura K. First-principles study of systematics of high-pressure elasticity in rare gas solids, Ne, Ar, Kr, and Xe // *J. Chem. Phys.* 2002. V. 117, P. 5859.
16. Drummond N.D., Needs R.J. Quantum Monte Carlo, density functional theory, and pair potential studies of solid neon // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73, P. 024107.
17. Schwerdtfeger P., Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory // *Phys. Rev. B*. 2009. V. 80, P. 064106.
18. He Y., Tang X., Pu Y. First-principle study of solid neon under high compression // *Physica B*. 2010. V. 405, P. 4335.
19. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации // *ФТТ*. 2001. Т. 43, С. 1292.
20. Bar'akhtar V.G., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Theory of adiabatic potential and atomic properties of simple metals. Gordon&Breach, London (1999). 317 p.
21. Толпыго К.Б., Троицкая Е.П. Распространение динамической теории кристаллических решеток с деформированными атомами на кристаллы элементов нулевой группы // *ФТТ*. 1971. Т. 13, С. 1135.

22. Болонин О.Н., Толпыго К.Б. Квадрупольная деформация атомов в динамике решетки твердых благородных газов // ФТТ. 1973. Т. 15, С. 1674.
23. Абаренков И.В., Антонова И.М., Барьяхтар В.Г., Булатов В.Л., Зароченцев Е.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов. Наука. думка, Киев (1991). 450 с.
24. Троицкая Е.П., Чабаненко Вал.В., Жихарев И.В., Горбенко Е.Е. Ab initio теория многочастичного взаимодействия и соотношения Коши в сжатых кристаллах инертных газов // ФТТ. 2011. Т. 53, С. 1555.
25. Дорман В.Л., Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Энергия связи и межатомный потенциал кристаллов инертных газов. // ФТТ. 1981. Т. 23, С. 1581.
26. Абаренков И.В., Антонова И.М., Барьяхтар В.Г., Булатов В.Л., Зароченцев Е.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов – Киев: Наукова думка, 1991 – 450 с.
27. Clementi F., Roetti C. Roothan-Hartree-Fock atomic wave functions // At. Data Nucl. Data Table. 1974. V. 14, P. 177.
28. Пилипенко Е.А., Троицкая Е.П., Горбенко Е.Е. Ab initio теория уравнения состояния сжатых кристаллов инертных газов // ФТТ. 2018. Т. 60, С. 151.
29. Aziz R.A., Slaman M.J. The Ne-Ne interatomic potential revisite // Chem. Phys. 1989. V. 130, P. 187.
30. Silvera I.F., Goldman V.V. The isotropic intermolecular potential for H₂ and D₂ in the solid and gas phases // J. Chem. Phys. 1978. V. 69, P. 4209.
31. Taravillo M., Baonza V.G., Nunez J., Caceres M. Simple equation of state for solids under compression // Phys. Rev. B. 1996. V. 54, P. 7034.
32. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure // Phys. Status Solidi B. 2014. V. 251, P. 774.
33. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Chabanenko Val.V. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms // Phys. Status Solidi B. 2015. V. 252, P. 709.
34. Poirier J.P., Tarantola A. A logarithmic equation of state // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 1998. V. 109, P. 1.
35. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Природа запрещенной щели и переход изолятор-металл под давлением // ФТТ. 2002. Т. 44, С. 1309.
36. March N.H. In: Advances in high pressure research. V.3 / Ed. R.S. Bradley. Academic Press, N.Y. (1969). P.241.
37. Толпыго К.Б., Троицкая Е.П. Короткодействующие силы в кристаллах элементов нулевой группы // ФТТ. 1975. Т. 17, С. 102.
38. Ross M., Mao H.K., Bell P.M., Xu J.A. The equation of state of dense argon: A comparison of shock and static studies // J. Chem. Phys. 1986. V. 85, P. 1028.
39. Jephcoat A.P. Rare-gas solids in the Earth's deep interior // Nature 1998. V. 393, P. 355.
40. Aleksandrov I.V., Zisman A.N., Stishov S.M. An investigation of the equations of state of the isoelectronic substances Csl-Xe and RbBr-Kr. Phase transitions in Csl and RbI // Sov. Phys. JETP 1987. V. 65, P. 371.
41. Zisman A.N., Aleksandrov I.V., Stishov S.M. X-ray study of equations of state of solid xenon and cesium iodide at pressures up to 55 GPa // Phys. Rev. B. 1985. V. 32, P. 484.
42. Jephcoat A.P., Mao H.-k., Finger L.W., Cox D.E., Hemley R.J., Zha C.-s. Pressure-induced structural phase transitions in solid xeno // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59, P. 2670.
43. Reichlin R., Brister K.E., McMahan A.K., Ross M., Martin S., Vohra Y.K., Ruoff A.L. Evidence for the insulator-metal transition in xenon from optical, x-ray, and band-structure studies to 170 GPa // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62, P. 669.
44. Errandonea D., Schwager B., Boehler R., Ross M. Phase behavior of krypton and xenon to 50 GPa // Phys. Rev. B. 2002. V. 65, P. 214110.
45. Kwon I., Collins L.A., Kress J.D., Troullier N. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression // Phys. Rev. B. 1995. V. 52, P. 165.

References

1. Hemley R.J. and Ashcroft H.K. The Revealing Role of Pressure in the Condensed Matter Sciences // Phys. Today. 1998. V. 51, P. 26.
2. Finger L.W., Hazen R.M., Zou G., Mao H.K., Bell P.M. Structure and compression of crystalline argon and neon at high pressure and room temperature // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 39, P. 892.
3. Hemley R.J., Zha C.S., Jephcoat A.P., Mao H.K., Finger L.W., Cox D.E. X-ray diffraction and equation of state of solid neon to 110 GPa // Phys. Rev. B. 1989. V. 39, P. 11820.
4. Dewaele A., Datchi F., Loubeyre P., Mezouar M. High pressure – high temperature equations of state of neon and diamond // Phys. Rev. B. 2008. V. 77, P. 094106.
5. Takemyra K., Watanuki T., Ohwada K., Machida A., Ohmura A., Aoki K. Powder x-ray diffraction study of Ne up to 240 GPa // J. Phys.: Conference Series. 2010. V. 215, P. 012017.
6. Birch F. Elasticity and constitution of the Earth's interior // J. Geophys. Res. 1952. V. 57, P. 227.
7. Vinet P., Rose J.H., Ferrante J., Smith L.R. Universal features of the equation of state of solids // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1, P. 1941.
8. Kumar M. High pressure equation of state for solids // Physica B. 1995. V. 212, P. 391.
9. Fang Z.H. Extension of the universal equation of state for solids in high-pressure phases // Phys. Rev. B. 1998. V. 58, P. 20.
10. Gaurav S., Sharmu B.S., Sharma S.B., Upadhyaya S.C. Analysis of equations of state for solids under high compressions // Physica B. 2002. V. 322, P. 328.
11. Freiman Yu.A., Tretyak S.M. Many-body interactions and high-pressure equations of state in rare-gas crystals // Low Temp. Phys. 2007. V. 33, P. 719.
12. Gupta S., Goyal S.C. Seismic wave velocities of rare gas solids through elastic properties in Earth's lower mantle // Sci. China Ser D-Earth Sci. 2009. V. 52, P. 1599.
13. Bonnet P. Equation of state for solid rare gases and alkali metals under pressure // Physica B. 2016 V. 492, P. 50.
14. Loubeyre P. Three-body exchange interaction in dense rare gases // Phys. Rev. B. 1988. V. 37, P. 5432.

15. Tsuchiya T., Kawamura K. First-principles study of systematics of high-pressure elasticity in rare gas solids, Ne, Ar, Kr, and Xe // *J. Chem. Phys.* 2002. V. 117, P. 5859.
16. Drummond N.D., Needs R.J. Quantum Monte Carlo, density functional theory, and pair potential studies of solid neon // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73, P. 024107.
17. Schwerdtfeger P., Hermann A. Equation of state for solid neon from quantum theory // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80, P. 064106.
18. He Y., Tang X., Pu Y. First-principle study of solid neon under high compression // *Physica B.* 2010. V. 405, P. 4335.
19. Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Уравнение состояния кристаллов инертных газов вблизи металлизации // *ФТТ.* 2001. Т. 43, С. 1292.
20. Bar'akhtar V.G., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Theory of adiabatic potential and atomic properties of simple metals. Gordon & Breach, London (1999). 317 p.
21. Tolpygo K.B., Troitskaya E.P. Extension of dynamical theory of crystal lattices with deformed atoms to crystals of elements in zeroth group // *Sov. Phys. Solid State.* 1971. V. 13, P. 939.
22. Bolonin O.N., Tolpygo K.B. Quadrupole deformation of atoms in the dynamics of a lattice of solid noble gases // *Sov. Phys. Solid State.* 1973. V. 15, P. 1124.
23. Abarenkov I.V., Antonova I.M., Baryakhtar V.G., Bulatov V.L., Zarochentsev E.V. Computational physics methods in solid state theory. Electronic structure of perfect and defective crystals. Nauk. Dumka, Kiev (1991). 450 p.
24. Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Zhykharev I.V., Gorbenko Ie.Ie. Ab initio theory of many-body interactions and Cauchy relations in compressed rare-gas crystals // *Phys. Solid State.* 2011. V. 53, P. 1555.
25. Dorman V.L., Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. Binding energy and interatomic potential of inert gas crystals. // *Sov. Phys. Solid State.* 1981. V. 23, P. 1581.
26. Abarenkov I.V., Antonova I.M., Baryakhtar V.G., Bulatov V.L., Zarochentsev E.V. Computational physics methods in solid state theory. Electronic structure of perfect and defective crystals – Kiev: Nauk. Dumka, 1991 – 450 p.
27. Clementi F., Roetti C. Roothan-Hartree-Fock atomic wave functions // *At. Data Nucl. Data Table.* 1974. V. 14, P. 177.
28. Pilipenko E.A., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie. Ab initio theory of the equation of state for compressed rare-gas crystals // *Phys. Solid State.* 2018. V. 60, P. 151.
29. Aziz R.A., Slaman M.J. The Ne-Ne interatomic potential revisited // *Chem. Phys.* 1989. V. 130, P. 187.
30. Silvera I.F., Goldman V.V. The isotropic intermolecular potential for H₂ and D₂ in the solid and gas phases // *J. Chem. Phys.* 1978. V. 69, P. 4209.
31. Taravillo M., Baonza V.G., Nunez J., Caceres M. Simple equation of state for solids under compression // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54, P. 7034.
32. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Chabanenko Val.V., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A. Ab initio theory of the many-body interaction and elastic properties of rare-gas crystals under pressure // *Phys. Status Solidi B.* 2014. V. 251, P. 774.
33. Varyukhin V.N., Troitskaya E.P., Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Chabanenko Val.V. Adiabatic potential and elastic properties of compressed rare-gas crystals in the model of deformable atoms // *Phys. Status Solidi B.* 2015. V. 252, P. 709.
34. Poirier J.P., Tarantola A. A logarithmic equation of state // *Physics of the Earth and Planetary Interiors.* 1998. V. 109, P. 1.
35. Zarochentsev E.V., Troitskaya E.P. The nature of the forbidden gap and the insulator-metal junction under pressure // *Phys. Solid State.* 2002. V. 44, P. 1309.
36. March N.H. In: *Advances in high pressure research.* V.3 / Ed. R.S. Bradley. Academic Press, N.Y. (1969). P.241.
37. Tolpygo K.B., Troitskaya E.P. Short-range forces in crystals of group zero elements // *Sov. Phys. Solid State.* 1975. V. 17, P. 102.
38. Ross M., Mao H.K., Bell P.M., Xu J.A. The equation of state of dense argon: A comparison of shock and static studies // *J. Chem. Phys.* 1986. V. 85, P. 1028.
39. Jephcoat A.P. Rare-gas solids in the Earth's deep interior // *Nature* 1998. V. 393, P. 355.
40. Aleksandrov I.V., Zisman A.N., Stishov S.M. An investigation of the equations of state of the isoelectronic substances CsI-Xe and RbBr-Kr. Phase transitions in CsI and RbI // *Sov. Phys. JETP* 1987. V. 65, P. 371.
41. Zisman A.N., Aleksandrov I.V., Stishov S.M. X-ray study of equations of state of solid xenon and cesium iodide at pressures up to 55 GPa // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32, P. 484.
42. Jephcoat A.P., Mao H.-k., Finger L.W., Cox D.E., Hemley R.J., Zha C.-s. Pressure-induced structural phase transitions in solid xenon // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V. 59, P. 2670.
43. Reichlin R., Brister K.E., McMahan A.K., Ross M., Martin S., Vohra Y.K., Ruoff A.L. Evidence for the insulator-metal transition in xenon from optical, x-ray, and band-structure studies to 170 GPa // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62, P. 669.
44. Errandonea D., Schwager B., Boehler R., Ross M. Phase behavior of krypton and xenon to 50 GPa // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 65, P. 214110.
45. Kwon I., Collins L.A., Kress J.D., Troullier N. First-principles study of solid Ar and Kr under high compression // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52, P. 165.

Gorbenko Ie.Ie., Pilipenko E.A., Tkacheva A.O. EQUATION OF STATE Ne AND Ar CRYSTALS UNDER PRESSURE

The nonempiric equations of state of compressed neon and argon crystals based on the adiabatic potential are investigated. The paired and three-body short-range repulsive potentials were calculated by the Hartree-Fock method in the basis of localized functions with their exact orthogonalization to each other and do not contain experimentally determined parameters. The theory is compared with experiment and the results of calculations by other authors. An analysis of the proposed equations of state at large compressions showed the importance of taking into account the three-body interaction and terms with higher powers in the overlap integral in compressed neon.

Key words: rare-gas crystals, many-body short-range interaction, deformation of electron shells, equation of state, Hartree-Fock approximation, high pressure.

Горбенко Евгений Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, доцент, директор Института физико-математического образования, информационных и

обслуживающих технологий Луганского
государственного педагогического университета.
E-mail: e_g81@mail.ru

Gorbenko Ievgen, PhD in Physics and Mathematics,
Docent, Director of the Institute of Physics and Mathematics
Education, Information and Service Technologies of Lugansk
State Pedagogical University.

Пилипенко Екатерина Александровна, кандидат
физико-математических наук, старший научный
сотрудник отдела фазовых превращений Донецкого
физико-технического института имени А.А. Галкина.
E-mail: pilipenko.katerina@mail.ru

Pilipenko Ekaterina, PhD in Physics and Mathematics,
Senior Researcher of Department of Phase Transformations of
Donetsk A.A. Galkin Physics and Technology Institute.

Ткачева Алеся Олеговна, старший лаборант
кафедры физики и методики преподавания физики
Луганского государственного педагогического
университета.

E-mail: destin.ation@yandex.ua

Tkacheva Alesya, Senior Laboratory Assistant of
Department of Physics and Methods of Teaching Physics of
Lugansk State Pedagogical University.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н.,
проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный
университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021 года

УДК 538.9

ИСТОРИЯ, ПРИМЕНЕНИЕ, ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА BiFeO_3/Yb

Хасбулатов С. В., Вахажи Х.-М. М., Мацаев М.-С. М.

HISTORY, APPLICATION, PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC BiFeO_3/Yb

Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Matsaev M.-S. M.

Приведены результаты исследования микроструктуры и диэлектрических свойств мультиферроиков типа BiFeO_3/Yb . Полученные результаты могут быть использованы при разработке мультиферроиков данного типа.

Ключевые слова: мультиферроики, твердые растворы, диэлектрические характеристики, микроструктура.

Введение. Исследованиям мультиферроиков на основе феррита висмута уделяется большое внимание в связи с сочетанием в них как магнитного ($T_N \sim 643$ К), так и сегнетоэлектрического ($T_C \sim 1083$ К) упорядочений. Однако синтез термически устойчивых порошковых продуктов, пригодных для получения керамик, затруднен. Введение РЗЭ позволяет стабилизировать структуру феррита висмута, оптимизировать его свойства, а также усилить взаимодействие между магнитными и электрическими свойствами за счет подавления пространственно-модулированной магнитной структуры. Одним из РЗЭ, применяемым для стабилизации структуры феррита висмута, является иттербий [1-4].

Иттербий был открыт Жаном Шарлем Мариньяком в 1878 году в окиси эрбия. Наряду ещё с тремя химическими элементами (тербий, эрбий, иттрий) получил название в честь села Иттербю, находящегося на острове Ресарё, входящем в Стокгольмский архипелаг.

Мультиферроики типа BiFeO_3/Yb могут найти применение как лазерные, термоэлектрические и магнитные материалы, а также в электронике и ядерной энергетике.

Результаты исследования. Объектами исследования выступили керамики состава $\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x\text{FeO}_3$ (концентрация от 0.05–0.20%, шаг 0.05%).

Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра ДРОН-3 (отфильтрованное $\text{CoK}\alpha$ -излучение, схема фокусировки по Брэггу - Брентано).

Исследование поликристаллического (зёрненного) строения мультиферроиков проводили в отраженном свете на оптическом микроскопе Neophot 21 и инвертированном высокоточном микроскопе Leica DMI 5000M.

Действительные и мнимые части относительной диэлектрической проницаемости и тангенс угла диэлектрических потерь (ϵ'/ϵ_0 , ϵ''/ϵ_0 , $\tan\delta$) на частотах ($20\text{--}2\cdot 10^6$) Гц исследовались на специальном стенде с использованием прецизионного LCR-метра Agilent E4980A в интервалах температур (300–900) К.

На рис. 1 представлены результаты рентгеноструктурного исследования твёрдых растворов $(\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x)\text{FeO}_3$. Исследованные твёрдые растворы (ТР) содержат примесные фазы $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$, количество которых увеличивается с ростом x . При больших концентрациях РЗЭ появляются дополнительные линии, которые не идентифицируются и, вероятно, принадлежат фазам, содержащим РЗ с не перовскитной структурой.

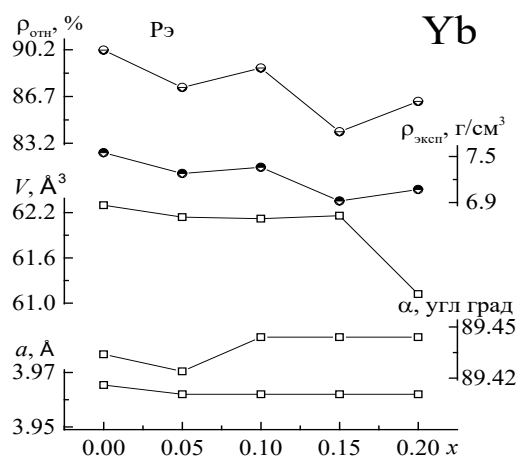


Рис. 1. Зависимости структурных параметров, экспериментальной, $\rho_{\text{эксп}}$, и относительной, $\rho_{\text{отн}}$, плотностей от концентрации: $\text{Yb}(x)$ – параметр a , угол α , объем V ромбоэдрической ячейки

В твердых растворах изменение симметрии не обнаружено. Можно сделать вывод, что растворение используемых в данной работе РЗ элементов в BiFeO_3 происходит до $x = 0.05$ и уменьшается по мере уменьшения их ионного радиуса.

На рис. 2 показаны фотографии микроструктуры изученных ТР. Как видно, при уменьшении R_i и возрастании x структура разрыхляется, межкристаллитные пространства заполняются жидкой фазой, утолщаются границы зерен.

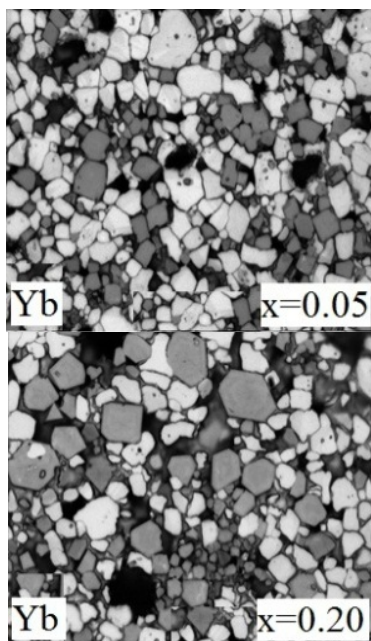


Рис. 2. Микроструктуры образцов керамики $\text{Bi}_{0.95}\text{Yb}_{0.05}\text{FeO}_3$, $\text{Bi}_{0.8}\text{Yb}_{0.2}\text{FeO}_3$

На рис. 3 приведены результаты исследования зависимостей $\varepsilon/\varepsilon_0$ (диэлектрической проницаемости) образцов керамики от температуры при разных частотах измерительного переменного электрического поля. Как видно из рис. 3, в областях 400–500 К формируются дисперсионные максимумы $\varepsilon/\varepsilon_0$ (диэлектрической проницаемости), особенностью которых является сдвиг в высокотемпературную область, уменьшение и размытие их пиковых значений при увеличении частоты. Подобные явления, известные под названием Максвелл-Вагнеровской релаксации, связаны с накоплением свободных зарядов на поверхностях раздела компонентов на фоне межслоевых, межфазных и внутрифазных перестроек.

Видно, что "поведение" характеристик экстремально в окрестности температуры ≈ 640 К, принадлежащей области антиферромагнитного перехода. Анализ полученных данных позволяет сделать вывод о том, что T_N не испытывает значительного смещения при изменении концентраций и вида РЗЭ, замещающих Bi.

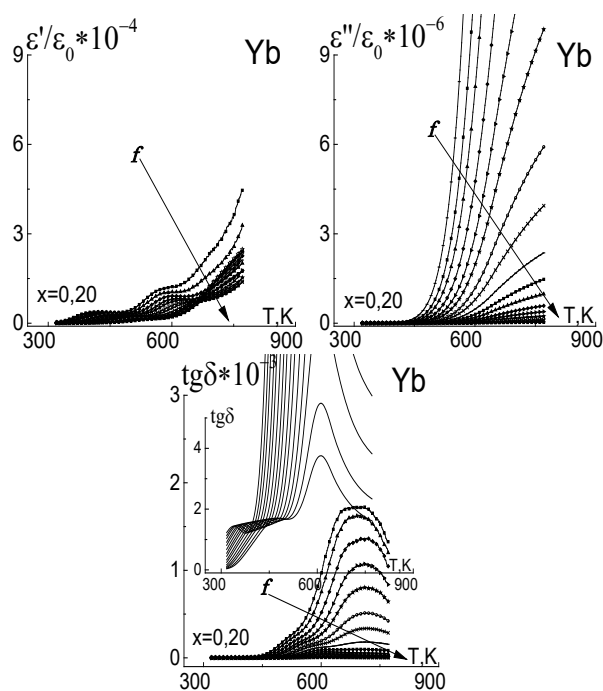


Рис. 3. Зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon/\varepsilon_0$ образцов керамики $\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x\text{FeO}_3$ от температуры T и частоты f при концентрации 20%

Выводы. В результате проведенных исследований установлено, что в процессе синтеза всех исследованных ТР образуются примесные фазы $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$, количество которых увеличивается с ростом x .

Показано, что T_N в изученных ТР не испытывает значительного смещения при изменении вида РЗЭ и его концентрации.

Полученные в данной работе результаты необходимо учитывать при создании нового поколения мультифункциональных (сочетающих в себе сегнетоэлектрические, магнитные и сегнетоэластические свойства) материалов, способных найти перспективные приложения в таких областях, как сенсорная техника, диагностика, обработка и хранение информации и многих других.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, Южный федеральный университет, 2020).

Л и т е р а т у р а

1. A.A. Pavelko, S.V. Khasbulatov, L.A. Reznichenko L.A. Shilkina, G.G. Gadjiev, A.G. Bakmaev, Z.M. Omarov, Verbenko I.A., Aleshin V.A., Parinov I.A., Shun-Hsyung Chang, Hung-Yu Wang. Features of the Formation of the Crystal Structure, Grain Structure, Dielectric and Thermophysical Properties of Bismuth Ferrite Doped with Erbium. // Applied Sciences. (MDPI) 2018. 8. pp. 2183.
2. Khasbulatov S.V., Pavelko A.A., Shilkina L.A., Aleshin V.A., Verbenko I.A., Hajiyev G.G., Omarov Z.M., Bakmaev A.G., Razumovskaya O.N., Reznichenko L.A.. Preparation, Structure, Microstructure, Dielectric and Thermal

Properties of Bismuth Ferrite with Holmium, Erbium and Ytterbium (Chapter 39, P. 283-288) // Monograph. "Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications". New York: Nova Science Publishers. 2016. - 582 p. https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=57290

3. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Гаджиев Г.Г., Шилкина Л.А., Резниченко Л.А., Бакмаев А.Г., Алешин В.А., Омаров З.М. Фазовые переходы, теплофизические свойства и диэлектрическая спектроскопия феррита висмута с малоразмерными РЗЭ // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17. № 20. С. 142-146. <http://elibrary.ru/item.asp?id=22483705>.

4. Хасбулатов С.В., Гаджиев Г.Г., Павелко А.А., Омаров З.М., Алешин В.А., Шилкина Л.А., Резниченко Л.А. Фазовые переходы, теплофизические свойства и диэлектрическая спектроскопия феррита висмута с малоразмерными РЗЭ // Сб-к материалов 14-й Российской конференции (с межд. участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-14). 15 – 17 октября 2014 г., г. Казань. Т. 1. С. 128-131.

References

1. A.A. Pavelko, S.V. Khasbulatov, L.A. Reznichenko L.A. Shilkina, G.G.Gadjiev, A.G. Bakmaev, Z.M. Omarov, Verbenko I.A., Aleshin V.A., Parinov I.A., Shun-Hsyung Chang, Hung-Yu Wang. Features of the Formation of the Crystal Structure, Grain Structure, Dielectric and Thermophysical Properties of Bismuth Ferrite Doped with Erbium. // Applied Sciences. (MDPI) 2018. 8. pp. 2183.

2. Khasbulatov S.V., Pavelko A.A., Shilkina L.A., Aleshin V.A., Verbenko I.A., Hajiyev G.G., Omarov Z.M., Bakmaev A.G., Razumovskaya O.N., Reznichenko L.A.. Preparation, Structure, Microstructure, Dielectric and Thermal Properties of Bismuth Ferrite with Holmium, Erbium and Ytterbium (Chapter 39, P. 283-288) // Monograph. "Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications". New York: Nova Science Publishers. 2016. - 582 p. https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=57290

3. Hasbulatov S.V., Pavelko A.A., Gadzhiev G.G., SHilkina L.A., Reznichenko L.A., Bakmaev A.G., Aleshin V.A., Omarov Z.M. Fazovye perekhody, teplofizicheskie svoystva i dielektricheskaya spektroskopiya ferrita vismuta s malorazmernymi RZE // Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. 2014. T. 17. № 20. S. 142-146. <http://elibrary.ru/item.asp?id=22483705>.

4. Hasbulatov S.V., Gadzhiev G.G., Pavelko A.A., Omarov Z.M., Aleshin V.A., SHilkina L.A., Reznichenko L.A. Fazovye perekhody, teplofizicheskie svoystva i dielektricheskaya spektroskopiya ferrita vismuta s

malorazmernymi RZE // Sb-k materialov 14-j Rossijskoj konferencii (s mezhd. uchastiem) po teplofizicheskim svoystvam veshchestv (RKTS-14). 15 – 17 oktyabrya 2014 g., g. Kazan'. T. 1. S. 128-131.

Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Matsaev M-S. M.

HISTORY, APPLICATION, PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC BiFeO₃/Yb

The results of studying the microstructure and dielectric properties of multiferroics of the BiFeO₃/Yb type. The results obtained can be used in the development of multiferroics of this type.

Key words: multiferroics, solid solutions, dielectric properties, microstructure.

Хасбулатов Сидек Вахаевич, к.ф.-м.н., доцент, декан физико-математического факультета, Чеченского государственного университета, г. Грозный.

E-mail: sidek80@bk.ru

Khasbulatov Sidek Vakhievich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dean of the Faculty of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

E-mail: sidek80@bk.ru

Вахажи Хас-Магомед Маусерович, к.б.н., и.о. заведующего кафедрой ПМикТ, Чеченского государственного университета (ЧР), г. Грозный.

E-mail: Macaev_hasmagomed76@mail.ru

Vakhazhi Khas-Magomed Mauserovich, Ph.D., Acting Head of the Department of PM&T, Chechen State University, Grozny.

Мацаев Магомед-Салах Масудович, студент Чеченского государственного университета, физико-математический факультет, (ЧР) г.Грозный.

E-mail: Macaev_hasmagomed76@mail.ru

Matsaev Magomed-Salakh Masudovich, a student of the Chechen State University, Faculty of Physics and Mathematics, (Chechen Republic), Grozny.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 20.04.2021

УДК 538.9

ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МУЛЬТИФЕРРОИКА BiFeO_3/La

Хасбулатов С.В., Вахажи Х.-М.М., Лепиев Х.Х

PREPARATION, STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC BiFeO_3/La

Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Lepiev Kh. R.

Приведены результаты исследования микроструктуры и диэлектрических свойств мультиферроиков типа BiFeO_3/La . Полученные результаты могут быть использованы при разработке высокотемпературных мультиферроиков данного типа.

Ключевые слова: мультиферроики, твердые растворы, диэлектрические характеристики, микроструктура.

Введение. В последние годы активный научный интерес проявляется к мультиферроикам – материалам с широким диапазоном физических свойств. Мультиферроики являются перспективными материалами нанoeлектроники, они могут быть использованы в устройствах магнитной записи и хранения информации, сенсорах и датчиках магнитного поля, системах защиты баз данных, интегральной СВЧ – технике, а также в приложениях в медицине (термотерапии), устройствах сбора энергии [1]. К таким материалам относится феррит висмута, модифицированный лантаном.

Лантан как химический элемент не удавалось открыть на протяжении 36 лет. В 1803 г. 24-летний шведский химик Йёнс Якоб Берцелиус исследовал минерал, известный теперь под названием церит. В этом минерале была обнаружена иттриевая земля и ещё одна редкая земля, очень похожая на иттриевую. Её назвали цериевой. В 1826 г. Карл Мосандер исследовал цериевую землю и заключил, что она неоднородна, что в ней, помимо церия, содержится ещё один новый элемент. Доказать сложность цериевой земли Мосандеру удалось лишь в 1839 г. Он сумел выделить новый элемент, когда в его распоряжении оказалось большее количество церита.

Новый элемент, обнаруженный в церите и мозандерите, по предложению Берцелиуса назвали лантаном. Оно было дано в честь истории его открытия и происходит от др.-греч. $\lambda\alpha\nu\theta\acute{\alpha}\nu\omega$ — «скрываюсь», «таюсь».

Лантан вместе с церием и неодимом относится к наиболее распространенным редкоземельным элементам. Содержание лантана в земной коре

порядка $2,9 \cdot 10^{-3}\%$ по массе, в морской воде — около $2,9 \cdot 10^{-6}$ мг/л.

Впервые в истории лантан применяли в газонакалильных сетках. Оксид и борид лантана используются в электронно-вакуумных лампах как материал т. н. «горячего катода», то есть катода с высокой интенсивностью потока электронов. Кристаллы с лантаном применяются в источниках катодных лучей для электронных микроскопов. Соединение состава с лантаном используется для анодного материала никель-металл-гидридных аккумуляторов. Чистый лантан практически не используется по причине своей высокой стоимости; вместо него применяется мишметалл: сплав с содержанием лантана 20—45 %. Для производства типичного гибридного автомобиля Toyota Prius требуется 10—15 кг лантана, где он входит в состав аккумулятора. Карбонат лантана используется как лекарство, имеющее собственное название Fosrenol.

Результаты исследования. Объектами исследования выступили керамики состава $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$, ($x = 0.025-0.50$, $\Delta x = 0.025 \pm 0.10$), полученные по методике, описанной в [2,3]. Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра ДРОН-3 (отфильтрованное $\text{Co}_{\text{K}\alpha}$ -излучение, схема фокусировки по Брэггу - Брентано).

Исследование поликристаллического (зёрненного) строения мультиферроиков проводили в отраженном свете на оптическом микроскопе Neophot 21 и инвертированном высокоточном микроскопе Leica DMI 5000M.

Относительная диэлектрическая проницаемость (ϵ/ϵ_0), на частотах $(20-2 \cdot 10^6)$ Гц исследовались на специальном стенде с использованием прецизионного LCR-метра Agilent E4980A в интервале температур (300–850) К.

Рентгенофазовый анализ показал, что в ТР, модифицированных La, при 0.17 до 0.50% примесные фазы отсутствуют. При концентрации La от 0.0 до 0.17% образцы содержат соединения

$\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$ и $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, относительные интенсивности линий которых не превышают 3÷5%.

Анализ дифракционных отражений ТР с добавлением Рг выявил 5 концентрационных областей, отличающихся фазовым составом. Дальнейшие исследования показали, что практически во всем интервале концентраций La зависимость $V_{\text{эксп}}(x)$ не соответствует зависимости $V_{\text{теор}}(x)$, рассчитанной для ТР замещения в А-позиции и имеет три области постоянства (инвариный эффект - ИЭ): I – $0.025 \leq x \leq 0.05$, II – $0.075 \leq x \leq 0.20$, III – $0.3 \leq x \leq 0.5$ и лишь при $0.2 < x < 0.3$ $V_{\text{эксп}}(x)$ соответствует $V_{\text{теор}}(x)$. В области ИЭ I процесс образования ТР замещения тормозится структурной нестехиометрией (дефицитом А-позиций), которая по нашим расчетам составляет не менее 4 % [2-4], здесь существует Рэ фаза. В областях ИЭ II и III расположены морфотропные области (МО), в первой сосуществуют Рэ фаза и P_1 фаза типа PbZrO_3 , во второй – ромбические фазы P_1 и P_2 типа La_xFeO_3 . Очевидно, что между МО должна существовать однофазная область P_1 . Таким образом, фазовая диаграмма системы $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ в интервале $0 \leq x \leq 0.50$ имеет следующий вид: Рэ фаза расположена в интервале $0 \leq x < 0.30$, фаза P_1 существует при $0.05 < x \leq 0.50$, фаза P_2 – в интервале $0.20 < x \leq 0.50$, две МО – Рэ+ P_1 и P_1 + P_2 расположены в интервалах $0.05 < x \leq 0.2$ и $0.2 < x \leq 0.5$, соответственно (рис. 1).

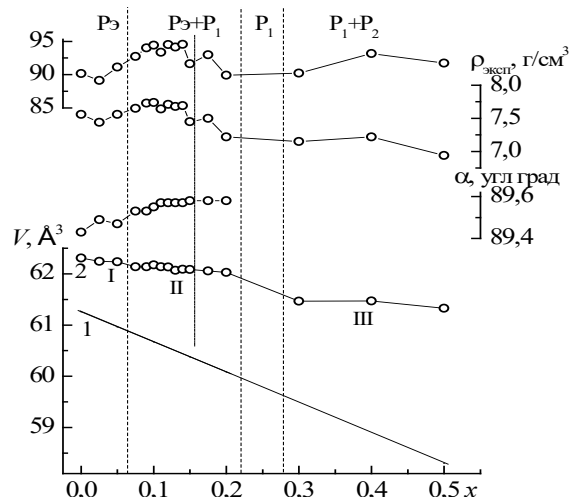


Рис. 1. Зависимости углового параметра α , теоретического (1) и экспериментального (2) объемов, V , ромбоэдрической ячейки, экспериментальной, $\rho_{\text{эксп}}$, и относительной, $\rho_{\text{отн}}$, плотностей керамик ТР $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ от x

На рис. 2 показаны фотографии микроструктуры изученных объектов, свидетельствующие о достаточно плотной зеренной структуре образцов с кристаллитами неправильной формы, размер которых зависит от количества вводимого модификатора

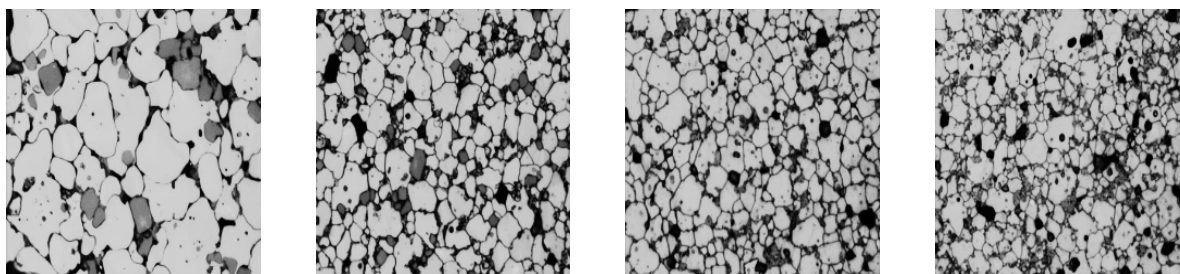


Рис. 2. Фрагменты микроструктуры керамик $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ $0.025 \leq x \leq 0.02$, увеличение 1000х, масштаб: 2 мм–1 мкм). 1, $x=0.025$; 2, $x=0.10$; 3, $x=0.15$; 4, $x=0.20$

На рис. 3 приведены зависимости характеристик диэлектрического отклика. Полученные результаты показали, что рассматриваемые зависимости испытывают аномалии двух типов. Первая – в области температур (300–450)К на зависимостях ϵ/ϵ_0 , вторая – в области (500–650)К. Обе имеют вид сильно

дисперсионных максимумов, имеющих релаксационный характер. При этом увеличение концентрации РЗЭ приводит к усложнению регистрируемых диэлектрических спектров. Подобные явления, известные под названием максвелл-вагнеровской релаксации, наблюдались ранее.

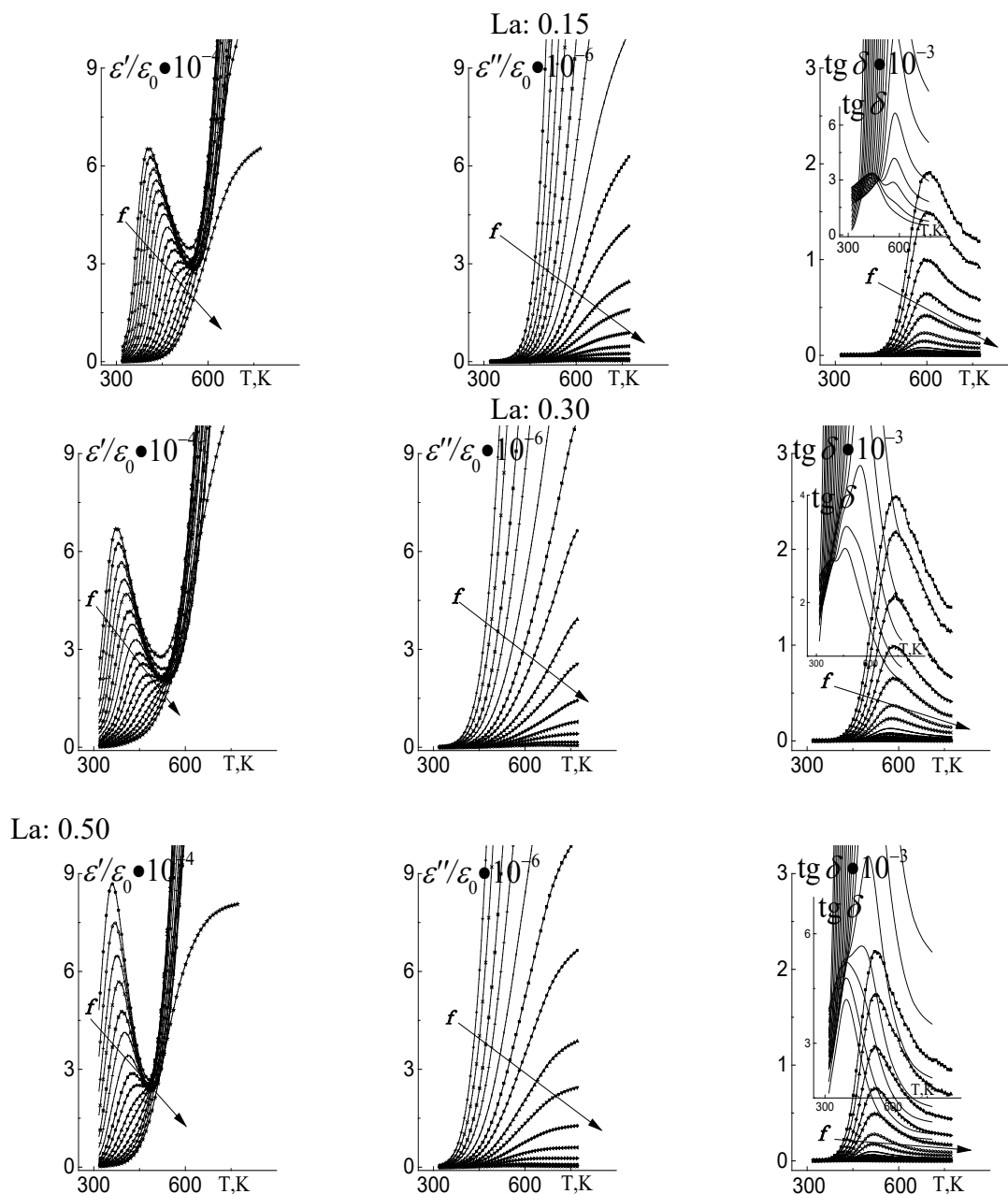


Рис. 3. Зависимости $\varepsilon/\varepsilon_0(T)$ образцов керамики $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ ($0.15 \leq x \leq 0.50$) от температуры в интервале частот $(25 \div 1,2 \cdot 10^6)$ Гц, (стрелкой указан рост частоты f)

Выводы. Оптимизация режимов синтеза и спекания позволила минимизировать содержание основных балластных примесей $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$ и $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, образующихся в процессе приготовления как чистого BiFeO_3 , так и твердых растворов на его основе, до значений менее 5% при сохранении свойственной для BiFeO_3 ромбоэдрической структуры в довольно широком концентрационном интервале вводимых модификаторов и появлении в случае с La моноклинной фазы. Относительная плотность образцов составляла более 90%. Полученные результаты целесообразно использовать при разработке устройств

спинтроники на основе высокотемпературного мутиферроика феррита висмута.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, Южный федеральный университет, 2020).

Л и т е р а т у р а

1. Титов С.В., Вербенко И.А., Усеинов А.С., Кравчук К.С., Шилкина Л.А., Алёшин В.А., Шевцова С.И., Титов В.В., Хасбулатов С.В., Резниченко Л.А. Керамический феррит висмута, модифицированный лантаном, как основа многофункциональных

сегнетомагнитных материалов // Сб.-к материалов VI международная конференция "Деформация и разрушение материалов и наноматериалов". 10-13 ноября 2015 года, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва С. 688-389.

2. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Шилкина Л.А., Алешин В.А., Резниченко Л.А. Структура, зеренное строение и диэлектрические свойства мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00-0.50$) // Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона». 2015. №3. URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3410>

3. Хасбулатов С.В., Титов С.В., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Шабанов В.М., Алешин В.А., Резниченко Л.А. Структура керамик BiFeO_3 , модифицированных лантаном // Сб.-к трудов XX Всероссийской конференции по физике сегнетоэлектриков (ВКС– XX), (Школа молодых ученых «Актуальные проблемы физики сегнетоэлектриков»). г. Красноярск. С. 67-68. ИФ СО РАН. 2014.

4. Титов С.В., Вербенко И.А., Шилкина Л.А., Алешин В.А., Шевцова С.И., Тепляков Н.А., Сидоров Н.В., Кравчук К.С., Шабанов В.М., Титов В.В., Хасбулатов С.В., Резниченко Л.А. Новая фазовая диаграмма для керамик $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$. // Сб.-к трудов Третьего Международного междисциплинарного молодежного симпозиума «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Анализ современного состояния и перспективы развития» («LFPM-2014»). г. Ростов-на-Дону–г.Туапсе 2-6 сентября. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ. 2014. Т. 2. С. 320-330.

References

1. Titov S.V., Verbenko I.A., Useinov A.S., Kravchuk K.S., SHilkina L.A., Alyoshin V.A., SHEvcova S.I., Titov V.V., Hasbulatov S.V., Reznichenko L.A. Keramicheskij ferrit vismuta, modifitsirovannyj lantanom, kak osnova mnogofunktsional'nyh segnetomagnitnyh materialov // Sb.-k materialov VI mezhdunarodnaya konferenciya "Deformatsiya i razrushenie materialov i nanomaterialov". 10-13 noyabrya 2015 goda, Institut metallurgii i materialovedeniya im. A.A. Bajkova RAN, g. Moskva С. 688-389.

2. Hasbulatov S.V., Pavelko A.A., SHilkina L.A., Aleshin V.A., Reznichenko L.A. Struktura, zerennoe stroenie i dielektricheskie svoystva mul'tiferroikov $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00-0.50$) // Elektronnyj nauchnyj zhurnal «Inzhenernyj vestnik Dona». 2015. №3. URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3410>

3. Hasbulatov S.V., Titov S.V., Verbenko I.A., SHilkina L.A., SHabanov V.M., Alyoshin V.A., Reznichenko L.A. Struktura keramik BiFeO_3 , modifitsirovannyh lantanom // Sb.-k trudov XX Vserossijskoj konferencii po fizike segnetoelektrikov (VKS– XX), (SHkola molodyh uchenykh «Aktual'nye problemy fiziki segnetoelektrikov»). g. Krasnoyarsk. S. 67-68. IF SO RAN. 2014.

4. Titov S.V., Verbenko I.A., SHilkina L.A., Aleshin V.A., SHEvcova S.I., Teplyakov N.A., Sidorov N.B.,

Kravchuk K.S., SHabanov V.M., Titov V.V., Hasbulatov S.V., Reznichenko L.A. Novaya fazovaya diagramma dlya keramik $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$. // Sb.-k trudov Tret'ego Mezhdunarodnogo mezhdisciplinarnogo molodezhnogo simpoziuma «Fizika bessvintsovyyh p'ezoaktivnyh i rodstvennyh materialov. Analiz sovremennogo sostoyaniya i perspektivy razvitiya» («LFPM-2014»). g.Rostov-na-Donu–g.Tuapse 2-6 sentyabrya. Rostov-na-Donu: Izd-vo YUFU. 2014. Т. 2. С. 320-330.

Khasbulatov S.V., Vakhazhi Kh.-M. M., Lepiev Kh. R.

PREPARATION, STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF MULTIFERROIC BiFeO_3/La

The results of the study of the microstructure and dielectric properties of BiFeO_3/La type multiferroics. The results obtained can be used in the development of high-temperature multiferroics of this type.

Key words: multiferroics, solid solutions, dielectric characteristics, microstructure

Хасбулатов Сидек Вахаевич, к.ф.-м.н., доцент, декан физико-математического факультета, Чеченского государственного университета, г. Грозный.
E-mail: sidek80@bk.ru

Khasbulatov Sidek Vakhievich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dean of the Faculty of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Вахажи Хас-Магомед Маусерович, к.б.н., и.о. заведующего кафедрой ПМиКТ, Чеченского государственного университета (ЧР), г. Грозный.
E-mail: Macaev_hasmagomed76@mail.ru

Vakhazhi Khas-Magomed Mauserovich, Ph.D., Acting Head of the Department of PM&T, Chechen State University, Grozny.

Лепиев Халид Русланович, студент Чеченского государственного университета, физико-математический факультет, (ЧР) г.Грозный.
E-mail: Macaev_hasmagomed76@mail.ru

Lepiev Khalid Ruslanovich, student of the Chechen State University, Faculty of Physics and Mathematics, Grozny.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 20.04.2021

УДК 538.9

СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА BiFeO_3/Pr

Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В, Корсунов К.А.

SPECTROSCOPY, DIELECTRIC AND THERMAL PROPERTIES BiFeO_3/Pr

Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S. V., Korsunov K.A.

Приведены результаты исследования микроструктуры, диэлектрических и теплофизических свойств высокотемпературных мультиферроиков типа BiFeO_3 . Полученные результаты могут быть использованы при разработке высокотемпературных мультиферроиков данного типа.

Ключевые слова: мультиферроики, твердые растворы, диэлектрические характеристики, теплофизические свойства, микроструктура

Введение. Значительный интерес исследователей вызывает класс материалов, которые получили название мультиферроики [1-3]. Эти вещества обладают одновременно магнитным и электрическим упорядочениями. К числу таких соединений относится феррит висмута, BiFeO_3 , в котором в области высоких температур реализуются сегнетоэлектрический (при $T_C \sim 1083\text{K}$) и антиферромагнитный (при $T_N \sim 643\text{K}$) фазовые переходы. Исследованию керамических составов на основе BiFeO_3 с помощью различных методов посвящено большое количество работ. Однако остается много нерешенных вопросов, связанных с природой фазовых превращений и особенностями поведения физических свойств мультиферроика BiFeO_3 , модифицированного редкоземельными элементами (РЗЭ).

Празеодим был открыт в 1885 году австрийским химиком Карлом Ауэром фон Вельсбахом. Он установил, что обнаруженный в 1839 году шведским химиком Карлом Мосандером элемент дидим является смесью двух элементов с близкими физическими и химическими свойствами, которым он дал названия неодим и празеодим.

Празеодим получают в смеси с другими редкоземельными элементами. При экстракционном и хроматографическом разделении и дробной кристаллизации празеодим концентрируется вместе с лёгкими лантаноидами и отделяется вместе с неодимом. Далее празеодим отделяют от неодима и переводят в чистый металл металлотермически или электролизом при 850°C .

Ионы празеодима используются для возбуждения лазерного излучения (инфракрасное излучение). Фторид празеодима используется как

лазерный материал. Оксид празеодима используется для варки стекла, которому его добавление придаёт бледно-зелёную окраску. Монотеллурид празеодима применяется в небольших (пока) количествах для регулировки свойств (ЭДС, сопротивления, прочности) у некоторых термоэлектрических сплавов на основе редких земель (коэффициент термо-ЭДС $52\text{—}55\text{ мкВ/К}$).

Соли празеодима используются в ЯМР, как сдвигающий реагент.

Сплавы празеодима с германием и кремнием используются как сверхпроводящие материалы.

Празеодим применяется для производства магнитных сердечников и повышения эффективности катодов (электровакуумная техника). Празеодим является компонентом мишметалла, легирующей добавкой к стали. Входит в состав магниевых сплавов с кобальтом и никелем.

Химические свойства. Химические свойства всех редкоземельных металлов достаточно похожи друг на друга, в этом плане не отличился и празеодим. Когда празеодим соприкасается с молекулами кислорода, начинается процесс медленного окисления. Однако скорость окисления достаточно мала, до полного покрытия окислившейся плёнкой, ему необходимо находится на открытом воздухе порядка недели.

Физические свойства. Празеодим обладает блестящим светло-серым цветом. По основным характеристикам, празеодим достаточно тугоплавкий материал, который обладает высокой плотностью среди всех редкоземельных металлов. Его плотность составляет порядка 475 дм^3 на килограмм. Данный металл достаточно ковкий и гибкий, при разогреве до определённой температуры по Цельсию он отлично поддаётся механической и физической обработке. Данный материал обладает достаточно высокой температурой внутреннего кипения, она одна из самых больших среди всех редкоземельных металлов, температура составляет порядка 3512°C . За счёт своей тягучести и способности к долгому вытягиванию, данный материал очень часто

используется в металлургии и других видах промышленности.

Объекты исследования:

• ТР состава $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.0 \dots 0.5$; $\Delta x = 0.025, 0.05, 0.10$).

Методы получения образцов. Образцы ТР всех составов получены двухстадийным твердофазным синтезом из оксидов высокой степени чистоты (чда, осч) с последующим спеканием по обычной керамической технологии.

Основные результаты. Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра ДРОН-3 и АДП.

Исследование зёрненного строения объектов проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM – 6390 L (JEOL) (Япония).

Высокотемпературные диэлектрические спектры исследовали на специальном стенде, сконструированном в НИИ физики ЮФУ, с использованием прецизионных LCR - метров Agilent 4980A, WayneKerr 6500B.

Теплофизические исследования проведены в Институте физики им. Х.И. Амиханова Дагестанского научного центра РАН

Анализ дифракционных отражений ТР с добавлением Pr выявил 5 концентрационных областей (рис.1).

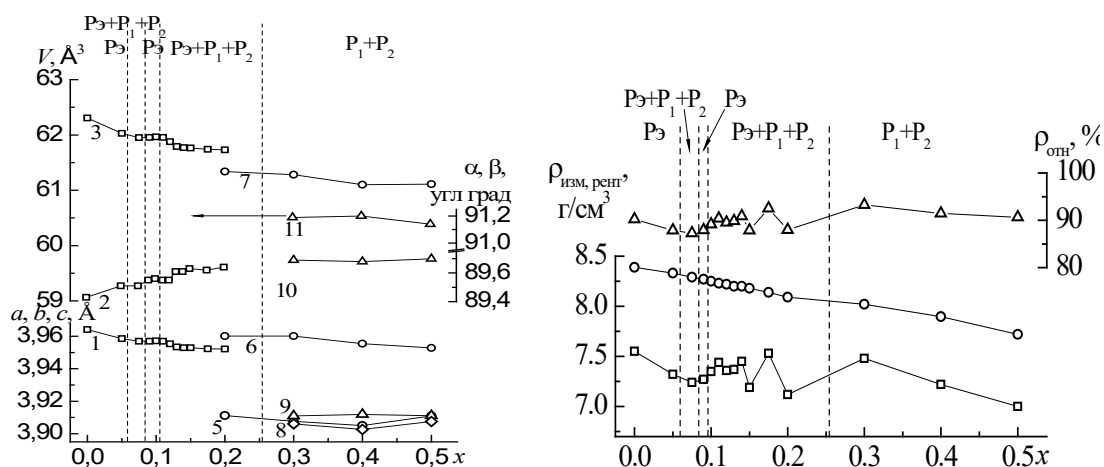


Рис. 1. Зависимости параметров, объема перовскитовой ячейки и твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$ от x : 1, 2, 3-а, α , V ромбоэдрической ячейки, 5, 6, 7-а, c , V псевдотетрагональной ячейки (фаза P_1), 8, 9, 10, 11-б, a , V , β моноклинной ячейки (фаза P_2), соответственно. Пунктирными линиями показана фазовая диаграмма системы (а); Зависимости измеренной, рентгеновской и относительной плотностей керамик твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$ от x (б)

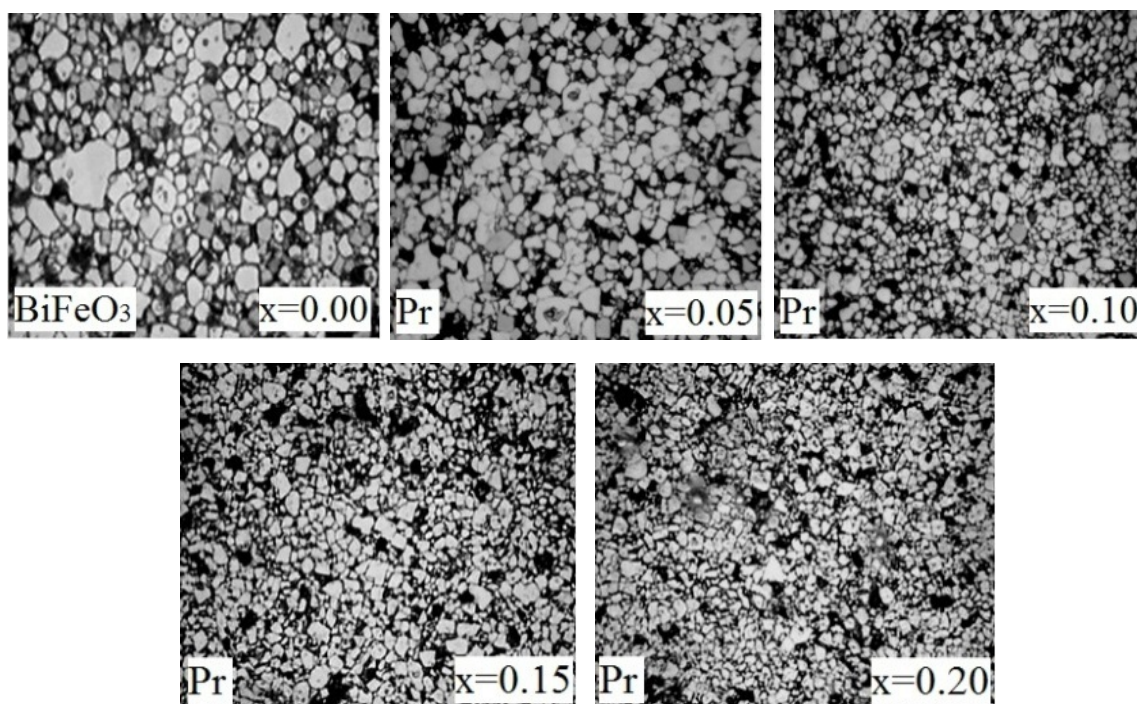


Рис. 2. Фрагменты микроструктуры керамик $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$, $0.05 \leq x \leq 0.20$, (увеличение 1000х, масштаб: 2 мм–1 мкм)

На рис. 2 показаны фотографии микроструктуры изученных объектов, свидетельствующие о достаточно плотной зеренной

структуре образцов с кристаллитами неправильной формы, размер которых зависит от количества вводимого модификатора.

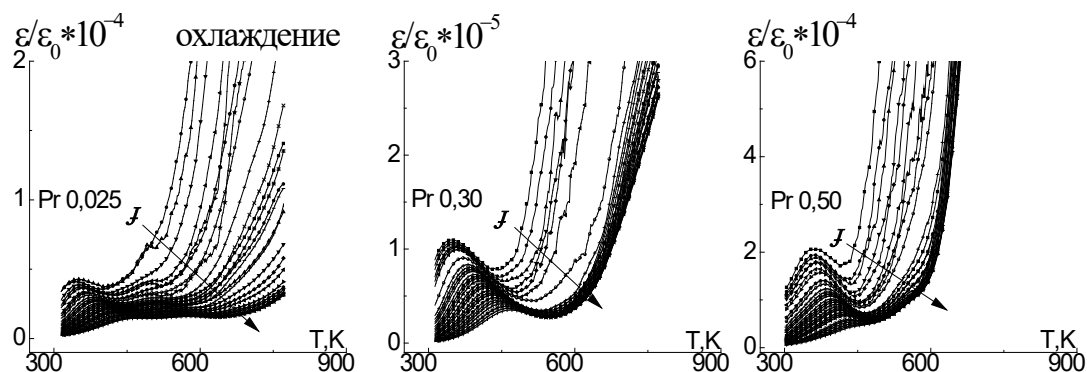


Рис. 3. Зависимости $\varepsilon/\varepsilon_0(T)$ образцов керамики $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$, $0.025 \leq x \leq 0.50$ от температуры в интервале частот $(25 \div 1,2 \cdot 10^6)$ Гц, (стрелкой указан рост частоты, f)

На рис. 3 показаны зависимости характеристик диэлектрического отклика. Анализ полученных результатов показал, что рассматриваемые зависимости испытывают аномалии двух типов. Первая – в области температур (300–450) К на зависимостях $\varepsilon/\varepsilon_0$, вторая – в области (500–650) К. Обе имеют вид сильно дисперсионных максимумов, имеющих релаксационный характер.

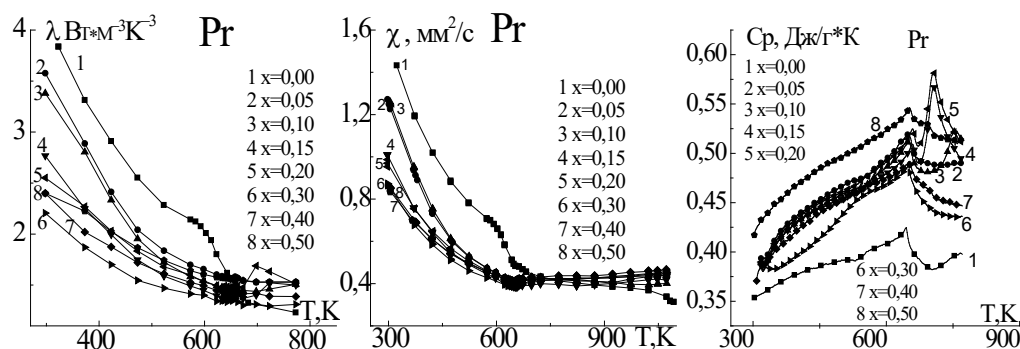


Рис. 4. Зависимости теплопроводности λ , температуропроводности χ , теплоемкости C_p керамики ТР $\text{Bi}_{1-x}\text{M}_x\text{FeO}_3$; (M-La, Pr $x=0.00-0.05-0.50$) от температуры

Зависимости λ , χ , C_p от температуры с неярко выраженными минимумами в окрестности температуры Нееля (рис. 4) характерны для подобных объектов и ранее наблюдались в родственных системах [4,5].

Выводы. Полученные результаты необходимо использовать при разработке высокотемпературных мультиферроиков типа BiFeO_3 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, Южный федеральный университет, 2020).

Л и т е р а т у р а

1. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Гаджиев Г.Г., Шилкина Л.А., Резниченко Л.А., Бахмаев А.Г., Алешин В.А., Омаров З.М. Фазовые переходы, теплофизические свойства и диэлектрическая спектроскопия феррита висмута с малоразмерными РЗЭ // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17. № 20. С. 142-146.

<http://elibrary.ru/item.asp?id=22483705>.

2. Хасбулатов С.В., Шилкина Л.А., Садыков Х.А., Павелко А.А., Козаков А.Т., Кубрин С.П., Андрюшина И.Н., Резниченко Л.А. Фазообразование, формирование микроструктуры и макроструктуры в BST-керамиках // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 11. С. 1539-1541.

3. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Шилкина Л.А., Алешин В.А., Резниченко Л.А. Получение, микроструктура и диэлектрические спектры мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$, $x = 0.00-0.50$ // Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона». 2015. №3. URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3411>

4. Каллаев С.Н., Омаров З.М., Митаров Р.Г., Билалов Б.Р., Курбайтаев А.Я., Хасбулатов С.В., Резниченко Л.А. Теплоемкость мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$ // ФТТ. 2017. Т. 59. № 7. С. 1448-1451. <http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/44613>

5. Kallaev S.N., Bakmaev A.G., Khasbulatov S.V., Riznichenko L.A. Thermal diffusivity and thermal conductivity of $\text{Bi}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0-0.30$) multiferroics // High Temperature, 2018, V. 56. No. 5. P. 1-3. DOI: 10.1134/S0018151X18050139

References

1. Xasbulatov S.V., Pavelko A.A., Gadzhiev G.G., Shilkina L.A., Reznichenko L.A., Bakmaev A.G., Aleshin V.A., Omarov Z.M. Fazovye perexody, teplofizicheskie svoystva i dielektricheskaya spektroskopiya ferrita vismuta s malorazmernymi RZE // Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. 2014. T. 17. № 20. S. 142-146.
<http://elibrary.ru/item.asp?id=22483705>.
2. Xasbulatov S.V., Shilkina L.A., Sadykov X.A., Pavelko A.A., Kozakov A.T., Kubrin S.P., Andryushina I.N., Reznichenko L.A., Fazoobrazovanie, formirovanie mikrostruktury i makrootklikov v bst-keramikax // Izv. RAN. Ser. fiz. 2016. T. 80. № 11. S. 1539-1541.
3. Xasbulatov S.V., Pavelko A.A., Shilkina L.A., Aleshin V.A., Reznichenko L.A. Poluchenie, mikrostruktura i dielektricheskie spektry multiferroikov $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$, $x = 0.00-0.50$ // Elektronnyj nauchnyj zhurnal «Inzhenernyj vestnik Dona». 2015. №3
URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2015/3411>
4. Kallaev S.N., Omarov Z.M., Mitarov R.G., Bilalov B.R., Kurbajtaev A.Ya., Xasbulatov S.V., Reznichenko L.A. Teploemkost multiferroikov $\text{Bi}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$ // Ftt. 2017. T. 59. № 7. S. 1448-1451.
<http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/44613>
5. Kallaev S.N., Bakmaev A.G., Xasbulatov S.V., Reznichenko L.A. Thermal diffusivity and thermal conductivity of $\text{Bi}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0-0.30$) multiferroics // High Temperature, 2018, V. 56. No. 5. P. 1-3. DOI: 10.1134/S0018151X18050139

**Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S. V.,
Korsunov K.A.**

**SPECTROSCOPY, DIELECTRIC AND THERMAL
PROPERTIES BiFeO_3/Pr**

The results of studying the microstructure, dielectric and thermophysical properties of high-temperature multiferroics

of the BiFeO_3 type. The results obtained can be used in the development of high-temperature multiferroics of this type.

Key words: multiferroics, solid solutions, dielectric properties, thermophysical properties, microstructure.

Абдулмуслимова Селима Анзоровна, студентка Чеченского государственного университета, физико-математический факультет, г.Грозный.
E-mail: jasm27122001@mail.ru

Abdulmuslimova Selima, student of the Chechen State University, Physics and Mathematics Faculty, Grozny.

Хасбулатов Сидек Вахаевич, к.ф.-м.н., доцент, декан физико-математического факультета, Чеченского государственного университета, г. Грозный.
E-mail: sidek80@bk.ru

Khasbulatov Sidek Vakhaevich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dean of the Faculty of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Корсунов Константин Анатольевич, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: Korsunof@mail.ru

Korsunov Konstantin, doctor of technical Sciences, Professor, head of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 20.04.2021

УДК 538.9

ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО МУЛЬТИФЕРРОИКА BiFeO₃/Sm

Абдулмуслимова С.А., Хасбулатов С.В.

RESEARCH OF HIGH TEMPERATURE MULTIFEROIC BiFeO₃/Sm

Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S.V.

Приведены результаты исследования микроструктуры, диэлектрических и теплофизических свойств высокотемпературных мультиферроиков типа BiFeO₃, модифицированного крупноразмерными ионами редкоземельного элемента Sm. Полученные результаты могут быть использованы при разработке устройств спинтроники на основе высокотемпературного мультиферроика феррита висмута.

Ключевые слова: мультиферроики, твердые растворы, диэлектрические характеристики, теплофизические свойства, микроструктура.

Исследована структура, микроструктура, диэлектрические и теплофизические свойства высокотемпературного мультиферроика феррита висмута, модифицированного крупноразмерными ионами редкоземельного элемента Sm [1-3].

Объектом выступили керамики состава Bi_{1-x}Sm_xFeO₃ (концентрация = 0.05–0.50, шаг = 5÷10%). Образцы получены по обычной керамической технологии, включающей двухстадийный синтез из оксидов Bi₂O₃, Fe₂O₃, (PЗЭ)₂O₃ высокой степени чистоты (чда, осч) при температурах синтеза из интервала (1000÷1050)К (в зависимости от состава), и последующее спекание без приложения давления при температурах из интервала (1140–1240) К (в зависимости от состава).

Рентгенографические исследования при комнатной температуре проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометра ДРОН-3 (отфильтрованное Co_{Kα}-излучение, схема фокусировки по Брэггу - Брентано).

Исследование поликристаллического (зёренного) строения мультиферроиков проводили в отраженном свете на оптическом микроскопе Neophot 21 и инвертированном высокоточном микроскопе Leica DMI 5000M.

Теплофизические исследования проводились в Институте физики им. Х.И.Амирханова ДНЦ РАН. Теплопроводность вычислялась по формуле:

$$\lambda = C_p \rho \chi,$$

где C_p – теплоемкость, ρ – плотность, χ – температуропроводность образцов.

Температуропроводность (χ) измерялась компенсационным методом – на установке LFA-457

”MicroFlash” немецкой фирмы NEZSCH, теплоемкость (C_p) – с помощью дифференциального сканирующего калориметра DSC-204 F1 немецкой фирмы NEZSCH, в интервале температур (300÷1200) К.

«Поведение» действительной и мнимой частей относительной диэлектрической проницаемости (ϵ'/ϵ_0 и ϵ''/ϵ_0) на частотах (20–2·10⁶) Гц исследовалось на специальном стенде с использованием прецизионного LCR-метра Agilent E4980A в интервалах температур (300–900) К.

Металлический самарий получают методами металлотермии и электролитически, в зависимости от структуры производства и экономических показателей. Мировое производство самария оценивается в несколько сотен тонн, большая его часть выделяется ионообменными методами из монацитового песка.

Магнитные материалы. Самарий широко используется для производства сверхмощных постоянных магнитов. Термоэлектрические материалы. Учитывая сверхвысокую радиационную стойкость самария, моносulfид самария может послужить для конструирования атомных реакторов, напрямую преобразующих тепло и отчасти ионизирующее излучение в электроэнергию (космические реакторы, реакторы для глубокого космоса).

Тензочувствительные материалы. Ядерная энергетика. В ядерной энергетике самарий используется для управления атомными реакторами, так как сечение захвата тепловых нейтронов для природного самария превышает 6800 барн. Манганаты самария и стронция обладают гигантским магнитокалорическим эффектом и могут быть использованы для конструирования магнитных холодильников.

Гигантский магнитоэлектрический эффект. Молибдат самария обнаруживает на порядок больший по величине магнитоэлектрический эффект, чем, например, молибдат гадолиния, и интенсивно изучается.

Производство стекла. Самарий может быть использован для возбуждения лазерного излучения в жидких и твердых средах.

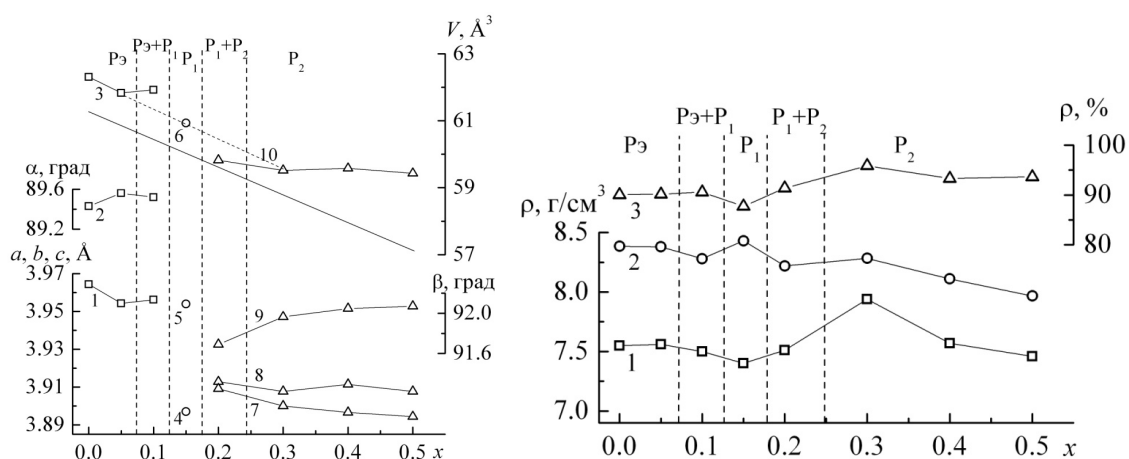


Рис.1. а-Зависимости параметров, экспериментального и теоретического (прямая линия) объемов перовскитовой ячейки твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ от x и фазовая диаграмма системы: 1, 2, 3-а, V ромбоэдрической ячейки, 4, 5, 6 - c , a , V псевдотетрагональной ячейки (фаза P_1), 7, 8, 9, 10- b , a , β , V моноклинной ячейки (фаза P_2). б- Зависимости измеренной (1), рентгеновской (2) и относительной плотностей керамик твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ от x

Результаты рентгенографических исследований твердых растворов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ приведены на рис. 1.

Анализ публикаций на тему структурных исследований системы твердых растворов (ТР) $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ показал значительный разброс данных, касающихся как симметрии ТР, так и интервалов, в которых происходят фазовые переходы.

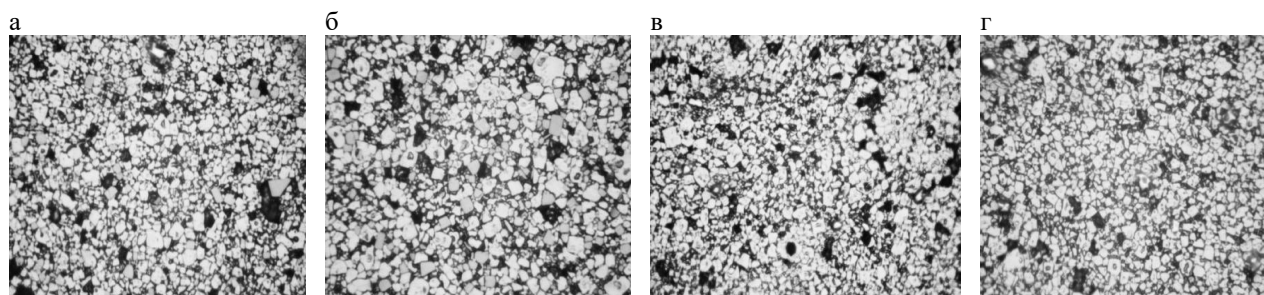
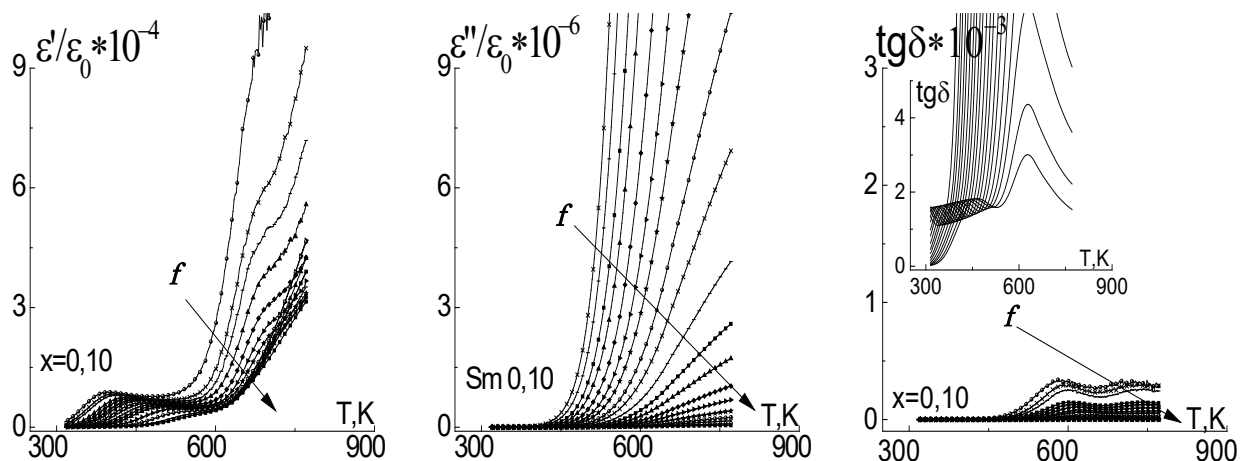


Рис. 2. Микроструктуры образцов керамики $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$, $x = (0.05(\text{a}), 0.10(\text{б}), 0.15(\text{в}), 0.20(\text{г}))$. Увеличение: – 500х (масштаб - 0,5 мм – 1 мкм)

На рис. 2 показаны фотографии наиболее типичной микроструктуры изученных объектов. После термического травления возникает изображение границ кристаллитов как в основной светлой, так и в примесных фазах, представленное на поверхности тонкими темными замкнутыми вокруг зерен линиями.



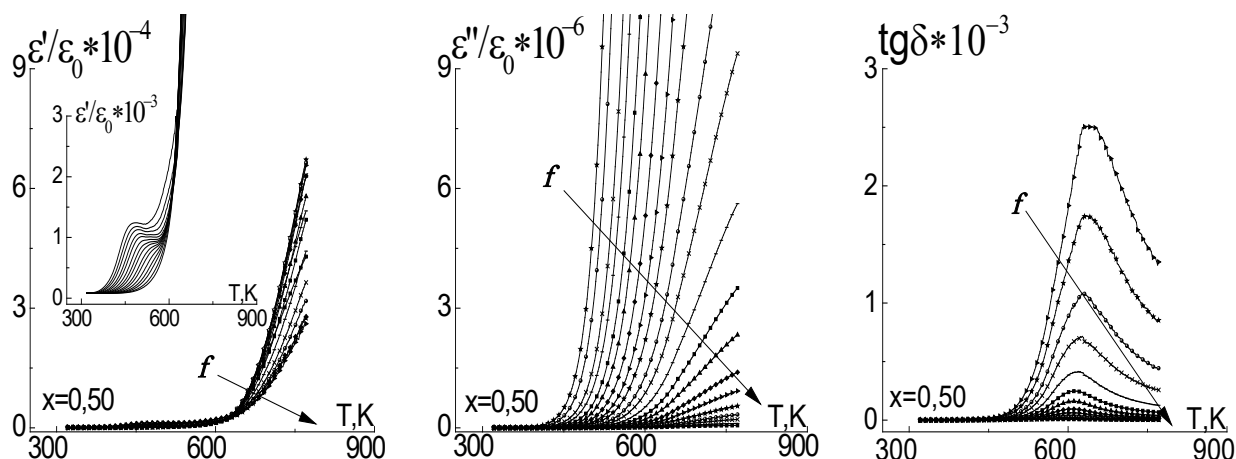


Рис. 3. Зависимости $\varepsilon'/\varepsilon_0$, $\varepsilon''/\varepsilon_0$, $\text{tg}\delta$ (Т) образцов керамики $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ $0.00 \leq x \leq 0.50$ от температуры в интервале частот $(25 \div 1,2 \cdot 10^6)$ Гц, (стрелкой указан рост частоты, f)

Полученные диэлектрические спектры свидетельствуют как о крайней неоднородности объектов, вызывающей заметную дисперсию диэлектрических свойств, так и о повышенной электропроводности материалов (рис. 3).

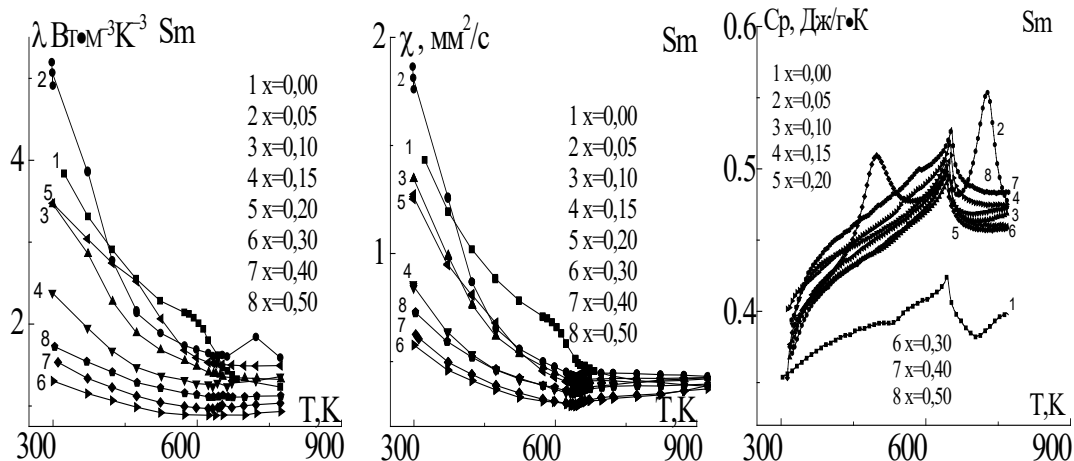


Рис. 4. Зависимости теплопроводности λ , температуропроводности χ , теплоемкости C_p керамики $\text{TP Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ $0.00 \leq x \leq 0.50$ от температуры

Зависимости теплофизических характеристик от концентрации вводимых модификаторов традиционны с минимумами и максимумами вблизи температуры Нееля ($T_N \sim 643\text{K}$) приведены на рис. 4 [4,5].

Оптимизация режимов синтеза и спекания позволила минимизировать содержание основных балластных примесей $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$ и $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$, образующихся в процессе приготовления как чистого BiFeO_3 , так и твердых растворов на его основе, до значений менее 5%. При этом, помимо свойственной для BiFeO_3 ромбоэдрической структуры, в узком концентрационном диапазоне вводимых модификаторов наблюдалось появление моноклинной фазы. Относительная плотность образцов составляла более 90%.

Выводы. Полученные результаты целесообразно использовать при разработке

устройств спинтроники на основе высокотемпературного мультиферроика феррита висмута.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, Южный федеральный университет, 2020).

Л и т е р а т у р а

1. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Шилкина Л.А., Алешин В.А., Резниченко Л.А. Исследования высокотемпературного мультиферроика феррита висмута, легированного самарием // Электронный научный журнал «Инженерный вестник Дона». 2015. №4. URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2015/3428>
2. Хасбулатов С.В., Павелко А.А., Гаджиев Г.Г., Шилкина Л.А., Резниченко Л.А., Бакмаев А.Г., Алешин В.А., Омаров З.М. Фазовые переходы, теплофизические

свойства и диэлектрическая спектроскопия феррита висмута с малоразмерными РЗЭ // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17. № 20. – С. 142-146.

3. Каллаев С.Н., Садыков С.А., Омаров З.М., Курбайтаев А.Я., Резниченко Л.А., Хасбулатов С.В. Диэлектрические свойства и теплоемкость мультиферроика $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ // ФТТ. 2016. Т. 58. № 4. С. 664-666. <http://journals.ioffe.ru/articles/42853>

4. Гаджиев Г.Г., Омаров З.М., Бакмаев А.Г., Хасбулатов С.В., Вербенко И.А. Теплофизические свойства модифицированного феррита висмута в широком интервале вариаций химического состава и температур. // Сб-к трудов Третьего Международного междисциплинарного молодежного симпозиума «Физика бесвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Анализ современного состояния и перспективы развития» («LFPM-2014»). г.Ростов-на-Дону – г.Туапсе, 2-6 сентября. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ. 2014. Т. 1. С. 347-348.

5. Khasbulatov S.V., Pavelko A.A., Reznichenko L.A., Shilkina L.A., Omarov Z.M., Aleshin V.A. The Phase Composition, Grain Structure, Dielectric Spectra And The Heat Capacity Of $\text{Bi}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_3$ Solid Solutions. (Chapter 40, P. 279-286) // Monograph. «Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications». New York: Nova Science Publishers. 2017. - 785 p.

References

1. Xasbulatov S.V., Pavelko A.A., Shilkina L.A., Aleshin V.A., Reznichenko L.A. Issledovaniya vysokotemperaturnogo multiferroika ferrita vismута, legirovannogo samariem // Elektronnyj nauchnyj zhurnal «Inzhenernyj vestnik Dona». 2015. №4. URL: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2015/3428>

2. Xasbulatov S.V., Pavelko A.A., Gadzhiev G.G., Shilkina L.A., Reznichenko L.A., Bakmaev A.G., Aleshin V.A., Omarov Z.M. Fazovye perexody, teplofizicheskie svoystva i dielektricheskaya spektroskopiya ferrita vismута s malorazmernymi RZE // Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. 2014. Т. 17. № 20. С. 142-146.

3. Kallaev S.N., Sadykov S.A., Omarov Z.M., Kurбайтаев А.Я., Reznichenko L.A., Xasbulatov S.V. Dielektricheskie svoystva i teploemkost multiferroika $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ // Ftt. 2016. Т. 58. № 4. С. 664-666. <http://journals.ioffe.ru/articles/42853>

4. Gadzhiev G.G., Omarov Z.M., Bakmaev A.G., Xasbulatov S.V., Verbenko I.A. Teplofizicheskie svoystva modifitsirovannogo ferrita vismута v shirokom intervale variacij ximicheskogo sostava i temperatur. // Sb-k trudov

tretego mezhdunarodnogo mezhdisciplinarnogo molodezhnogo simpoziuma «Fizika bessvincovykh pezoaktivnykh i rodstvennykh materialov. Analiz sovremennogo sostoyaniya i perspektivy razvitiya» («LFPM-2014»). g.Rostov-na-Donu – g.Tuapse, 2-6 sentyabrya. Rostov-na-Donu: Iizd-vo YuFU. 2014. Т. 1. С. 347-348.

5. Khasbulatov S.V., Pavelko A.A., Reznichenko L.A., Shilkina L.A., Omarov Z.M., Aleshin V.A. The Phase Composition, Grain Structure, Dielectric Spectra And The Heat Capacity Of $\text{Bi}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_3$ Solid Solutions. (Chapter 40, P. 279-286) // Monograph. «Physics, Mechanics of New Materials and Their Applications». New York: Nova Science Publishers. 2017. - 785 p.

Abdulmuslimova S.A., Khasbulatov S.V.

RESEARCH OF HIGH TEMPERATURE MULTIFEROIC BiFeO_3/Sm

The results of a study of the microstructure, dielectric and thermophysical properties of high-temperature multiferroics of the BiFeO_3 type modified with large-size ions of the rare-earth element Sm. The results obtained can be used in the development of spintronic devices based on the high-temperature multiferroic bismuth ferrite.

Key words: multiferroics, solid solutions, dielectric characteristics, thermophysical properties, microstructure

Абдулмуслимова Селима Анзоровна, студентка Чеченского государственного университета, физико-математический факультет, г.Грозный.

E-mail: jasm27122001@mail.ru

Abdulmuslimova Selima, student of the Chechen State University, Physics and Mathematics Faculty, Grozny.

Хасбулатов Сидек Вахаевич, к.ф.-м.н., доцент, декан физико-математического факультета, Чеченского государственного университета, г. Грозный.

E-mail: sidek80@bk.ru

Khasbulatov Sidek Vakhaevich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dean of the Faculty of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 20.04.2021

СЕКЦИЯ 2

ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

УДК 577.2:577.3

МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЯЧИХ И ХОЛОДНЫХ ПЯТЕН УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО МУТАГЕНЕЗА НА УЧСТКЕ ДВУНИТЕВОЙ ДНК С ОДНОРОДНЫМ НУКЛЕОТИДНЫМ СОСТАВОМ

Гребнева Е.А.

POTENTIAL CURVED LINES FOR THE HYDROGEN BOND PROTON IN A WATER DIMER AT DIFFERENT LENGTHS OF HYDROGEN BOND AND THEIR VALUE FOR POLYMERABLE-TAUTOMERIC MODELS

Grebneva H.A.

В рамках полимеразно-таутомерной модели ультрафиолетового мутагенеза был предложен механизм образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза. Рассчитаны энергии, которые могут передаваться на цис-син циклобутановые пиримидиновые димеры, которые могут образовываться на запаздывающей нити части участка ДНК *surF*, состоящей только из пиримидинов. Показано, что горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза являются те цис-син циклобутановые пиримидиновые димеры, на которые передается больше энергии, чем на другие такие же цис-син циклобутановые пиримидиновые димеры. Исследованы причины, по которым на участке ДНК, состоящем из одних пиримидинов, вероятность образования мутаций резко повышается.

Ключевые слова: ультрафиолетовый мутагенез, редкие таутомерные формы оснований ДНК, горячие и холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза, передача энергии возбуждения по ДНК, синглетные уровни энергии оснований ДНК, триплетные уровни энергии оснований ДНК.

Введение. Общепринятая в настоящее время полимеразная парадигма мутагенеза опирается на гипотезу о том, что причиной мутаций являются случайные ошибки ферментов ДНК-полимераз. Считается, что эти ферменты встраивают напротив матричных оснований ДНК, находящихся в канонических таутомерных формах, случайные канонические основания, которые не образуют с матричными основаниями водородные связи [1]. Однако полимеразная парадигма противоречит экспериментальным данным и не способна объяснить практически ни одного явления

мутагенеза [3]. Поэтому я предложила и разрабатываю полимеразно-таутомерные модели мишенного ультрафиолетового мутагенеза, радиационно-индуцированных байстендер эффектов и радиационно-индуцированной нестабильности генома [2-17]. Кроме того, был предложен механизм образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза [16]. Для изучения свойств возбужденных водородных связей в молекуле ДНК, Толпыго и Гребнева выполнили несколько циклов квантово-механических расчетов [17]. Эти результаты послужили основой для построения механизма образования редких таутомерных форм в спаренных основаниях ДНК [2].

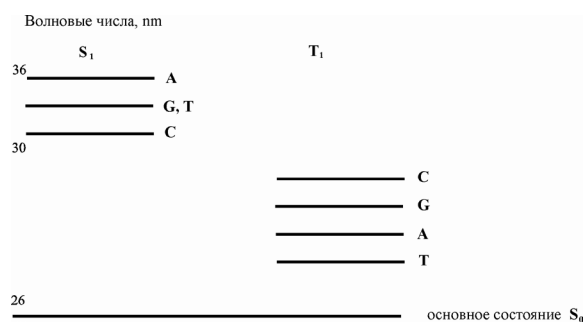


Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней различных оснований ДНК [24]: S_1 – нижний синглетный уровень, T_1 – нижний триплетный уровень

Полимеразно-таутомерные модели опираются на идею Уотсона и Крика о том, что причиной мутагенеза может быть способность оснований ДНК, связанных между собой водородными связями, находиться в различных таутомерных формах [18]. Основания в редких таутомерных формах были найдены в молекулах ДНК [19]. Как показали эксперименты, в активных центрах ДНК-полимераз были найдены неканонические пары оснований, одно из которых в каждой паре оснований находится в редкой таутомерной форме [20, 21]. Эти результаты [20, 21] являются прямым экспериментальным подтверждением идеи, предложенной Уотсоном и Криком [18], и полимеразно-таутомерных моделей [2-17].

Мутации, вызванные ультрафиолетовым светом, распределены по молекуле ДНК неравномерно. Большая их часть сосредоточена в так называемых горячих пятнах ультрафиолетового мутагенеза. На некоторых участках их никогда не бывает, это холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза [22]. *Цис-син* цитозинового циклобутановые димеры чаще приводят к мутациям, чем тиминовые. А горячие пятна ультрафиолетового мутагенеза, как правило, совпадают с *цис-син* циклобутановыми димерами, включающими молекулы цитозина и тимина (СТ). Как показывает эксперимент, на СТ сайтах фотопродукты образуются довольно часто [22].

Автором была высказана идея, что вероятность образования мутаций на различных участках ДНК может зависеть от процессов распространения энергии возбуждения по молекуле ДНК, и предложена модель образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза [16]. Для лидирующей нити участка ДНК, кодирующего супрессорную транспортную РНК *supF* [1], были исследованы несколько горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза [16].

Почему *цис-син* циклобутановые пиримидиновые димеры $T_{154}C_{155}$ и $C_{156}T_{157}$, образующиеся на ДНК *supF*, являются горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза? На запаздывающей нити молекулы ДНК *supF* образовался *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер $T_{145}C_{146}$ (рис. 2), напротив цитозина C_{146} появилась одна мутация замены оснований [1]. Как показано в табл. 3, на $T_{145}C_{146}$ может быть передано довольно много ($3,75 E_T^{Tr}$) энергии возбуждения. А на цитозин C_{146} может быть передано $2,5 E_C^{Tr}$ энергии возбуждения. Другими словами этой энергии вполне достаточно для образования *цис-син* циклобутанового пиримидинового димера $T_{145}C_{146}$ и образования одной мутации.

На запаздывающей нити молекулы ДНК *supF* образовался *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер $T_{148}C_{149}$ (рис. 2), напротив цитозина C_{149} не появилось ни одной мутации [1].

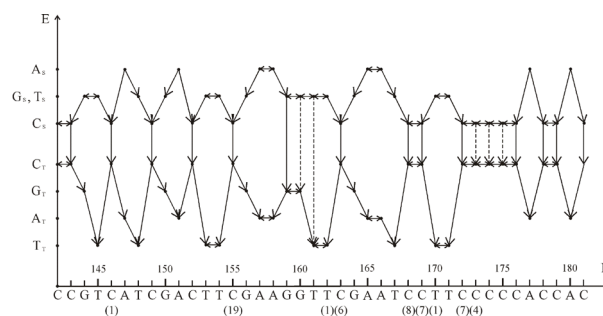


Рис. 2. Часть участка № 142 - № 181 запаздывающей нити ДНК *supF* гена, на котором в [1] были получены горячие пятна ультрафиолетового мутагенеза. По оси абсцисс отложены основания и их номера, а по оси ординат – их триплетные и синглетные уровни энергии. В скобках указано количество мутаций, образовавшихся напротив данного основания ДНК

Как показано в табл. 1, на $T_{148}C_{149}$ может быть передано $3,25 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения. А на цитозин C_{149} может быть передано довольно много ($4 E_C^{Tr}$) энергии возбуждения. Для того чтобы оценить вероятность образования мутаций на данном сайте нужно сравнить его с другим аналогичным сайтом.

Как показано в табл. 1, на $T_{153}T_{154}$ может быть передано $3,25 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения. Как было показано в полимеразно-таутомерной модели ультрафиолетового мутагенеза, к мишенным мутациям могут приводить только те циклобутановые пиримидиновые димеры, одно или оба основания в которых находятся в редких таутомерных формах. А молекулы цитозина значительно чаще изменяют свои таутомерные состояния, чем молекулы тимина [23]]. Именно по этой причине *цис-син* циклобутановый тиминный димер $T_{153}T_{154}$ является холодным пятном ультрафиолетового мутагенеза.

Как показано в табл. 1, на $T_{154}C_{155}$ может быть передано по $3,25 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения. На цитозин C_{155} может быть передано довольно много ($4 E_C^{Tr}$) энергии возбуждения. Кроме того, цитозин C_{155} находится на участке ДНК, где подряд расположены 4 пиримидина C_{152} , T_{153} , T_{154} и C_{155} (рис. 2). Поэтому *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер $T_{154}C_{155}$ является горячим пятном ультрафиолетового мутагенеза.

На запаздывающей нити молекулы ДНК *supF* находится участок ДНК, на котором подряд расположены 3 пиримидина T_{161} , T_{162} и C_{163} (рис. 2). Напротив C_{163} образовалось 6 мутаций, транзиций $C \rightarrow G$ и $T \rightarrow A$, а напротив T_{162} образовалась одна мутация, транзигция $T \rightarrow A$ и $C \rightarrow G$ [1]. При этом могут образоваться 2 *цис-син* циклобутановых пиримидиновых димера $T_{161}T_{162}$ и $T_{162}C_{163}$ (рис. 2). Оба эти *цис-син* циклобутановых пиримидиновых димера $T_{161}T_{162}$ и $T_{162}C_{163}$ являются горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза [1]. Как показано в табл. 1, на $T_{161}T_{162}$ может быть передано $4 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения, а на T_{162} может быть

передано $5 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения. То есть при образовании *цис-син* циклобутанового пиримидинового димера $T_{161}T_{162}$ может быть использовано довольно много энергии. Кроме того, *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер $T_{161}T_{162}$ находится на участке ДНК, состоящим из

трех пиримидинов, что удваивает вероятность образования мутаций. Тиминовые димеры довольно редко приводят к мутациям, поэтому даже одна мутация, образовавшаяся напротив тиминового димера, позволяет считать его горячим пятном ультрафиолетового мутагенеза.

Таблица 1

Горячие и холодные пятна ультрафиолетового мутагенеза, образующиеся на № 167 - № 181 запаздывающей нити участка ДНК *supF* [1] (энергия дается в величинах энергии триплетного уровня тимина E_T^{Tr} или в величинах энергии триплетного уровня цитозина E_C^{Tr}).

№ п/п	Сайт ДНК	Пятно	Энергия, которая может передаваться на данный сайт ДНК	Раз-мер пиримид. уч-ка	Кол-во оснований	Кол-во мутаций
1.	$T_{167}C_{168}$	Гор.	$4,5 E_T^{Tr}$	10	15	8
	C_{168}		$2,5 E_C^{Tr}$	10	7	8
2.	$C_{168}C_{169}$	Гор.	$5 E_C^{Tr}$	10	7	15 (8)
	C_{169}		$2,5 E_C^{Tr}$	10	7	7
3.	$C_{169}T_{170}$	Гор.	$4,125 E_T^{Tr}$	10	13	4
	T_{170}		$2,5 E_T^{Tr}$	10	13	1
4.	$T_{170}T_{171}$	Гор.	$5,75 E_T^{Tr}$	10	13	1
	T_{171}		$3,25 E_T^{Tr}$	10	13	0
5.	$T_{171}C_{172}$	Хол.	$5,75 E_T^{Tr}$	10	8	0
	C_{172}		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	2
6.	$C_{172}C_{173}$	Гор.	$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	6(4)
	C_{173}		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	4
7.	$C_{173}C_{174}$		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	2
	C_{174}		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	0
8.	$C_{174}C_{175}$	Хол.	$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	0
	C_{175}		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	0
9.	$C_{175}C_{176}$	Хол.	$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	0
	C_{176}		$3,25 E_C^{Tr}$	10	8	0
10.	$C_{178}C_{179}$	Хол.	$3 E_C^{Tr}$	2	4	0

Как показано в табл. 1, на $T_{162}C_{163}$ может быть передано $4 E_T^{Tr}$ энергии возбуждения, а на цитозин C_{163} может быть передано $6 E_C^{Tr}$ энергии возбуждения, то есть очень много энергии возбуждения. Это является одной из причин, почему напротив C_{163} образовалось 6 мутаций. Кроме того, *цис-син* циклобутановый пиримидиновый димер $T_{162}C_{163}$ находится на участке ДНК, состоящим из трех пиримидинов, что увеличивает вероятность образования мутаций.

Выводы. Анализ горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза показал, что горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза являются те циклобутановые димеры цитозин – тимин или тимин – цитозин, на которые стекает больше энергии, чем на такие же димеры цитозин – тимин или тимин – цитозин. Причиной этого являются процессы распространения энергии по молекуле ДНК и соотношение синглетных и триплетных уровней различных оснований. Часть энергии возбуждения идет на образование циклобутановых пиримидиновых димеров, а добавочная энергия может вызывать изменения таутомерных состояний в основаниях ДНК, входящих в пиримидиновые циклобутановые димеры, что, в свою очередь, может быть

источником мутаций [14]. Кроме того надо учитывать энергию возбуждения, которая может передаваться на триплетный уровень данного основания и максимальную энергию возбуждения, которая может передаваться на данные основания. Анализ мутаций, образующихся на различных участках ДНК, показал, что мутации чаще образуются на участках ДНК, состоящих из трех и больше пиримидинов. При этом вероятность образования пиримидиновых димеров возрастает. Кроме того, на участке ДНК, состоящим из одних цитозинов, мутации чаще образовывались напротив молекул цитозина, рядом с которыми находились молекулы тимина. У тимина более низкий уровень энергии, чем у аденина [24], поэтому энергия возбуждения на однородном участке ДНК будет с большей вероятностью передаваться на тимин, чем на аденин. Это могло быть одной из причин того, что напротив молекул цитозина, которые расположены ближе к молекулам тимина, образовались мутации, а напротив молекул цитозина, которые расположены на другом конце участка ДНК, состоящего из молекул цитозина, мутации не появились.

Как показывают экспериментальные данные, *цис-син* циклобутановые тиминового димеры гораздо

реже приводят к мутациям, чем *цис-син* циклобутановые цитозиновые димеры, а чаще всего мутации вызывают *цис-син* циклобутановые димеры, включающие цитозин и тимин. Было показано в полимеразно-таутомерных моделях мутагенеза [13, 15-27] что к мутациям приводят только те *цис-син* циклобутановые пиримидиновые димеры, одно или оба основания которых изменили свои таутомерные состояния. А молекулы цитозина значительно чаще изменяют свои таутомерные состояния, чем молекулы тимина [23]. Именно по этой причине *цис-син* циклобутановые тиминовые димеры чаще всего являются холодными пятнами ультрафиолетового мутагенеза, а *цис-син* циклобутановые пиримидиновые димеры ТС и СС являются горячими пятнами ультрафиолетового мутагенеза.

Предложен метод расчета относительных вероятностей образования *цис-син* циклобутановых пиримидиновых димеров и образования редких таутомерных форм оснований ДНК, входящих в состав этих димеров. Другими словами, предложен метод, позволяющий предсказать относительную вероятность образования горячих и холодных пятен ультрафиолетового мутагенеза. Для расчета необходимо знать только последовательность оснований ДНК или РНК и соотношение синглетных и триплетных уровней оснований ДНК и РНК.

Этот метод может быть использован для оценки относительных вероятностей образования мутаций на любых сайтах одонитевой РНК, такой как коронавируса Sars-cov-2, который вызывает болезнь COVID-19. Для этого необходимо разработать механизм образования редких таутомерных форм оснований в одонитевой РНК. Кроме того, необходимо найти значения синглетных и триплетных уровней энергии молекулы урацила или их относительное положение относительно других оснований.

Сделан вывод, что модель является перспективной и не противоречит экспериментальным фактам. Для того чтобы интерпретировать результаты расчетов, прежде чем делать какие-либо предсказания, необходимо дальнейшее изучение имеющихся экспериментальных данных.

Л и т е р а т у р а

1. J.-S. Taylor. New structural and mechanistic insight into the A-rule and the instructional and non-instructional behavior of DNA photoproducts and other lesions. *Mutat. Res.*, 510, 55-70, 2002.
2. H.A. Grebneva. Nature and possible mechanisms formation of potential mutations arising at emerging of thymine dimers after irradiation of double-stranded DNA by ultraviolet light. *J. Mol. Struct.*, 645, 133-143, 2003.
3. H.A. Grebneva. One of mechanisms of targeted substitution mutations formation at SOS-replication of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. *Environ. Mol. Mutagen.*, 47, 733-745, 2006.
4. Е.А. Гребнева. Механизмы мишенных мутаций сдвига рамки считывания – появление инсерций при склонном к ошибкам или SOS синтезе молекулы ДНК, содержащей *цис-син* циклобутановые тиминовые димеры. *Мол. Биол.*, 48, 531–542, 2014.
5. H.A. Grebneva. A polymerase – tautomeric model for targeted frameshift mutations: deletions formation during error-prone or SOS replication of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. *J. Phot. Mat. Techn.*, 1, 19-26, 2015.
6. Е.А. Гребнева. Механизмы образования мишенных сложных инсерций при синтезе молекулы ДНК, содержащей *цис-син* циклобутановые тиминовые димеры. *Докл. НАН Украины*, № 5, 145-154, 2015.
7. H.A. Grebneva. A Polymerase-tautomeric model for targeted substitution mutations formation during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane cytosine dimers. *Int. J. Mol. Biology: Open Access*, 1, 1-16, 2016.
8. H.A. Grebneva. Polymerase-tautomeric model for ultraviolet mutagenesis. Targeted base substitution and frameshift mutations caused by *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Saarbrucken, Germany. LAP LAMBERT Academic Publishing, pp. 132, 2017.
9. H.A. Grebneva. A polymerase–tautomeric model for radiation-induced bystander effects: a model for untargeted substitution mutagenesis during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA containing thymine and adenine in rare tautomeric forms. *Int. J. Mol. Biology: Open Access*, 2, 1-14, 2017.
10. H.A. Grebneva. A polymerase-tautomeric model for radiation-induced genomic instability: targeted delayed substitution mutations during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane cytosine dimers. *Int. J. Mol. Biology: Open Access*, 3, 125–141, 2018.
11. Е.А. Гребнева. Полимеразно-таутомерная модель радиационно-индуцированной нестабильности генома: мишенные задерживающиеся мутации замены оснований при склонном к ошибкам и SOS синтезе двунитевой ДНК, содержащей *цис-син* циклобутановые тиминовые димеры. *Физика и техника высоких давлений*, т. 27, № 3, с. 131-148, 2017.
12. Е.А. Гребнева. Обзор полимеразно-таутомерных моделей мишенного ультрафиолетового мутагенеза при склонном к ошибкам и SOS синтезе двунитевой ДНК, содержащей *цис-син* циклобутановые тиминовые димеры. *Физика и техника высоких давлений*, 28, 98-121, 2018.
13. H.A. Grebneva. Paradigm change in mutagenesis: polymerase-tautomeric models for targeted, delayed and untargeted ultraviolet mutagenesis during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. *Int. J. Molec. Biology: Open Access*, 4, 1-15, 2019.
14. H. A. Grebneva. 2019. Polymerase-tautomeric model for untargeted delayed base substitution mutations formation during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA containing thymine and adenine in some rare tautomeric forms. *Journal of oncology research*, 2019, vol. 1, no. 2, p. 24-37.
15. H. A. Grebneva. Polymerase-tautomeric models for A-rule during error-prone and SOS synthesis of DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers or thymines and adenines in some rare tautomeric forms. *Trends in Cell & Molecular Biology*, 2019, vol. 14, p. 51 – 68.
16. Е.А. Гребнева. Природа и механизмы образования горячих и холодных пятен

ультрафиолетового мутагенеза. Доповіді національної академії наук України 2012, № 10. С. 181-187. (ДАНУ-2012гор.пята). Докл. НАН України 2012 № 10:181-187.

17. Е.А. Гребнева. 2019. Теория тепловой релаксации энергии возбуждения водородных связей в ДНК. Ее вклад в ультрафиолетовый мутагенез. Saarbrücken, Germany. LAP LAMBERT Academic Publishing, 345 с.

18. J.D. Watson, F.H. Crick. The structure of DNA. Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol., 18, 123-131, 1953.

19. Н. И. Остапенко, Ю. А. Скрышевский, А. К. Кадашук, Ю. В. Рубин. Термолюминесценция кристаллов оснований нуклеиновых кислот. Известия АН СССР, 54, 445-449, 1990.

20. K. Bebenek, L.C. Pedersen, T.A. Kunkel. Replication infidelity via a mismatch with Watson-Crick geometry. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 108, 1862-1867, 2011.

21. W. Wang, H.W. Hellinga, L.S. Beese. Structural evidence for the rare tautomer hypothesis of spontaneous mutagenesis, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 108, 17644-17648, 2011.

22. C. N. Parris, D. D. Levy, J. Jessee, M. M. Seidman. 1994. Proximal and distal effects of sequence context on ultraviolet mutational hotspots in a shuttle vector replicated in xeroderma cells. J. Mol. Biol., vol. 236, no. 2, p. 491-502.

23. M. J. Novak, L. Lapinski, J. S. Kwiatkowski, J. Leszczynski. 1997. Molecular structure and infrared spectra of the DNA bases and their derivatives: theory and experiment. Computational chemistry: reviews of current trends. J. Leszczynski Ed., Wold Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, River Edge, NJ, vol. 2, p. 140-182.

24. A. A. Lamola, T. Gamane. 1967. Sensitized photodimerization of thymine in DNA. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, vol. 58, no. 2, p. 443-446.

References

1. J.-S. Taylor. New structural and mechanistic insight into the A-rule and the instructional and non-instructional behavior of DNA photoproducts and other lesions. Mutat. Res., 510, 55-70, 2002.

2. H.A. Grebneva. Nature and possible mechanisms formation of potential mutations arising at emerging of thymine dimers after irradiation of double-stranded DNA by ultraviolet light. J. Mol. Struct., 645, 133-143, 2003.

3. H.A. Grebneva. One of mechanisms of targeted substitution mutations formation at SOS-replication of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Environ. Mol. Mutagen., 47, 733-745, 2006.

4. H.A. Grebneva. Mechanisms of targeted frameshift mutations: insertions arising during error-prone or SOS synthesis of DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Molecular biology (Mosk.) 48, 457-467, 2014.

5. H.A. Grebneva. A polymerase – tautomeric model for targeted frameshift mutations: deletions formation during error-prone or SOS replication of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. J. Phot. Mat. Techn., 1, 19-26, 2015.

6. H.A. Grebneva. Mechanisms of targeted complex insertions formation under synthesis of DNA molecule containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Dopovidi NAN of Ukraine, no. 5, 145-154, 2015.

7. H.A. Grebneva. A Polymerase-tautomeric model for targeted substitution mutations formation during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane cytosine dimers. Int. J. Mol. Biology: Open Access, 1, 1-16, 2016.

8. H.A. Grebneva. Polymerase-tautomeric model for ultraviolet mutagenesis. Targeted base substitution and frameshift mutations caused by *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Saarbrücken, Germany. LAP LAMBERT Academic Publishing, pp. 132, 2017.

9. H.A. Grebneva. A polymerase-tautomeric model for radiation-induced bystander effects: a model for untargeted substitution mutagenesis during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA containing thymine and adenine in rare tautomeric forms. Int. J. Mol. Biology: Open Access, 2, 1-14, 2017.

10. H.A. Grebneva. A polymerase-tautomeric model for radiation-induced genomic instability: targeted delayed substitution mutations during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane cytosine dimers. Int. J. Mol. Biology: Open Access, 3, 125-141, 2018.

11. H.A. Grebneva. A polymerase-tautomeric model for radiation-induced genomic instability: targeted delayed substitution mutations under error-prone and SOS synthesis of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Fizika and Tekhnika visokih davleniy, 27, 131-148, 2017.

12. H.A. Grebneva. A review of the polymerase-tautomeric models for targeted ultraviolet mutagenesis under error-prone and SOS synthesis of double-stranded DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Fizika and Tekhnika visokih davleniy, 28, 98-121, 2018.

13. H.A. Grebneva. Paradigm change in mutagenesis: polymerase-tautomeric models for targeted, delayed and untargeted ultraviolet mutagenesis during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA, containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers. Int. J. Molec. Biology: Open Access, 4, 1-15, 2019.

14. H. A. Grebneva. 2019. Polymerase-tautomeric model for untargeted delayed base substitution mutations formation during error-prone and SOS replication of double-stranded DNA containing thymine and adenine in some rare tautomeric forms. Journal of oncology research, 2019, vol. 1, no. 2, p. 24-37.

15. H. A. Grebneva. Polymerase-tautomeric models for A-rule during error-prone and SOS synthesis of DNA containing *cis-syn* cyclobutane thymine dimers or thymines and adenines in some rare tautomeric forms. Trends in Cell & Molecular Biology, 2019, vol. 14, p. 51 – 68.

16. H. A. Grebneva. 2012. The nature and mechanisms of hot and cold spots for UV mutagenesis formation, Dopovidi NAN Ukraine, vol. 10, pp. 181-187, 2012.

17. H.A. Grebneva. The thermal relaxation theory of the excitation energy of hydrogen bonds in DNA. Its contribution to ultraviolet mutagenesis. Saarbrücken, Germany. LAP LAMBERT Academic Publishing, 345 p., 2019.

18. J.D. Watson, F.H. Crick. The structure of DNA. Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol., 18, 123-131, 1953.

19. N.I. Ostapenko, Yu.A. Skryshevskii, A.K. Kadashchuk, Yu.V. Rubin. Thermoluminescence of crystals of nucleic acids bases. Izvestia Acad Sci USSR, 54, 445-449, 1990.

20. K. Bebenek, L.C. Pedersen, T.A. Kunkel. Replication infidelity via a mismatch with Watson-Crick geometry. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 108, 1862-1867, 2011.

21. W. Wang, H.W. Hellinga, L.S. Beese. Structural evidence for the rare tautomer hypothesis of spontaneous mutagenesis, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 108, 17644-17648, 2011.

22. C. N. Parris, D. D. Levy, J. Jessee, M. M. Seidman. 1994. Proximal and distal effects of sequence context on ultraviolet mutational hotspots in a shuttle vector replicated in xeroderma cells. *J. Mol. Biol.*, vol. 236, no. 2, p. 491-502.

23. M. J. Novak, L. Lapinski, J. S. Kwiatkowski, J. Leszczynski. 1997. Molecular structure and infrared spectra of the DNA bases and their derivatives: theory and experiment. *Computational chemistry: reviews of current trends*. J. Leszczynski Ed., Wold Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, River Edge, NJ, vol. 2, p. 140-182.

24. A. A. Lamola, T. Gamane. 1967. Sensitized photodimerization of thymine in DNA. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 58, no. 2, p. 443-446.

Grebneva H.A.

THE MECHANISM OF FORMATION OF HOT AND COLD SPOTS OF ULTRAVIOLET MUTAGENESIS ON A SITE OF DOUBLE-STRANDED DNA WITH A HOMOGENEOUS NUCLEOTIDE COMPOSITION

Within the framework of the polymerase-tautomeric model of ultraviolet mutagenesis, a mechanism for the formation of hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis was proposed. The energies that can be transferred to all cis-syn cyclobutane pyrimidine dimers that can form on the lagging strand of a part of the supF DNA region have been calculated. The energies that can be transferred to cis-syn-cyclobutane pyrimidine dimers, which can be formed on the lagging strand

of the part of the supF DNA region, consisting only of pyrimidines, have been calculated. It has been shown that hot spots of ultraviolet mutagenesis are those cis-syn cyclobutane pyrimidine dimers to which more energy is transferred than to other cis-syn cyclobutane pyrimidine dimers. The reasons are investigated, why the probability of mutation formation increases sharply on a DNA region consisting of pyrimidines alone.

Key words: *ultraviolet mutagenesis, rare tautomeric forms of DNA bases, hot and cold spots of ultraviolet mutagenesis, excitation energy transfer through DNA, singlet energy levels of DNA bases, triplet energy levels of DNA bases.*

Гребнева Елена Анатольевна, старший научный сотрудник Донецкого физико-технического института имени А. А. Галкина.

E-mail: grebneva@gmail.com

Grebneva Helen, Senior researcher of the Donetsk physics and technology institute named after A. A. Galkin.

Рецензент: Румянцев Владимир Васильевич, проф., д. ф.-м. н., заведующий отдела динамических свойств сложных систем ГП «Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина».

Статья подана 20.04.2021

УДК 621.37

ОБОСНОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ УСТРОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ СИСТЕМ И СЕТЕЙ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ

Третьяков И.А.

JUSTIFICATION OF THE PHYSICAL FOUNDATIONS OF FUNCTIONAL ELECTRONICS DEVICES FOR THE PRACTICAL IMPLEMENTATION OF TELECOMMUNICATIONS SYSTEMS AND NETWORKS

Tretiakov I.A.

Процессы ускорения научно-технического прогресса требуют внедрения в практику перспективных приборов и устройств передачи, обработки и хранения информации. Большие надежды в этом направлении связаны с внедрением новых многофункциональных квантовых приборов – эхо-процессоров. Данное направление развития функциональной электроники очень слабо освещено в научной литературе. В настоящей работе предпринята попытка восполнить этот пробел и с единых позиций проанализировать и обосновать принципы построения и функционирования эхо-процессоров, использующих различные физические явления, в частности, спиновое, электроакустическое, фотонное, фононное и другие виды эха. Отмечена сложность внутренних физических процессов в эхо-процессорах. Обосновано большое количество практических применений, показана перспективность использования УФЭ в вычислительной технике для обработки радиосигналов, в измерительной технике, в системах телекоммуникации.

Ключевые слова: функциональная электроника, обработка радиосигналов, телекоммуникации, процессор, волна, эхо-эффект.

Введение. Устройство функциональной электроники по сути представляет собой процессор, выполненный на отличных от традиционных процессорных принципов, который не могут заменить все возможные реализации процессоров на сверхбольших интегральных схемах. Устройства функциональной электроники успешно осуществляют обработку аналоговых сигналов, не нуждаясь в предварительной кодировке сигнала в цифровой, благодаря чему обработка совершается в режиме реального времени. Хорошие массогабаритные и энергетические характеристики, а также высокая надежность и быстродействие делают процессоры устройств функциональной электроники весьма перспективными модулями, способными обеспечить решение задач по созданию телекоммуникационной аппаратуры нового поколения, использующей новые физические принципы и явления [1, 2].

Однако, говоря о замечательных свойствах УФЭ-процессоров, нельзя не отметить, что в настоящее время они все еще полноценно не вышли из стен лабораторий и находятся в стадии интенсивного исследования. Существенным тормозом в активном внедрении таких процессоров в настоящее время является отсутствие систематизированных публикаций по особенностям построения и возможностям их использования в народном хозяйстве.

Исходя из вышесказанного, целью настоящей работы является обоснование физических основ устройств функциональной электроники, анализ существующих физических явлений потенциально пригодных для создания устройств обработки радиосигналов на принципах функциональной электроники, рассмотрение структур, назначения, достоинств и недостатков, а также возможностей использования таких устройств в вычислительных средствах и телекоммуникациях.

Процессоры на приборах с зарядовой связью. Активной средой приборов с зарядовой связью (ПЗС) является полупроводниковая пластина с расположенной на ней системой электродов (рис. 1). С помощью устройства управления под каждый электрод может быть введен объемный заряд, образованный сгустками носителей заряда (например, дырками) [3]. Под действием приложенных электрических потенциалов, изменяющихся определенным образом, сгустки заряда, введенные под электроды, последовательно перемещаются. Наличие или отсутствие заряда соответствует 1 или 0 информации.



Рис. 1. Структура ПЗС-процессора

Ввод информации в ПЗС-процессор осуществляется активным элементом (транзистором), в котором инжектируется сгусток заряда в подзатворную область, связанную с периодической системой электродов, реализующих активную среду процессора. Вывод сигнала из активной среды осуществляется аналогичным элементом, причем проводимость элемента определяется приходом неравновесных носителей из активной среды ПЗС. Рассмотренный ПЗС-процессор выполняет функции регистра сдвига, линии задержки, устройства памяти и др. Наиболее интересной областью применения подобного процессора является преобразование оптического сигнала в электрический при одновременном осуществлении телевизионной развертки изображения по строкам и кадрам.

Процессоры на цилиндрических магнитных доменах. Весьма перспективными и уже нашедшими свое применение в технике являются представители другого раздела функциональной электроники (магнитоэлектронники) – процессоры на цилиндрических магнитных доменах (ЦМД). Структура такого процессора представлена на рис. 2. Носителем информации в них является домен, представляющий собой цилиндрическую область в тонкой ферритовой пленке (отсюда и название ЦМД) [4].

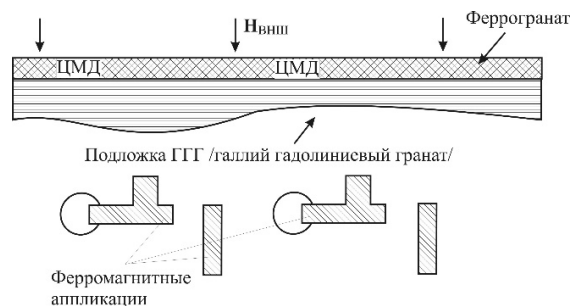


Рис. 2. Структура ЦМД-процессора

Намагниченность ЦМД противоположна намагниченности основного объема пленки. Пленка обладает магнитной анизотропией (осью легкого намагничивания, перпендикулярной поверхности пленки) и располагается в постоянном магнитном поле, ориентированном вдоль оси анизотропии. Обычно толщина пленки и диаметр ЦМД имеют величину порядка 1 мкм. На поверхность пленки наносятся ферромагнитные аппликации. Для перемещения ЦМД в пространстве производится перемагничивание аппликации вращающимся магнитным полем, вектор поляризации которого лежит в плоскости пленки и вращается вокруг оси, перпендикулярной пленке, с частотой до 10 МГц. Каждый период вращения обеспечивает перемещение ЦМД на один период аппликаций. В подобном процессоре активной средой является ферритовая пленка с аппликациями в сочетании со

статическим нормальным и вращающимся касательным полем. Ввод информации обеспечивается генератором ЦМД, в котором используется импульсное перемагничивание ограниченной области пленки. Для вывода информации служат, например, элементы с магниторезистивной пленкой, электрическое сопротивление которой зависит от наличия ЦМД под элементом.

Необходимо подчеркнуть, что описанная выше структура процессора на ЦМД полностью аналогична структуре процессоров на ПЗС в отношении процессов переноса сигнала, записи и хранения информации, хотя процессоры используют совершенно различные физические явления.

Возможен также оптический вывод информации, для чего используется вращение плоскости поляризации света, проходящего через пленку, поскольку в основной массе пленки и в ЦМД плоскость поляризации вращается в разные стороны. Перспективно использование системы ЦМД как оптической голограммы, управляемой электрическими сигналами.

Основной областью применения процессоров на ЦМД в настоящее время является использование их в качестве запоминающих устройств. Запоминающие устройства на ЦМД наиболее перспективны для применения в энергонезависимых системах памяти среднего объема. Основными достоинствами таких запоминающих устройств являются: возможность сохранения информации при отключении питания, возможность перепрограммирования, отсутствие механических частей, высокая радиационная стойкость. Запоминающие устройства на ЦМД могут использоваться в качестве внешней памяти квазиэлектронных АТС, в автоответчиках, в телефонных аппаратах и в т. п. устройствах телекоммуникаций. Находят они применение также в аппаратуре передачи и обработки информации. Дальнейший прогресс в использовании устройств на ЦМД связан с совершенствованием процессоров на основе доменосодержащих материалов, обеспечивающих логическую обработку информации.

На основе материалов с ЦМД-структурой ведутся разработки магнитооптических запоминающих устройств и управляемых транспарантов, представляющих собой специальный тип дисплея и служащих для преобразования записываемой информации в двухмерный оптический сигнал. Такие дисплеи перспективны для использования в портативной вычислительной технике, в подвижных полевых и бортовых системах вычислительной техники и телекоммуникаций.

Процессоры на поверхностных акустических волнах. Так же довольно перспективными считаются процессоры на поверхностных акустических волнах ПАВ (рис. 3), использующие волны механической деформации

твердого тела, распространяющиеся вдоль его поверхности. Благодаря сравнительно низкой скорости распространения волны обеспечивается существенная задержка сигнала во времени или динамическая запись сигнала значительного объема[4]. Быстрому внедрению процессоров на ПАВ, безусловно, способствовало то обстоятельство, что технология их производства во многом аналогична технологии производства полупроводниковых микросхем, которая главным образом определяется последовательным нанесением (путем напыления) различных материалов на основание (подложку).

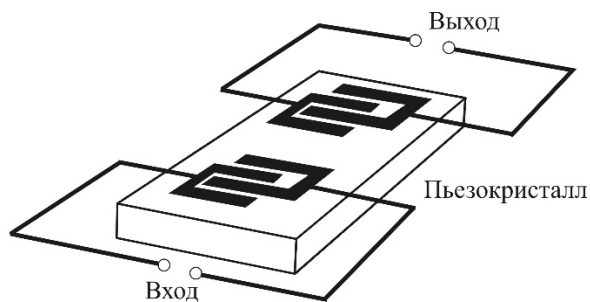


Рис. 3. Структура ПАВ-процессора

Активной средой в процессорах на ПАВ является приповерхностный слой кристалла, вдоль которого распространяется акустическая волна. Для связи среды с входом и выходом, представляющими собой цепи с электрическими сигналами, используются пьезоэлектрические элементы, в которых акустическая деформация вызывается электрическим полем входных и выходных электродов специальной конфигурации.

Необходимо отметить, что эффективность обработки сигналов на ПАВ увеличивается с ростом несущей частоты сигнала. Однако реализация процессоров на ПАВ на частотах свыше 1 ГГц сдерживается серьезными технологическими ограничениями, связанными с субмикронными расстояниями между элементами гребенчатой структуры при размерах самой структуры порядка 1 мкм.

Наиболее освоены в настоящее время линейные устройства ПАВ. В основе их функционирования лежат физические явления, которые можно описать в линейном приближении. В таких устройствах в качестве рабочего тела обычно используется один материал и одно или два из его свойств (электрических или упругих). К числу таких устройств относятся уже освоенные промышленностью линии задержки, резонаторы, фильтры, накопители информации. По принципу применения они являются аналогами обычных радиотехнических узлов, но реализованных на новых физических принципах. Внедрение подобных устройств функциональной электроники оценивается как один из эффективных способов микроминиатюризации и улучшения технических

характеристик радиоэлектронной аппаратуры (уменьшаются массогабаритные параметры, энергопотребление, повышается точность обработки сигналов, улучшается отношение сигнал/шум на выходе приемных устройств и т. п.).

Большие возможности процессоров на ПАВ связываются с нелинейной обработкой сигналов [5]. Нелинейные эффекты в пьезоэлектрике позволяют осуществить перемножение двух сигналов с выделением результирующей компоненты, которая представляет собой свертку двух сигналов в реальном масштабе времени и служит основой корреляционной обработки, оптимальной фильтрации, Фурье-анализа и ряда других видов обработки аналоговых сигналов.

Очень важно, что использование нелинейных устройств на ПАВ приводит, как правило, к принципиальному изменению структуры аппаратуры. Например, акустические процессоры позволяют отказаться от необходимости аппаратной реализации квантования спектра исследуемых сигналов, последующей их задержки, осуществления свертки отдельных частей сигналов и т. д. Процессор на ПАВ построен так, что осуществляет по заданному закону весь процесс корреляционной обработки сигналов в целом.

Процессоры на спиновых волнах. Спиновая волна или магнитостатическая волна (МСВ) представляет собой волновой процесс ориентации спиновых магнитных моментов электронов, ответственных за ферромагнитные свойства вещества. Спиновый процессор (СВ) (рис. 4) состоит из тонкой ферромагнитной пленки, нанесенной на неферромагнитную подложку [6].

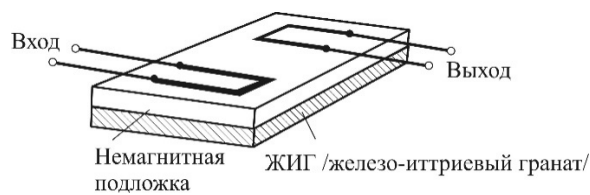


Рис. 4. Структура СВ-процессора

Пленка находится в статическом магнитном поле, приводящем вещество в состояние магнитного насыщения, благодаря чему обеспечивается исходная ориентация спинов. Магнитное поле входного сигнала (как правило, СВЧ-сигнала) вызывает колебания спинов, в результате чего происходит возбуждение СВ. Путем изменения напряженности постоянного магнитного поля возможно управление дисперсией СВ. Фазовая и групповая скорости СВ могут существенно отличаться, что позволяет обеспечить большую задержку или накопление сигнала в активной среде. К большому преимуществу процессоров на спиновых волнах относится простота выполнения конструкции — субмикронной точности не требуется. Обычно это отрезок микрополосковой линии. Функционально процессоры на СВ и на ПАВ

равноценны, однако спиновые волны могут быть использованы на более высоких частотах (2 - 20 ГГц).

Простейшими устройствами на СВ являются линии задержки, трансверсальные, полосовые и резонансные фильтры, ответвители, фильтры сжатия линейно-частотно-модулированных (ЛЧМ) сигналов, частотно-избирательные шумоподавители.

В настоящее время существуют технические решения генераторов сдвига частоты радиорелейных линий связи, фазовращателей. СВЧ-генераторы на СВ с управляемой перестройкой частоты позволяют создавать СВЧ-устройства, обрабатывающие сигналы в реальном масштабе времени. К дополнительным преимуществам устройств на СВ относится возможность обработки сигналов непосредственно в СВЧ-диапазоне. Полосовые фильтры на СВ могут найти применение в телекоммуникационных приемниках, в селекторах каналов приемников многоканальных систем связи. Предполагается использование процессоров на СВ в смесителях, схемах синхронизации, приемниках шумоподобных сигналов, фурье-преобразователях, схемах стробирования, приемниках-повторителях спутниковых систем связи и т.д. В задачах нелинейной обработки используется нелинейность намагниченности феррита по отношению к СВЧ магнитному полю, связанному с СВ. Для решения некоторых задач спектрального анализа и ввода информации в оптические системы обработки сигналов используется эффект рассеяния света на спиновых волнах (магнитооптический эффект в феррите).

Процессоры на эффекте спинового или электроакустического эха. Большие перспективы создания устройств оптимальной обработки радиочастотных сигналов связаны с изучением таких физических явлений, как ядерное и электронное спиновое эхо. С помощью подобных устройств можно осуществлять задержку радиосигналов в диапазоне частот 100 - 600 МГц, сжатие ЧМ-сигналов, согласованную полосовую фильтрацию, корреляцию и автокорреляцию. Согласованные фильтры на основе спинового эха используются в моделах широкополосных систем связи с шумоподобными сигналами, которые обеспечивают малое время вхождения в синхронизм (сотни миллисекунд) при базе сигналов в десятки тысяч бит. Эффект спинового эха заключается в возможности записи сигнала в объеме твердого тела путем воздействия магнитного поля, несущего сигнал, на систему спинов электронов или ядер вещества [7]. По истечении некоторого времени τ_3 (задержка сигнала) записанный сигнал может быть считан. Для этого к объему твердого тела через время $\tau_3/2$ после подачи сигнала прикладывается считывающий импульс. Физическая природа эха заключается в том, что после приложения и снятия сигнала отклик системы исчезает вследствие

нарушения когерентности различных спектральных компонент колебаний системы. Воздействие считывающего импульса благодаря нелинейности системы возбуждает компоненты колебаний с обратным изменением фазы, что приводит к восстановлению когерентности колебаний через время τ_3 (возникает эхо). Для практической реализации эхо-процессоров используются явления спинового эха на системе ядерных спинов (ядерное эхо) или акустических колебаний в пьезоэлектронике (фононное эхо). Носителем информации в этих случаях служат колебания спинов ядер или атомов решетки. Активной средой, таким образом, является объем твердого тела (рис. 5).

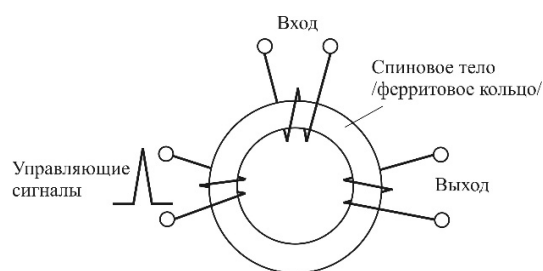


Рис. 5. Структура ЯМР-процессора

Ввод и вывод информации осуществляется индукторами магнитного или электрического поля соответственно. На основе эхо уже сегодня ведутся разработки систем памяти и спектральной обработки сигналов.

Представляет интерес явление длительного хранения сигнала в пьезоэлектрической активной среде (фононный процессор), связанное с образованием заряженных дефектов кристаллической решетки, возникающих под действием интенсивной волны сигнала (рис. 6). Система дефектов служит своеобразной акустической голограммой, восстанавливающей волну сигнала после воздействия на нее считывающей волны. В перспективе возможно использование эффектов эха в сверхпроводнике, в котором носителем информации служат магнитные вихри.

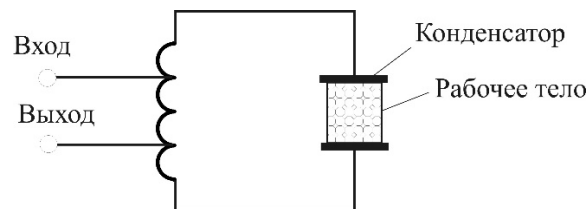


Рис. 6. Структура фононного процессора

Выводы. Обзор возможных реализаций структур процессоров обработки радиосигналов, выполненных на основе принципов функциональной электроники (ПАВ, ПЗС, ЦМД, СВ, эхо-процессоров), и анализ существующих технических возможностей их реализации показывает, что процессоры на основе

использования эхо-эффекта отличаются более высоким (на два порядка) уровнем интеграции. Например, уровень интеграции, достигаемый в спиновом устройстве, близок к предельному и определяется межатомным расстоянием. Это на три порядка (в 1000 раз) выше минимального топологического размераспециализированной большой интегральной схемы на два порядка выше предельно ожидаемого значения указанного параметра. Технология изготовления спиновых устройств достаточно проста, поскольку формирование статических неоднородностей (доменных границ) обеспечивается за счет процесса кристаллизации порошкообразных окислов при их спекании. В этом случае, так как динамическая неоднородность не перемешается в объеме кристалла, требования к пространственной однородности синтезируемых материалов и степени очистки исходного сырья значительно снижаются. Кроме того, отпадает и необходимость точного сопряжения форм геометрических элементов.

Вышеуказанные особенности существенно улучшают воспроизводимость технологических процессов, повышают надежность и увеличивают процент выхода годных изделий и позволяют вполне обоснованно приблизиться к практической реализации систем и сетей телекоммуникаций на устройствах функциональной электроники, в частности на модулях из процессоров на эффекте спинового или электроакустического эха.

Л и т е р а т у р а

1. Федотов Я. А. Функциональная электроника / Я. А. Федотов. – Москва : Высш. шк., 2012. – 455 с.
2. Третьяков И. А. Анализ направлений развития устройств обработки сигналов на принципах функциональной электроники / И. А. Третьяков // Вестник Донецкого национального университета. Серия Г: Технические науки. – 2020. – № 3. – С. 4-8.
3. Кузнецов Ю. А. Микросхемотехника БИС на приборах с зарядовой связью / Ю. А. Кузнецов, В. А. Шилин. – Москва. – Радио и связь. – 2000. – 160 с.
4. Розеншер Э. Оптоэлектроника. Пер. с франц. / Э. Розеншер, Б. Винтер. – Москва. – Техносфера. – 2014. – 592 с.
5. Кочемасов Е. Н. Акустоэлектронные Фурье-процессоры / Е. Н. Кочемасов, Е. В. Долбня, Н. В. Соболев. – Москва. – Радио и связь. – 1987. – 168 с.
6. Соколов С. А. Оптимальная обработка сложных сигналов при помощи эффекта спинового эха / С. А. Соколов // Сб. трудов Рязанского радиотехнического института. – №5. – 2001. С. 74 – 81.
7. Гуляев Ю. В. Акустоэлектронные устройства обработки и генерации сигналов. Принципы работы, расчета и проектирования / Ю. В. Гуляев, О. Л. Балышева, В. И. Григорьевский, В. Ф. Дмитриев, Г. Д. Мансфельд. – Москва. – Радиотехника. – 2012. – 571 с.

R e f e r e n c e s

1. Fedotov Ja. A. Funkcional'naja elektronika / Ja. A. Fe-dotov. – Moskva : Vyssh. shk., 2012. – 455 s.
2. Tret'jakov I. A. Analiz napravlenij razvitiya ustrojstv obrabotki signalov naprincipah funkcional'noj elektroniki / I.

A. Tret'jakov // Vestnik Do-neckogonacional'nogouniversiteta. Serija G: Tehniche-skienauki. – 2020. – № 3. – S. 4-8.

3. Kuznecov Ju. A. Mikroshemotekhnika BIS napriborah s zarjadovoj svjaz'ju / Ju. A. Kuznecov, V. A. Shilin. – Moskva. – Radio isvjaz'. – 2000. – 160 s.

4. Rozensher Je. Optoelektronika. Per. s franc. / Je. Rozen-sher, B. Vinter. – Moskva. – Tehnosfera. – 2014. – 592 s.

5. Kochemasov E. N. Akustoelektronnye Fur'e-processory / E. N. Kochemasov, E. V. Dolbnja, N. V. Sobol'. – Moskva. – Radio isvjaz'. – 1987. – 168 s.

6. Sokolov S. A. Optimal'naja obrabotka slozhnyh signalov pri pomoshhi efekta spinovogo zha / S. A. Soko-lov // Sb. trudov Rjazanskogoradiotekhnicheskogoinstitu-ta. – №5. – 2001. S. 74 – 81.

7. Guljaev Ju. V. Akustoelektronnye ustrojstva obrabotki i generacii signalov. Principy raboty, raschetaj pro-ektirovanija / Ju. V. Guljaev, O. L. Balyshcheva, V. I. Gri-gor'evskij, V. F. Dmitriev, G. D. Mansfel'd. – Moskva. – Radiotekhnika. – 2012. – 571 s.

Tretiakov I.A.

JUSTIFICATION OF THE PHYSICAL FOUNDATIONS OF FUNCTIONAL ELECTRONICS DEVICES FOR THE PRACTICAL IMPLEMENTATION OF TELECOMMUNICATIONS SYSTEMS AND NETWORKS

The processes of accelerating scientific and technological progress require the introduction into practice of advanced devices and devices for transmitting, processing and storing information. Great hopes in this direction are associated with the introduction of new multifunctional quantum devices-echo processors. This direction of development of functional electronics is very poorly covered in the scientific literature. In this paper, an attempt is made to fill this gap and to analyze and justify the principles of construction and functioning of echo processors using various physical phenomena, in particular, spin, electroacoustic, photon, phonon, and other types of echo from a unified perspective. The complexity of internal physical processes in echo processors is noted. A large number of practical applications are justified, and the prospects of using FED in computer technology for processing radio signals, in measurement technology, and in telecommunications systems are shown.

Keywords: functional electronics, radio signal processing, telecommunications, processor, wave, echo effect.

Третьяков Игорь Александрович, канд. техн. наук, заместитель декана по научной работе, заведующий учебной лабораторией кафедры радиофизики и инфокоммуникационных технологий ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», ДНР, г. Донецк.
E-mail: i.tretiakov@mail.ru

Tretiakov Igor Aleksandrovich, Cand. of. tech, Deputy Dean for Research, Head of laboratory at Department of Radiophysics and Infocommunication Technologies of Donetsk National University, DPR, Donetsk.
E-mail: i.tretiakov@mail.ru

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.03.2021 г.

УДК 621.983

ВЛИЯНИЕ НАТЯГА НА ПЛОТНОСТЬ И ОСТАТОЧНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ДОРНОВАНИИ ПОРОШКОВОЙ ПОРИСТОЙ ЗАГОТОВКИ

Рябичева Л.А., Решетняк Д.В.

INFLUENCE OF THE TIGHTNESS OF BURNISHING ON DENSITY AND RESIDUAL STRESS OF POWDER POROUS BILLET

Ryabicheva L.A., Reshetnyak D.V.

В статье методом моделирования исследовано влияние натяга при свободном дорновании порошковой пористой заготовки на величину и распределение относительной плотности, остаточных напряжений и деформаций, возникающих в деталях с отверстием. Показано, что чем больше величина относительного натяга, тем больше сила дорнования и больше относительная плотность материала в зоне отверстия полого цилиндра. Величина интенсивности остаточных напряжений и остаточных деформаций после дорнования с ростом относительного натяга также увеличивается за счет роста окружных и радиальных напряжений. Осевые напряжения по величине не зависят от относительного натяга.

Ключевые слова: порошковая пористая заготовка; свободное дорнование; натяг; остаточные напряжения; деформация, относительная плотность.

Введение. При дорновании одним из геометрических параметров инструмента, влияющим на упрочнение материала, является натяг, который выполняется за счет тела дорна. Натяг определяет геометрическую ширину контакта дорна и заготовки. Как показано в работах [1, 2], с ростом относительного натяга увеличивается сила дорнования вследствие увеличения геометрической ширина контакта дорна и заготовки. При больших натягах средние контактные давления при дорновании отверстий малого диаметра существенно зависят от степени толстостенности [3]. Чем меньше натяг, тем больше проявляется влияние степени толстостенности на остаточные напряжения, определяющие упрочнения заготовки.

Однако, известны исследования по влиянию натяга на распределение напряжений выполнены для компактных материалов, в частности сталей [4]. Отсутствуют данные по исследованию влияния натяга на характеристики напряженно-

деформированного состояния при дорновании заготовок из порошковых материалов.

Целью работы является исследование влияния величины натяга на силу, остаточные напряжения и деформации, относительную плотность при свободном дорновании порошковой полой заготовки.

Методика исследования. При моделировании свободного дорнования порошковой полой заготовки использовали термин «полый цилиндр». Рассматривали свободное дорнование порошкового полого цилиндра с исходной пористостью 15 % по схеме сжатия. Длина заготовки $L_0 = 20$ мм, наружный диаметр $D_0 = 28$ мм. Материал – медь марки ПМС-1. Натяг дорнования определялся исходным внутренним диаметром полого цилиндра. Величина исходного внутреннего диаметра полых цилиндров, относительный натяг и параметры используемой конечно-элементной сетки приведены в табл. 1.

В базе материалов пакета Deform 10.2 был создан материал с механическими свойствами, соответствующими материалу основы: модуль Юнга $E = 128$ ГПа; коэффициент Пуассона $\nu = 0,34$. Кривые упрочнения меди для различных скоростей деформации были заданы в табличном виде.

Для моделирования использовали вариант теории пластичности, предложенный в работах [5, 6]. В его основе лежит представление о пластическом потенциале, как о функции компонентов тензора напряжений, которому в пространстве напряжений соответствуют гладкая, выпуклая и замкнутая поверхность. Для моделирования выбран полый цилиндр из порошковой меди с исходной пористостью 15 %.

Таблица 1

Параметры модели полого цилиндра

Внутренний диаметр отверстия, d_0 , мм	Натяг, i , мм	Относительный натяг i/d_0 , %	Количество конечных элементов	Количество узлов
9,8	0,2	2,0	1532	1589
9,5	0,5	5,3	1546	1621
9,2	0,8	8,7	1556	1630

Результаты исследования. На рис. 1,а показано изменение силы дорнования полого цилиндра с различным натягом. При относительном натяге равном 2 % и 5,3 % на кривых наблюдается плато, что свидетельствует о наличии структурной деформации и невозможности достижения

максимальной плотности материала [7]. При относительном натяге 8,7 % на кривой отсутствует плато, что свидетельствует о предельном уплотнении материала. Кривая силы подобна кривым, полученным при дорновании компактных материалов [8].

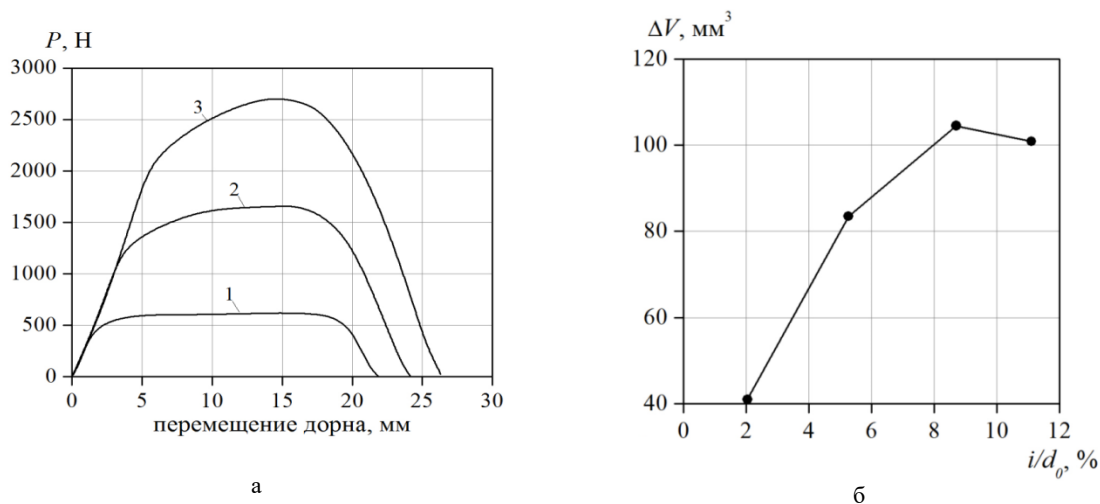


Рис.1. Сила дорнования полого цилиндра в зависимости от перемещения дорна при относительном натяге: 1 – 2 %; 2 – 5,3 %; 3 – 8,7 % - а; изменение объема материала полого цилиндра после дорнования в зависимости от относительного натяга - б

Увеличение натяга до 1,0 мм уже не приводит к большому уплотнению материала. Действительно, на рис. 1, б, показывающем зависимость изменения объема заготовки от относительного натяга дорнования, сначала наблюдается его увеличение, что соответствует увеличению плотности, а затем при натяге более 0,8 мм даже некоторое уменьшение.

Эти данные согласуются с изменением относительной плотности полого цилиндра после дорнования (рис. 2, 3). При

относительном натяге 2 % максимальная относительная плотность не достигается. В данном случае на поверхности отверстия она равна 0,93, длина очага уплотнения составляет 1,8 мм. При относительном натяге 5,3 % относительная плотность на поверхности отверстия увеличивается до 0,94, а длина очага уплотнения до 4,6 мм. При относительном натяге 8,7 % относительная плотность на поверхности отверстия остается равной 0,94, длина очага уплотнения составляет 5,6 мм.

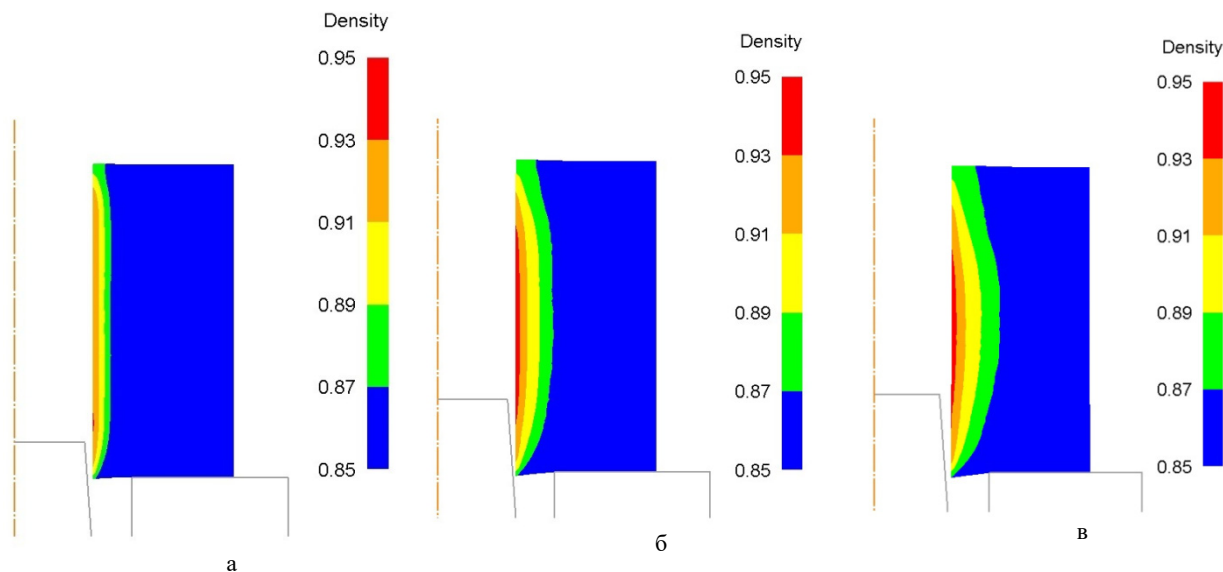


Рис. 2. Распределение относительной плотности после дорнования с относительным натягом: а – 2 %; б – 5,3 %; в – 8,7 %

Таким образом, при дорновании пористого полого цилиндра увеличение относительного натяга более 8,7 % не приводит к увеличению относительной плотности материала.

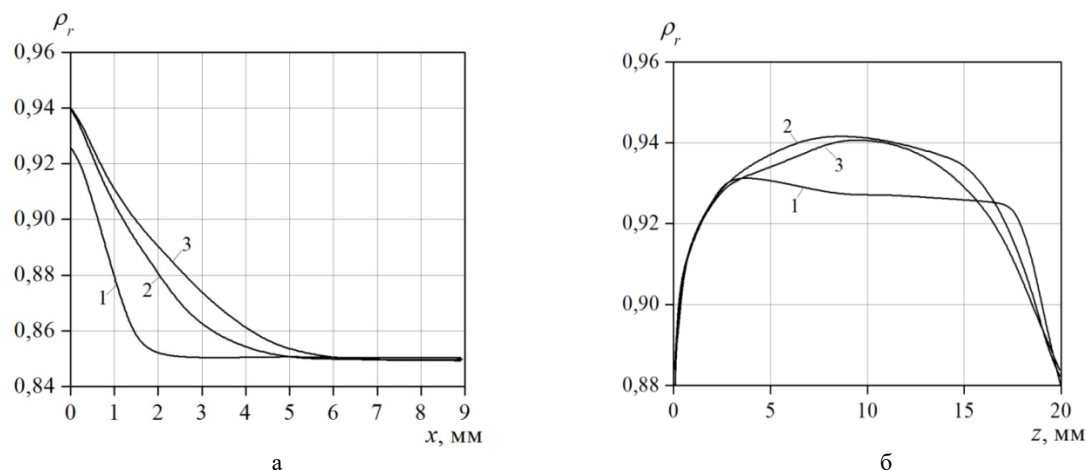


Рис.3. Изменение относительной плотности по толщине стенки - а, по длине образующей отверстия – б полого цилиндра после дорнования с относительным натягом:
1 – 2 %; 2 – 5,3 %; 3 – 8,7 %

Распределение относительной плотности на внутренней поверхности полого цилиндра после дорнования (рис.3, б) показывает, что при относительном натяге 2 % относительная плотность практически постоянна на большей части длины цилиндра. При большем относительном натяге величина относительной плотности по длине цилиндра распределена менее равномерно.

Согласно положений Губра-Мизеса [8], интенсивность напряжений в пластической области

после дорнования можно рассматривать как повышенный предел текучести материала заготовки в зоне отверстия. Величина интенсивности напряжений после дорнования с натягом 2 % и более показывает, что напряжение текучести материала в зоне отверстия увеличивается примерно в 4 раза по сравнению с исходным материалом заготовки и соответствует упрочненной компактной меди (рис.4, а), что связано с ростом интенсивности деформаций (рис. 4, б).

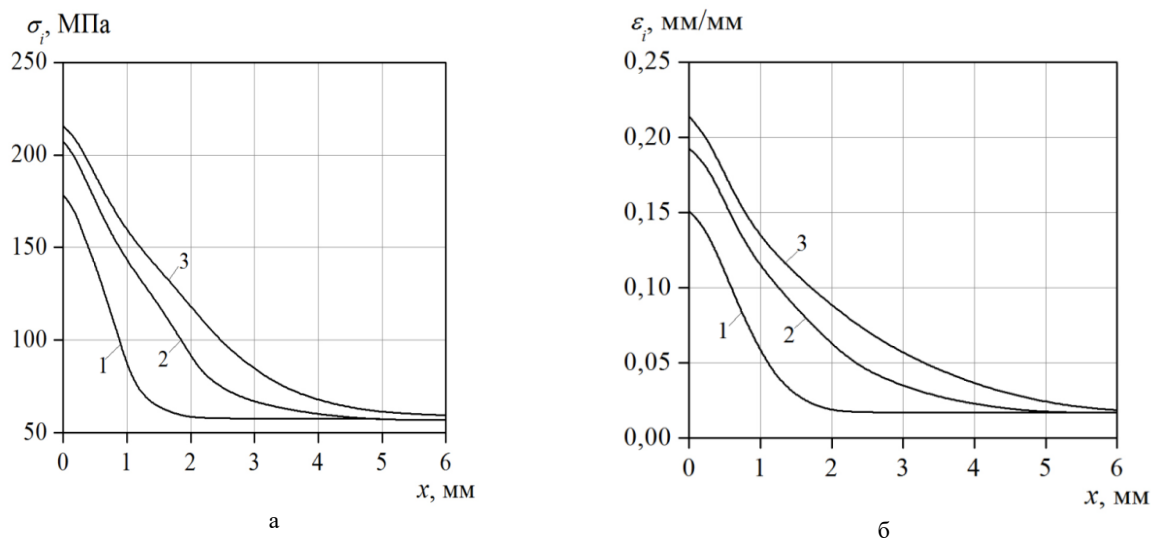


Рис. 4. Изменение интенсивности остаточных напряжений – а и остаточных деформаций – б по толщине стенки полого цилиндра после дорнования с относительным натягом:
1 – 2 %; 2 – 5,3 %; 3 – 8,7 %

Напряжение текучести материала в упрочненном слое определяется распределением степени деформации по его толщине (рис.4, б) в соответствии с кривой деформационного упрочнения пористой меди.

На рис. 5 представлены эпюры остаточных напряжений при различных величинах относительного натяга.

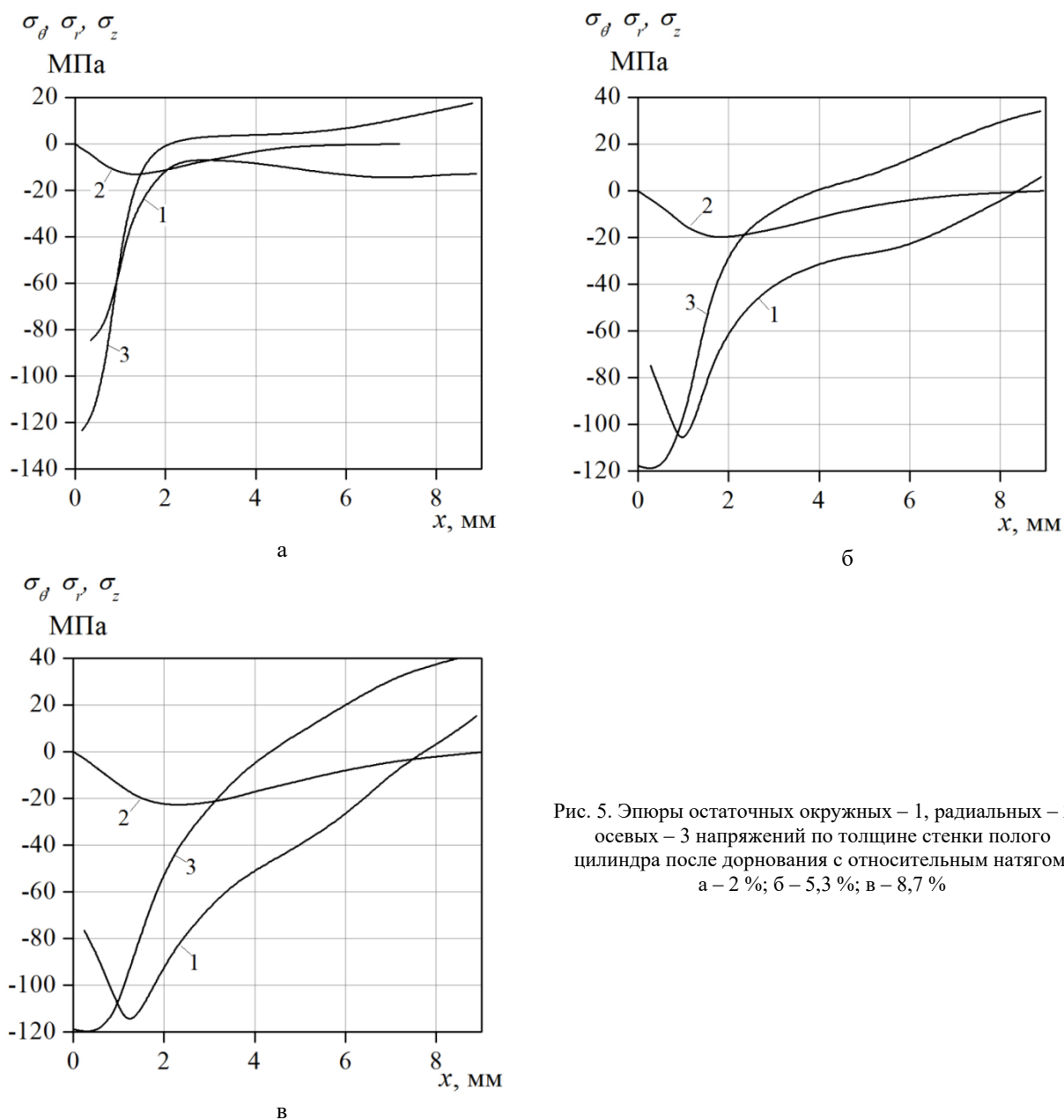


Рис. 5. Эпюры остаточных окружных – 1, радиальных – 2 и осевых – 3 напряжений по толщине стенки полого цилиндра после дорнования с относительным натягом: а – 2 %; б – 5,3 %; в – 8,7 %

Окружные напряжения по абсолютной величине увеличиваются по толщине стенки с ростом величины относительного натяга. Причем чем больше относительный натяг, тем более полого располагается кривая. Радиальные напряжения наименьшие по абсолютной величине при относительном натяге 2 %. С ростом величины относительного натяга их абсолютная величина увеличивается. Осевые напряжения по величине одинаковые.

Выводы. Установлено, что, чем больше величина относительного натяга, тем больше сила дорнования и больше относительная плотность материала в зоне отверстия полого цилиндра.

Величина интенсивности остаточных напряжений и остаточных деформаций после дорнования также увеличивается с ростом относительного натяга за счет увеличения окружных радиальных напряжений. Осевые напряжения по величине не зависят от относительного натяга.

Литература

1. Скворцов В.Ф. О влиянии геометрических параметров заготовок на процесс дорнования / В.Ф. Скворцов, А.Ю. Арляпов, И.С. Охотин // Известия вузов. Машиностроение. – 2008. – № 9. – С. 55–59.
2. Скворцов В.Ф. Остаточные напряжения при дорновании отверстий малого диаметра в полых толстостенных цилиндрах большими натягами / В.Ф.

Скворцов, А.Ю. Арляпов, И.С. Охотин // Известия Томского политехнического университета. Томск: ТПУ, 2010, Т. 316, – № 2. – С. 24–27

3. Проскуряков Ю.Г., Романов В.Н., Исаев А.Н. Объемное дорнование отверстий / Ю.Г. Проскуряков, В.Н. Романов, А. Н. Исаев. – М.: Машиностроение, 1984. – 224 с.

4. Shima, S. and Oyane, M. Plasticity theory for porous metals / S. Shima, M. Oyane // International Journal of Mechanical Sciences / Volume 18, Issue 6, June 1976. - P. 285-291.

5. Штерн М.Б. 5. Модифицированные модели деформирования порошковых материалов на основе пластичных и труднодеформируемых порошков / М.Б. Штерн, О.В. Михайлов // Вестник Национального технического университета «Киевский политехнический институт». Серия Машиностроение. 2011. № 62. - С.13-19.

6. Розенберг А.М. Механика пластического деформирования в процессах резания и деформирующего протягивания / А.М. Розенберг, О.А. Розенберг. – Киев: Наукова думка, 1990. – 320 с.

7.Рябичева Л.А. Анализ напряженно-деформированного состояния при дорновании втулки / Л.А. Рябичева, Д.В. Решетняк //Ресурсосберегающие технологии производства и обработки давлением материалов в машиностроении. 2020. №4. – С. 10-20.

8. Качанов Л.М. Основы теории пластичности / Л.М. Качанов. – М.: Наука, 1969. – 420 с.

References

1. Skvorcov V.F. O vlijanii geometricheskikh parametrov zagotovok na process dornovaniya / V.F. Skvorcov, A.Ju. Arljapov, I.S. Ohotin // Izvestijavuzov. Mashinostroenie. – 2008. – № 9. – S. 55–59.

2. Skvorcov V.F. Ostatochnye naprjazheniya pri dornovanii otverstij malogo diametra v polyh tolstostennyh cilindrah bol'shimi natjagami / V.F. Skvorcov, A.Ju. Arljapov, I.S. Ohotin // Izvestija Tomskogo politehnicheskogo universiteta. Tomsk: TPU, 2010, T. 316, – № 2. – S. 24–27

3. Proskurjakov Ju.G., Romanov V.N., Isaev A.N. Ob#emnoe dornovanie otverstij / Ju.G. Proskurjakov, V.N. Romanov, A. N. Isaev. – М.: Mashinostroenie, 1984. – 224 s.

4. Shima, S. and Oyane, M. Plasticity theory for porous metals / S. Shima, M. Oyane // International Journal of Mechanical Sciences / Volume 18, Issue 6, June 1976. - P. 285-291.

5. Shtern M.B. Modificirovannye modeli deformirovaniya poroshkovykh materialov na osnove plastichnyh i trudnodeformiruemykh poroshkov / M.B. Shtern, O.V. Mihajlov // Vestnik Nacional'nogo tehničeskogo universiteta «Kievskij politehnicheskij institut». Serija Mashinostroenie. 2011. № 62. - S. 13-19.

6. Rozenberg A.M. Mehanika plasticheskogo deformirovaniya v processah rezaniya i deformirujushhego

protjagivaniya / A.M. Rozenberg, O.A. Rozenberg. – Kiev: Naukova dumka, 1990. – 320 s.

7. Rjabicheva L.A. Analiz naprjazhenno-deformirovannogo sostojaniya pri dornovanii vtulki / L.A. Rjabicheva, D.V. Reshetnjak // Resursosberegajushhie tehnologii proizvodstva i obrabotki davleniem materialov v mashinostroenii. 2020. № 4. – S. 10-20.

8. Kachanov L.M. Osnovy teorii plastichnosti / L.M. Kachanov. – М.: Nauka, 1969. – 420 s.

Ryabicheva L.A. Reshetnyak D.V.

INFLUENCE OF THE TIGHTNESS OF BURNISHING ON DENSITY AND RESIDUAL STRESS OF POWDER POROUS BILLET

In article the method of modeling investigated influence of a tightness at a free burnishing of powder porous billet at a size and distribution of relative density, the residual stress and deformations arising in details with an opening. It is shown that the more the size of a relative tightness, the more force of a burnishing more relative density of material in a zone of an opening of the hollow cylinder. The size of intensity of residual stress and residual deformations after a burnish with growth of a relative tightness also increases due to growth of district and radial stress. Axial stress in size does not depend on a relative tightness.

Keywords: powder porous billet; free burnishing; tightness; residual stress; deformation, relative density.

Рябичева Людмила Александровна, д.т.н. профессор кафедры «Материаловедение» ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля», г. Луганск.
E-mail: ryabic@gmail.com

Ryabicheva Lyudmula Alekandrovna, Doctor of Engineering Science, Full professor, of the Chair «Materials Science» SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Решетняк Денис Вадимович, старший преподаватель кафедры «Материаловедение» ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля», г. Луганск.
E-mail: denres@mail.ru

Reshetnyak Denis Vadimovich, senator teacher of the Chair «Materials Science», SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 31.03.2021

УДК 669.187.2 : 537.84

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОЭЛЕКТРОДНЫХ ПЕЧНЫХ УСТАНОВКАХ

Кухарев А.Л.

MATHEMATICAL MODELING OF MAGNETOHYDRODYNAMIC PROCESSES IN MULTI-ELECTRODE FURNACE

Kukharev A.L.

Приведена математическая модель для расчета магнитогидродинамических процессов в ванне расплава шестиэлектродной дуговой печи емкостью 180 т. Определены условия моделирования и особенности протекания магнитогидродинамических процессов в расплаве при переменных электромагнитных полях, формируемых трехфазными синусоидальными токами, а также при нестационарных тепловых потоках от электрических дуг.

Ключевые слова: дуговая печь, магнитная гидродинамика, течения.

Введение. В сильноточных металлургических установках при протекании электрического тока через расплав проявляются магнитогидродинамические (МГД) эффекты, которые существенно влияют на интенсивность технологических процессов. Для многоэлектродных печных установок с энергопитанием от преобразователей частоты актуальной задачей является поиск рациональных электромагнитных воздействий, обеспечивающих требуемые условия перемешивания расплава и его температурной гомогенизации.

Данная статья является продолжением работ [1-7]. В этих работах нами обоснована конструкция шестиэлектродной дуговой печи, содержащая три сводовых (СЭ) и три подовых (ПЭ) электрода, причем угол между смежными осями сводовых и подовых электродов составляет 60° (рис. 1). В [4] для данной печи нами разработана математическая модель магнитогидродинамических и тепловых процессов в расплаве стали при энергопитании печи постоянным током. В [5] также произведена верификация модели по результатам физических экспериментов.

Целью данной работы является разработка математической модели и численное исследование МГД течений расплава в шестиэлектродной дуговой печи при ее энергопитании переменным током пониженной частоты.

Изложение основных материалов. При построении модели МГД процессов нами были обоснованы следующие допущения [3-5]: не учитывались химические реакции, процессы

испарения и плавления. Так как магнитное число Рейнольдса $Re_m < 1$, то перенос магнитного поля потоком электропроводной жидкости не учитывался. Так как для течения расплава критерий Бринкмана $Br \ll 1$, то не учитывалась диссипация энергии вязкими силами. С учетом того, что электрические дуги образуют на поверхности расплава вогнутый мениск и с учетом постоянного перемещения катодно-анодных пятен дуги по поверхности мениска, распределение плотности теплового потока от дуги на этой поверхности принималось как постоянное. Дополнительные источники тепла, например, топливно-кислородные горелки, а также тепловые процессы в шлаке и в футеровке ванны агрегата не учитывались.

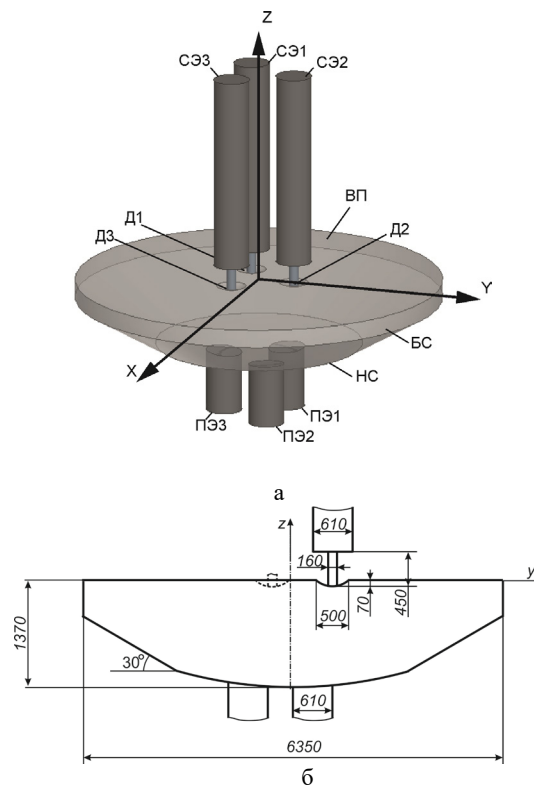


Рис. 1. Геометрическая модель ванны печи: а)– общий вид; б)– профиль ванны в направлении оси Y

С учетом особенностей физических процессов, их временных и пространственных параметров, а также особенностей используемого программного обеспечения математическое моделирование физических процессов в печной установке осуществлялось на основе принципа декомпозиции.

В рамках МГД и тепловой подзадачи используемая модель включала уравнение сохранения энергии, уравнение движения, уравнение неразрывности, уравнение состояния и уравнения стандартной $k-\varepsilon$ модели турбулентности с учетом определения турбулентной вязкости и теплопроводности:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = -\rho C_p (\vec{v} \cdot \nabla T) + \lambda_{эф} \nabla^2 T + Q_{дж} \quad (1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] = -\nabla p + \eta_{эф} \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{g} + \vec{F}_л, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (3)$$

$$\rho = \rho_0 (1 - \beta \Delta T), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} k) = \\ = \nabla \cdot \left[\left(\eta + \frac{\eta_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\eta + \frac{\eta_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] +$$

$$+ C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k},$$

$$\eta_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (7)$$

$$\lambda_T = \frac{C_p \eta_T}{Pr_T}, \quad (8)$$

где ρ – плотность, кг/м³; T – температура, К; C_p – теплоемкость, Дж/(кг·К); $Q_{дж}$ – плотность джоулева тепловыделения, Вт/м³; p – давление, Па; $\vec{F}_л$ – плотность силы Лоренца, Н/м³; ρ_0 – плотность расплава при температуре T_0 , кг/м³; β – коэффициент объёмного расширения, К⁻¹; ΔT – отклонение температуры от T_0 , К; входящий в уравнения (1) эффективный коэффициент теплопроводности $\lambda_{эф}$ представлялся в виде суммы коэффициента молекулярной теплопроводности и дополнительного коэффициента, обусловленного турбулентным режимом движения среды: $\lambda_{эф} = \lambda + \lambda_T$; входящий в уравнение (2) эффективный коэффициент динамической вязкости

представлялся аналогично: $\eta_{эф} = \eta + \eta_T$; G_k – специфическая генерация турбулентной кинетической энергии, образованная от средних градиентов скорости; G_b – специфическая генерация турбулентной кинетической энергии, образованная от выталкивающей силы; в обобщенной форме:

$$G_k = -\overline{\rho v_i' v_j'} \frac{\partial v_j}{\partial x_i}, \quad G_b = \beta g_i \frac{\eta_T}{Pr_T} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad \text{где } Pr_T -$$

турбулентное число Прандтля для энергии; $C_{3\varepsilon}$ – константа, зависящая от степени воздействия выталкивающей силы; $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_ε , σ_k – остальные константы модели турбулентности [5].

При построении модели использовались следующие граничные условия. На поверхности менисков (области Д1, Д2, Д3 на рис. 1, а) задавалось условие второго рода в виде теплового потока от анодной области дуги q_a , Вт/м². На верхней поверхности (ВП) расплава, покрытого слоем шлака, использовалось условие теплоизолированности. В случае, когда верхняя поверхность расплава является свободной, применялось условие третьего рода с учетом теплоотдачи за счет конвекции и излучения. На нижней (НС) и боковой (БС) стенках печного агрегата задавалось граничное условие первого рода в виде средней температуры стенки T_{cm} , принятой по результатам экспериментальных данных. Кроме того, на всех внешних границах расплава задавалось условие прилипания. Математическое описание данных граничных условий имеет вид:

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial \hat{n}} \Big|_{Д1-Д3} &= q_a, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial \hat{n}} \Big|_{ВП_{шл}} = 0, \\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial \hat{n}} \Big|_{ВП_{св}} &= \alpha_\Sigma (T - T_{окр}), \\ T|_{НС} &= T_{cm}, \quad T|_{БС} = T_{cm}, \quad \vec{v}|_z = 0. \end{aligned}$$

где α_Σ – суммарный коэффициент теплопередачи конвекцией и излучением, Вт/м²; $T_{окр}$ – температура окружающей среды, К.

В рамках решения электромагнитной подзадачи использовалась система уравнений электромагнитного поля Максвелла, дополненная законом Ома, уравнением среды и уравнением непрерывности электрического тока [3]. Плотности джоулева нагрева и сил Лоренца в расплаве, входящие соответственно в уравнения (1) и (2), определялись по выражениям:

$$Q_{дж} = |\vec{J}|^2 \sigma^{-1}, \quad \vec{F}_л = \vec{J} \times \vec{B}, \quad (9)$$

где $\vec{J}$ – плотность тока, А/м²; $\vec{B}$ – индукция магнитного поля, Тл; σ – электропроводность среды, См/м.

Для численного решения электромагнитной задачи уравнения электромагнитного поля были выражены через векторный электрический потенциал $\vec{A}_z$ и магнитный скалярный потенциал Ω_m : $\vec{J} = \nabla \times \vec{A}_z$, $\vec{H} = \vec{A}_z - \nabla \Omega_m$ – в проводящей области; $\vec{H} = -\nabla \Omega_m$ – в непроводящей области, где $\vec{H}$ – напряженность магнитного поля, А/м; $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Гн/м – магнитная постоянная. Тогда система уравнений электромагнитного поля в потенциальной формулировке запишется в виде:

для проводящей области:

$$\nabla \times \frac{1}{\sigma} \nabla \times \vec{A}_z - \nabla \frac{1}{\sigma} \nabla \cdot \vec{A}_z + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{A}_z - \nabla \Omega_m) = 0, \quad (10)$$

$$\nabla \cdot \mu_0 (\vec{A}_z - \nabla \Omega_m) = 0, \quad (11)$$

для непроводящей области:

$$-\nabla \cdot \mu_0 \nabla \Omega_m = 0. \quad (12)$$

Используемые граничные условия электромагнитного поля в полной формулировке представлены нами в [3]. В качестве особых граничных условий использованы значения полных токов I на входных и выходных сечениях электродов СЭ1-СЭ3 и ПЭ1-ПЭ3 (рис. 1, а).

В рамках подзадачи расчета теплофизических параметров электрических дуг использовалось уравнение Эленбааса-Геллера с учетом переноса энthalпии и излучения. С использованием функции

$$S = \int_0^T \lambda dT \text{ данное уравнение имеет вид [6]:}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial S}{\partial r} + \sigma(S) E^2 - Q_u(S) = G \frac{\bar{h} - h_z}{L_\delta \pi R_\delta^2}, \quad (13)$$

где Q_u – мощность радиационных энергопотерь единицы объема Вт/м³; $G = 2\pi \int_0^R v_z \rho dr$ – расход газа

в дуге, м³/с; h_z – энthalпия газа на внешней границе дуги, Дж/кг; $\bar{h} = \frac{1}{G} 2\pi \int_0^R v_z \rho h dr$ – среднемассовая

энthalпия газа, Дж/кг; L_δ – длина дуги, м; R_δ – радиус дуги, м. Уравнение (13) дополнялось граничными условиями в центре разрядной области (условие симметрии) и на внешней границе (условие первого рода) [6]. При расчетах использованы термодинамические характеристики воздушной плазмы при атмосферном давлении в диапазоне температур 1-25 кК [6]. Плотность общего теплового потока от анодной области электрической дуги на расплав q_a вычислялась как сумма

составляющих теплового потока за счет конвекции $q_{кон}$, излучения q_u , а также за счет работы выхода электронов и анодного падения напряжения q_n :

$$q_a = q_{кон} + q_u + q_n = \frac{G(\bar{h} - h_z)}{\pi R_a^2} + \frac{1}{R_a} \int_0^{R_a} Q_u(S) r dr + J_a (U_a + A_{вых}), \quad (14)$$

где R_a – радиус анодной области дуги, м; J_a , U_a – соответственно плотность тока в анодной области дуги, А/м² и анодное напряжение падения, В; $A_{вых}$ – работа выхода электронов, эВ.

Для моделирования МГД процессов при переменных электромагнитных полях, формируемых трехфазным синусоидальным током, в табл. 1 приведены результаты модификации граничных условий для тока I и плотности теплового потока q_a . В табл. 1: $\omega = 2\pi f$ – угловая частота, рад/с; f – частота, Гц; τ_δ – постоянная времени дуги, с.

В этой работе нами исследовалась дуговая печь с ванной расплава емкостью $M=180$ т ($V=26,3$ м³) и установленной мощностью 150 МВА. При моделировании принимались следующие значения: $I=80$ кА, $q_a=6,43 \cdot 10^7$ Вт/м², $f=0,1$ Гц. Выбор значений частоты тока детально рассмотрен нами в [7]. Также использовались физические свойства расплава стали [3-5].

На рис. 2 приведены результаты моделирования МГД течений в ванне расплава при энергопитании печи трехфазным синусоидальным током частотой 0,1 Гц для временного момента, соответствующего амплитуде тока через СЭ2. Установлено, что амплитудные значения скорости течений и турбулентной кинетической энергии приблизительно в $\sqrt{2}$ раз больше, чем при питании постоянным током.

Обнаружено, что при прямой последовательности векторов токов в электродах поле электромагнитных сил вращается против часовой стрелки и совершает оборот вокруг оси ванны за время, соответствующее половине периода тока. При формировании обратной последовательности векторов токов в электродах направление движения электромагнитного поля изменяется на противоположное.

При пониженной частоте тока вращение электромагнитного поля вызывает аналогичное вращение гидродинамического поля в расплаве. В сравнении с энергопитанием постоянным током, при питании печи токами пониженной частоты более чем на 50 % увеличивается интенсивность азимутальных вихревых течений, при этом объем застойных зон в расплаве уменьшается более чем в 2 раза.

Таблица 1

**Модификация граничных условий для токов и тепловых потоков
при трехфазном синусоидальном энергопитании**

Наименование поверхности (рис. 1а)	Накладываемые граничные условия
СЭ1	$I_{c1}(t) = \sqrt{2}I \sin(\omega t)$
СЭ2	$I_{c2}(t) = \sqrt{2}I \sin\left(\omega t - \frac{2\pi}{3}\right)$
СЭ3	$I_{c3}(t) = \sqrt{2}I \sin\left(\omega t + \frac{2\pi}{3}\right)$
Д1	$q_{a1}(t) = q_a \left[1 - \frac{\cos(2\omega t) + \omega\tau_\theta \cdot \sin(2\omega t)}{1 + (\omega\tau_\theta)^2} \right]$
Д2	$q_{a2}(t) = q_a \left[1 - \frac{\cos\left(2\omega t + \frac{2\pi}{3}\right) + \omega\tau_\theta \cdot \sin\left(2\omega t + \frac{2\pi}{3}\right)}{1 + (\omega\tau_\theta)^2} \right]$
Д3	$q_{a3}(t) = q_a \left[1 - \frac{\cos\left(2\omega t - \frac{2\pi}{3}\right) + \omega\tau_\theta \cdot \sin\left(2\omega t - \frac{2\pi}{3}\right)}{1 + (\omega\tau_\theta)^2} \right]$
ПЭ1	$I_{n1}(t) = \sqrt{2}I \sin\left(\omega t + \frac{2\pi}{3}\right)$
ПЭ2	$I_{n2}(t) = \sqrt{2}I \sin(\omega t)$
ПЭ3	$I_{n3}(t) = \sqrt{2}I \sin\left(\omega t - \frac{2\pi}{3}\right)$

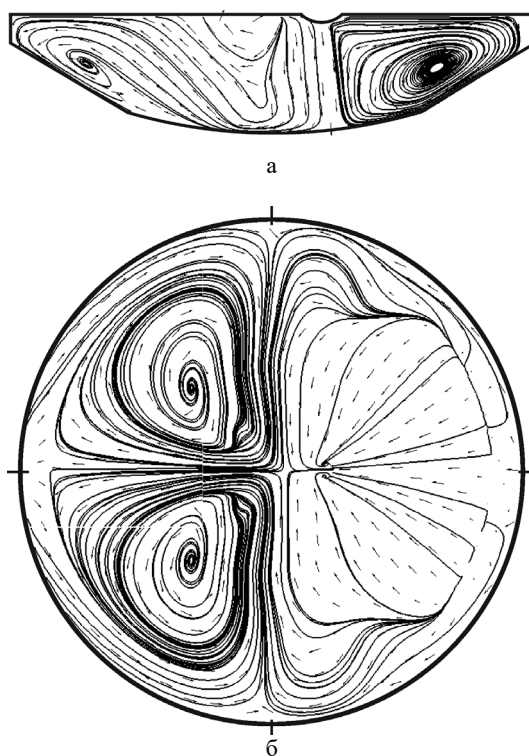


Рис. 2. Траектории течения расплава: а) – в вертикальном сечении вдоль оси Y;
б) – в горизонтальном сечении при Z=-310 мм

Выводы. Для предложенной конструкции многоэлектродной печной установки разработана математическая модель магнитогидродинамических процессов в расплаве при переменных электромагнитных полях и при нестационарных тепловых потоках от электрических дуг.

Показано, что воздействие трехфазного переменного тока регулируемой частоты и формы на ванну расплава является более многофакторным за счет наложения на расплав амплитуд токов и формирования в горизонтальной плоскости ванны вращающегося электромагнитного поля.

В работе обоснована возможность динамического изменения параметров вихревых структур при изменении порядка чередования фаз токов.

Л и т е р а т у р а

1. Кухарев А. Л. Принципы повышения интенсивности тепломассообмена в жидких средах дуговых многоэлектродных печей / А. Л. Кухарев, В. В. Белоусов // Вестник Донецкого национального университета. Серия Г: Технические науки. – 2018. – №2. – С. 82–91.

2. Пат. 119279. Україна, МПК⁷ H05B 7/144, F27D 11/10 Система электроживлення багатоелектродної дугової печі / заявник та патентовласник Кухарев О. Л., Ковальчук А. О. – № u201700825; заявл. 30.01.2017; опубл. 25.09.2017, Бюл. № 18. – 6 с.

3. Кухарев А. Л. Электромагнитное поле в ванне многоэлектродной печи / А. Л. Кухарев // Вестник Луганского национального университета имени Владимира Дала. – 2018. – № 5(11). – С. 247–251.

4. Кухарев А. Л. Течения расплава в многоэлектродной дуговой печи в условиях электровихревой и естественной конвекции / А. Л. Кухарев // Вестник Луганского национального университета имени Владимира Дала. – Луганск: ЛНУ им. В. Дала, 2019. – №7 (25). – С. 217–223.

5. Kukharev A. The Peculiarities of Convective Heat Transfer in Melt of a Multiple-Electrode Arc Furnace / A. Kukharev, V. Bilousov, E. Bilousov, V. Bondarenko // Metals. – 2019. – № 9. – 1174.

6. Кухарев А. Л. Расчет параметров электрической дуги в электропечных установках для производства стали и ферросплавов / А. Л. Кухарев, К. А. Корсунов, С. Н. Сергиенко // Сборник научных трудов ДонГТУ. – Алчевск, 2017. – Вып. №5 (48). – С. 52–57.

7. Кухарев А. Л. Выбор рациональных энергетических параметров многоэлектродных электропечных установок / А. Л. Кухарев // Вестник Донецкого национального университета. Серия Г: Технические науки. – Донецк: ДонГУ, 2020. – № 1. – С. 59–71.

R e f e r e n c e s

1. Kuharev A. L. Principy povysheniya intensivnosti teplomassobmena v zhidkikh sredakh dugovykh mnogojelektroodnykh pechey / A. L. Kuharev, V. V. Belousov // Vestnik Doneckogo nacional'nogo universiteta. Seriya G: Tehnicheskie nauki. – 2018. – №2. – С. 82–91.

2. Pat. 119279. Ukraїna, MPK⁷ H05V 7/144, F27D 11/10 Systema elektrozhyvlennja bagatoelektroodnoi' dugovoї' pechi / zavnyk ta patentovlasnyk Kuharev O. L., Koval'chuk A. O. – № u201700825; zavavl. 30.01.2017; opubl. 25.09.2017, Bjul. № 18. – 6 s.

3. Kuharev A. L. Jelektromagnitnoe pole v vanne mnogojelektroodnoj pechi / A. L. Kuharev // Vestnik Luganskogo nacional'nogo universiteta imeni Vladimira Dalja. – 2018. – № 5(11). – С. 247–251.

4. Kuharev A. L. Tehenija rasplava v mnogojelektroodnoj dugovoj pechi v uslovijah jelektrovihrevoj i estestvennoj konvekcii / A. L. Kuharev // Vestnik Luganskogo nacional'nogo universiteta imeni Vladimira Dalja. – Lugansk: LNU im. V. Dalja, 2019. – №7 (25). – С. 217–223.

5. Kukharev A. The Peculiarities of Convective Heat Transfer in Melt of a Multiple-Electrode Arc Furnace / A. Kukharev, V. Bilousov, E. Bilousov, V. Bondarenko // Metals. – 2019. – № 9. – 1174.

6. Kuharev A. L. Raschet parametrov jelektricheskoi dugi v jelektrapechnykh ustanovkakh dlja proizvodstva stali i ferrosplavov / A. L. Kuharev, K. A. Korsunov, S. N. Sergienko // Sbornik nauchnykh trudov DonGTU. – Alchevsk, 2017. – №5 (48). – С. 52–57.

7. Kuharev A. L. Vybora racional'nykh jenergeticheskikh parametrov mnogojelektroodnykh jelektrapechnykh ustanovok / A. L. Kuharev // Vestnik Doneckogo nacional'nogo universiteta. Seriya G: Tehnicheskie nauki. – Doneck: DonNU, 2020. – № 1. – С. 59–71.

Kukharev A. L. MATHEMATICAL MODELING OF MAGNETOHYDRODYNAMIC PROCESSES IN MULTI-ELECTRODE FURNACE

A mathematical model is presented for calculating magnetohydrodynamic processes in the melt bath of a six-electrode arc furnace with a capacity of 180 tons. The conditions for modeling and the features of the magnetohydrodynamic flow in the melt under alternating electromagnetic fields formed by three-phase sinusoidal currents, taking into account the nonstationarity of heat fluxes from electric arcs, are determined.

It is shown that at an alternating current with a frequency of 0.1 Hz, the amplitude values of the flow velocity and turbulent kinetic energy in the melt are approximately 1.41 times greater than with a direct current power supply.

The possibility of dynamically changing the parameters of electrovortex structures when changing the sequence of the current vectors in the electrodes is substantiated.

Keywords: arc furnace, magnetic hydrodynamics, flows.

Кухарев Алексей Леонидович, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры электромеханики Стахановского инженерно-педагогического института ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Дала», г. Стаханов.
E-mail: alex.kuharev@mail.ru

Kukharev Alexey Leonidovich, candidate of science, associate professor, associate professor of chair of electromechanics of Stakhanov Engineering and Pedagogical institute of SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University", Stakhanov.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Дала».

Статья подана 20.04.2021

УДК. 551.46.09

НЕФТЯНОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ВОД В АБХАЗСКОМ СЕКТОРЕ ЧЕРНОГО МОРЯ**Гицба Я.В****OIL POLLUTION OF WATERS IN THE ABKHAZIAN SECTOR OF THE BLACK SEA****Gitsba Ya.V.**

В работе приведена оценка нефтяного загрязнения морской акватории Абхазии. Выявлен характер сезонного и среднемесячного распределения концентрации нефтепродуктов в прибрежных водах акватории сухумской бухты, также в акватории гудаутского участка шельфа. В акватории сухумской бухты наибольшее загрязнение наблюдается в летний период (2,85 ПДК). Картина пространственного распределения НП в акватории гудаутского участка имеет тенденцию к повышению от поверхностного слоя к горизонту 20 м, сезонная концентрация - от весеннего к осеннему периоду. Многолетний ход распределения концентрации НП имеет тенденцию к снижению в среднем на 2,1 ПДК, хотя и остается на уровне, превышающем предельно допустимую норму.

Основными источниками загрязнения прибрежных вод абхазской акватории Черного моря являются: городская канализация, автомобильные заправочные станции, автотранспорт, основное черноморское течение способствует загрязнению открытой части акватории.

Ключевые слова: мониторинг, нефтепродукты, загрязнение, акватория, поверхностный сток, основное черноморское течение, морской транспорт.

Введение. Черное море является наиболее подверженным угрозе крупных разливов нефти морским регионом мира. Это обусловлено такими факторами, как чрезвычайно большой объем уже перевозимой через море нефти, отсутствие эффективных механизмов борьбы с ее разливами, и низкие способности самоочищения Черного моря [1].

Изучение Черноморского региона имеет важное значение с точки зрения рыболовства и мореплавания, рекреации, хозяйственной и промышленной деятельности. Огромный интерес представляет добыча нефти и газа в этом районе, транспортные пассажиры - и грузоперевозки, научно-исследовательская деятельность.

К основным факторам, влияющим на концентрацию нефтепродуктов (НП) можно отнести: основное черноморское течение, метеорологические условия, поверхностный сток, морской транспорт. Большинство нефтепродуктов поступают в акваторию Черного моря при транспортировании нефти, со сточными водами предприятий, с хозяйственно-бытовыми водами. Основными природными источниками нефтяного

загрязнения морской среды являются естественные выходы нефти на дне моря и менее значительным источником – эрозионные процессы [2].

В настоящее время основным методом контроля нефтепродуктов в водных объектах является инфракрасный (ИК)-спектрофотометрический. Данный метод позволяет дать объективную оценку нефтяного загрязнения, осуществлять непосредственный мониторинг загрязнений нефтяными углеводородами без потери каких-либо фракций и гарантирует достоверность и точность результатов измерений [3]. Предельно допустимой концентрацией (ПДК) НП является концентрация, принятая для рыб хозяйственных водоемов (0,05 мг/л). Предел измерения 0-250 мг/л [4].

Актуальность проблемы. Состояние прибрежных вод акватории Абхазии имеет рекреационное и экологическое значение, и оказывает влияние на экономику страны. Для нашей республики экологические проблемы должны быть приоритетными, так как от экологического состояния моря зависит развитие курортной индустрии страны. Таким образом, исследование характера загрязнения природных вод нефтепродуктами является актуальной задачей.

Целью работы является изучение особенностей распределения нефтепродуктов в абхазской акватории Черного моря и выявление основных факторов, способствующих загрязнению моря.

Задачи исследования: 1) выявление среднемесячного, сезонного и многолетнего хода распределения НП в поверхностном слое акватории сухумской бухты; выявление загрязнения НП гудаутского участка, как в прибрежной, так и в открытой части моря; выявление основных факторов, способствующих загрязнению и распространению нефтепродуктов, как в прибрежной, так и в открытой части моря.

Результаты и обсуждение. К числу наиболее распространенных загрязняющих веществ антропогенного происхождения, присутствующих в воде, почве, донных отложениях, относятся нефтепродукты. Нефтепродукты являются нормируемым видом загрязнения.

Мониторинг концентрации нефтепродуктов в акватории сухумской бухты проводится Абхазским государственным центром экологического мониторинга с 1998 г по настоящее время в четырех пунктах. Пункты наблюдений выбраны исходя из степени загрязненности в результате антропогенной деятельности. Пробы берутся каждые две недели: в начале и середине месяца.

Из среднемесячного распределения НП в акватории сухумской бухты следует повышение концентрации с января по июль. Наименьшее среднемесячное значение наблюдается в декабре 0,07 мг/л (1,4 ПДК), наибольшее - в июле (0,19 мг/л), что соответствует превышению нормы в 3,8 раза (рис. 1).

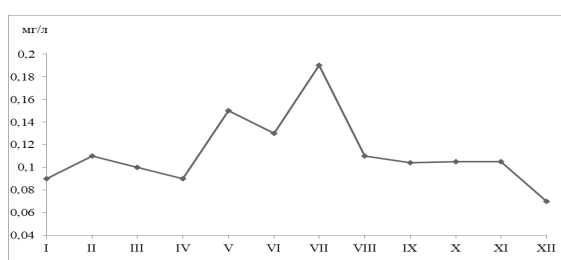


Рис. 1. Среднемесячное распределение нефтепродуктов в акватории сухумской бухты за 1998-2018 гг

Наибольшие концентрации нефтепродуктов обнаружены в пробах, отобранных в летний период 1998-2002 гг., в них концентрация нефтепродуктов превышала норму в 7-8 раз. Если проследить за сезонным ходом концентрации НП, выявляется, что в летний период (2,85 ПДК) наблюдается

наибольшее загрязнение НП акватории бухты, наименьшее – зимой (1,81 ПДК).

В летний сезон в г. Сухум часто наблюдаются ливневые осадки, суточное выпадение которых превышает месячную норму и осень в Абхазии характеризуется максимальным количеством осадков, по сравнению с другими сезонами, вследствие чего после ливневых осадков в море с поверхностным стоком поступает наибольшее количество НП. В летний и осенний периоды в море выходит наибольшее количество морского транспорта, который также может быть источником загрязнения акватории НП [5].

Накопление НП в прибрежной акватории в летний сезон, связано с гидродинамическими процессами, происходящими в море. В летний период, когда имеются значительные различия в температуре поверхности моря и глубинных слоев и нагонные явления проявляются эффективно, происходит накопление нефтепродуктов вблизи берега. Однако максимальные концентрации НП в прибрежной зоне моря связаны не столько с нагонными явлениями, сколько смывом с приморских территорий и выносами ливневок. И при этом, ОЧТ (основное черноморское течение) отвечает за перенос НП в открытую часть моря [6].

В работе, с целью выявления многолетней изменчивости, исследовано распределение концентрации нефтепродуктов в акватории бухты за период с 2001 по 2018 гг. (рис. 2). В 2003, 2014, 2015 годах наблюдения за содержанием НП в акватории бухты не проводились.

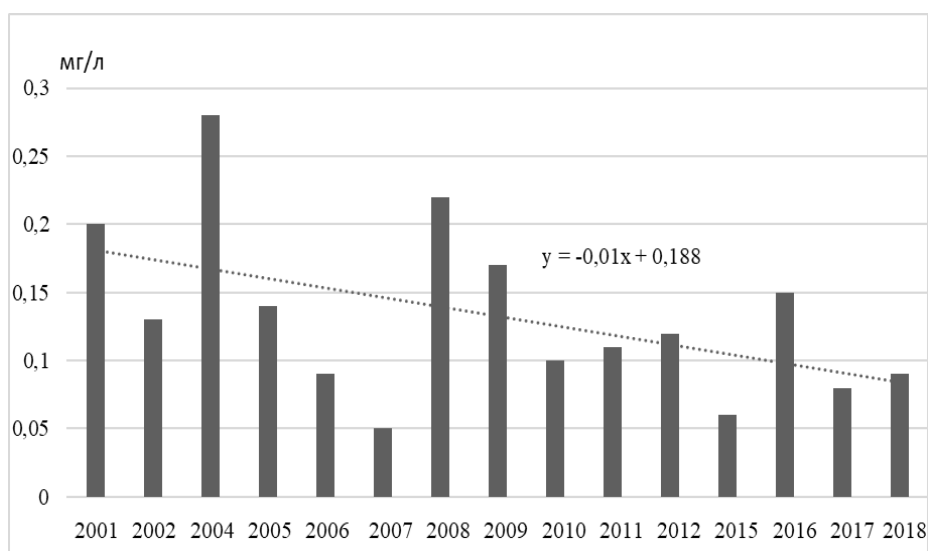


Рис. 2. Многолетняя изменчивость концентрации НП в акватории сухумской бухты

Для акватории бухты наблюдается отрицательный тренд со временем. Судя по линии тренда, концентрация нефтепродуктов имеет тенденцию к снижению на 0,1 мг/л, что составляет 2,1 ПДК. Наибольшая концентрация НП (5,6 ПДК)

наблюдается в 2004 г., наименьшая – в 2007 г. (1 ПДК).

До 2005 года главным фактором загрязнения абхазской акватории Черного моря являлся Супсинский нефтяной терминал. Интенсивность

работы Супсинского терминала была снижена после ввода в эксплуатацию нефтепровода Баку-Тбилиси-Джейхан в обход Черного моря. В результате концентрация нефтепродуктов с 2005 по 2007 гг. заметно снизилась, но в связи с возрастанием количества осадков и морского транспорта в последние годы произошло повышение концентрации нефтепродуктов, что отразилось на среднегодовых значениях [7].

Для сравнительного анализа приводятся результаты исследования водной толщи Гудаутского участка на содержание НП за 2011, 2013 годы. Изучение загрязнения водной среды в акватории Гудаутского участка проведено на 15 станциях в три календарных периода: марте, июле и октябре. Пробы отбирались на глубинах 0, 5, 10, 20 м и на дне моря [7].

Результаты мониторинга показали, что на всех горизонтах водной толщи прослеживается тенденция уменьшения концентрации НП в 2013 г. по сравнению с 2011 г. (рис. 3). Среднегодовая концентрация НП в 2011 г. составила 63,63 мкг/л

(1,3 ПДК), в 2013 г. 29,84 мкг/л (0,6 ПДК). Наиболее загрязненными оказались станции №1 (расположенная в 2 км от берега) в 2011 г. (1,76 ПДК) и №12 (расположенная в 30 км от берега) в 2013 г. (1,33 ПДК).

В марте 2011 года содержание НП в морской воде изменялось от 18 до 77 мкг/л и в 29% проб содержание превышало ПДК в 1,1-1,54 раза, максимальное превышение ПДК (в 1,54 раза) зафиксировано в придонном слое станции №3. В мае 2013 г. в водной толще акватории Гудаутского участка концентрации НП варьировали в пределах от 15 до 190 мкг/л, превышение ПДК обнаружено в 3-х пробах воды, отобранных в поверхностном слое станций № 11 и 12 (2,2 ПДК, 2,8 ПДК) и на глубине 20 м станции № 12 (3,8 ПДК).

Результаты мониторинга показали, что на всех горизонтах водной толщи в 2011 г. прослеживается сезонная тенденция увеличения средних содержаний НП от марта к октябрю, в 2013 г. максимум концентрации НП наблюдается в июле (0,68 ПДК) [7] (рис. 4).

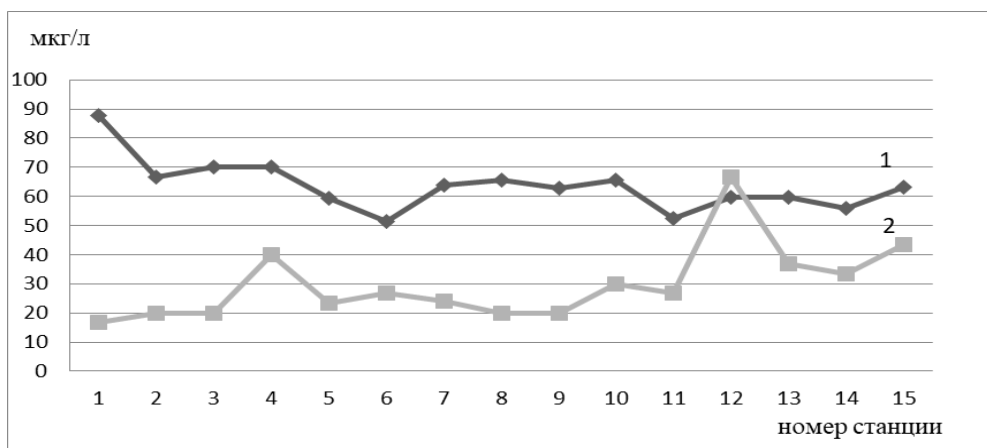


Рис. 3. Пространственное распределение НП в водной толще (0,5 м – до дна) гудаутского участка шельфа в 2011 (1) и 2013 гг. (2)

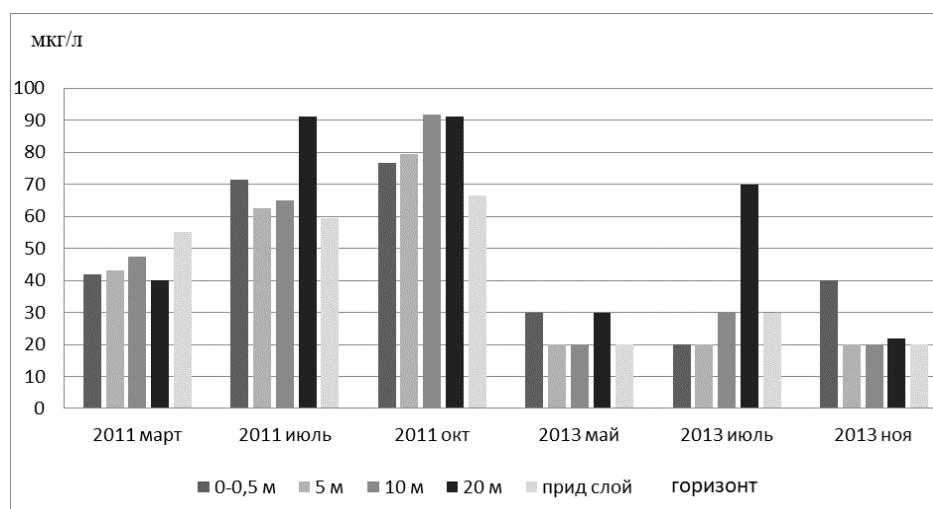


Рис. 4. Средние содержания НП на различных горизонтах водной толщи гудаутского участка шельфа

Картина пространственного распределения НП имеет тенденцию повышения от поверхностного слоя к горизонту 20 м. В придонном слое среднее содержание НП в основном меньше по сравнению со средним содержанием в слое 0-20 м. Превышение ПДК наблюдалось на всех горизонтах в июле и октябре и в придонном слое в марте 2011 г. В 2013 г. превышение ПДК наблюдалось в июле на горизонте 20 м (1,4 ПДК).

В целом из результатов мониторинга абхазской акватории Черного моря следует, что прибрежные поверхностные воды более загрязнены НП, нежели пространственные воды Гудаутского участка шельфа, где НП распределены более равномерно и наблюдается значительное их снижение в последние годы.

Основные рекомендации по снижению загрязнения прибрежных вод – контроль за ливневым и речным стоком, т.к. сток с суши вносит основной вклад в загрязнение прибрежной акватории моря.

Выводы: 1. Наибольшая концентрация нефтепродуктов наблюдается в прибрежной зоне, т.к. в этой полосе происходит непосредственное загрязнение моря поверхностным стоком. С удалением от берега, концентрация уменьшается в 2-3 раза. 2. Уменьшение процессов вертикального перемешивания вод и образование устойчивого термоклина в летний период способствует накоплению НП в прибрежной акватории (2,85 ПДК). 3. За последние 15 лет наблюдается тенденция снижения НП в акватории сухумской бухты на 1,21 ПДК. 4. Концентрация нефтепродуктов в акватории гудаутского участка шельфа увеличивается от поверхностного слоя моря к горизонту 20 м, несколько превышая предельно допустимую норму. 5. Наибольшее количество нефти с суши поступает в море речным и поверхностным стоком, смываемой с городских территорий. Также загрязнению поверхностных вод моря нефтепродуктами способствуют морской транспорт и основное черноморское течение.

Л и т е р а т у р а

1. Нельсон-Смит А. Нефть и экология моря. – М.: Издательство "Прогресс", 1977. – 302 с.
2. Герлах С.А. Загрязнение морей. Диагноз и терапия. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 264 с.
3. Методика выполнения измерений массовой концентрации нефтепродуктов в пробах питьевых, природных и очищенных сточных вод методом ИК-спектроскопии – Москва, 2000.
4. Государственные стандарты Союза ССР. Вода питьевая. Методы анализа. – М.: Изд-во стандартов, 1984. – 239 с.
5. Гицба Я.В., Экба Я.А. Нефтеуглероды в абхазской акватории Черного моря. Материалы Международного симпозиума «Инженерная экология» – 2015. Выпуск VIII. Москва, 2015. - С. 77-82.
6. Гицба Я.В., Экба Я.А. Распределение нефтепродуктов в Сухумской акватории Черного моря. Материалы VII Международной черноморской школы-семинара «Исследования и креативные проекты для

устойчивого развития прибрежно-шельфовых зон», Геленджик, 2016.

7. Гицба Я.В., Дбар Р.С. Экба Я.А. Загрязнение морской акватории нефтепродуктами. Доклады российского научно-технического общества радиотехники, электроники и связи им. А.С. Попова. Выпуск IX. Москва, 2017. - С. 42-46.

References

1. Nelson-Smith A. Oil and ecology of the sea. - M.: Publishing house "Progress", 1977. - 302 p.
2. Gerlach S.A. Pollution of the seas. Diagnosis and therapy. - L.: Gidrometeoizdat, 1985. -- 264 p.
3. Technique for measuring the mass concentration of petroleum products in samples of drinking, natural and treated wastewater, the method of IR spectrometry - Moscow, 2000.
4. State standards of the USSR. Drinking water. Analysis methods. - M.: Publishing house of standards, 1984. -- 239p.
5. Gitsba Ya.V., Ekba Ya.A. Petroleum hydrocarbons in the Abkhazian water area of the Black Sea. Materials of the International Symposium "Environmental Engineering" - 2015. Issue VIII. Moscow, 2015. - S. 77-82.
6. Gitsba Ya.V., Ekba Ya.A. Distribution of oil products in the Sukhumi water area of the Black Sea. Materials of the VII International Black Sea School-Seminar "Research and Creative Projects for Sustainable Development of Coastal Shelf Zones", Gelendzhik, 2016.
7. Gitsba Ya.V., Dbar R.S. Ekba Ya.A. Pollution of the sea area with oil products. Reports of the Russian Scientific and Technical Society of Radio Engineering, Electronics and Communications named after V.I. A.S. Popov. Issue IX. Moscow, 2017.- S. 42-46.

Gitsba Ya.V.

OIL POLLUTION OF WATERS IN THE ABKHAZIAN SECTOR OF THE BLACK SEA

The paper provides an assessment of oil pollution in the sea area of Abkhazia. The character of the seasonal and average monthly distribution of the concentration of oil products in the coastal waters of the Sukhum bay water area, also in the water area of the Gudauta shelf, has been revealed. In the water area of the Sukhumi Bay, the greatest pollution is observed in the summer period (2.85 MPC). The picture of the spatial distribution of petroleum products in the water area of the Gudauta area tends to increase from the surface layer to the 20 m horizon, the seasonal concentration - from spring to autumn. The long-term course of the distribution of the concentration of petroleum products tends to decrease by an average of 2.1 MPC, although it remains at a level exceeding the maximum permissible norm.

The main sources of pollution of the coastal waters of the Abkhazian water area of the Black Sea are: city sewerage, automobile filling stations (gas stations), motor transport, the main Black Sea current contributes to the pollution of the open part of the water area.

Key words: monitoring, oil products, pollution, water area, surface runoff, main Black Sea current, sea transport.

Гицба Яна Валиковна, канд.физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры прикладной физики Абхазского государственного университета, г. Сухум, Республика Абхазия.

Gitsba Yana Valikovna, candidate of Physical and Mathematical Sciences, dozent, the most senior researcher, Abkhazian State University, Republic of Abkhazia.

E-mail: Yana_akya@mail.ru

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 09.04.2021 года

УДК 520.874.3: 520.872 : 520.844

ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СДВИГОВ И ПРОСЕДАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД НАД ОТРАБОТАННЫМ ПРОСТРАНСТВОМ ШАХТ ГОРОДА ДОНЕЦКА

Несова А.В., Шестакин Н.С., Хархордин Е.В.

POSSIBILITIES OF STUDYING SHIFTS AND SITTING ROCKS OVER THE WORKED SPACE OF THE MINES OF THE CITY OF DONETSK

Nesova A.V., Shestavin N.S., Kharkhordin E.V.

Для определения состояния поверхности Земли из за возможных сдвигов и проседании горных пород в результате добычи угля и полезных ископаемых, предлагается изучить возможность использования метода радарной интерферометрии, как одной из альтернатив в мониторинге состояния поверхности Земли.

С применением спутникового сервиса «BEGA-Science» и данных с космического аппарата Sentinel-1, прибор C-SAR в режиме IW (VH, VV), получена информация о деформации поверхности и сооружений по двум или более датам

Предложен способ мониторинга состояния земной поверхности можно использовать для определения величины деформации земной поверхности, что поможет определить влияние деформаций земной поверхности на состояние конструкции подрабатываемых зданий и сооружений.

Ключевые слова: мониторинг, поверхность Земли, радарная интерферометрия, деформация, дистанционное зондирование Земли, полезные ископаемые, добыча угля.

Введение. Изучение рельефа местности с использованием данных дистанционного зондирования Земли, в настоящее время является, как никогда актуальной и полезной информацией для многих отраслей деятельности начиная с бизнеса, строительства, и заканчивая научными исследованиями.

Спутниковый мониторинг земной поверхности проводится с использованием спутниковых радиолокаторов, в основу которых лежит дифференциальная обработка двух или более радиолокационных изображений одинаковой геометрии съемки [1].

Этот способ мониторинга является эффективным методом оценки рельефа Земли на больших площадях. На уровне единиц сантиметров определяется вертикальные смещения земной поверхности при дифференциальной обработке данных радиолокационных изображений (РЛИ). Благодаря этому открываются широкие перспективы использования РЛИ для более глубокого изучения процессов сдвижения земной поверхности и мониторинга состояния объектов на обширных территориях [2].

Главное достоинство данного подхода это снижение трудоемкости, полевой этап сократится до закрепления сигнальных точек и определен их координат для целей привязки к картографической информации, и получение комплексной картины техногенного воздействия, охватывающей всю зону влияния [3].

Цель работы: исследовать возможное применение метода радарной интерферометрии на полигонах Донецка

В работе планируется решить следующие задачи:

- изучить теоретические основы обработки РЛИ.
- выбрать оптимальный способ обработки РЛИ.
- применение радиолокационных спутников для анализа процессов оседания земной поверхности в районе горных выработок.

Интерферометрия (радиолокация с синтезированной апертурой), фиксирует амплитуду и фазу отраженного сигнала. Не имеет практического значения использование одного изображения с радара с синтезированной апертурой (РСА) в данном методе, тогда как два снимка (интерференционная пара), полученные под различными углами, могут быть использованы для получения цифровой модели рельефа, которая, в свою очередь, может дать информацию об изменениях ландшафта и улучшить разрешение.

Дифференциальная интерферометрия основана на обработке двух и более радиолокационных снимков, снятых с двух близких параллельных орбит космического аппарата (расстояние между сенсорами около 300 м).

Пара спутниковых изображений, сделанных с некоторым интервалом времени есть самым простым способ оценки смещений и временных изменений.

На рисунке ниже приведены две интерферограммы позволяющие, увидеть любые изменения, которые произошли на поверхности Земли (рис.1) [4].

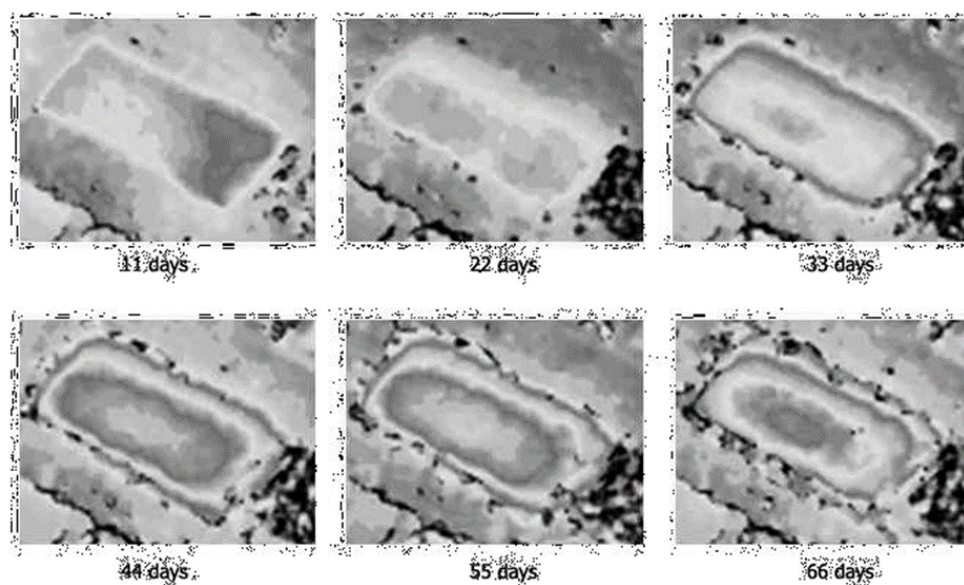


Рис. 1. Осадка в зоне строительства здания (каждое изменение градации серого соответствует оседаниям, равным половине длины волны – 1,55 см)

Один из способов применения методов радиолокационной интерферометрии описаны в работе [5], где проводится анализ процессов оседания земной поверхности в районе горных выработок на основе радиолокационных спутниковых данных на примере Карагандинской области.

В Карагандинской области (Казахстан), в настоящий момент имеется большое количество шахт со значительным объемом выработанного угля, в связи с этим зарегистрированы случаи деформации железнодорожного полотна, проседания автомобильных дорог и возникновения трещин на стенах зданий.

Так как в Донецкой области есть множество угледобывающих предприятий, то рассмотренная выше проблема процессов сдвигов и проседания поверхности для нас весьма актуальна.

В центральном районе города Донецк уже были зафиксированы разрушения и трещины на постройках из-за тектонических разломов, которые связаны с геологическим строением территории Донбасса, и пустот (отработанных пространств шахт), оставшихся после столетнего периода добычи угля. Эти нарушения отмечены на рис. 2, где показаны следующие объекты:

- 1) Стадион «Донбасс Арена» – построен в 2009 г.;
- 2) Место укрепления сооружения, расположенного на тектонических нарушениях;
- 3) Французский надвиг;
- 4) Коксовый надвиг;
- 5) Мушкетовский надвиг;
- 6) 22-х этажный жилой дом – построен в 2005 г. и не заселен в связи с трещинами;
- 7) 9-ти этажный жилой дом – построен в 1985 г. и треснул по всей высоте;

8) 5-ти этажный жилой дом, который разрушился в 1981 г.;

9) Полигон № 1 территории интереса площадью в 7,93 км².

Особенно интересен для изучения район стадиона «Донбасс Арена» [6], где пересекаются два тектонических разлома: Французский и Коксовый, что приводит к значительным деформациям конструкций сооружения, как на уровне фундамента, как и на покрытии, а также на всех остальных уровнях (на рисунке 4.2 красными стрелками показано направление крена на парапетной стене 6-7 уровня стадиона).

Для целей оперативного мониторинга состояния территории и сооружений на территории города Донецка актуально использовать возможности спутникового мониторинга, которые предоставляет Центр коллективного пользования системами архивации, обработки и анализа спутниковых данных (ЦКП «ИКИ-Мониторинг») Института космических исследований Российской академии наук [7]. С марта 2020 года Донецкий национальный университет получил свободный доступ к системе «VEGA-Science», которая содержит архивы радиолокационных изображений с космического аппарата Sentinel-1, прибор C-SAR в режиме IW (VH, VV), что позволит получать информацию о деформации поверхности и сооружений методом радарной интерферометрии после соответствующей обработки оптико-радарных композитов (ОРК) территории Ворошиловского р-на г. Донецка по двум и более датам (на рис. 4 для примера показан один из таких снимков сделанный 28 января 2020 г.).

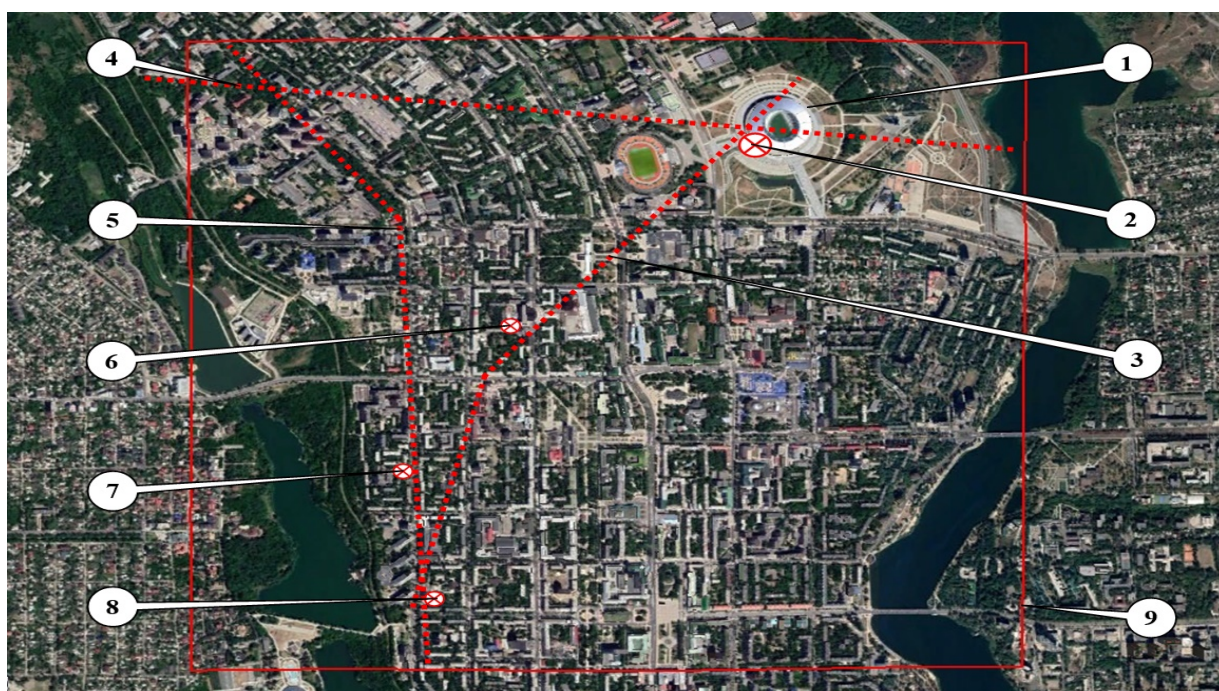


Рис. 2. Центральный район города Донецк на сервисе Google Earth Pro

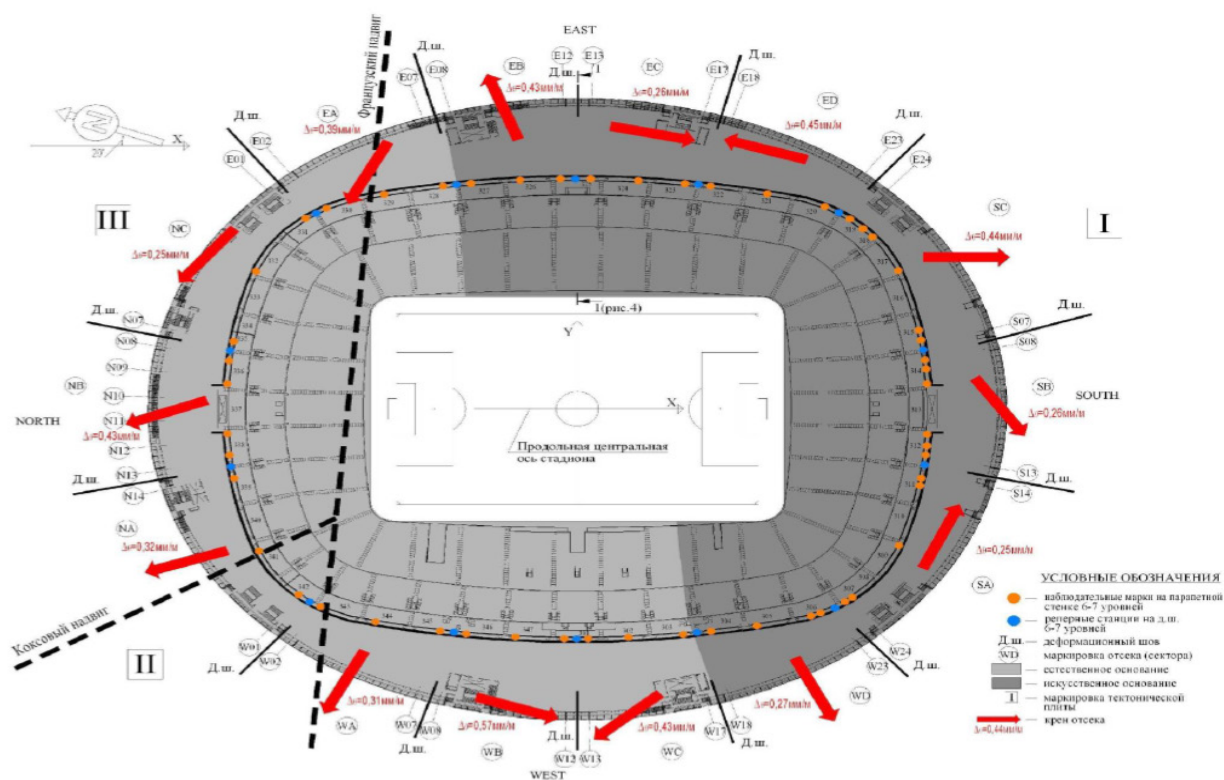


Рис. 3. Крен секций стадиона «Донбасс Арена» по данным измерений

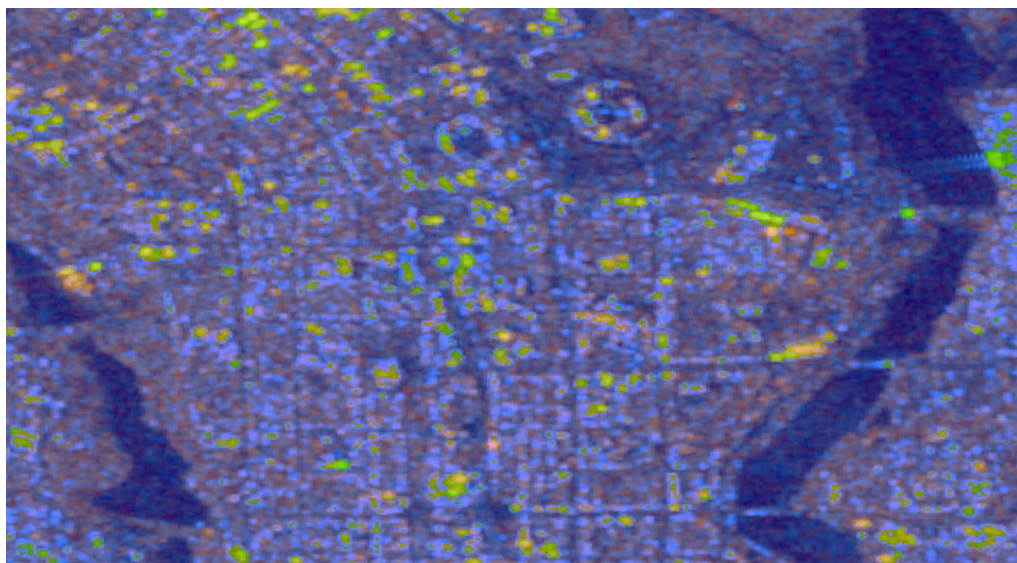
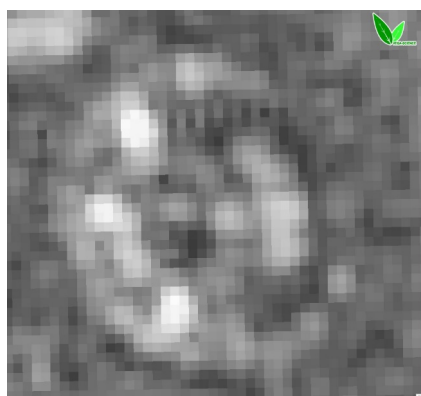
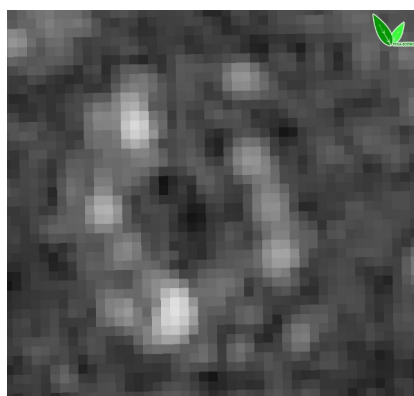


Рис. 4. ОРК Ворошиловского р-на г. Донецка на 28.01.2020

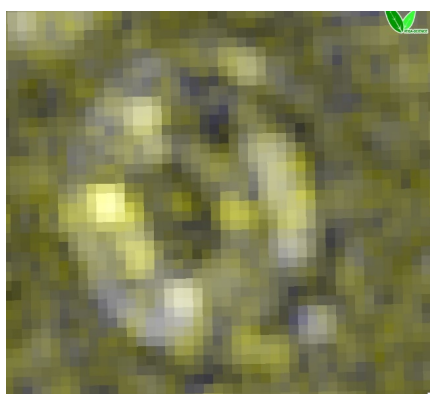


а

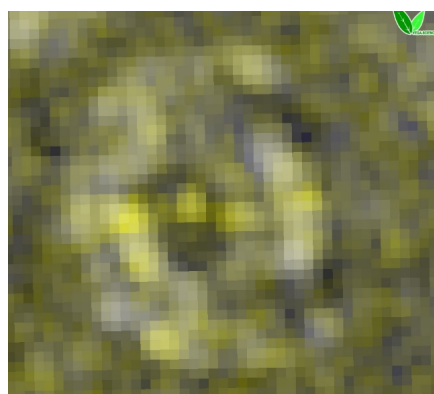


б

Рис. 5. Поляризация ВВ (а) и ВГ (б) в районе стадиона «Донбасс Арена» на 28.01.2020



в



г

Рис. 6. Синтез поляризаций ВВ-ВВ-ВГ в районе стадиона «Донбасс Арена» на 28.01.2020 (а), 03.02.2020 (б), 09.02.2020 (в) и 15.02.2020 (г)

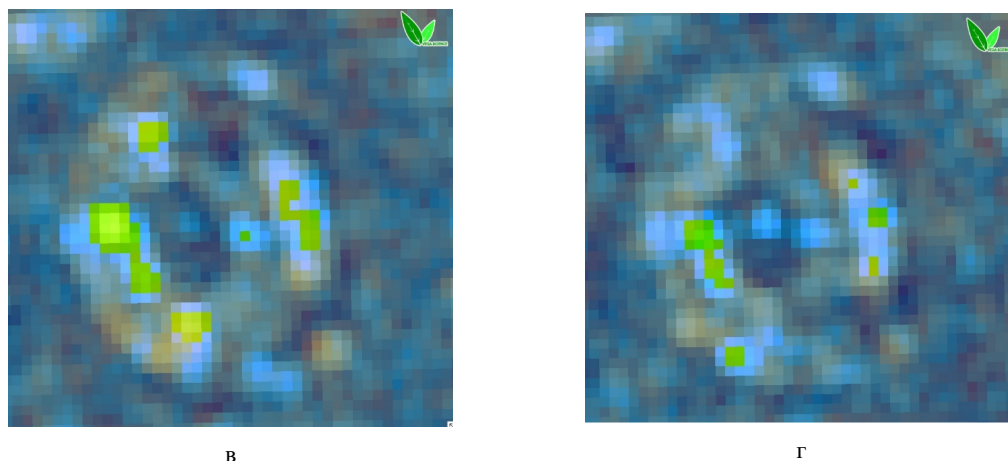


Рис. 7. ОВК в районе стадиона «Донбасс Арена» на 28.01.2020 (а), 03.02.2020 (б), 09.02.2020 (в) и 15.02.2020 (г)

На рис. 5-7 показана последовательность обработки спутниковых радарных данных в районе стадиона «Донбасс Арена» от распределения калиброванных поляризаций на одну дату до получения распределений синтеза поляризаций на четыре даты, а затем получения оптико-радарного композита. В настоящее время проводятся работы по разработке компьютерной программы на MATLAB по адаптации этих изображений в метод радарной интерферометрии для получения информации о деформациях поверхностей и сооружений.

Выводы. Метод радиолокационной интерферометрии помогает получать цифровые модели рельефа высокого разрешения, оценивать смещения, связанные с землетрясениями, магматической активностью, обнаруживать разливы нефти и различать их причины, проводить мониторинг смещений.

Метод мониторинга деформаций земной поверхности при подземной добыче угля из пластовых месторождений можно использовать для определения величины деформации земной поверхности, что поможет определить влияние деформаций земной поверхности на состояние конструкции подрабатываемых зданий и сооружений.

На основе полученных данных можно производить не только оценку уже произошедших изменений поверхности, но и прогнозировать дальнейшее развитие процесса, величину и направление оседания, используя методы интерполяции данных и принимать своевременные меры для обеспечения безопасности промышленных объектов и населения.

Л и т е р а т у р а

1. Евтюшкин А.В., Филатов А.В. Оценка деформаций земной поверхности в районах интенсивной нефтедобычи Западной Сибири методом PCA интерферометрии по данным ENVISAR и ALOS/PALSAR // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса:

Физические основы, методы и технологии мониторинга окружающей среды, потенциально опасных явлений и объектов. Сборник научных статей. Выпуск 6. Том 2. – М.: ООО «Азбука-2000», 2009. – С. 46-53.

2. Баранов Ю.Б., Кантемиров Ю.И., Киселевский Е.В., Болсуновский М. А. Мониторинг смещений земной поверхности на разрабатываемых месторождениях углеводородов с помощью комплекса космических и геодезических методов. // Геоматика, № 1, 2008. – С. 51-55.

3. Лысков И.А., Мухин В.В., Кашников Ю.А. Мониторинг деформационных процессов земной поверхности методами радарной интерферометрии. // Вестник ПГТУ Геология. Нефтегазовое и горное дело, № 5. – 2010. – С. 11-16.

4. URL:<http://www.sarmap.ch/page.php?page=landdisplacement>. (дата обращения: 01.04.2021)

5. Мозер Д.В., Туякбай А.С., Гей Н.И., Нагибин А.А., Сатбергенова А.К. Мониторинг подработанных территорий Карагандинского угольного бассейна с использованием спутниковой радарной интерферометрии // Интерэкспо Гео-Сибирь., 2014. – т. 4. – № 1. – С. 14-18.

6. Розенвассер Г.Р. Концепция мониторинга уникальных строительных объектов на примере футбольного стадиона «Донбасс Арена» в г. Донецке // Вестник Института гражданской защиты Донбасса, Выпуск 3 (7), 2016. – С. 26-35.

7. Лупян Е.А., Прошин А.А., Бурцев М.А. и др. Опыт эксплуатации и развития центра коллективного пользования системами архивации, обработки и анализа спутниковых данных (ЦКП «ИКИ-Мониторинг») // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. – 2019. – Т. 16. – № 3. – С. 151-170.

6. Rosenwasser G.R. The concept of monitoring unique construction projects on the example of the Donbass Arena football stadium in Donetsk // Bulletin of the Institute of Civil Protection of Donbass, Issue 3 (7), 2016. - pp. 26-35.

7. Lupyan E.A., Proshin A.A., Burtsev M.A. and others. Experience in the operation and development of a center for collective use of archiving, processing and analysis systems of satellite data (CKP "IKI-Monitoring") // Modern problems of remote sensing of the Earth from space. - 2019. - T. 16. - No. 3. - S. 151-170.

References

1. Evtyushkin A.V., Filatov A.V. Assessment of deformations of the earth's surface in areas of intense oil production in Western Siberia using the SAR interferometry method according to ENVI \ ASAR and ALOS \ PALSAR data // Modern problems of remote sensing of the Earth from space: Physical foundations, methods and technologies for monitoring the environment, potentially dangerous phenomena and objects. Collection of scientific articles. Issue 6. Volume 2. - Moscow: Azbuka-2000 LLC, 2009. - P. 46-53.
2. Baranov Yu.B., Kantemirov Yu.I., Kiselevskiy EV, Bolsunovskiy MA Monitoring of displacements of the earth's surface at the developed hydrocarbon deposits using a complex of space and geodetic methods. // Geomatics, No. 1, 2008. - S. 51-55.
3. Lyskov I.A., Mukhin V.V., Kashnikov Yu.A. Monitoring of deformation processes of the earth's surface using radar interferometry methods. // Bulletin of PGTU Geology. Oil and gas and mining, No. 5. - 2010. - P. 11-16.
4. URL: <http://www.sarmap.ch/page.php?Page=landdisplacement>. (date of access: 01.04.2021)
5. Moser D.V., Tuyakbai A.S., Gay N.I., Nagibin A.A., Satbergenova A.K. Monitoring of undermined territories of the Karaganda coal basin using satellite radar interferometry // Inter-expo Geo-Siberia., 2014. - vol. 4. - No. 1. - pp. 14-18.

Nesova A.V., Shestavin N.S., Kharkhordin E.V.

POSSIBILITIES OF STUDYING SHIFTS AND SITTING ROCKS OVER THE WORKED SPACE OF THE MINES OF THE CITY OF DONETSK

To determine the state of the Earth's surface due to possible shifts and subsidence of rocks as a result of coal and minerals mining, it is proposed to study the possibility of using the method of radar interferometry as one of the alternatives in monitoring the state of the Earth's surface.

Using the VEGA-Science satellite service and data from the Sentinel-1 spacecraft, the C-SAR device in IW (VH, VV) mode, information on the deformation of the surface and structures was obtained for two or more dates

The proposed method for monitoring the state of the earth's surface can be used to determine the magnitude of the deformation of the earth's surface, which will help to determine the effect of deformations of the earth's surface on the state of the structure of undermined buildings and structures.

Key words: *monitoring, the Earth's surface, radar interferometry, deformation, remote sensing of the Earth, minerals, coal mining.*

Несова Арина Владимировна, аспирант, инженер кафедры «Физики неравновесных процессов, метрологии и экологии им И.Л. Повха» ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк.

E-mail: arina.nesova@gmail.com

Nesova Arina Vladimirovna, postgraduate student, engineer of the Chair of "Physics of Non-equilibrium Processes, Metrology and Ecology named after I.L. Povkha" State Educational Establishment of Higher Professional Education "Donetsk National University", Donetsk.

Шеставин Николай Степанович, к.т.н., заведующий отделом научно-технической информации ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк.

E-mail: n.shestavin@mail.ru

Shestavin Nikolay Stepanovich, Candidate of Technical Sciences, Head of the Scientific and Technical Information Department, State Educational Establishment of Higher Professional Education "Donetsk National University", Donetsk.

Хархордин Евгений Витальевич, студент 4 курса программы бакалавриата кафедры «Физики неравновесных процессов, метрологии и экологии им И.Л. Повха ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет», г. Донецк.

E-mail: gekaharhordin@gmail.com

Kharkhordin Evgeny Vitalievich, 4th year undergraduate student of the Department of Physics of Nonequilibrium Processes, Metrology and Ecology named after I.L. Povkha " State Educational Establishment of Higher Professional Education "Donetsk National University", Donetsk.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК 538.911

АНАЛИЗ УСТРОЙСТВ РАВНОМЕРНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ПОТОКА РАБОЧЕЙ ЖИДКОСТИ В ГИДРАВЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ТЯЖЕЛОМ МАШИНОСТРОЕНИИ И МОБИЛЬНЫХ СЛОЖНОТЕХНИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВАХ

Горбунов Р.С., Цурцилина А.Ю., Деркачев И.С.

ANALYSIS OF DEVICES FOR UNIFORM SEPARATION OF THE WORKING FLUID FLOW IN HYDRAULIC SYSTEMS USED IN HEAVY ENGINEERING AND MOBILE COMPLEX ENGINEERING DEVICES

Gorbunov R.S., Putilin N.V., Derkachev I.S.

В работе рассмотрены виды и конструкция существующих устройств разделения потока рабочей жидкости в гидравлических системах. Приведены примеры и особенности их применения, а так же основные достоинства и недостатки. Рассмотрены перспективы исследований в данной области.

Ключевые слова: делитель потока, равномерное распределение, гидравлическая система, мобильное сложнотехническое устройство.

Введение. Довольно сложно опровергать тот факт, что в современном мире одной из основных составных частей технологических машин, является их привод. Зачастую в качестве силового привода в мобильных сложнотехнических устройствах используется именно гидравлический привод. Его эксплуатационные и функциональные характеристики оказывают ключевое влияние на свойства, как отдельного гидромеханического привода, так и всего устройства.

В современных реалиях развития промышленности большинство гидромеханических приводов мобильных сложнотехнических устройств требуют обеспечения синхронного функционирования двух и более рабочих органов. Наличие нескольких рабочих органов является весьма распространенным явлением в различных отраслях производства, особенно часто это прослеживается в сельскохозяйственном, инженерно-строительном и авиационном направлениях. Синхронное функционирование нескольких рабочих органов зачастую является ключевым фактором полноценной работоспособности мобильного сложнотехнического устройства. Основываясь на вышесказанном можно утверждать, что одним из основных вопросов современной гидравлики является изучение обеспечения синхронного функционирования нескольких рабочих органов. Следует отметить, что данный вопрос не достаточно разработан в современной технической и научной

литературе, а потому требуют дальнейшего изучения, что и делает его актуальным.

Основная часть. Основываясь на ранее проведенных исследованиях [1] и современном развитии технологий в области машиностроения, синхронное функционирование двух и более рабочих органов наиболее рационально осуществлять за счёт использования в гидравлической системе дроссельных делителей потока (ДДП) и делителей-сумматоров потоков (ДСП). Однако стоит отметить тот факт, что основными применяемыми, в различных отраслях, ДДП являются устройства золотникового типа. Данный тип ДДП отличается повышенными требованиями к качеству рабочей жидкости и условиям эксплуатации, что является основной причиной их ограниченного и не эффективного использования в системах приводов мобильных сложнотехнических устройств, используемых в сложных и экстремальных условиях, характеризующихся широким перепадом температуры окружающей среды, ее повышенной загрязненностью и невысоким качеством рабочей жидкости.

Рассмотрим устройство ДДП более подробно. ДДП включает в свою конструкцию три основных элемента, а именно: задающее устройство, чувствительный элемент и запорно-регулирующий элемент. В ДДП золотникового типа, который используется в настоящее время не только в России, но и во всем мире, в качестве запорно-регулирующего элемента применяются золотниковые пары [2].

Простейшим примером ДДП золотникового типа является Г75-6, схема которого приведена на рис. 1.

Принцип работы рассматриваемого ДДП золотникового типа заключается в следующем: рабочая жидкость поступает на вход 6, затем разделившиеся потоки, пройдя через входные

сопротивления (чувствительные элементы) 5 и 7, по протокам 4 и 8 золотника 3, подаются на соответствующие переменные сопротивления 15 и 10, образованные кромками золотника 3 и втулки 2. Через выходные каналы 14 и 11 рабочая жидкость отводится к гидравлическим двигателям. При работе ДП давление из проточек 4 и 8 по соответствующим каналам 12 и 13 подаётся в камеры управления 9 и 16, образованные торцами золотника 3, втулкой 2 и корпусом 1 делителя потока.

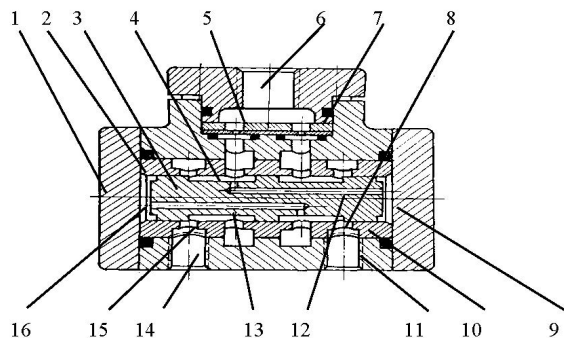


Рис. 1. ДДП золотникового типа

Стоит ещё раз упомянуть тот факт, что, несмотря на массовое распространение, рассматриваемые ДДП имеют целый ряд недостатков, которые характерны для всех гидравлических устройств золотникового типа:

- сложность изготовления;
- большая часть ДДП не подлежит ремонту;
- чувствительность к рабочей жидкости и условиям эксплуатации.

В связи с этими, применение ДДП золотникового типа в гидроприводах общего назначения является нецелесообразным.

Решить данный проблемный вопрос на протяжении долго времени пытались не только в России, но и в странах Европы. Неоднократно предпринимались попытки создать ДДП, отличный по конструкции от ДДП золотникового типа [3].

Первой, довольно успешной, попыткой решения данной проблематики стал делитель потока с плоским мембранным элементом. Конструкция такого ДДП [4] представлена на рис. 2.

В данном ДДП функции запорно-регулирующего элемента выполняет гибкая мембрана с жестким центром в сочетании с переменными гидравлическими сопротивлениями типа плоский (тарельчатый) клапан. Стоит отметить тот факт, что рассматриваемый ДДП, как и золотниковый, имеет механически сблокированный задатчик – одна и та же мембрана одновременно участвует в управлении переменными сопротивлениями обеих ветвей.

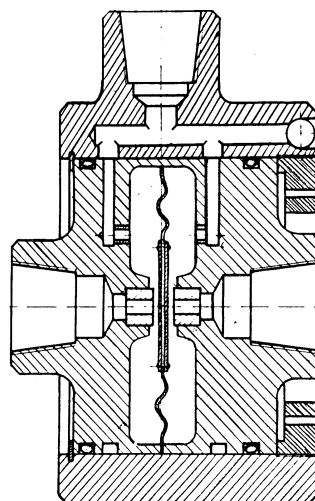


Рис. 2. ДДП с плоским мембранным элементом

Несмотря на, казалось бы, явные преимущества перед золотниковым типом, а именно - простоту конструкции, низкую стоимость и низкие требования к качеству рабочей жидкости, рассматриваемый ДДП все же имеет критический недостаток – во время работы ДДП, из-за воздействия силы гидростатического давления на площадь выходного отверстия, появляются недопустимо высокие ошибки деления потоков.

Данная проблема была спешно устранена авторами патента, что в значительной мере улучшило работу делителя потока, однако вместе с тем привело к усложнению и удорожанию изготовления данного ДДП.

Другой попыткой решения проблемы ДДП золотникового типа стал ДСП, в котором запорно-регулирующим элементом служили гибкие мембранные элементы и переменные гидравлические сопротивления типа плоский клапан, однако функции чувствительных элементов здесь выполняют трубки Вентури. Данный ДДП представлен на рис. 3 [5].

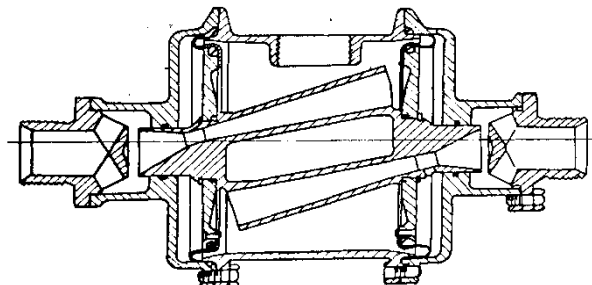


Рис. 3. ДСП с чувствительными элементами в виде трубок Вентури

ДСП с чувствительными элементами в виде трубок Вентури имеет ряд преимуществ по сравнению с ранее описанными, а именно:

- уменьшенные потери энергии на делителе, за счет использования трубок Вентури;

- использование трубок Вентури позволяет обеспечивать работу устройства как ДСП и как ДДП.

Однако, в данной конструкции ДСП прослеживается такой же критический недостаток как и у делителя, изображённого на рисунке 2, а именно то, что на его мембранные элементы, по площади выходных отверстий, в процессе регулирования воздействует перепад давления, что является причиной значительной ошибки синхронизации и требует специальной настройки входных сопротивлений.

Ещё одной попыткой ухода от конструкции ДДП золотникового типа стало создание делителей потока с цилиндрическими мембранными элементами. Данные ДДП представлены на рис. 4 [6].

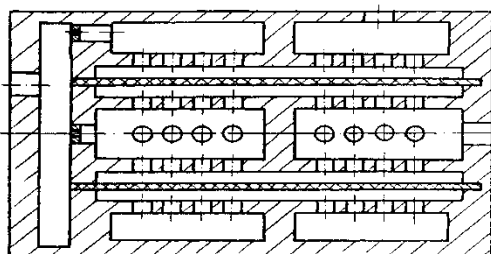


Рис. 4. Дроссельный делитель потока с цилиндрической мембраной

Применение упругих оболочек дало возможность полностью отказаться от необходимости использования трущихся подвижных элементов, однако вместе с этим появились такие недостатки, как:

- неодинаковые условия регулирования в ветвях, что дополнительно требует специальной настройки чувствительных элементов.

- зависимость от качества и расхода рабочей жидкости.

В большинстве случаев предпринимались попытки создания ДДП как не золотникового типа, так и не мембранного. В качестве примера рассмотрим ДДП, схема которого представляет собой делитель потока не золотникового типа с запорно-регулирующим элементом, выполненным в виде пружины [7]. Схема данного ДДП представлена на рис. 5.

Подобная конструкция ДДП могла бы стать полноценной заменой делителям золотникового типа, однако в ней также имеются специфические недостатки:

- требуются жесткие требования к пружинам на точность изготовления;
- точность работы делителя во многом зависит от жесткости пружин и мембранного элемента;
- из-за перепада давления в ДДП значительно снижается точность синхронизации.

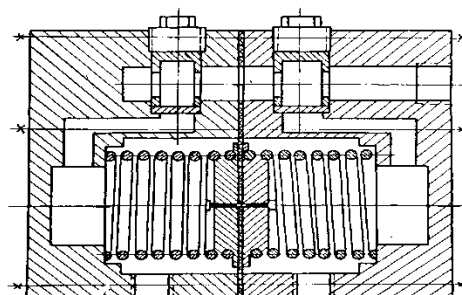


Рис. 5. ДДП пружинного типа

Относительно свежей попыткой ухода от ДДП золотникового типа, является использование в роли запорно-регулирующего элемента упругого кольца круглого сечения.

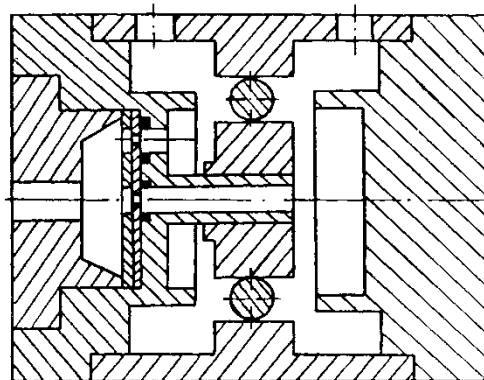


Рис. 6. ДДП с регулятором в виде упругого кольца круглого сечения

На рис. 6 изображена конструктивная схема такого делителя потока. Принцип действия рассматриваемого ДДП такой же, как и у остальных делителей не золотникового типа, которые были описаны выше, однако здесь функции запорно-регулирующего элемента выполняет подвижное упругое кольцо круглого сечения.

Но в данной конструкции ДДП также прослеживаются критические недостатки, которые нивелируют все ее преимущества:

- при деформации упругого кольца возникают диссипативные силы в его материале, что в значительной мере увеличивает ошибку синхронизации;

- за пределами дросселирующей щели на упругое кольцо влияет перепад давления, который соответствует перепаду давлений в синхронизируемых гидравлических двигателях, что в свою очередь также ухудшает качество работы делителя.

Выводы. Полученные результаты анализа устройств равномерного разделения потока рабочей жидкости позволяют прийти к следующим выводам:

- ДДП золотникового типа, несмотря на явные недостатки, все же являются основным способом синхронизации нескольких рабочих органов

гидромеханического привода и массово применяются в различных отраслях;

– устранение недостатков и повышение эффективности работы ДДП золотникового типа является важной и актуальной задачей в настоящее время;

– несмотря на различные варианты конструкции делителей потока и научные изыскания по данной тематике, эффективной замены ДДП золотникового типа до сих пор не найдено.

Л и т е р а т у р а

1. Антоненко В. И. Разработка конструкции и оптимизация процессов гидропривода синхронных механизмов сельскохозяйственных машин: автореф. дис. ... канд. техн. наук. – Ростов-на-Дону, 1985. – 23 с

2. Сахно Ю.А. Делители и сумматоры потоков / Ю. А. Сахно, М. Б. Таугер. – М.: Машиностроение, 1972. – 110 с.

3. Рыбак А.Т. Моделирование и расчёт гидромеханических систем на стадии проектирования / ДГТУ; А.Т. Рыбак. – Ростов-на-Дону, 2006. – 167 с.

4. Пат. 3729014 (США), Делитель потока / Tadataka Narumi – № 112233; заявл. 03.02.71; приор. 07.02.70, Япония.

5. Пат. 1566897 (Франция), Делитель расхода Richard Lucas. – № 150410; заявл. 03.05.68

6. А. с. 931995 СССР, МКИ4 F15 В 11/22. Делитель потока / Т. В. Алексеева, Р. П. Кириков, Э. М. Шерман [и др.] (СССР). – №2964050/25-06; заявл. 23.07.80; опубл. 30.05.82., Бюл. № 20.

7. А. с. 496416 СССР, М. Кл.2 F16 К 18/00. Делитель потока / Л. Л. Роганов (СССР). – № 1874039/25-8; заявл. 15.01.73; опубл. 25.12.75, Бюл. № 47.

References

1. Antonenko V. I. Design development and optimization of hydraulic drive processes of synchronous mechanisms of agricultural machines: abstract of the cand. tech. sci. dis. – Rostov-on-Don, 1985. – 23 p.

2. Sakhno Yu. A. Dividers and summators of flows / Yu. A. Sakhno, M. B. Tauger – M.: Mashinostroenie, 1972. – 110 p.

3. Rybak A. T. Modeling and calculation of hydro-mechanical systems at the design stage / DSTU; A. T. Rybak. – Rostov-on-Don, 2006. – 167 p.

4. Pat. 3729014 (USA), Flow Divider / Tadataka Narumi – No. 112233; claimed 03.02.71; prior. 07.02.70, Japan.

5. Pat. 1566897 (France), Richard Lucas flow divider. – No. 150410; application. 03.05.68

6. A. S. 931995 USSR, MKI4 F15 In 11/22. Flow divider / T. V. Alekseeva, R. P. Kirikov, E. M. Sherman [et al.] (USSR). – No. 2964050/25-06; application No. 23.07.80; publ. 30.05.82., Byul. No. 20.

7. A. S. 496416 USSR, M. Kl. 2 F16 K 18/00. Flow divider / L. L. Roganov (USSR). – No. 1874039/25-8; application No. 15.01.73; publ. 25.12.75, Byul. No. 47.

Gorbunov R.S., Putilin N.V., Derkachev I.S.

ANALYSIS OF DEVICES FOR UNIFORM SEPARATION OF THE WORKING FLUID FLOW IN HYDRAULIC SYSTEMS USED IN HEAVY ENGINEERING AND MOBILE COMPLEX ENGINEERING DEVICES

The paper considers the types and design of existing devices for separating the flow of working fluid in hydraulic systems. Examples and features of their application, as well as the main advantages and disadvantages are given. The prospects of research in this field are considered.

Key words: flow divider, uniform distribution, hydraulic system, mobile complex technical device.

Горбунов Роман Сергеевич, аспирант «Донской государственный технический университет», г. Ростов-на-Дону.

E-mail: gorbunov155125@yandex.ru

Gorbunov Roman Sergeevich, post-graduate student of DSTU, Rostov-on-Don.

Цурцилина Алена Юрьевна, аспирант Южно-федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: alena.eurolux@mail.com

Tsurtsilina Alyona Yuryevna, postgraduate student of the SFU, Rostov-on-Don.

Деркачев Игорь Сергеевич, к.т.н., Южно-федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: igor-derk@yandex.ru

Derkachev Igor Sergeevich, Candidate of Technical Sciences, Rostov-on-Don.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК 537.571

ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАЗРЯДА В ЖИДКОСТИ**Сергиенко С.Н., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.****PHYSICAL MODELS OF DISCHARGE IN A LIQUID****Sergienko S.N., Yuriev S.A., Malyuta E.R.**

Настоящая работа посвящена рассмотрению основных механизмов инициации канала высоковольтного разряда при формировании пробоя в жидкости, проанализированы условия и особенности их существования. Произведена сравнительная оценка четырёх физических моделей разряда в жидкости, их структура и количественная оценка параметров разряда.

Ключевые слова: разряд в жидкости, пузырьковый механизм, микровзрывной механизм, ионизационный механизм, электротепловой механизм, инициация.

Введение. До настоящего времени не выработана единая теория развития импульсного электрического пробоя жидкостей. Это связано с рядом вопросов, связанных с нестационарностью процессов пробоя, невозможностью достаточно точно спрогнозировать место и время пробоя, быстротечностью протекания процесса и т.д. Полученные экспериментальные данные в разные времена применялись в основном как частный случай конкретного процесса, и, как правило, противоречили данным, полученным в другой работе.

Активное исследование процессов инициации разряда в жидкости началось в начале XX века [1]. При высоковольтном электровзрыве, создаваемом разрядом на водный промежуток, выделяются следующие основные стадии: формирование плазменного канала, замыкающего межэлектродный промежуток; резкое возрастание разрядного тока и быстрое выделение электрической энергии в канале высокой проводимости и пульсация парогазовой полости после окончания выделения электрической энергии в разрядном канале.

Эффективность выделения энергии в канале и усиление воздействия на объект зависят от параметров стадии формирования.

Электрический механизм пробоя идентифицировался В.Я. Ушаковым [2] по отсутствию газообразования в жидкости до появления свечения, высокой скорости прорастания ветви пробоя (до 105 м/с и более), отсутствию зависимости электрической прочности от температуры жидкости вплоть до точки кипения и от электропроводности жидкости. Рассматривая пробой низкопроводящих и диэлектрических жидкостей, авторы работы [3] выдвигают идею о

значительной роли эмиссии, ударной ионизации и автоионизации молекул жидкости. По их мнению, автоионизация происходит в приэлектродном слое жидкости под действием поля микрорельефа поверхности электрода. Напряженность такого поля может на три порядка превосходить среднюю напряженность поля в промежутке, а возникающие при автоионизации электроны движутся к аноду, размножаясь по пути за счет ударной ионизации. В [4] изучалось влияние импульсов напряжения наносекундной длительности на пробой дистиллированной воды с обоснованием электрострикции как фактора развития возмущений оптической плотности разрежения воды, инициирующего пробой.

В кратком обзоре механизмов формирования стримерных разрядов в жидкости [5] упомянуто влияние факторов молекулярной ионизации и ионной диссоциации, зависящей от электрического поля, механизма Аугера (Auger mechanism), сопровождающих электрический механизм пробоя.

Целью работы является обзор существующих механизмов формирования канала высоковольтного разряда с анализом физических моделей формирования пробоя водного промежутка.

Изложение основных материалов. Текущее представление о многообразии механизмов инициации разряда в жидкостях представлено в монографии [6]. Большое количество экспериментальных исследований по электрическому пробоя жидкостей, накопленный к настоящему времени, показывает, что существует несколько различных механизмов пробоя, описать которые единой теорией принципиально невозможно. Для стадии зажигания разряда можно выделить, как минимум, четыре различных механизма иницирования разряда: 1) пузырьковый, 2) микровзрывной, 3) ионизационный, 4) электротепловой.

Три из четырех представленных модели предполагают образование области пониженной плотности среды, в которой происходит зажигание разряда. Отличие моделей состоит в механизмах, которые приводят к появлению свободных носителей зарядов вблизи электродов, ток которых и

обеспечивает формирование областей пониженной плотности, а также в предлагаемых механизмах дальнейшего развития разряда.

Первый механизм инициации разряда — пузырьковый, в котором главную роль играют пузырьки газа, существовавшие в жидкости и на электродах до приложения поля. Пузырьки размером от единиц до десятков микрон существуют в жидкости, преимущественно на электродах. Под действием электрического поля после достижения на пузырьке падения напряжения U_p в нем возникают ионизационные процессы (частичные разряды) [7]. После разряда поле в пузырьке уменьшается вследствие экранирования осевшими зарядами внешнего поля, что вызывает ослабление либо прекращение ионизационных процессов. Действие электрического поля на осевший заряд приводит к вытягиванию пузырька вдоль поля, а также к продвижению заряда вглубь жидкости со скоростью, определяемой подвижностью носителей заряда.

Скорость перемещения разряда определяется подвижностью носителей зарядов. При этом возможны две ситуации: поддержания разряда в виде «тлеющего разряда» либо прекращение разряда. Процесс продолжается периодически до тех пор, пока напряженность электрического поля на полюсе пузырька в жидкости не достигнет критического значения для зажигания разряда в жидкости.

Модель пузырькового пробоя жидкости количественно описывается следующими параметрами: время пробоя приэлектродного пузырька и общее время развития разряда (от момента подачи импульса до момента замыкания промежутка хорошо проводящим каналом).

Оценка времени пробоя проводится на основании анализа механизма пробоя на основе теории газового разряда. Лавинно-стримерный [8] переход реализуется при αd (α — коэффициент ударной ионизации, d — межэлектродное расстояние (диаметр пузырька)) в диапазоне от 18 до 20. Для оценки характерных значений αd в [6] задаются следующими величинами: средняя напряженность E поля в промежутке 100-1000 кВ/см, давление p , близкое к атмосферному, диаметр d пузырька от единиц до десятков микрон. При этих значениях величина $E/p \sim (100-1000) \text{ В}/(\text{см} \cdot \text{Торр})$, а коэффициент ударной ионизации описывается соотношением

$$\alpha/p = A \exp[-B/(E/p)],$$

где $A=15 \text{ (см} \cdot \text{Торр)}^{-1}$; $B=365 \text{ В}/(\text{см} \cdot \text{Торр})$. Из этих оценок следует величина $\alpha \sim 700-8000 \text{ см}^{-1}$, а $\alpha d \sim 2-3$. Это указывает на то, что таунсендовский механизм пробоя пузырька определяет появление вторичных лавин в пузырьке за счет фотонов или положительных ионов [6]. Для оценки времени пробоя, используется формула [8]:

$$\tau = \frac{d}{bE(\beta-1)};$$

где b — подвижность ионов; $\beta = \gamma(\exp(\alpha d) - 1) > 1$ — коэффициент умножения числа электронов; E — напряженность поля.

Делая оценки для $(\beta-1)$ при напряженностях, несколько превышающих величину, задаваемую кривой Пашена (на которой $\beta=1$), авторы [6] приходят к значению $\tau \sim 2 \text{ нс}$ при $b=1 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, $E=100 \text{ кВ}/\text{см}$ и $d=20 \text{ мкм}$.

Оценка общего времени задержки пробоя проводилась авторами [6] для следующих условий: однородное или слабонеоднородное электрическое поле в разрядном промежутке; короткий промежуток; существующие на электродах зародыши пузырьков. Это дает основания в составе общего времени развития разряда пренебречь такими составляющими, как время роста пузырька от зародышевого состояния до размера, при котором возможен его пробой, и временем формирования разряда (т. е. временем между достижением ионизованным пузырьком критического для зажигания разряда размера) ввиду его малости из-за коротких длин разрядного промежутка и высокой скорости разряда в жидкости. Тогда общее время определяется только временем роста ионизованного пузырька до некоторого критического размера, при котором происходит зажигание разряда и его переход из пузырька в жидкость.

На рис. 1 показана зависимость времени формирования пузырьков от величины приложенного напряжения. Среднее электрическое поле в промежутке $E_a = V/d$, где V — приложенное напряжение, а d — межэлектродное расстояние.

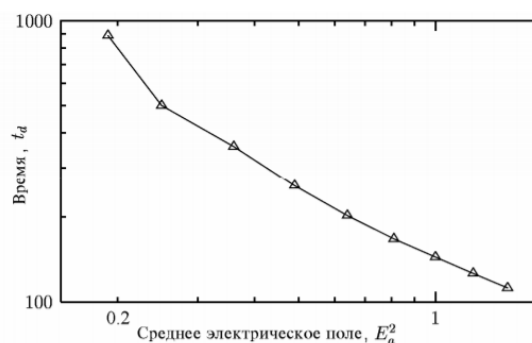


Рис. 1. Зависимость времени формирования пузырька заданного размера от квадрата среднего электрического поля

Такой механизм инициации разряда наиболее вероятен для недегазированных жидкостей при приложении импульсов напряжения длительностью от десятых долей до десятков микросекунд.

Второй механизм инициации — микровзрывной, характеризуется следующими этапами развития: эмиссия электронов (в случае инициации на катоде) или ионизация молекул

жидкости (при инициации на аноде); сильный локальный разогрев жидкости токами появившихся носителей заряда и её взрывное вскипание; образование ударной волны; взрывное вскипание жидкости за фронтом ударной волны; ионизация в парогазовых пузырьках; инициация канала разряда. Наиболее подробно микровзрывная модель изложена в работах E.E. Kunhardt и H.M. Jones [9]. Данный механизм реализуется при высоких значениях напряженности электрического поля вблизи поверхности высоковольтного электрода, малых радиусах скругления электрода, и, как правило, в коротких межэлектродных промежутках.

Количественные оценки полного времени задержки пробоя основываются на оценке времени появления хотя бы одного парового пузырька, возникающего при взрывном вскипании жидкости вблизи поверхности электрода. Для его оценки используется формула Деринга-Фольмера [10], связывающая частоту зародышеобразования среди прочего с температурой перегретой жидкости и внешним давлением. Именно эти два параметра являются основными и рассчитываются в модели с привлечением экспериментальных данных для давления. Расчет температуры производится на основе скорости энерговыделения в приэлектродной области, которая определяется плотностью тока носителей заряда. Появление самих носителей заряда объясняется в модели туннельным эффектом, вероятность которого рассчитывается отдельно для обеих полярностей разряда. Количественным критерием оценки возможности реализации такого механизма служит величина объемного энерговыделения, необходимого для реализации взрывного вскипания.

На рис. 2 показано зажигание и развитие разряда через 30, 20 и 10 нс до замыкания промежутка соответственно [11].



Рис. 2. Структуры разряда при микровзрывном механизме инициации

Говоря о первых двух механизмах инициации следует отметить, что к появлению начального пузырька, из которого в обоих механизмах происходит дальнейшее развитие разряда, может приводить и кавитация, вызванная электрострикционными силами. По собственным оценкам авторов энергии, вложенной к моменту появления пузырька, вполне достаточно для вскипания жидкости в наблюдаемом объеме, однако отсутствие ударных волн на временах, меньших гидродинамических, которые всегда сопровождают

появление «вскипающих» пузырьков [9], говорит в пользу иного механизма формирования пузырька, например, электрострикционного.

Третий механизм инициации разряда — ионизационный. Для его реализации перенапряжение на электродах должно быть сверхвысоким, а время нарастания напряжения очень коротким, порядка 10^8 В/см и 10^{-9} с соответственно. При этом происходит ионизация непосредственно молекул жидкости (за счет ударной или автоионизации) и не наблюдается предварительного фазового перехода. Внешнее отличие развившихся каналов разрядов, инициация которых предполагается по смешанному и чисто ионизационному механизмам, продемонстрировано, например, в [11] (рис. 2 и 3). Кроме внешнего вида, развитие по ионизационному механизму отличается крайне высокой скоростью распространения каналов — до 200 км/с.

Ионизационный механизм — один из самых сложных как для экспериментального наблюдения, так и для расчетно-теоретических исследований. Качественное влияние данного механизма на форму уже развившегося канала было показано в [11] (рис. 3). На сегодняшний день исследовались попытки зарегистрировать ионизационные процессы на стадии до возникновения фазовых переходов при следующих экстремальных условиях: напряжение 220 кВ, длительность переднего фронта напряжения 150 пс, длительность импульса не более 12 нс [12] (рис. 4).

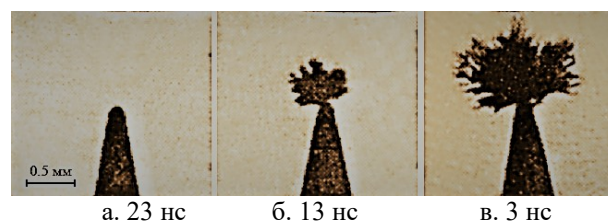


Рис. 3. Структуры разряда при ионизационном механизме инициации

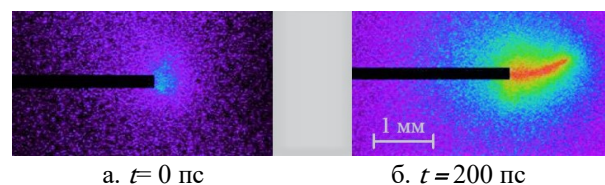


Рис. 4. Структуры разряда при ионизационном механизме инициации

Качественного совпадения основных тенденций (ветвление канала, его фрактальная структура, зависимость структуры от напряжения) удалось добиться с развитием флуктуационной модели [13]. В ней авторами задавался пороговый критерий пробоя, т.е. считалось, что развитие канала в следующую точку межэлектродного пространства происходит, если напряженность поля в ней

$$E > E_0 + \delta,$$

где E_0 – некоторое характерное для вещества критическое значение;

δ – флуктуирующая добавка, отражающая стохастический характер пробоя диэлектрических жидкостей (в этой добавке математически учитываются разнообразные случайные процессы: локальные неоднородности жидкости, микрополя, связанные с ориентацией молекул и т. п.).

Развитие структуры канала моделировалось при помощи «клеточных» автоматов. В настоящий момент флуктуационная модель дает качественное совпадение без возможности расчета подробной кинетики и свойств вещества в разрядных каналах, однако в приведенных работах авторы развивают и дополняют свою модель все новыми параметрами, что, в конечном счете, может привести к развитию полного представления о динамике ионизационного процесса.

Другой подход к моделированию ионизационного механизма развивается из представлений о стримере как о волне ионизации, т. е. сводится к решению транспортных уравнений, учитывающих механизмы зарождения и гибели носителей заряда в канале разряда.

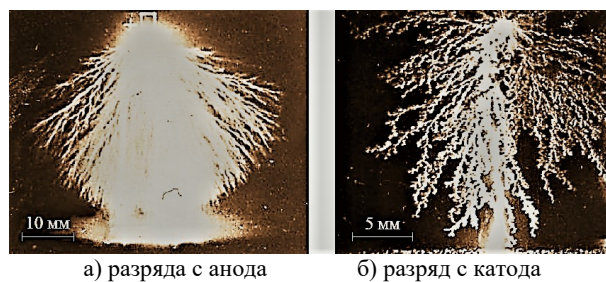
Поскольку жидкость, с одной стороны, гораздо плотнее газа и в этом смысле ближе к твердому веществу, а с другой — не обладает регулярной структурой, как и газ, то в русле этой двойственности возникло два подхода к моделированию стримера в качестве волны ионизации, которые отличаются закладываемыми механизмами возникновения носителей заряда. К первой группе относятся работы [13], в которых используется газовая аналогия ударной ионизации с поправочными коэффициентами, ко второй — работы [11], в которых появление носителей заряда обеспечивается туннельным эффектом на основе теории пробоя твердых диэлектриков Зеннера. При получении количественных данных по обоим подходам большое значение играет выбор поправочных коэффициентов, а также коэффициентов рекомбинации. В [12] также удалось учесть влияние фазового перехода в основной части стримерного канала (позади головки стримера) на длину прорастания стримера, скорость и диаметр канала.

Четвертый, электротепловой механизм инициации, как правило, реализуется следующим образом: локальный разогрев жидкости вблизи высоковольтного электрода токами проводимости; фазовый переход в этой области; ионизация в образовавшейся парогазовой области; образование начального плазменного канала разряда. Такой механизм обычно реализуется при больших значениях произведения времени воздействия импульса напряжения и электропроводности жидкости. Поскольку длительность импульса напряжения редко превышает миллисекунду, проводимость жидкости должна быть достаточно

большой для развития разряда по электротепловому механизму.

Исследованию разряда в жидкостях с повышенной проводимостью посвящено значительно меньше работ [13]. Наиболее достоверные данные относятся к диапазону проводимости

100–10000 мкСм/см [11]. В качестве рабочей среды в [11] были выбраны водопроводная вода и водные растворы хлорида натрия. Показано, что с увеличением проводимости раствора (более 100 мкСм/см) ступенчатый процесс распространения (удлинения) канала разряда переходит в непрерывный. Остальные внешние признаки канала (структура, проводимость, интенсивность самосвечения) остаются схожими со случаем слабопроводящих жидкостей. Впервые был показан эффект полярности для проводящих жидкостей в резко неоднородном поле (геометрия электродов «острие-плоскость»). Оказалось, что в случае положительной полярности острия увеличение проводимости практически не сказывается на скорости распространения лидерного канала (имеется лишь слабая тенденция к уменьшению). Для отрицательной полярности этот эффект выражается, наоборот, в увеличении скорости распространения плазменного канала. Помимо эффекта полярности для скорости, анодо- и катодонаправленные разряды отличаются внешним видом и геометрической структурой лидерных каналов (рис. 5).



а) разряд с анода б) разряд с катода

Рис. 5. Внешний вид анодо- и катодонаправленных лидеров в водном растворе NaCl, проводимость 14 мСм/см

Внешний вид анодонаправленного лидера представляет собой «пузырьковую» структуру, в отличие от «гладких» сильно ветвящихся каналов катодонаправленного разряда. Свечение катодонаправленного канала обладает существенно большей интенсивностью свечения.

Основываясь на [13], описание разряда в проводящих растворах можно дополнить следующим: 1) замыкание разрядного промежутка при проводимости раствора 20–2000 мкСм/см в неоднородном поле и длинных промежутках происходит без образования сплошного предварительного газового мостика между электродами даже при воздействии длинными импульсами напряжения; 2) с увеличением

проводимости падает вероятность наблюдения «быстрой» лидерной стадии, появлению плазмы в межэлектродном промежутке чаще всего предшествует образование парогазовой области, а при высоких значениях проводимости обычной лидерной картины разряда не наблюдалось вовсе.

Отличительной особенностью механизма, который подразумевает возможность протекания больших предразрядных токов, является принципиальная возможность развития разряда с низкими скоростями роста канала.

Выводы. До настоящего времени не сформулировано единой теории пробоя жидкости. Рассматриваются либо пробой по газовому механизму, либо прямая ионизация в жидкой фазе.

Анализ литературных данных показывает, что при больших напряженностях поля, порядка МВ/см, представления о механизмах инициации и развития электрического разряда в жидкости в основном развиты для наносекундных и микросекундных разрядов в диэлектрических жидкостях, в которых разрядный канал распространяется с большой скоростью по стримерно-лидерному механизму, характерному для газовых разрядов.

Тепловой механизм развития разряда, характерный для жидкости с повышенной проводимостью, сопровождающийся фазовым переходом, практически не исследован.

В настоящее время ведется активное численное моделирование разрядов в жидкости с искусственными микропузырьками для прикладных задач (в том числе для медицины), которое позволяет лучше понять механизмы иницирования разрядов в диэлектрических жидкостях по микропузырьковому механизму, однако не даёт представлений о переходе разряда из пузырьков в жидкость и дальнейшем развитии канала а также не позволяет оценить интегральные характеристики микропузырьковой среды с повышенной концентрацией газовых включений.

Таким образом, продолжение изучения механизмов инициации разрядов в жидкостях требует дальнейших исследований.

Л и т е р а т у р а

1. Kreuger F. H., Galski E., Krivda A. Classification of Electrical Insulation. 1993. V. 28, N 6. P. 917–931.;
2. Ушаков В.Я. Импульсные разряды в вакууме и газах. Достижения высоковольтников ТПУ за 60 лет // Известия Томского политехнического университета. – 2006. – Т.309. – № 2. – С. 54-58;
3. Bragg J.K., Sharbough A.H., Crowe R.W. Cathode effects in the Dielectric Breakdown of Liquids // Journal of Applied Physics. – 1954. – vol.25. – no.3. – pp. 382-391. doi:10.1063/1.1721645;
4. Seepersad Y., Fridman A., Dobrynin D. Anode Initiated Impulse Breakdown in Water: the Dependence on Pulse Rise Time For Nanosecond and Sub-Nanosecond Pulses and Initiation Mechanism Based on Electrostriction // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – vol.48. – no.42. – p. 424012. doi:10.1088/0022-3727/48/42/424012;

5. Sun A., Zhuang J., Huo C. Formation mechanism of streamer discharges in liquids: a review // High Voltage. – 2016. – vol.1. – no.2. – pp. 74-80. doi: 10.1049/hve.2016.0016;

6. Пробой жидкостей при импульсном напряжении / В. Я. Ушаков [и др.] ; под ред. В. Я. Ушаков. — Томск : Изд-во НТЛ, 2005. — 488 с.;

7. Korobejnikov S. M., Yanshin E. V. Model of prebreakdown processes in liquids under pulse voltage // 1987 Ninth International Conference on Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids. – 1987. – P. 398-402;

8. Райзер, Ю. П. Физика газового разряда. – Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2009. – С. 736;

9. Jones H. M., Kunhardt E. E. Nanosecond pre-breakdown and breakdown phenomena in water: influence of pressure, conductivity, and ionic sheath formation // Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids, 1996, ICDL '96., 12th International Conference on. – 1996. – P. 360-364;

10. Жекул В.Г., Раковский Г.Б. К теории формирования электрического разряда в проводящей жидкости // Журнал технической физики. – 1983. – Т.53. – Вып.1. – С. 8-14;

11. Климкин, В. Ф. Механизмы электрического пробоя воды с острейшего анода в наносекундном диапазоне // Письма в Журнал технической физики. – 1990. – Т. 16, вып. 4. – С. 54-58;

12. Non-equilibrium plasma in liquid water: dynamics of generation and quenching / A. Starikovskiy [et al.] // Plasma Sources Science & Technology. — 2011. – Vol. 20, no. 2. – P. 024003;

13. Куперштох, А. Л. Флуктуационная модель пробоя жидких диэлектриков // Письма в Журнал технической физики. – 1992. – Т. 18, вып. 19. – С. 91-96.

References

1. Kreuger F. H., Galski E., Krivda A. Classification of Electrical Insulation. 1993. V. 28, N 6. P. 917–931.;
2. Ushakov V. Ya. Pulse discharges in vacuum and gases. Achievements of high-voltage TPU for 60 years // News of Tomsk Polytechnic University. – 2006. – T.309. – № 2. – Page 54-58;
3. Bragg J.K., Sharbough A.H., Crowe R.W. Cathode effects in the Dielectric Breakdown of Liquids // Journal of Applied Physics. – 1954. – vol.25. – no.3. – pp. 382-391. doi:10.1063/1.1721645;
4. Seepersad Y., Fridman A., Dobrynin D. Anode Initiated Impulse Breakdown in Water: the Dependence on Pulse Rise Time For Nanosecond and Sub-Nanosecond Pulses and Initiation Mechanism Based on Electrostriction // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – vol.48. – no.42. – p. 424012. doi: 10.1088/0022-3727/48/42/424012;
5. Sun A., Zhuang J., Huo C. Formation mechanism of streamer discharges in liquids: a review // High Voltage. – 2016. – vol.1. – no.2. – pp. 74-80. doi: 10.1049/hve.2016.0016;
6. Breakdown of liquids at impulse voltage / V. Ya. Ushakov [et al.]; ed. V. Ya. Ushakov. - Tomsk: NTL Publishing House, 2005. – P.488;
7. Korobejnikov S. M., Yanshin E. V. Model of prebreakdown processes in liquids under pulse voltage // 1987 Ninth International Conference on Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids. – 1987. – P. 398-402;

8. Reiser, Yu. P. Gas discharge physics. - Dolgoprudny: Publishing House "Intelligence," 2009. - P. 736;

9. Jones H. M., Kunhardt E. E. Nanosecond pre-breakdown and breakdown phenomena in water: influence of pressure, conductivity, and ionic sheath formation // Conduction and Breakdown in Dielectric Liquids, 1996, ICDL '96., 12th International Conference on.— 1996. — P. 360-364;

10. Zhekul V.G., Rakovsky G.B. To the theory of the formation of electric discharge in a conductive fluid//Journal of Technical Physics. — 1983. — T.53. — I. 1. — P. 8-14;

11. Klimkin, V.F. Mechanisms of electric breakdown of water from the island anode in the nanosecond range//Letters to the Journal of Technical Physics. — 1990. - T. 16, vol. 4. — Page 54-58;

12. Non-equilibrium plasma in liquid water: dynamics of generation and quenching / A. Starikovskiy [et al.] // Plasma Sources Science & Technology. — 2011. — Vol. 20, no. 2. — P. 024003;

13. Kuperstokh, A. L. Fluctuation model of pro-combat of liquid dielectrics//Letters to the Journal of Technical Physics. — 1992. - T. 18, vol. 19. — P. 91-96.

Sergienko S. N., Yuryev S. A., Malyuta E. R.
PHYSICAL MODELS OF DISCHARGE IN A LIQUID.

A high-voltage underwater electric explosion, realized by discharging a capacitor into a water gap, is characterized by three main stages: the stage of formation of the plasma channel, the channel stage and post-discharge one. Substantially, the channel, post-discharge stages and the efficiency of energy release in the channel and the increase in the hydrodynamic effect on the object being processed depend on the parameters of the stage of formation.

The present work is devoted to the consideration of the main mechanisms of initiation of the high-voltage discharge channel during the formation of a breakdown in the liquid, the conditions and features of their existence are analyzed. Four

physical models of discharge in a liquid were compared: bubble, micro-explosive, ionization and electric heat. Their structure and quantitative evaluation of parameters for each of the discharges are considered.

Key words: Bubble Mechanism, Micro Blasting Mechanism, Ionization Mechanism, Electric Heat Mechanism, Initiation, Discharge in Fluid

Сергиенко Сергей Николаевич, к.т.н. доцент кафедры «Радиофизика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: sn.sergienko.dsti@gmail.com

Sergienko Sergey Nikolaevich, Candidate of Technical Sciences, docent of the Department of «Radiophysics» of the State University of Higher Education of the LPR «DonGTI», Alchevsk.

Юрьев Сергей Александрович, к.т.н. доцент кафедры «Теоретическая механика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: ysa.dmmi@gmail.com

Yuriev Sergey Aleksandrovich, Candidate of Technical Sciences, docent of the Chair «Theoretical Mechanics» of the State University of Higher Education of the LPR «DonGTI», Alchevsk.

Малюта Елизавета руслановна, аспирант кафедры «Радиофизика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: lizamalyuta1997@gmail.com

Malyuta Elizaveta Ruslanovna, post-graduate student of the Chair of «Radiophysics» of the State Educational Institution of the LNR «DonGTI», Alchevsk.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК 539.211, 548.4

О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИЯ ЭФФЕКТА ШВИНГЕРА РОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННЫХ ПАР С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Никитин Е.В.

ON THE POSSIBILITY OF OBSERVING THE SCHWINGER EFFECT OF THE PRODUCTION OF ELECTRON-POSITRON PAIRS USING LASER RADIATION

Nikitin E.V.

В случае сильных полей возможен процесс рождения частиц за счет энергии поля. Быстрый прогресс лазерной физики привел к резкому росту интенсивности лазерного излучения. В этой работе сделана попытка использовать релятивистские электроны, взаимодействующие с полем лазера 10^{24} Вт/см² для получения массового рождения электрон-позитронных пар с помощью эффекта Швингера. Идея состоит в том, чтобы использовать большое поперечное электромагнитное поле, видимое электроном, когда на него воздействуют лазерные лучи.

Ключевые слова: Эффект Швингера, вычислительный эксперимент, рождение пар, лазеры

Введение. Самым замечательным в вакууме является то, что он проводит, когда приложенная разность потенциалов в данной области превышает критическое значение - эффект, который теперь носит имя Швингера [1]. Швингер дал полную характеристику того, как могут образовываться пары позитронов и электронов, если приложенное электрическое поле в данной области превышает критическое значение

$$E_{cr} = \frac{m_e^2 c^3}{e \hbar} \approx 10^{18} \frac{V}{m}.$$

До недавнего времени считалось, что эффект рождения пар в сильном поле представляет только теоретический интерес, поскольку для его наблюдения требуются электрические поля, сравнимые по величине с критическим полем квантовой электродинамики, что на много порядков превышает возможности эксперимента.

Однако быстрый прогресс лазерной физики привел к резкому росту интенсивности лазерного излучения. Получение сверхсильных полей достигается при сжатии (укорочении) лазерных импульсов, длительность τ которых становится уже сравнимой с оптическим периодом (фемтосекундные импульсы).

Импульсы сверхвысокой интенсивности генерируются при помощи твердотельных лазеров ближнего инфракрасного и оптического диапазонов длин волн; наиболее часто используются неодимовый (длина волны $\lambda=1064$ нм) и титан-

сапфировый ($\lambda=800$ нм) лазеры, а также их вторые гармоники. Современные лазерные установки позволяют получать импульсы интенсивностью до $2 \cdot 10^{22}$ Вт/см² (при этом напряженность электрического поля E равна 10^{12} В/см, что на 2–3 порядка превосходит атомную, а длительность импульсов такой интенсивности составляет десятки фемтосекунд). Введение в эксплуатацию мощных лазеров на свободных электронах (ЛСЭ) открыло новые возможности для экспериментов по нелинейному взаимодействию лазерного излучения с веществом в ультрафиолетовом и рентгеновском диапазонах длин волн. Поля 10^{23} - 10^{24} Вт/см² в скором времени станут реальностью.

Для достижения критического значения электрического поля нужно, чтобы поле лазера составляло порядка 10^{29} Вт/см² [2]. В этой работе мы попытаемся использовать релятивистские электроны, взаимодействующие с полем лазера 10^{24} Вт/см² для получения массового рождения электрон-позитронных пар с помощью эффекта Швингера.

Идея состоит в том, чтобы использовать большое поперечное электромагнитное поле, видимое электроном, когда на него воздействуют лазерные лучи. Мы проиллюстрируем этот эффект на примере встречных лучей с круговой поляризацией. Преимущество, предлагаемое этой конфигурацией, аналогично резкому увеличению энергии в системе центра масс при использовании встречных пучков частиц вместо неподвижных мишеней.

Целью настоящей работы является попытка показать, что рождение пар возможно при много меньшем поле лазера, чем 10^{29} Вт/см².

Результаты исследований. Пусть релятивистские электроны с лоренц-фактором γ движутся перпендикулярно однородному магнитному полю B . Они будут производить пары,

если $\frac{\gamma B}{B_{cr}}$ становится порядка единицы. Здесь $B_{cr}=10^4$

ГГс – магнитный эквивалент критического

электрического поля E_{cr} . Сечения данных процессов хорошо известны [3]. Аналогично процессам в магнитном поле, рождение пар в однородном электрическом поле происходит, если параметр

$$\eta = \frac{\gamma E \sin(\theta)}{E_{cr}} \quad (1)$$

также становится порядка единицы. Здесь θ – угол между электрическим полем и моментом электрона. Процесс рождения электрон-позитронных пар в поле лазера от электронов с энергией около 50 ГэВ уже наблюдался в линейном ускорителе [4], но число пар было крайне малым.

В [5] была получена оценка

$$\eta = 2I_0 \lambda_{mc},$$

где I_0 – поле лазера, выраженное в единицах 10^{24} Вт/см², а λ_{mc} – длина волны лазера в микронах. На первый взгляд это выглядит многообещающе. Но $eE \sin(\theta)$ в (1) – это составляющая силы, действующей на частицу, перпендикулярная ее скорости, чего нет в лазерном поле. В действительности электрон, который улавливается одним лазерным лучом с изначально низкой энергией в лаборатории, ускоряется по траектории, которая сильно снижает эффективное значение η из-за взаимодействия электрического и магнитного полей.

Рассмотрим классическое уравнение движения электрона, включая реакцию излучения по Ландау и Лифшицу,

$$\frac{d(\gamma \vec{\beta})}{dt} = -\frac{e}{mc} \left(\vec{E} + \vec{\beta} \times \vec{B} \right) - \frac{2e^4 \gamma^2}{3m^3 c^5} \vec{\beta} \left| \vec{E} + \vec{\beta} \times \vec{B} \right|_{\perp}^2 \quad (2)$$

Второй член уравнения (2) представляет собой сопротивление и потерю энергии из-за излучения, с которым связано образование пар, и пропорционален квадрату перпендикулярной составляющей силы Лоренца. Два встречных лазерных луча создают стоячую волну с узлами, в которых $B = 0$, а электрическое поле вращается с постоянной амплитудой. Благодаря симметрии, электрон, помещенный точно в узел, не движется в направлении волны, а совершает круговое движение с центростремительной силой, создаваемой электрическим полем. В этом случае уравнение (2) упрощается

$$\frac{d(\gamma \vec{\beta})}{dt} = -\frac{eE}{mc} \left(-\hat{e} - \frac{2}{3} \gamma^2 \frac{E}{E_{cl}} (1 - (\vec{\beta} \cdot \hat{e})^2) \right) \quad (3),$$

где $\hat{e}$ со шляпкой – единичный вектор в направлении электрического поля, и мы определили характерное значение E_{cl} электрического поля в классической

электродинамике: $E_{cl} = \frac{m^2 c^4}{e^3}$. Из уравнения (3)

видно, что сила реакции излучения становится

$$\text{важной, когда } \frac{\gamma^2 E}{E_{cl}} \approx 1.$$

В разреженной плазме полное электрическое поле E связано с интенсивностью каждого лазерного луча I (по отдельности) соотношением

$$I = \frac{cE^2}{16\pi}.$$

Учитывая уравнение (1), можно получить соотношение

$$I_0 = 2,75\eta^4 + 0,28(\eta / \lambda_{mc}). \quad (4)$$

График этой зависимости приведён на рис. 1 (где взята логарифмическая шкала; длина волны лазера взята в 1 микрон).

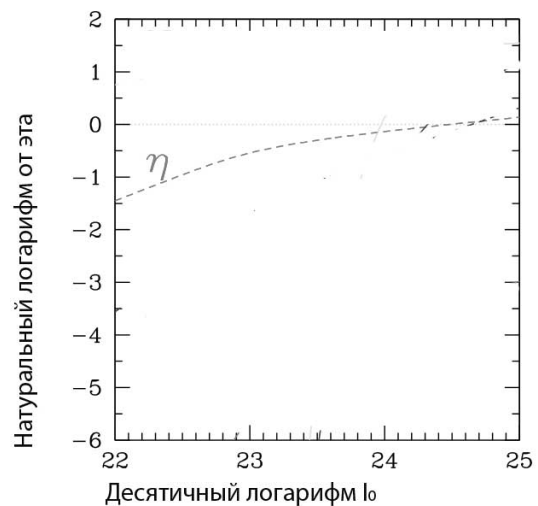


Рис. 1. Поведение натурального логарифма от η в зависимости от десятичного логарифма I_0 .

Выводы. Видно, что встречные лучи с круговой поляризацией с интенсивностью приблизительно 1024 Вт/см² действительно уже способны приводить к рождению электрон-позитронных пар в эффекте Швингера. Это делает возможность наблюдать рождение пар при много меньшем поле, чем теоретическое.

Л и т е р а т у р а

1. J. S. Schwinger, Phys. Rev. 82, 664 (1951).
2. Y. I. Salamin, S. X. Hu, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Physics Reports, 427, 41 (2006).
3. T. Erber, Reviews of Modern Physics, 38, 626 (1966).
4. D. L. Burke, R. C. Field, G. Horton-Smith, J. E. Spencer, D. Walz, S. C. Berridge, W. M. Bugg, K. Shmakov, A. W. Weidemann, C. Bula, et al., Physical Review Letters, 79, 1626 (1997).
5. Y. Y. Lau, F. He, D. P. Umstadter, and R. Kowalczyk, Physics of Plasmas, 10, 2155 (2003).

References

1. J. S. Schwinger, Phys. Rev. 82, 664 (1951).
2. Y. I. Salamin, S. X. Hu, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Physics Reports, 427, 41 (2006).
3. T. Erber, Reviews of Modern Physics, 38, 626 (1966).
4. D. L. Burke, R. C. Field, G. Horton-Smith, J. E. Spencer, D. Walz, S. C. Berridge, W. M. Bugg, K. Shmakov, A. W. Weidemann, C. Bula, et al., Physical Review Letters, 79, 1626 (1997).
5. Y. Y. Lau, F. He, D. P. Umstadter, and R. Kowalczyk, Physics of Plasmas, 10, 2155 (2003).

Nikitin E.V.**ON THE POSSIBILITY OF OBSERVING THE SCHWINGER OF THE PRODUCTION OF ELECTRON-POSITRON PAIRS USING LASER RADIATION**

In the case of strong fields, the process of particle creation is possible due to the field energy. The rapid progress of laser physics has led to a sharp increase in the intensity of laser radiation. In this work, an attempt was made to use relativistic electrons interacting with a laser field of 10^{24} W /

cm² to obtain mass production of electron-positron pairs using the Schwinger effect. The idea is to use the large transverse electromagnetic field visible to the electron when it is exposed to laser beams.

Key Words: *Schwinger effect, computational experiment, pair production, lasers.*

Никитин Евгений Владимирович, старший преподаватель ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля», г. Луганск.

E-mail: evnikitin6@hotmail.com

Nikitin Evgeniy Vladimirovich, Senior Lecturer, SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК53.08

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МАТЕРИАЛОВ

Астафьев П.А.

ANALYSIS OF THE CURRENT STATE OF ELECTRODYNAMIC PARAMETERS RESEARCH METHODS OF MATERIALS

Astafev P.A.

Проведен анализ методов исследования электродинамических параметров материалов. Выявлены основные особенности каждого метода, описаны возможности применения для исследования различных типов веществ. Приведены примеры использования метода прямоугольного волновода и коаксиальной линии для измерения диэлектрических и магнитных проницаемостей материалов. Описаны основные источники погрешностей, а также методы борьбы с ними.

Ключевые слова: коаксиальный метод, волноводный метод, электродинамические параметры, матрица S -параметров.

Введение. Современные темпы развития науки и техники в области микроэлектроники приводят к необходимости разработки новых материалов с требуемыми электродинамическими характеристиками. Среди основных этапов проектирования таких материалов неотъемлемую часть занимает моделирование и экспериментальное исследование взаимодействия электромагнитной волны с веществом.

Множество научных работ посвящено исследованию электродинамических свойств материалов на СВЧ. Обычно акцент делается на методы синтеза, структуру и свойства, приводятся результаты измерения. Мало внимания уделяется методике эксперимента. Важно подчеркнуть, что результаты исследования материалов на СВЧ крайне чувствительны к начальным условиям постановки эксперимента, способу его проведения, геометрическим параметрам исходного образца. Иногда возникает необходимость воспроизведения подобных экспериментов со схожими или иными начальными условиями. Поэтому для адекватной оценки результатов измерений следует уметь оценивать применимость и точность существующих методов исследования для каждого конкретного случая, учитывать возможные источники погрешностей измерений.

Целью работы было выявить основные тенденции в использовании современных методов исследования СВЧ-материалов, продемонстрировать главные сложности, с которыми сталкиваются

исследователи при измерениях электродинамических параметров различных веществ.

Для выполнения корректных измерений необходимо выбрать метод, который будет соответствовать выбранному объекту исследования удовлетворять требованиям по механическим параметрам, возможным диапазонам частот, точности измерений. Основные факторы, определяющие выбор методов [1]:

- диапазон частот.

Например, для измерения диэлектрической проницаемости на низких и высоких частотах (до 30 МГц) конденсаторного метода будет достаточно [2]. При измерении электродинамических параметров в СВЧ-диапазоне (3 – 30 ГГц) обычно используются волноводные методы, или методы свободного пространства [3]. Нерезонансные методы используют в тех случаях, когда нужно исследовать параметры материала в широком диапазоне частот. Когда нужно получить дискретные частотные характеристики, применяют резонансные методы [4].

- ожидаемые значения диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь;

- необходимая точность измерений.

Резонансные методы позволяют получать электродинамические параметры с гораздо более высокой точностью, чем нерезонансные [3,4]. Значения диэлектрической проницаемости, измеренные таким способом, можно использовать в качестве эталонных для сравнения со значениями, полученными другими методами [5].

- свойства материала (однородность, изотропность и пр.);

Волноводные методы позволяют исследовать электродинамические параметры анизотропных материалов [1].

- вид материала (жидкий, порошок, твердый, листовой);

Методом открытого коаксиального пробника можно измерять электродинамические параметры

материалов в широкой полосе частот, но из-за невозможности строгого соблюдения воздушных зазоров между образцом и поверхностью вещества, при измерении твердых материалов могут возникнуть погрешности [1, 2].

- ограничения на размер и форму образца;
- разрушающий или неразрушающий метод;
- контактный или бесконтактный метод;
- температура;
- стоимость.

Простейшим методом исследования диэлектрических параметров материала является конденсаторный метод. Такой метод имеет серьезные ограничения по частоте, и применяется в диапазонах до 100 МГц [2].

В СВЧ-диапазоне все методы измерений электромагнитных свойств материалов можно разделить на две основные группы по способу измерений: нерезонансные методы и резонансные методы [4].

Во многих обзорных источниках, например [3, 4], приводится следующая классификация методов по способу измерения:

- 1) нерезонансные методы;
 - а. методы отражения;
 - метод коаксиального пробника;
 - б. методы передачи-отражения;
 - волноводные методы;
 - квазиоптические или методы свободного

пр-ва;

- 2) резонансные методы;

Как уже упоминалось ранее, нерезонансные методы позволяют измерить диэлектрическую и/или магнитную проницаемость в широком диапазоне частот. Главными ограничениями здесь выступает специфика распространения электромагнитной волны в волноводе. Например, для прямоугольного волновода есть ограничение по нижнему пределу длины волны – длина волны не должна превышать некоторое критическое значение $\lambda_{кр}$, которое зависит от размера волновода. Волна с более низкой частотой в таком волноводе распространяться не может [6]. Резонансные методы позволяют с высокой точностью измерить значения диэлектрической и магнитной проницаемости в области резонанса частоты самого материала, или опорного резонатора.

Нерезонансные методы можно разделить на методы отражения и методы передачи-отражения [4].

Одним из самых широко используемых методов отражения является метод открытого коаксиально пробника. Его используют для измерения свойств немагнитных материалов в широкой полосе частот, при этом толщина образца должна быть много больше диаметра коаксиального пробника [4]. Метод применяется для измерения параметров жидкостей или пластичных материалов, так как погрешности, связанные с воздушным

зазором возникающие при измерении твердых материалов, не позволяют получать достоверные результаты [1, 2]. Для измерения магнитной проницаемости образца используется метод короткозамкнутого коаксиального пробника [4].

Для исследования диэлектрических материалов гораздо лучше подходят методы передачи-отражения. Эта группа методов основана на измерении матрицы рассеяния линии передачи. Одним из самых распространенных способов измерения параметров образца является размещение его в отрезке волновода или коаксиальной линии. Материал взаимодействует с электромагнитной волной, изменяя мощность отраженного и пройденного сигнала. На основании коэффициентов передачи и отражения можно вычислить диэлектрическую и магнитную проницаемость образца [4].

Для измерения электродинамических параметров материалов в СВЧ-диапазоне используется волноводный метод. Допустимые частоты зависят от размера волновода. Волновод заполняют материалом. Измеряется скорость и затухание волны. Диэлектрическая и магнитная проницаемости вычисляются из результатов измерений отраженного сигнала (S_{11}) или прошедшего сигнала (S_{21}) [1].

Среди особенностей метода можно выделить [1]:

- широкополосность – нижнее значение ограничено длиной образца;
- ограниченное разрешение при низких потерях (зависит от длины образца);
- возможность измерения параметров магнитных материалов;
- возможность измерения параметров анизотропных материалов.

Основными требованиями к образцам являются [1]:

- образец заполняет сечение устройства подключения;
- отсутствие воздушных зазоров на стенках устройства подключения;
- гладкие и плоские поверхности, расположение перпендикулярно продольной оси;
- однородность.

Следует обратить внимание на следующие источники погрешностей [1]:

- неточность измерения величины S_{11} и S_{21} ;
- недостаточно плотное прилегание материала образца к стенкам линии передачи;
- погрешность расчета;
- нарушение параллельности плоскостей, перпендикулярных к направлению распространения волны;

– низкое качество обработки поверхности плоскостей, перпендикулярных к направлению распространения волны;

– неточность измерения толщины образца.

Волноводные методы с использованием скалярных анализаторов цепей могут применяться для определения спектров поглощения гексагонального феррита бария в диапазоне 30-50 ГГц [7]. При измерении параметров образцов с различной концентрацией галлия в прямоугольном волноводе 5,2 x 2,6 мм было обнаружено смещение резонансного пика поглощения с увеличением концентрации сначала в область более низких частот, а затем в противоположную сторону. Так же было обнаружено, что с ростом напряженности внешнего магнитного поля резонансная частота также линейно возрастает.

Одной из возможных областей применения гексаферрита бария является использование его в СВЧ-устройствах в качестве фильтров в диапазоне частот 37-42 ГГц, либо в качестве элементов в антенных решетках на частотах до 1 ТГц. Кроме того, рассматриваются радиопоглощающие свойства данного материала [8]. Измерения так же проводятся с использованием прямоугольного волновода. Исследуется зависимость резонанса поглощения от концентрации алюминия, при этом учитываются не только диэлектрические, но и магнитные потери.

Метод коаксиального волновода применяется в широком диапазоне частот (от 50 МГц до 18 ГГц) для измерений электродинамических параметров тонких пленок. В таких экспериментах пленка должна быть свернута в трубку и помещена внутрь коаксиальной линии. Для этого пленка и подложка должны обладать достаточной гибкостью. Для корректировки ошибок, связанных с воздушным зазором разработаны специальные аналитические модели, эффективность которых подтверждается экспериментами и результатами конечно-элементного моделирования [9]. Метод корректировки ошибок, связанных с воздушным зазором основан на методе [10], т.е. рассматривается модель многослойного конденсатора, с отличием только в количестве слоев и воздушных зазоров.

Основными требованиями для образца является точность совпадения его геометрических размеров с размерами волновода [11, 12]. Особое внимание уделяется зазором между внутренней поверхностью коаксиальной или волноводной линии и образца, т.к. он вносит наибольший вклад в погрешность. В случае коаксиальной линии, зазор между центральной жилой и внешней поверхностью волновода оказывает более существенное влияние на точность расчета диэлектрической и магнитной проницаемости образца, чем зазоры в прямоугольном волноводе [4, 11]. Погрешности, связанные с неточностью геометрических размеров, особенно сильно проявляются при высоких значениях диэлектрической проницаемости [13].

В работе [5] показано, что при исследовании параметров диэлектриков, таких как оксид алюминия и перовскитные сегнетоэлектрические материалы, коррекция значения диэлектрической проницаемости при помощи методов, описанных во многих литературных источниках [4, 10, 12], позволяет существенно увеличить точность измерений.

Для получения корректировочных формул используется модель коаксиальной линии с образцом, зазоры в которой симметричны относительно центра коаксиальной линии, что позволяет рассматривать модель как систему последовательных конденсаторов (рис. 1).

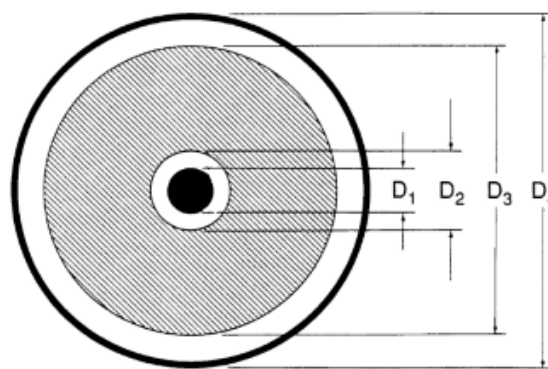


Рис. 1. Модель коаксиальной линии с образцом

Для корректировки результатов вычисления действительных и мнимых частей диэлектрической и магнитной проницаемости (ϵ'_c , ϵ''_c , μ'_c , μ''_c , соответственно) при измерении методом коаксиальной линии используют следующие формулы [4, 10]:

$$\epsilon'_c = \epsilon'_m \left(\frac{L_2}{L_3 - \epsilon'_m L_1} \right) \quad (1)$$

$$\epsilon''_c = \left(\epsilon'_c \frac{\epsilon''_m}{\epsilon'_m} \right) \frac{L_3}{L_3 - \epsilon'_m L_1 \left(1 + \left[\frac{\epsilon''_m}{\epsilon'_m} \right]^2 \right)} \quad (2)$$

$$\mu'_c = \mu'_m \frac{L_3 - L_1}{L_2} \quad (3)$$

$$\mu''_c = \mu''_m \frac{L_3}{L_2} \quad (4)$$

Где коэффициенты L_1 , L_2 , и L_3 рассчитываются по формулам:

$$L_1 = \ln \frac{D_2}{D_1} + \ln \frac{D_4}{D_3} \quad (5)$$

$$L_2 = \ln \frac{D_3}{D_2} \quad (6)$$

$$L_3 = \ln \frac{D_4}{D_1} \quad (7)$$

Переменные D соответствуют размерам на рис. 1.

При использовании метода прямоугольного волновода на точность измерения диэлектрической и магнитной проницаемости могут влиять зазоры между широкой и узкой стенкой волновода. Обычно, зазор между образцом и узкой стенкой волновода не учитывается, как как его влияние на точность измерений незначительно [4] (рис. 2).

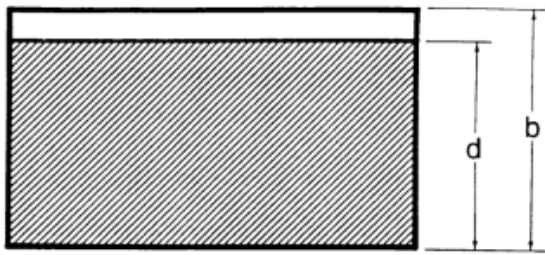


Рис.2. Геометрия прямоугольного волновода

Для методов измерений в прямоугольном волноводе используются следующие корректирующие формулы:

$$\varepsilon'_c = \varepsilon'_m \frac{d}{b - (b - d)\varepsilon'_m} \quad (8)$$

$$\varepsilon''_c = \left(\varepsilon'_c \frac{\varepsilon''_m}{\varepsilon'_m} \right) \frac{b}{b - (b - d)\varepsilon'_m} \quad (9)$$

$$\mu'_c = \mu'_m \left(\frac{b}{d} \right) - \left(\frac{b - d}{d} \right) \quad (10)$$

$$\mu''_c = \mu''_m \left(\frac{b}{d} \right) \quad (11)$$

Еще одним эффективным методом измерения электродинамических параметров материалов в СВЧ- и КВЧ-диапазоне частот является метод свободного пространства. Ширина полосы частот определяется параметрами излучающей и приемной антенны [3].

В основе данного метода лежит следующий принцип: образец, находящийся в свободном пространстве, облучают с помощью антенны. С помощью этой же антенны измеряют параметр S_{11} . С помощью другой антенны, расположенной по другую сторону образца, измеряют параметр S_{12} . На основании измеренных величин рассчитывают требуемые характеристики диэлектрического материала [1].

Особенности метода [1]:

- бесконтактный, неразрушающий;
- высокочастотный – нижнее значение ограничено толщиной образца;
- пригоден при высоких температурах;
- возможно изменение поляризации антенны для измерения свойств анизотропных материалов;

– возможность измерений магнитных материалов.

Требования к образцам [1]:

- большие, плоские образцы с параллельными сторонами;
 - однородность.
- Основные источники погрешностей [1]:
- неточность измерения величины S_{11} и S_{12} ;
 - погрешность расчета;
 - нарушение параллельности плоскостей, перпендикулярных к направлению распространения волны;
 - низкое качество обработки поверхности плоскостей, перпендикулярных к направлению распространения волны;
 - неточность измерения толщины образца.

Методы с использованием объемного резонатора условно можно разделить на две группы. К первой группе относят методы, основанные на возбуждении резонанса непосредственно в измеряемом образце, а ко второй – на внесении образцом возмущения в поле опорного резонатора. В обоих методах измеряются параметры S_{11} и/или S_{12} . На основании измеренных величин рассчитывают требуемые характеристики диэлектрического материала [1].

Особенности метода [1]:

- высокая точность измерений, особенно для методов первой группы;
- методы первой группы хорошо подходят для изучения материалов с высоким значением диэлектрической проницаемости, а методы второй группы – для материалов с низким значением диэлектрической проницаемости;
- методы первой группы хорошо подходят для изучения материалов с низкими потерями, а методы второй группы – для материалов с высокими потерями.

Требования к образцам [1]:

- методы первой группы требуют изготовления образцов заданного размера и простой формы (прямоугольник, цилиндр) для упрощения последующего расчета;
- методы второй группы не предъявляют особых требований к образцам и могут быть использованы для работы с образцами малого размера.

Основные источники погрешностей [1]:

- неточность измерения величины S_{11} и S_{12} ;
- погрешность расчета;
- для методов первой группы на погрешность влияет неточность определения размеров образцов.

Выводы. Развитие функциональных материалов идет в двух направлениях: как радиопоглощающие материалы в случае использования в целях экранирования, или как отражающие материалы в случае применения в элементах АФАР. Соответственно, требования к

современным материалам заключаются в наличии высокого коэффициента затухания, либо высокого коэффициента отражения электромагнитной волны. Для получения таких веществ требуется точный расчет их электродинамических параметров.

Существует множество методов для измерения диэлектрической и магнитной проницаемости материалов в СВЧ-диапазоне. Наиболее эффективными и широко применяемыми из них являются метод коаксиальной линии и волноводный метод.

Все методы без исключения имеют погрешности, связанные с ошибками в измерении S-параметров, корректностью расчета или неидеальной геометрической формой образцов. Использование соответствующих методов расчета параметров, их корректировки с учетом неидеальности образцов позволяют существенно повысить точность результатов, в особенности для материалов с высокими значениями параметра ϵ .

Для еще большей достоверности получаемых данных, иногда приходится прибегать к набору статистики в исследованиях, что иногда невозможно за счет ограниченного количества исследуемых образцов.

Полное описание методики эксперимента помогает сравнивать достоверность результатов исследования схожих веществ. Благодаря этому исследователь может поставить собственный эксперимент, ориентируясь на предыдущие результаты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БАЗ0110/20-3-07ИФ).

Л и т е р а т у р а

1. Диденко Ю. В. СВЧ методы измерения параметров диэлектрических материалов на основе составного диэлектрического резонатора / Ю. В. Диденко, В. И. Молчанов, В. М. Пашков, Д. Д. Татарчук, Д. А. Шмыгин // *Electronics and Communications*. – 2014. – Т. 19. – №6(83). – С. 14–20.
2. Knyazev N.S., Malkin A.I. Dielectric permittivity and permeability measurement system. In: *CEUR Workshop Proceedings*, Yekaterinburg, 9 December 2017. Yekaterinburg: Ural Federal University; 2017. Vol. 1814, – pp. 45–51.
3. Любченков А.В. Анализ методов измерения электродинамических параметров материалов, поглощающих сверхвысокочастотное электромагнитное излучение // *Вестник Воронежского государственного технического университета*. 2009. Т. 5. No 9. С. 17–19.
4. Chen, L.F.; Ong, C.K.; Neo, C.P.; Varadan, V.V.; Varadan, V.K. *Microwave Electronics: Measurement and Materials Characterization*; Wiley: Chichester, U.K., 2004.
5. Baker-Jarvis, J.; Janezic, M.; Krupka, J. Measurements of coaxial dielectric samples employing both transmission/reflection and resonant techniques to enhance air-gap corrections. *International Conference on Microwave, Radar and Wireless Communications (MIKON2006)*, Krakow, Poland, May 2006, p. 1093–1096.

and *Wireless Communications (MIKON2006)*, Krakow, Poland, May 2006, p. 1093–1096.

6. Малушков Г. Д. Антенны и устройства сверхвысоких частот. Ч. 1. Линии передачи и устройства сверхвысоких частот. Москва, 1973. 264 с.

7. Труханов А.В., Труханов С.В., Турченко В.А., Олейник В.В., Яковенко Е.С., Мацуй Л.Ю., Вовченко Л.Л., Лаунец В.Л., Казакевич И.С., Джабаров С.Г. Кристаллическая структура, магнитные и микроволновые свойства твердых растворов $\text{BaFe}_{12-x}\text{Ga}_x\text{O}_{19}$ ($0.1 \leq x \leq 1.2$) // *Физика твердого тела*, 2016, Т.58, Вып. 9. с. 1733–1738.

8. M.G. Vakhitov, D.S. Klygach, D.A. Vinnik, V.E. Zhivulin, N.S. Knyazev, Microwave properties of aluminum-substituted barium hexaferrite $\text{BaFe}_{12-x}\text{Al}_x\text{O}_{19}$ ceramics in the frequency range of 32–50 GHz, *J. Alloy. Compd.* 816(2020) 152682.

9. Wang Y, Hooper I, Edwards E, Grant PS. In press. Gap corrected thin film permittivity and permeability measurement with a broadband coaxial line technique. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*

10. J. Baker-Jarvis, “Transmission/reflection and short-circuit line permittivity measurements,” U.S. Dept. Commerce, NIST, Washington, DC, 1990.

11. J. Sheen, “Comparisons of microwave dielectric property measurements by transmission/reflection techniques and resonance techniques,” *Measurement Science and Technology*, vol. 20, no. 4, p. 042001, Apr. 2009.

12. C. Y. Kuek, “Measurement of dielectric material properties,” Rohde & Schwarz Application Note, RAC0607-0019, 2006.

13. E.J. Vanzura, J.R. Baker-Jarvis, J.H. Grosvenor, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* 42 (1994) 2063–2070.

R e f e r e n c e s

1. Didenko YU. V. SVCH metody izmereniya parametrov dielektricheskikh materialov na osnove sostavnogo dielektricheskogo rezonatora / YU. V. Didenko, V. I. Molchanov, V. M. Pashkov, D. D. Tatarchuk, D. A. SHmygin // *Electronics and Communications*. – 2014. – Т. 19. – №6(83). – p. 14–20.
2. Knyazev N.S., Malkin A.I. Dielectric permittivity and permeability measurement system. In: *CEUR Workshop Proceedings*, Yekaterinburg, 9 December 2017. Yekaterinburg: Ural Federal University; 2017. Vol. 1814, pp. 45–51.
3. Lyubchenkov A.V. Analiz metodov izmereniya elektrodinamicheskikh parametrov materialov, pogloshchayushchihsverhvysochastotnoe elektromagnitnoe izluchenie // *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*. 2009. T. 5. No 9. p. 17–19.
4. Chen, L.F.; Ong, C.K.; Neo, C.P.; Varadan, V.V.; Varadan, V.K. *Microwave Electronics: Measurement and Materials Characterization*; Wiley: Chichester, U.K., 2004.
5. Baker-Jarvis, J.; Janezic, M.; Krupka, J. Measurements of coaxial dielectric samples employing both transmission/reflection and resonant techniques to enhance air-gap corrections. *International Conference on Microwave, Radar and Wireless Communications (MIKON2006)*, Krakow, Poland, May 2006, p. 1093–1096.

6. Malushkov G. D. Antennyiustroystvasverhvyso-kihchastot. CH. 1. Liniiperedachiustroystvasverhvyso-kihchastot. Moskva, 1973. p. 264.

7. Truhanov A.V., Truhanov S.V., Turchenko V.A., Olejnik V.V., YAkovenko E.S., Macuj L.YU., Vovchenko L.L., Launec V.L., Kazakevich I.S., Dzhabarov S.G. Kristallicheskayastruktura, magnitnyeimikrovolnovyesvoystvatverdyhrastvorov BaFe_{12-x}Ga_xO₁₉ (0.1 ≤ x ≤ 1.2) // Fizikatverdgotela, 2016, T.58, iss. 9. p. 1733–1738.

8. M.G. Vakhitov, D.S. Klygach, D.A. Vinnik, V.E. Zhivulin, N.S. Knyazev, Microwave properties of aluminum-substituted barium hexaferrite BaFe_{12-x}Al_xO₁₉ ceramics in the frequency range of 32–50 GHz, J. Alloy. Compd. 816(2020) 152682.

9. Wang Y, Hooper I, Edwards E, Grant PS. In press. Gap corrected thin film permittivity and permeability measurement with a broadband coaxial line technique. IEEE Trans. Microw. Theory Tech.

10. J. Baker-Jarvis, "Transmission/reflection and short-circuit line permittivity measurements," U.S. Dept. Commerce, NIST, Washington, DC, 1990.

11. J. Sheen, "Comparisons of microwave dielectric property measurements by transmission/reflection techniques and resonance techniques," Measurement Science and Technology, vol. 20, no. 4, p. 042001, Apr. 2009.

12. C. Y. Kuek, "Measurement of dielectric material properties," Rohde & Schwarz Application Note, RAC0607-0019, 2006.

13. E.J. Vanzura, J.R. Baker-Jarvis, J.H. Grosvenor, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. 42 (1994) 2063-2070.

Astafev P.A.

ANALYSIS OF THE CURRENT STATE OF ELECTRODYNAMIC PARAMETERS RESEARCH METHODS OF MATERIALS

The analysis of methods for studying the electrodynamic parameters of materials is carried out. The main features of each method are revealed, the possibilities of application for the study of various types of substances are described. Examples of using the method of a rectangular waveguide and a coaxial line to measure the dielectric and magnetic permeability of materials are given. The main sources of errors are described, as well as methods of dealing with them.

Key words: coaxial method, waveguide method, electrodynamic parameters, scattering parameters.

Астафьев Павел Андреевич, аспирант 2 года обучения физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

E-mail: l.6.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru

Astafev Pavel Andreevich, 2nd year PhD student of Physics Faculty at Southern Federal University.

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК621.378.325

ПЕРСПЕКТИВА ДАЛЬНЕЙШЕГО ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ НАКАЧКИ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРАХ

Мурга Е.В., Юрьев С.А., Малюта Е.Р.

THE PROSPECT OF FURTHER IMPROVING THE EFFICIENCY OF PUMP ENERGY CONVERSION IN SOLID-STATE LASERS

Murga E.V., Yuriev S.A., Malyuta E.R.

Настоящая работа посвящена анализу существующих способов повышения энергии накачки в твердотельных лазерах, а также рассмотрению условий формирования коллективного излучения в активной среде твердотельного лазера. Показано, что способ создания неравновесного состояния активной среды может стимулировать коллективное взаимодействие активных центров, которое влияет на свойства выходного излучения.

Ключевые слова: твердотельный лазер, энергия накачки, коллективное излучение, модуляция добротности.

Введение. Одной из наиболее активно развивающихся областей лазерной физики является усовершенствование технических характеристик твердотельных лазеров. Одними из способов повышения эффективности использования твердотельных лазеров является увеличение энергоэффективности с единицы объема и снижение массогабаритных характеристик. На сегодняшний день твердотельные лазеры используются во многих областях, например, для обработки материалов, в научных исследованиях, в медицинской практике и т.д.

В последнее время широко применяются твердотельные YAG:Nd-лазеры с диодной накачкой или полупроводниковой лазерной матрицей [1]. Так как на мощность лазера и длину волны излучения влияет температура матрицы, при этом повышение температуры приводит к сдвигу длины волны в более длинноволновый диапазон и уменьшению излучаемой мощности. Стабилизация пиковой длины волны полупроводниковой лазерной матрицы требует высокой точности стабилизации температуры перехода ($\pm 1^\circ \text{C}$). Этого можно достичь, используя эффект Пельтье для стабилизации параметров твердотельного лазера [2].

Для повышения эффективности использования лазеров применяют источники питания с диодной накачкой, работающих в импульсном режиме [3]. При этом анализируется величина спада прямоугольных импульсов тока накачки, что

приводит к использованию генераторов с частичным разрядом емкостных накопителей.

Особый интерес представляют твердотельные лазеры с диодной накачкой [4]: опыт работы по эксплуатации таких лазеров позволяет утверждать, что они обладают большими преимуществами по сравнению с твердотельными лазерами с ламповой накачкой. Диодная оптическая накачка позволяет:

- обеспечить продолжительную работу лазеров в импульсно-периодическом режиме с сохранением качества излучения за счет снижения уровня теплового воздействия при накачке активного элемента;

- многократно повысить коэффициент полезного действия (КПД) лазерного излучения за счет практически полного совпадения спектральной полосы излучения полупроводникового лазерного диода с полосой поглощения активного элемента твердотельного лазера;

- существенно улучшить массогабаритные характеристики лазеров;

- использовать низковольтные источники электропитания для обеспечения работы твердотельного лазера.

В работе [5] исследовано повышение эффективности твердотельных лазеров за счет использования активных сред на базе кристаллов халькогенидов, легированных ионами переходных металлов, такие как $\text{Fe}^{2+}:\text{ZnSe}$, $\text{Cr}^{2+}:\text{CdSe}$, $\text{Cr}^{2+}:\text{ZnSe}$ с многослойными диэлектрическими покрытиями. Такие покрытия могут обеспечить просветление образца в диапазоне от 2 до 5 мкм. В результате исследований удалось получить просветление кристалла, которое характеризуется увеличением пропускания на 10%, с учетом того, что структура наносится только на одну рабочую поверхность кристалла ZnSe. При этом выходная мощность 1,06 Вт при поглощенной мощности накачки 2,6 Вт с дифференциальным КПД 41,6 % при использовании выходного зеркала с коэффициентом пропускания 33,3 %.

Целью работы является исследование возможности повышения энергетической эффективности лазера.

Изложение основных материалов и результатов исследований. Процесс лазерного излучения представляет собой линейную зависимость стимулированного излучения от числа возбужденных частиц над порогом генерации. Чем больше превышение над порогом, тем выше усиление люминесценции. При большом усилении активной среды люминесценция усиливается примерно в 1000 раз [6].

Исследования зависимости параметров выходного излучения лазеров от режима их возбуждения позволили выделить режим питания ламп накачки, при котором в активной среде возбуждаются коллективные взаимодействия возбужденных активных центров. Обнаруженные коллективные явления оказывают существенное влияние на параметры выходного излучения лазера [7].

При расчете систем лазерного контроля используют теоретические модели, позволяющие установить критерий для оценки энергетической эффективности как всей системы в целом, так и эффективности работы отдельных компонент лазерной системы. Такой критерий описывает зависимость энергетической эффективности активного элемента и режима накачки лазера с модулированной добротностью, которые в наибольшей степени влияют на эффективность работы всей системы контроля. Эффективность преобразования энергии в активной среде для

лазерной системы оценивается при помощи целевой функции φ :

$$\varphi = \frac{E_r}{\int_{t=0}^{t=\tau_u} P_{cl} dt}, \quad (1)$$

где E_r – энергия моноимпульса;

$\int_{t=0}^{t=\tau_u} P_{cl} dt$ – потери на суперлюминесценцию.

Возбуждая коллективные взаимодействия можно увеличить энергетическую эффективность лазеров как в режиме модуляции добротности, так и в режиме свободной генерации. При возбуждении коллективных взаимодействий можно добиться повышения выходной энергии в 1,3 раза по сравнению с известными способами возбуждения. При этом наблюдается равномерное распределение интенсивности излучения по торцу активного элемента, что привело к уменьшению расходимости излучения в 1,4 раза.

Данный способ стабилизации параметров излучения возможен без дополнительных устройств, а лишь по тракту питания ламп накачки. Разработка такого режима со стабилизацией параметров производится для конкретного лазера с учетом типоразмера активного элемента, концентрации активных центров и режима генерации [7,8].

Изменение формы огибающей импульса излучения лазера при традиционном способе возбуждения представлено на рис. 1, а, а на рис. 1,б - в режиме со стабилизацией параметров.

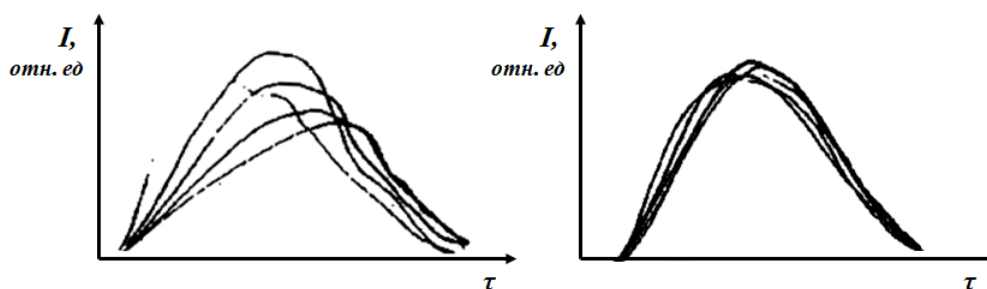


Рис. 1. Диаграммы огибающей импульсов излучения

На рис. 1 представлены временные диаграммы для последовательности из пяти импульсов. Данная диаграмма характеризует повышение стабильности выходной энергии лазера при использовании коллективных взаимодействий в возбужденной активной среде. Количественные оценки указывают на уменьшение разброса выходной энергии с 60% до 10% при изменении напряжения питания на $\pm 10\%$ от номинального.

Использование сверхизлучения позволяет стабилизировать значения выходной энергии лазера по сравнению с «гладким» импульсом накачки. А также увеличить выходную энергию до 30%. Подобные

эффекты наблюдаются в активной среде при достаточно высоком уровне инверсии населенностей.

Исследования показали, что при периодическом внешнем воздействии высокой интенсивности возможно установление коррелированного состояния возбужденных активных центров.

Одним из вариантов сильного вынуждающего воздействия может служить последовательность интенсивных импульсов накачки, подаваемых после достижения в активной среде половинного уровня инверсии. Длительность и скважность импульсов, накладываемых на опорный импульс накачки, зависит от параметров активной среды (геометрические размеры кристалла, сорт и

концентрация активных центров). При таком воздействии возникает волнообразный процесс распространения возмущений в кристалле, направленный от периферии к оси кристалла. Эти волны были названы волнами динамической поляризации [7]. При согласовании волн динамической поляризации и коэффициента связи возбужденных активных центров, между ними устанавливаются коррелированные состояния. При низкой добротности резонатора снижение инверсии за счет потерь на спонтанное излучение невелико. Поэтому при включении добротности помимо гигантского импульса в выходном излучении наблюдается излучение, обусловленное коллективными эффектами.

Исследование временных и пространственных характеристик генерируемого излучения указывает на то, что данная добавка происходит за счет сверхизлучения. Характер добавочного излучения заметен на осциллограммах огибающей генерируемого излучения при малых значениях коэффициента отражения выходного зеркала, т.е. при высоких значениях полезных потерь. В этом случае излучение, обусловленное коллективным эффектом происходит сразу после включения затвора, в то время, как гигантский импульс развивается дольше и на осциллограмме просматривается как отдельный импульс.

При высоком значении коэффициента отражения выходного зеркала развитие гигантского импульса происходит значительно быстрее и излучение обоих типов накладывается друг на друга. Энергия выходного импульса возрастает. При этом также отмечено существенное укорочение результирующего гигантского импульса. Изучение распределения поля излучения в дальней зоне показало, что расходимость излучения уменьшается в 1,5 раза, что свидетельствует о коллективном характере излучения и увеличении размеров излучающих областей (нитей).

Выводы. Использование режима накачки с указанными особенностями позволяет за счет вклада коллективных эффектов повысить энергию выходного излучения в 1,3 – 1,4 раза, уменьшить расходимость излучения и улучшить распределение интенсивности по торцу кристалла в плане равномерности. Это очень существенно для таких операций как контроль длин и локализации объектов в пространстве, лазерная фотолитография и размерная обработка материалов.

Использование предложенного метода стабилизации параметров лазерного излучения позволит существенно улучшить эффективность и качество систем лазерного контроля, учитывая широкое применение в технологии лазеров на алюмоиттриевом гранате.

Л и т е р а т у р а

1. Глухих, И.В. Мощные твердотельные лазеры на Nd:YAG с поперечной диодной накачкой и улучшенным

качеством излучения / И.В. Глухих, С.А. Димаков, Р.Ф. Курунов, С.С. Поликарпов, С.В. Фролов // Журнал технической физики. – 2011. – Том 81. Вып. 8. – С. 71-75.

2. Шелестов, Д.А. Стабилизация длины волны излучения диодных лазеров. Динамические характеристики элементов Пельтье / Д.А. Шелестов, С.М. Томилов // Фотоника. – 2016. – №4 (58). – С. 52-63.

3. Кошелев, П.А. Импульсные системы накачки твердотельных лазеров / П.А. Кошелев, В.М. Опре, А.В. Прилуцкий, А.О. Темников // Вопросы электротехнологии. – 2014. – №4.

4. Архипов, Д.А. Оптимизация рабочих характеристик твердотельного лазера с диодной накачкой для космических применений / Д.А. Архипова, В.И. Венглюка, В.А. Деревянко, М.С. Егорова, Ю.А. Резункова, В.В. Степанова // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2016. – Том 16. – №8.

5. Тарабрин, М.К. Повышение эффективности твердотельных лазеров среднего ИК-диапазона с помощью микротекстурирования лазерных монокристаллов $\text{Fe}^{2+}:\text{ZnSe}$, $\text{Cr}^{2+}:\text{CdSe}$ / М.К. Тарабрин, В.А. Лазарев, С.О. Леонов, В.Е. Карасик, Ю.П. Подмарьков, М.П. Фролов, В.И. Козловский // Сборник научных трудов XXVII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ЛАЗЕРЫ В НАУКЕ, ТЕХНИКЕ, МЕДИЦИНЕ». – Туапсе. – 2016 г. – Том 27.

6. Звелто, О. Принципы лазеров: Пер. с англ. — 3-е перераб. и доп. / О. Звелто. – Москва: Мир, 1990. — 560 с.

7. Колпаков, Н.Д. О возможности использования взаимного влияния активных центров лазерных рабочих сред для повышения эффективности накачки / Н.Д. Колпаков, Ю.С. Денищик, В.В. Мурга // Электронная техника. Сер. Лазерная техника и оптоэлектроника. – 1990. – Вып. 4(56). – С. 63-64.

8. Мурга, В.В. Влияние коллективных явлений в активной среде лазеров на их излучательные характеристики / В.В. Мурга // Тезисы докладов Международной конференции «Лазеры и современное приборостроение». – С-Пб. – 1993. – С. 16-17.

R e f e r e n c e s

1. Glukhikh, I. V. Powerful solid-state Nd:YAG lasers with transverse diode pumping and improved radiation quality / I. V. Glukhikh, S. A. Dimakov, R. F. Kurunov, S. S. Polikarpov, S. V. Frolov // Journal of Technical Physics. - 2011. - Volume 81. Issue 8. - pp. 71-75.

2. Shelestov, D. A. Stabilization of the wavelength of radiation of diode lasers. Dynamic characteristics of Peltier elements / D. A. Shelestov, S. M. Tomilov // Fotonika. – 2016. – №4 (58). – Pp. 52-63.

3. Koshelev, P. A. Pulsed pumping systems of solid-state lasers / P. A. Koshelev, V. M. Opre, A. V. Prilutsky, A. O. Temnikov // Voprosy elektrotekhnologii. – 2014. – No. 4.

4. Arkhipov, D. A. optimization of the performance of solid-state diode pumped laser for space applications / D. A. Arkhipov, V. I. Verluca, V. A. Derevyanko, M. S. Egorova, Yu. a. Rezunkov, V. V. Stepanova // Scientific and technical journal of information technologies, mechanics and optics. - 2016. - Volume 16. - No. 8.

5. Tarabrin M. K. Efficiency Improving of the MID-IR Solid State Lasers by means of $\text{Fe}^{2+}:\text{ZnSe}$, $\text{Cr}^{2+}:\text{CdSe}$ Laser Single Crystals Microtexturing / M. K. Tarabrin, V. A. Lazarev, S. O. Leonov, V. E. Karasik, Yu. P. Podmarkov, M. P. Frolov, V. I. Kozlovsky // Collection of scientific papers OF THE XXVII INTERNATIONAL CONFERENCE

"LASERS IN SCIENCE, TECHNOLOGY, MEDICINE". - Tuapse. - 2016-Volume 27.

6. Zvelto, O. Principles of lasers: Trans. from English-3rd edition. and add. / O. Zvelto. - Moscow: Mir, 1990 — - 560 p.

7. Kolpakov, N. D. On the possibility of using the mutual influence of active centers of laser working media to increase the pumping efficiency / N. D. Kol-pakov, Yu. S. Denishchik, V. V. Murga // Elektronika i tekhnika. Ser. Laser technology and optoelectronics. - 1990. - Issue 4(56). - pp. 63-64.

8. Murga, V. V. Influence of collective phenomena in the active medium of lasers on their radiative characteristics. // Abstracts of the International Conference "Lasers and Modern Instrumentation". - P-Pb. - 1993. - P. 16-17.

Murga E.V., Yuriev S.A., Malyuta E.R
THE PROSPECT OF FURTHER IMPROVING THE EFFICIENCY OF PUMP ENERGY CONVERSION IN SOLID-STATE LASERS

This work is devoted to the analysis of existing methods for increasing the pump energy in solid-state lasers, as well as to the conditions for the formation of collective radiation in the active medium of a solid-state laser. Theoretical and experimental methods were used in the work. The theoretical model is based on the electro-dipole approximation of the interaction of radiation with the medium.

Experimental confirmation of the formulated propositions was carried out on a ruby active element with the output energy fixed in the Q-factor modulation mode of the resonator. It is shown that the method of creating a non-equilibrium state of the active medium can stimulate the collective interaction of the active centers, which affects the properties of the output radiation.

This method of exciting the active medium of the laser makes it possible to increase the energy efficiency of existing coherent radiation generators and opens up prospects for obtaining collective radiation in other ranges of

electromagnetic radiation, including the X-ray and radio bands.

Keywords: *solid-state laser, pump energy, collective radiation, Q modulation.*

Мурга Елена Владиславовна, старший преподаватель кафедры «Радиофизика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: elena.murga@list.ru

Murga Elena Vladislavovna, senior lecturer the Chair of «Radiophysics» of the State University of Higher Education of the LPR «DonGTI», Alchevsk.

Юрьев Сергей Александрович, к.т.н. доцент кафедры «Теоретическая механика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: ysa.dmmi@gmail.com

Yuriev Sergey Aleksandrovich, Candidate of Technical Sciences, docent of the Chair of «Theoretical Mechanics» of the State University of Higher Education of the LPR «DonGTI», Alchevsk.

Малюта Елизавета Руслановна, аспирант кафедры «Радиофизика» ГОУ ВО ЛНР «ДонГТИ», г. Алчевск.

E-mail: lizamalyuta1997@gmail.com

Malyuta Elizaveta Ruslanovna, post-graduate student of the Chair of «Radiophysics» of the State Educational Institution of the LNR «DonGTI», Alchevsk.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 12.04.2021 г.

УДК 621.387.143

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК СТОЛБА СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДУГИ МЕТОДОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Калюжный Г.С., Корсунов К.А., Лыштван Е.Ю., Чаленко А.В.

INVESTIGATION OF THE CHARACTERISTICS OF THE COLUMN OF A STABILIZED ELECTRIC ARC BY THE METHOD OF COMPUTATIONAL EXPERIMENT

Kalyuzhny G.S., Korsunov R.A., Lyshtvan E.Y., Chalenko A.V.

В работе методом вычислительного эксперимента исследованы температурные характеристики столба электрической дуги, стабилизированной стенкой разрядной трубки. Математическая модель дуги была основана на уравнении Эленбааса-Геллера. Уравнения модели решались численно в среде пакета Comsol Multiphysics методом конечных элементов. По результатам вычислительного эксперимента определены диапазоны температур, при которых можно не учитывать влияния излучения дуги на ее температуру. Предложена простая полуэмпирическая зависимость, позволяющая рассчитать температуру на оси стабилизированной дуги по величине произведения ER .

Ключевые слова: Comsol Multiphysics, электрическая дуга, математическое моделирование, вычислительный эксперимент, закон подобия.

Введение. Электрическая дуга постоянного тока высокого давления является одним из наиболее простых источников низкотемпературной плазмы. Однако открытая дуга имеет чрезвычайно сложную пространственную конфигурацию, что объясняется рядом причин: взаимодействие дуги с собственным магнитным полем, конвекция окружающей среды, электрические пробой между отдельными участками дуги и др., что требует принятия мер по ее стабилизации [1-3]. Один из способов стабилизации электрической дуги – стабилизация стенкой разрядной трубки, заключающаяся в интенсивном охлаждении стенки и создании таким путем слоя относительно холодного газа между стенкой и дугой. Стабилизированная охлаждаемой стенкой разрядной трубки дуга постоянного тока за десятки лет использования ее в качестве источника низкотемпературной плазмы зарекомендовала себя как наиболее удобный инструмент для исследования оптических и транспортных свойств плазмы при высоких температурах и степенях ионизации. Она является стационарным источником, который допускает длительную, непрерывную работу с неизменными и хорошо воспроизводимыми параметрами плазмы.

Сложность теоретических исследований процессов, протекающих в столбе электрической дуги, стабилизированной стенкой разрядной трубки, обусловлена взаимосвязью тепловых и электродинамических процессов, протекающих в столбе дуги, а также существенно нелинейной зависимостью свойств переноса и термодинамических свойств дуговой плазмы от температуры [1, 4, 5]. Поэтому представляет интерес применение метода вычислительного эксперимента с помощью математического пакета Comsol Multiphysics для исследования характеристик электрической дуги, стабилизированной стенкой разрядной трубки. Методика использования пакета для этих целей рассмотрена в [6].

Цель работы заключается в исследовании характеристик столба электрической дуги с помощью математического пакета Comsol Multiphysics методом вычислительного эксперимента.

Математическая модель. Баланс энергии дуговой плазмы описывается уравнением теплопроводности с энерговыделением за счет джоулева тепла и потерями на излучение. Для аксиально симметричной задачи оно может быть записано в виде

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \lambda(T) \frac{dT}{dr} \right) = \sigma(T) E^2 - u(T), \quad (1)$$

где λ – теплопроводность плазмы, σ – электропроводность, u – удельная мощность излучения и обычно называется уравнением Эленбааса-Геллера [3-5]. Для упрощения анализа получаемых результатов удобно перейти к

безразмерному радиусу $\tilde{r} = \frac{r}{R}$, или

$$r = \tilde{r} R, \quad (2)$$

где R – радиус разрядной трубки.

Уравнение (1) при этом примет вид

$$-\frac{1}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} \left(\tilde{r} \lambda(T) \frac{dT}{d\tilde{r}} \right) = \sigma(T) E^2 R^2 - u(T) R^2. \quad (3)$$

В дальнейшем знак $\sim$ для упрощения записи будем опускать.

Уравнение (3) должно быть дополнено граничными условиями. В силу аксиальной симметрии задачи радиальная производная температуры на оси канала должна быть равна нулю:

$$\left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=0} = 0. \quad (4)$$

Температура на стенке разрядной трубки слабо влияет на распределение температуры в столбе дуги, особенно вблизи оси, и была взята равной 300 К:

$$T|_{r=1} = 300 K \quad (5)$$

Для завершения системы уравнений математической модели (3-5) необходимо задать температурные зависимости параметров плазмы – теплопроводности λ , электропроводности σ и удельной мощности излучения u . Ввиду сильной нелинейности этих функций целесообразно задать их с помощью интерполяции табличных данных. Такие данные для различных газов приведены, например, в [4]. Интерполяция проводилась встроенными средствами пакета Comsol Multiphysics. Полученные зависимости приведены в работе [6].

Влияние излучения на баланс энергии.

Представляет интерес вопрос – когда можно пренебречь потерями мощности на излучение? В работе [7] отмечено, что при атмосферном давлении и не слишком больших токах, когда температура плазмы не превышает 11000-12000 К, потери на излучение в большинстве случаев заметно уступают теплопроводностному выносу энергии из столба, поэтому их можно не учитывать. Рассматриваемая модель позволяет уточнить это положение. Для этого сравним величины температуры на оси столба, полученные без учета излучения плазмы T_0 и с учетом излучения T (последнюю будем считать истинной), полученные путем численного решения уравнения (3). На рис. 1 представлен график зависимости отношения этих температур от T . Как и следовало ожидать, температура T_0 имеет завышенные значения. Из рис.1 следует, что на уровне точности 5% пренебречь потерями на излучение можно: при $R = 0.5$ см до $13 \cdot 10^3$ К, при $R = 1$ см до $12 \cdot 10^3$ К и при $R = 2$ см до $11 \cdot 10^3$ К.

Закон подобия ER . В области температур, в которой можно пренебречь потерями мощности на излучение, уравнение Эленбааса-Геллера (3) может быть записано как

$$-\frac{1}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} \left(\tilde{r} \lambda(T) \frac{dT}{d\tilde{r}} \right) = \sigma(T) E^2 R^2.$$

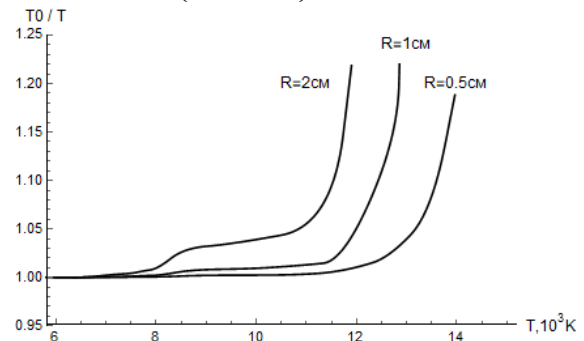


Рис. 1. Зависимость отношения T_0/T от температуры на оси столба дуги при различных значениях радиуса R разрядной трубки

Из его вида следует, что радиальное распределение температуры (по безразмерному радиусу) будет одинаково для случаев, когда одинаково произведение ER . В частности, будет одинакова температура на оси канала. Таким образом, температура на оси будет функцией ER .

Для подтверждения этого вывода были построены зависимости температуры на оси канала от произведения ER для трех значений радиуса разрядной трубки – 0,5 см, 1 см и 2 см. Результаты приведены на рис. 2. Видно, что они подтверждают закон подобия. Кружками обозначены границы применимости используемого приближения.

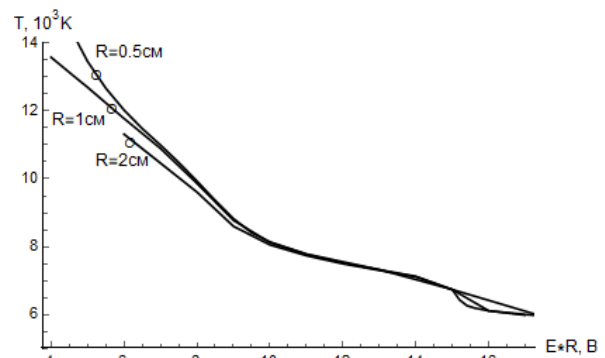


Рис. 2. Зависимость температуры на оси столба дуги от ER при различных значениях радиуса R разрядной трубки

Аппроксимируя зависимость рис. 2, можно получить функцию $T = f(ER)$, выражающую температуру на оси канала от величины ER . В инженерной практике обычно используют степенную зависимость. После логарифмического преобразования она переходит в линейную, что дает возможность использовать математический аппарат линейной регрессии.

На рис. 3 приведена зависимость $\ln T$ от $\ln(ER)$, полученная в ходе вычислительного эксперимента. Она близка к линейной, что указывает на возможность использования аппроксимации

степенной функции. Прямая на графике – результат линейной регрессии. По ее результатам была получена следующая зависимость:

$$T[10^3 K] = \frac{A}{(ER[B])^\alpha}, \quad (6)$$

где $A = 38,6_{-1.9}^{+2.0}$, $\alpha = 0,657 \pm 0,022$.

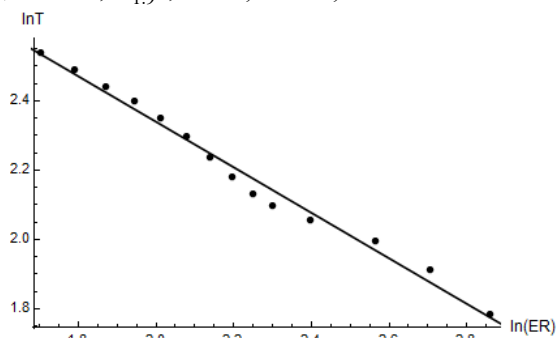


Рис. 3. Зависимость $\ln T$ от $\ln(ER)$

На рис. 4 приведены данные вычислительного эксперимента по зависимости температуры на оси от напряженности поля при различных значениях радиуса разрядной трубки и кривые, рассчитанные по полученной аппроксимационной формуле. Видно, что формула (6) вполне удовлетворительно описывает расчетные данные и может применяться в инженерной практике.

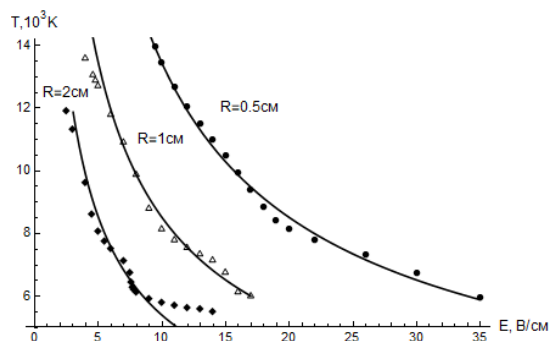


Рис.4. Зависимость температуры на оси столба дуги от напряженности поля при различных значениях радиуса разрядной трубки

Выводы. Вычислительный эксперимент, проведенный с помощью математического пакета Comsol Multiphysics, позволил провести исследование характеристик электрической дуги, стабилизированной стенкой разрядной трубки, в частности:

- изучить вопрос влияния излучения на баланс энергии в столбе дуги;
- подтвердить закон подобия ER ;
- получить простое соотношение для расчета температуры на оси дуги по величине параметра ER .

Л и т е р а т у р а

1. Асиновский Э.И. Стабилизированные электрические дуги и их применение в теплофизическом эксперименте / Э.И. Асиновский, А.В. Кириллин, В.Л. Низовский. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 264 с.
2. Даутов Г.Ю. Плазмотроны со стабилизированными электрическими дугами / Г.Ю. Даутов, В.Л. Дзюба, И.Н. Карп. – К.: Наук. думка, 1984. – 168 с.
3. Дресвин С.В., Иванов Д.В. Основы математического моделирования плазмотронов. Часть 1. Уравнение баланса энергии. Метод контрольного объема. Расчет температуры плазмы / С.В. Дресвин, Д.В. Иванов. – СПб: Из-во Политех. ун-та, 2004. – 227 с.
4. Жуков М.Ф. Прикладная динамика термической плазмы / М.Ф. Жуков, А.С. Коротеев, Б.А. Урюков. – Новосибирск: Наука. Сиб. Отд., 1975. – 298 с.
5. Калюжный Г.С. Расчет характеристик столба электрической дуги, стабилизированной стенкой разрядной трубки / Г.С. Калюжный, К.А. Корсунов, Е.Ю. Лыштван, А.В. Чаленко // Вестник ЛГУ им. В. ДАЛЯ. – № 10(40). – Луганск: Изд-во ЛГУ им В. Даля, 2020. – С. 166-170.
6. Райзер Ю.П. Физика газового разряда / Ю.П. Райзер. – М.: Наука, 1987. – 592 с.
7. Теория столба электрической дуги / В.С. Энгельшт, В.Ц. Гурович, Г.А. Десятков и др. – Новосибирск: Наука, 1990. – 376 с.

References

1. Asinovskij Je.I. Stabilizirovannye jelektricheskie dugi i ih primeneniye v teplofizicheskom jeksperimente / Je.I. Asinovskij, A.V. Kirillin, V.L. Nizovskij. – М.: FIZMATLIT, 2008. – 264 s.
2. Dautov G.Ju. Plazmotrony so stabilizirovannyimi jelektricheskimi dugami / G.Ju. Dautov, V.L. Dzjuba, I.N. Karp. – К.: Nauk. dumka, 1984. – 168 s.
3. Dresvin S.V., Ivanov D.V. Osnovy matematicheskogo modelirovaniya plazmotronov. Chast' 1. Uravneniye balansa jenergii. Metod kontrol'nogo ob#ema. Raschet temperatury plazmy / S.V. Dresvin, D.V. Ivanov. – SPb: Iz-vo Politeh. unta, 2004. – 227 s.
4. Zhukov M.F. Prikladnaja dinamika termicheskoy plazmy / M.F. Zhukov, A.S. Koroteev, B.A. Urjukov. – Novosibirsk: Nauka. Sib. Otd., 1975. – 298 s.
5. Kaljuzhnyj G.S. Raschet harakteristik stolba jelektricheskoy dugi, stabilizirovannoj stenкой razrjadnoy trubki / G.S. Kaljuzhnyj, K.A. Korsunov, E.Ju. Lyshtvan, A.V. Chalenko // Vestnik LGU im. V. DALJa. – № 10(40). – Lugansk: Izd-vo LGU im V. Dalja, 2020. – S. 166-170.
6. Rajzer Ju.P. Fizika gazovogo razrjada / Ju.P. Rajzer. – М.: Nauka, 1987. – 592 s.
7. Teorija stolba jelektricheskoy dugi / V.S. Jengel'sht, V.C. Gurovich, G.A. Desjatkov i dr. – Novosibirsk: Nauka, 1990. – 376 s.

Kalyuzhny G.S., Korsunov R.A., Lyshtvan E.Y., Chalenko A.V.

INVESTIGATION OF THE CHARACTERISTICS OF THE COLUMN OF A STABILIZED ELECTRIC ARC BY THE METHOD OF COMPUTATIONAL EXPERIMENT

In this paper, the temperature characteristics of an electric arc column stabilized by the wall of a discharge tube are studied by a computational experiment. The mathematical model of the arc was based on the Elenbaas-Geller equation. The model equations were solved numerically in the environment of the Comsol Multiphysics package by the finite

element method. Based on the results of the computational experiment, the temperature ranges at which the influence of arc radiation on its temperature can be ignored are determined. A simple semiempirical dependence is proposed to calculate the temperature on the axis of the stabilized arc by the product value.

Keywords: *Comsol Multiphysics, electric arc, mathematical modeling, computational experiment, similarity law.*

Калужный Геннадий Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент, временно не работает.

E-mail: kaluzhgs@gmail.com

Kalyuzhny Gennady, candidate of physical and mathematical Sciences, associate, temporarily does not work.

Корсунов Константин Анатольевич, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: Korsunof@mail.ru

Korsunov Konstantin, doctor of technical Sciences, Professor, head of the Department of physics of SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Лыштван Елена Юрьевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: lustva_lena@mail.ru

Lyshtvan Elena, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Чаленко Анжелика Валериевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: anghiel.anghiel.2014@mail.ru

Chalenko Anzhelika, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 533.901, 533.9.072

ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ САПФИРА, ВОЗБУЖДАЕМАЯ СКОЛЬЗЯЩИМ ВЫСОКОВОЛЬТНЫМ РАЗРЯДОМ

Громенко В.М., Харченко Е.И.

SAPPHIRE PHOSPHORESCENCE, EXCITED BY A SLIDING HIGH-VOLTAGE DISCHARGE

Gromenko V.M., Kharchenko E.I.

В работе представлены экспериментальные данные оптических исследований светящихся областей, образующейся при поверхностном высоковольтном разряде на сапфире в контролируемой атмосфере. Высказано предположение, что наблюдаемая фосфоресценция может быть обусловлена переходами $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ и $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ в сапфире.

Ключевые слова: плазмиды, конденсированная фаза, спектральный состав, запрещенные переходы, разряд.

Введение. В работе [1] сообщалось, что кислород в возбужденном состоянии может образовывать конденсированную фазу, которую наблюдали многие авторы как долгоживущие светящиеся образования [3,4]. Такой вывод сделан из формы светящихся областей и их спектров излучения, образующихся при скользящем высоковольтном разряде. В частности, было сделано допущение, что линии, наблюдаемые в спектре, обусловлены запрещенными переходами атомарного кислорода $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ и $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$.

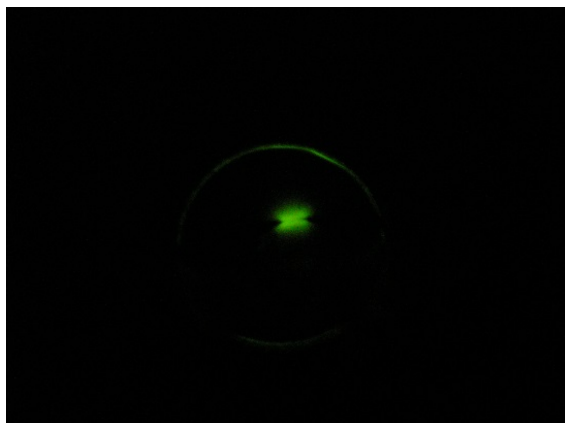


Рис.1. Светящаяся область при съемке перпендикулярно поверхности сапфира

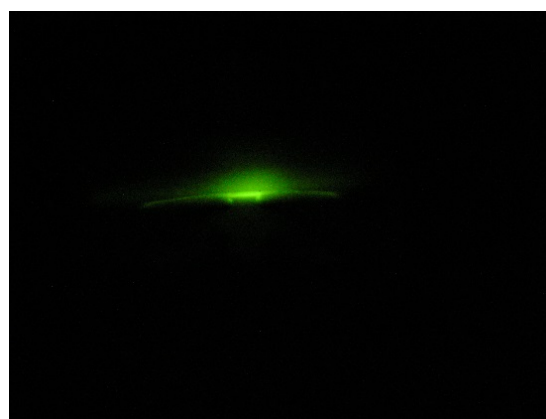


Рис.2. Светящаяся область при съемке вдоль поверхности сапфира

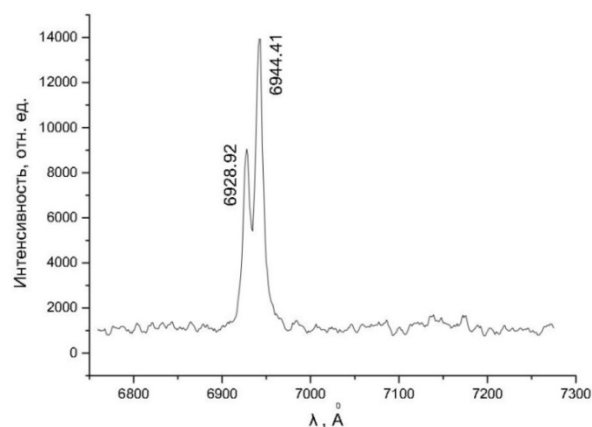


Рис. 3. Спектр свечения плазмиды на поверхности сапфира

Изложение основных материалов. В этой работе авторы попытались доказать, что светящиеся объекты образованы именно кислородом, хотя у азота, который есть в воздухе, тоже есть запрещенные переходы. Скользящий разряд, как и в предыдущей работе, осуществлялся подключением к вольфрамовым или алюминиевым электродам через управляемый разрядник конденсатора с

емкостью $C=0,025$ мкФ, заряженного до 12 кВ. Длительность протекания тока составляла 6 мкс. Съемка плазмоедов производилась электронно-оптическим преобразователем ЭП-13 с мультищелочным фотокатодом. Время экспонирования задавалось импульсным питанием ЭОПа. Съемка спектра осуществлялась при помощи дифракционного монохроматора МУМ, вместо выходной щели у которого располагался фотокатод электронно-оптического преобразователя (ЭОПа). Задержка съемки, как и ранее, была 1 мс и время экспозиции 100 мкс. Наблюдение в спектре двух линий с $\lambda_1 = 6929 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 6944 \text{ \AA}$, а также отсутствие полос в спектрах и независимость спектров от материала электродов позволило сделать вывод, что излучение принадлежит атомам кислорода или азота, и переходы, отвечающие за излучение, должны быть запрещенными.

Результаты исследований. Для того, чтобы выяснить влияние различных газов, скользящий разряд производился в контролируемой атмосфере. При этом разряд производился в таких газах как кислород, аргон, ксенон. Эксперимент показал, что форма светящихся областей и их спектры одинаковы для всех используемых газов.

Выводы. Из вышесказанного можно сделать вывод, что мы наблюдали фосфоресценцию лейкосапфира, которая обусловлена переходами $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ и $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ в кислороде, входящем в структуру кристалла.

В заключение необходимо отметить, что фосфоресценция наблюдалась только в случае касания электродов поверхности сапфира.

Л и т е р а т у р а

1. Громенко В.М., Харченко Е.И. О возможности конденсации кислорода в метастабильном состоянии, образующемся при поверхностном высоковольтном разряде. Вестник Луганского национального университета имени Владимира Даля. №7(25), 2019, с. 262-264.
2. Смирнов Б.М. Физика атома и иона. М.: Энергоатомиздат, 1986, 216 с.
3. Г.Д. Шабанов. Оптические свойства долгоживущих светящихся образований. Письма в ЖТФ, 2002, том 28, вып. 4. с. 81-86.
4. Е.Т. Протасевич. Разновидности свечения ВЧ разряда в зависимости от влажности воздуха. Журнал технической физики, 2005, т. 75, вып. 7. С. 134-138.

References

1. Gromenko V.M., Kharchenko E.I. About the possibility of freezing of the excited state in some compounds of oxygen. Vestnik of Lugansk Vladimir Dahl National University. №2(4), part 1, 2017, p.257-259.
2. Smirnov B.M. Physics of atom and ion. M.:Energoatomizdat, 1986, 216 p.
3. G.D. Shabanov. Optical properties of long-lived luminous formations. Technical physics letters, 2002, vol. 28, issue. 4. pp. 81-86.
4. E.T. Protasevich. Varieties of glow RF discharge depending on air moisture. Journal of technical physics, 2005, V. 75, no. 7. S. 134-138.

Gromenko V.M., Kharchenko E.I. SAPPHIRE PHOSPHORESCENCE, EXCITED BY A SLIDING HIGH-VOLTAGE DISCHARGE

The article presents experimental data of optical researches of luminous areas formed on the sapphire with a super-voltage discharge in a controlled atmosphere. It has been suggested that the observed phosphorescence can be caused by $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ and $^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ transitions in saphyr.

Key words: plasmoids, condensed phase, spectral composition, prohibited transitions, discharge.

Громенко Владимир Михайлович, ведущий инженер кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: kaf_fizkhim@mail.ru

Gromenko Vladimir, leading engineer of the Department of Physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Харченко Евгений Иванович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
Email: kharchenko_ei@mail.ru

Kharchenko Evgenyi, candidate of physical and mathematical sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 504.06

РАДИАЦИОННАЯ ОЦЕНКА ГОРОДСКИХ ПАРКОВ ГОРОДА ЛУГАНСКА

Воробьев С.Г., Чаленко А.В.

RADIATION ASSESSMENT OF URBAN PARKS OF LUGANSK

Vorobjov S.G., Chalenko A.V.

На основании оценки источников поступления радиоактивных загрязнений искусственного и естественного происхождения проведен анализ радиологической обстановки городских парков в г. Луганске. Определен с помощью гамма-спектрометра спектральный состав γ -излучения образцов грунта их удельная активность и удельная эффективная активность, установлен класс радиационных параметров отобранных почв.

Ключевые слова: гамма-излучение, радиационная обстановка, городские парки, удельная эффективная активность.

Введение. Источниками возникновения и распространения радиоактивных загрязнений, способных формировать повышенные дозы радиации во Луганске, могут быть: атмосферное выпадение радионуклидов, искусственного и естественного происхождения; ввоз товаров и транспортных средств, загрязненных радионуклидами; несанкционированное складирование и хранение радиоактивных предметов; использование строительных материалов, содержащих естественные радионуклиды – элементы уранового и ториевого рядов.

Контроль радиационного воздействия на население работников промышленных предприятий стал частью современной культуры всех стран мира. Такой контроль с целью обеспечения радиационной безопасности населения необходим и в г. Луганске. Создание системы радиационной безопасности любой территории предполагает получение достоверной информации об основных источниках поступления радионуклидов в объекты окружающей среды, формирующих общую радиационную коллективную дозу. [1-5].

Для того чтобы дать достоверную оценку радиационной обстановки городских парков города Луганска, необходимо провести радиационный мониторинг.

Цель работы – провести оценку радиационной обстановки почвы городских парков г. Луганска.

Основные задачи исследований:

- ✓ определить с помощью гамма-спектрометра спектральный состав γ -излучения образцов почв;

- ✓ вычислить удельную эффективную активность (УЭА) образцов почв;
- ✓ сравнить полученные данные с нормами радиационной безопасности.

Объект исследования – почва парков г. Луганска.

Для решения поставленных задач был использован сцинтилляционный метод регистрации гамма-излучения [6]. Чувствительным элементом детектора был кристалл йодистого натрия размером 63х63мм. Световые вспышки регистрировались фотоэлектронным умножителем типа ФЭУ-82, сигналы с которого подавались на многоканальный амплитудный анализатор, с которого в свою очередь передавались на персональный компьютер (рис. 1).

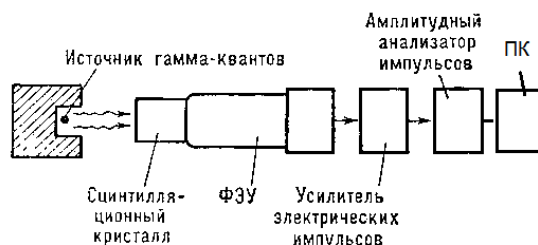


Рис.1. Схема сцинтилляционного гамма-спектрометра.

Установленное на персональном компьютере программное обеспечение «РИТМ-С» производит накопление и обработку энергетических спектров источников излучений, вычисляет активность и удельную активность радионуклидов, а также удельную эффективную активность по активности естественных радионуклидов (ЕРН ^{40}K , ^{226}Ra , ^{232}Th) и цезия-137. (рис. 2).

Для уменьшения фона детектор был окружен свинцовой защитой толщиной 2,5 см. (рис. 3).



Рис.2. Спектрометр гамма-излучения «РИТМ-С»

Образцы почв, исследовались на спектрометрической установке «РИТМ-С». Полученные значения удельной активности, удельной эффективной активности естественных радионуклидов, можно представить в виде протоколов измерений (отвечают методике измерения для лабораторного метода определения удельной эффективной активности в строительных материалах).



Рис.3. Детектор гамма-спектрометра и его защита

Значение удельной активности и удельной эффективной активности программа определяет в автоматическом режиме, у каждого гамма-кванта есть известное значения пика (например, у ^{226}Ra энергия пика находится в районе 1,786 МэВ). Удельная эффективная активность определялась по площади количество импульсов в канале, а погрешность определялась от формы площади. Полученные значения удельных активностей, удельных радионуклидов исследуемых проб, можно представить в виде протоколов измерений табл. 1-3.

Таблица 1

Протокол обработки спектра гамма-излучения почвы парковой зоны медуниверситета

№ п/п	Нуклид	Активность		Удельная активность		Погрешность активности, %
		Бк	мкКи	Бк/кг	мкКи/кг	
1	^{232}Th	-	-	-	-	
2	^{226}Ra	171.8	0.0046	171.8	0.0046	12.8
3	^{40}K	1139.3	0.0308	1139.3	0.0308	9.5
4	^{137}Cs	-	-	-	-	-
Объем пробы, см ³		Масса пробы, кг		Удельная эффективная активность, Бк/кг		Время измерения (экспозиция), сек
1000		1		268.6		1000

Таблица 2

Протокол обработки спектра гамма-излучения почвы парка 1 Мая

№ п/п	Нуклид	Активность		Удельная активность		Погрешность активности, %
		Бк	мкКи	Бк/кг	мкКи/кг	
1	^{232}Th	82	0.0022	57.8	0.0016	9.1
2	^{226}Ra	88,3	0.0024	62,2	0.0017	8.3
3	^{40}K	1105.4	0.0299	778.4	0.021	10.4
4	^{137}Cs	-	-	-	-	-
Объем пробы, см ³		Масса пробы, кг		Удельная эффективная активность, Бк/кг		Время измерения (экспозиция), сек
1000		1,42		204.1		1000

Таблица 3

Протокол обработки спектра гамма-излучения почвы парка Дружбы

№ п/п	Нуклид	Активность		Удельная активность		Погрешность активности, %
		Бк	мкКи	Бк/кг	мкКи/кг	
1	²³² Th	-	-	-	-	-
2	²²⁶ Ra	109.2	0.0029	107.2	0.0029	7.1
3	⁴⁰ K	720.5	0.0186	715.3	0.0196	11.2
4	¹³⁷ Cs	-	-	-	-	-
Объем пробы, см ³		Масса пробы, кг		Удельная эффективная активность, Бк/кг		Время измерения (экспозиция), сек
1000		1,0		170.2		1000

Полученные значения удельных эффективных активностей естественных радионуклидов исследуемых проб, представлены в виде табличных значений УЭА (табл. 4).

Таблица 4

Значения УЭА по паркам г. Луганска

№ п/п	Место отбора почвы	УЭА, Бк/кг
1	Парк Дружбы	170,2
2	Парк Дружбы	163,5
3	Парк Дружбы	161,7
Среднее значение		165,1
4	Парк 1 мая	204,1
5	Парк 1 мая	195,4
6	Парк 1 мая	207,5
Среднее значение		202,3
7	Парковая зона «Южноград»	191,4
8	Парковая зона «Южноград»	185,3
9	Парковая зона «Южноград»	180,1
Среднее значение		185,6
10	Парковая зона медуниверситета	268,6
11	Парковая зона медуниверситета	251,3
12	Парковая зона медуниверситета	248,2
Среднее значение		256

На основании полученных данных, построена гистограмма средних значений УЭА почв по паркам города Луганска (рис.4).

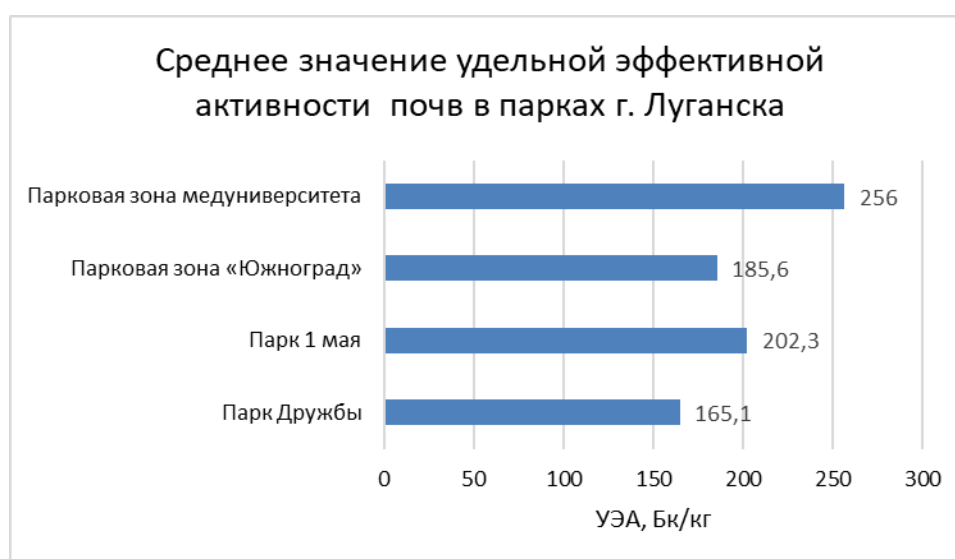


Рис.4. Среднее значение удельной эффективной активности почв в парках г. Луганска

Выводы.

1. Удельная эффективная активность всех проб не превышает допустимое значение для строительных материалов, используемых в строительстве общественных и жилых объектов (I класс радиационных параметров), составляет 370 Бк / кг. Присутствие изотопа Cs^{137} в исследованных образцах не обнаружено. Превышение над гамма-фоном обусловлено содержанием в образцах Th^{232} и других тяжелых элементов и продуктов их распада. Наибольший вклад в фон дает изотоп K^{40} .

2. Сравнивая значения удельной эффективной активности почвы в различных парках города, можно сделать вывод, что количество естественных радионуклидов, находящихся в почвах расположенных на территории медуниверситета, значительно выше к его значениям в почве, отобранных в других парках города.

Л и т е р а т у р а

1. Бурдина Н.О. Медико-экологические проблемы здоровья человека. / Планета – наш дом: Сб. материалов XII Междунар. молодежной научной конференции – Алчевск: ГОУ ВПО ЛНР «ДонГТУ», 2020. – 133-137 с.
2. Касимов А.М. Промышленные отходы. Проблемы и решения. Технологии и оборудование / Касимов А.М., Семенов В.Т., Романовский А.А. – Х.: ХНАГХ, 2007. – 411 с.
3. Давыдов М.Г. Радиоэкология / М.Г. Давыдов. – Ростов-на-Дону: Феникс, 2013. – 635 с.
4. Орешкин М.В., Махнев И.А., Калайдо А.В. Мифы и реальность радиационной опасности в Луганской и Донецкой областях / М.В. Орешкин, И.А. Махнев, А.В. Калайдо // Вестник аграрной науки Дона. – 2014. – № 4 (28). – С. 74 – 80.
5. Зубова Л.Г. Воздействие горнодобывающей промышленности на естественные ландшафты Донбасса / Л.Г. Зубова, В.А. Гречка, Ю.В. Матюшенко // Экологический и ресурсосбережение. – 1999. – № 4. – С. 63–66.
6. Волков В.Г., Христофоров В.А., Ушаков Н.П. Методы ядерной спектрометрии. – М.: Энергоатомиздат, 1990 – 256 с.

R e f e r e n c e s

1. Burdina N.O. Mediko_ekologicheskie problemi zdorovya cheloveka. / Planeta – nash dom_ Sb. materialov XII Mejdunar. molodejnoj nauchnoj konferencii – Alchevsk_ GOU VPO LNR «DonGTU»_ 2020. – 133_137 s.
2. Kasimov A.M. Promyshlennye othody. Problemy i resheniya. Tekhnologii i oborudovanie / Kasimov A.M., Semenov V.T., Romanovskij A.A. – H.: HNAGH, 2007. – 411 s.

3. Davidov M.G. Radioekologiya / M.G. Davidov. – Rostov-na-Donu: Feniks, 2013. – 635 s.

4. Oreshkin M.V., Mahnev I.A., Kalajdo A.V. Mify i real'nost' radiacionnoj opasnosti v Luganskoj i Doneckoj oblastyah / M.V. Oreshkin, I.A. Mahnev, A.V. Kalajdo // Vestnik agarnoj nauki Dona. – 2014. – № 4 (28). – S. 74 – 80.

5. Zubova L.G. Vozdejstvie gornodobyvayushchej promyshlennosti na estestvennye landshafty Donbassa / L. G. Zubova, V.A. Grechka, YU.V. Matyushenko // Ekotekhnologii i resursosberezhenie. – 1999. – № 4. – S. 63–66.

6. Volkov V.G., Hristoforov V.A., Ushakov N.P. Metody yadernoj spektrometrii. – M: Energoatomizdat, 1990 – 256 s.

Vorobjov S.G., Chalenko A.V.

RADIATION ASSESSMENT OF URBAN PARKS OF LUGANSK

Based on the assessment of the sources of radioactive contamination of artificial and natural origin, the analysis of the radiological situation of city parks in Lugansk was carried out. Using a gamma spectrometer, the spectral composition of γ -radiation of soil samples, their specific activity and specific effective activity, was determined, the class of radiation parameters of the selected soils was established.

Key words: gamma-radiation, radiation environment, city parks, specific effective activity.

Воробьев Сергей Германович, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: delfin_lg@mail.ru

Vorobjov Sergey, candidate of technical Sciences, associate Professor of the chair of physics of Lugansk Vladimir Dahl State University

Чаленко Анжелика Валериевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: anghiel.anghiel.2014@mail.ru

Chalenko Anzhelika, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021

УДК 551.521.2

ОСОБЕННОСТИ ЛАТЕРАЛЬНОГО И РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ ГОРНОЙ АДЫГЕИ

Бураева Е.А., Ширяева А.А.

OF LATERAL AND RADIAL DISTRIBUTION OF RADIONUCLIDES IN THE SOILS OF MOUNTAIN ADYGEA

Buraeva E.A., Shiryayeva A.A.

В работе представлены результаты многолетних исследований латерального и радиального распределения естественных радионуклидов ^{226}Ra , ^{232}Th , ^{40}K и искусственного ^{137}Cs в различных почвах горной Адыгеи. Использовались данные радиоэкологических экспедиций с 2012 по 2018 годов в Майкопский район Республики Адыгея. Показано, что накопление ^{137}Cs происходит на участках, расположенных в понижениях рельефа. Распределение естественных радионуклидов ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K по почвенным профилям равномерное и зависит от типа почвы, почвообразующих пород.

Ключевые слова: радионуклид, почва, накопление, распределение, удельная активность.

Введение. Радиоэкологический мониторинг объектов и территорий позволяет не только отслеживать влияние деятельности человека на экосистемы, но и оценивать дозовые нагрузки от природных источников ионизирующих излучений на население.

В горных районах часто широко распространены природные радиоактивные аномалии, связанные с выходами пород с повышенным содержанием радионуклидов рядов урана и тория, активно ведется добыча полезных ископаемых. На территориях с сильно расчлененным рельефом наблюдаются оползневые и обвальные процессы. При этом горные районы активно эксплуатируются в туристической отрасли. Поэтому важной задачей является оценка радиоактивности природных территорий горных районов. На северном Кавказе к таким районам с природными радиоактивными аномалиями относится Республика Адыгея (горная часть).

Изложение основных материалов. Для оценки влияния особенности латерального и радиального распределения радионуклидов в почвах с 2012 по 2018 годов в горных районах Республики Адыгея были заложены модельные контрольные участки, расположенные на территориях с различными

почвами и на разных элементах рельефа. Зональными почвами являются бурые лесные, ранкеры лесные, луговые почвы. В поймах рек развиты аллювиально-дерновые почвы.

Удельную активность радионуклидов определяли гамма-спектрометрическим методом, используя сцинтилляционный спектрометр «Прогресс-гамма». Время набора спектра не превышало 24 часа. Погрешность измерений удельной активности радионуклидов не более 15%.

Результаты исследований. Ниже в табл. 1 и на рис. 1 приведены результаты оценки удельной активности основных дозообразующих радионуклидов в верхнем (0-10 см) слое почвы.

Таблица 1

Удельная активность радионуклидов в почвах

Параметры	Радионуклиды			
	^{137}Cs	^{226}Ra	^{232}Th	^{40}K
Минимум	0,1	2,0	0,9	101,1
Максимум	284,8	284,2	73,4	992,0
Среднее арифметическое	28,1	28,0	31,8	439,3
Среднее геометрическое	26,6	26,4	30,3	437,8
Мода	26,9	23,6	32,4	448,0
Медиана	30,4	25,8	31,7	425,0
Стандартная ошибка	2,1	0,5	0,3	3,9
Стандартное отклонение	44,6	17,6	9,4	135,5
Дисперсия выборки	1456,8	110,3	88,1	18353,3
Экссесс	17,8	35,4	0,8	4,9
Асимметричность	3,2	3,9	0,2	1,3
Интервал	282,8	109,2	55,4	844,0
Количество проб	1201	1219	1220	1215

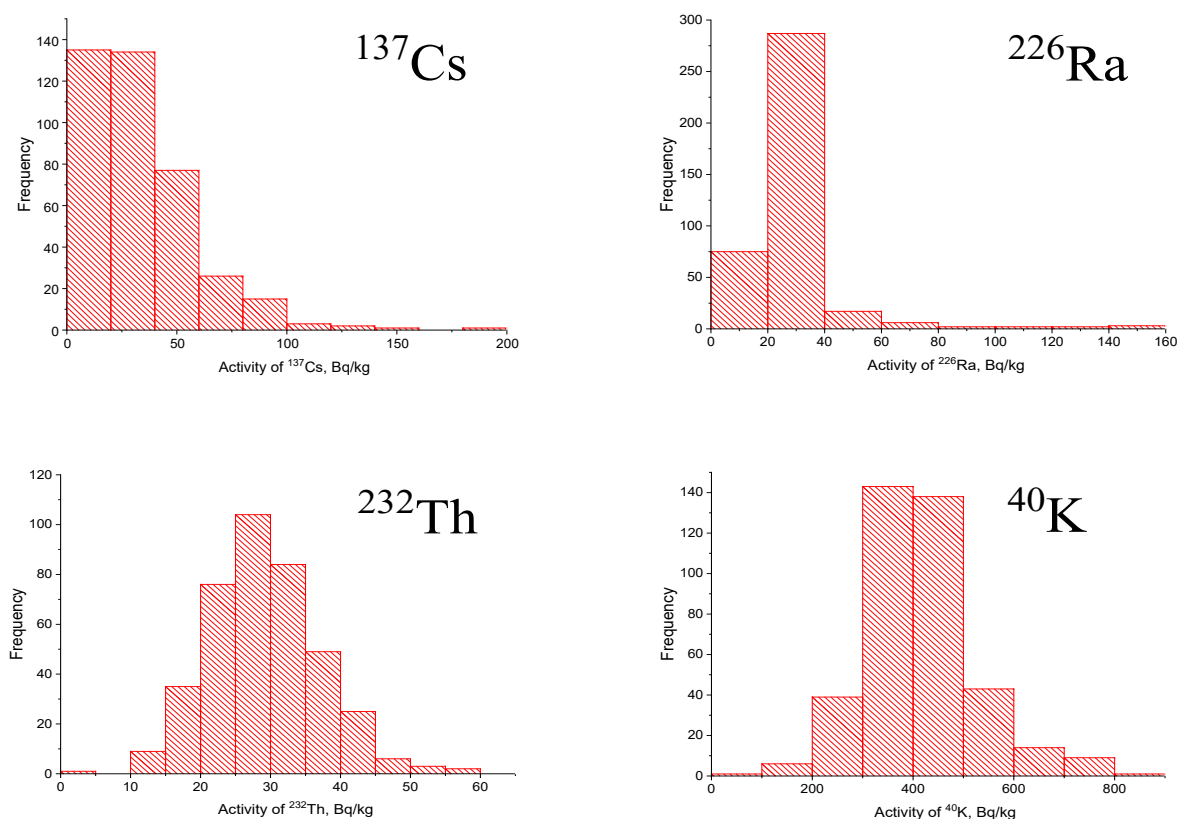


Рис. 1. Распределения удельной активности радионуклидов в почвах 0-10 см по всем точкам отбора

Распределения искусственного ^{137}Cs и естественного ^{226}Ra являются односторонним, асимметричным, нужно отметить, что величины асимметрии являются положительными, максимумы функций распределения смещены влево относительно максимумов нормального распределения. Коэффициенты островершинности (эксцесс) отличны от нуля для почв данных территорий, следовательно, можно говорить о неравномерности распределения данных радионуклидов по территории исследования. Это обусловлено как неравномерностью выпадения радиоцезия после аварии на Чернобыльской АЭС, так и миграцией данного радионуклида в вертикальном и горизонтальном направлениях. Для ^{226}Ra – неравномерное распределение связано с тем, что почвы горной Адыгеи сформированы на породах с различным содержанием радионуклидов – от низкоактивных аргиллитов, песчаников и известняков до высокоактивных гранитоидов.

Распределение естественных ^{232}Th и ^{40}K во всех почвах района исследования стремится к нормальному. Благодаря этому можно говорить о равномерности распределения ^{232}Th , ^{40}K в данных почвах.

Ниже на рис. 2 представлены диаграммы размаха удельной активности искусственного ^{137}Cs и естественных радионуклидов ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K в слое 0-10 см на разных контрольных участках (на примере 2018 года).

Данные диаграммы позволяют оценить нам пределы вариации радионуклидов в различных почвах, в таких как луговой (ML, SL), аллювиально-дерновой (PB, SS-6), бурой лесной (SS-1SS-4, SS-5, BL), ранкер лесной (RL). Максимальные вариации радионуклидов характерны для почв на точках СС-4 (бурые лесные неполноразвитые почвы) и СС-5 (бурые лесные примитивные почвы), данные точки расположены на крутом склоне в ущелье реки Сюк. Склон непрерывно осыпается, что приводит к изменению радионуклидного состава этих почв.

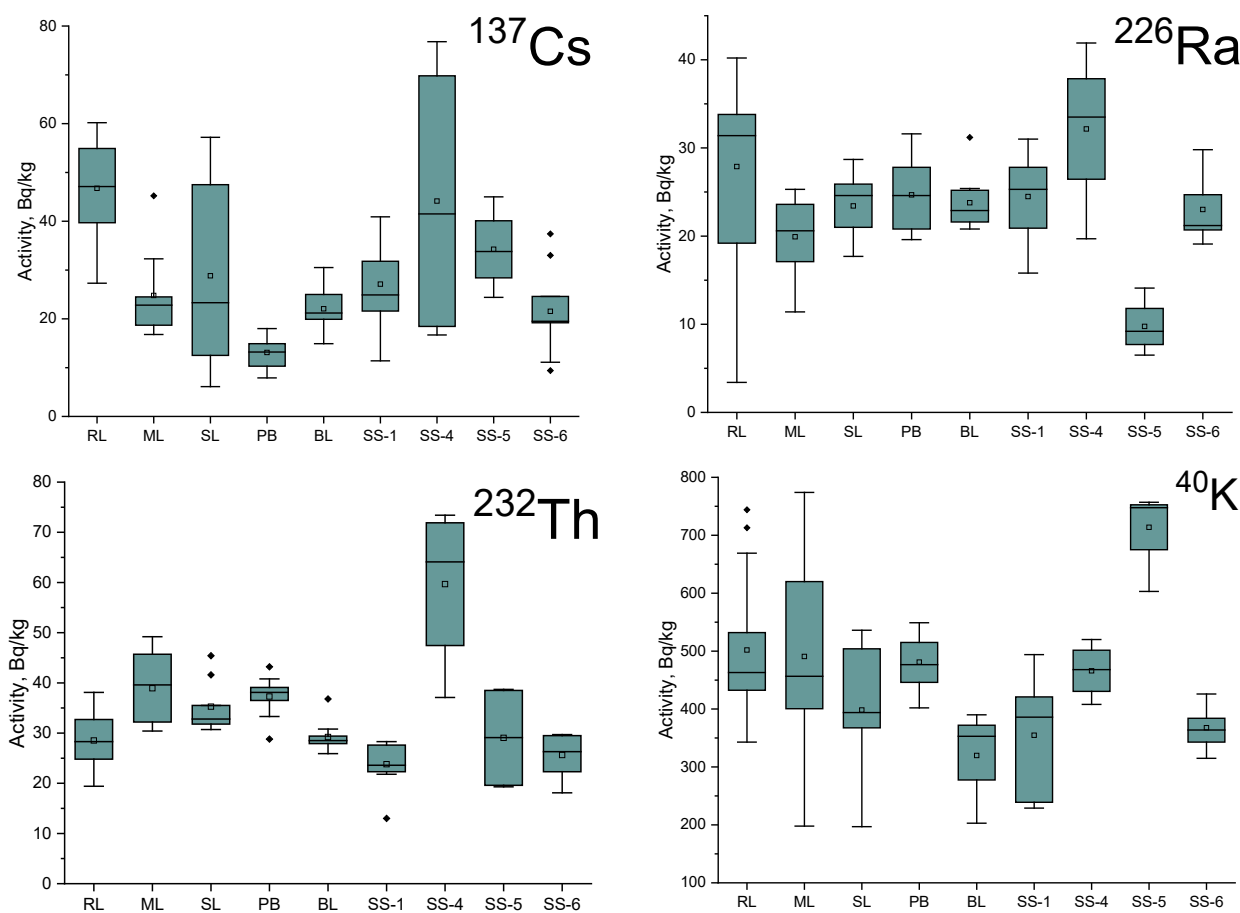


Рис. 2. Распределение удельной активности радионуклидов в профиле 0-10 см на разных контрольных участках (на примере 2018 года)

Таблица 2

Содержание радионуклидов в почве

Параметры	Радионуклиды			
	^{137}Cs	^{226}Ra	^{232}Th	^{40}K
Минимум	6,1	9,8	13,0	229,0
Максимум	60,2	40,2	59,7	713,8
Среднее арифметическое	28,0	24,4	31,3	421,7
Среднее геометрическое	23,9	23,7	30,4	412,2
Стандартная ошибка	2,3	0,9	1,1	13,2
Количество проб	79			

Выводы. В данной работе проведен анализ особенности латерального и радиального распределения радионуклидов в почвах, построены диаграммы распределения ^{137}Cs , ^{226}Ra , ^{232}Th , ^{40}K по всем точкам отбора.

Стоит отметить, что в условиях сильно расчлененного горного рельефа имеет место накопление и переотложение радиоцезия в понижениях рельефа, на дне ущелий, у подножий гор. Это может приводить к изменению дозовых нагрузок от ^{137}Cs на различных элементах ландшафта (при характерных концентрациях радиоцезия на выровненных площадках 20-50 Бк/кг, на склонах и в понижениях рельефа удельная активность данного радионуклида может достигать

уже 200-300 Бк/кг. В тоже время, распределение естественных радионуклидов ^{232}Th и ^{40}K наблюдается равномерно в пределах погрешности.

В заключение необходимо отметить, что исследования особенности распределения радионуклидов в почвах территорий со сложным рельефом актуальны в области радиационной безопасности окружающей среды и позволяют решать задачи по особенностям миграции радионуклидов в наземных экосистемах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032) / (БА30110/20-3-07ИФ).

Литература

1. Давыдов, М.Г. Радиоэкология: учебник для вузов. / М.Г. Давыдов [и др.]– Ростов-на-Дону: Феникс, – 2013. – 635 с.
2. Бетенеков, Н.Д. Радиоэкологический мониторинг: учеб. пособие / Н.Д. Бетенеков. – Екатеринбург : Уральский университет, 2014. – 208 с.

References

1. Davydov, M.G. Radioekologija: uchebnikdljavuzov. / M.G. Davydov [idr.]– Rostov-na-Donu: Feniks, – 2013. – 635 s.
2. Betenkov, N.D. Radioecological monitoring: studies. manual / N. D. Betenyov. - Ekaterinburg-Bourg: Ural University

Buraeva E.A., Shiryayeva A.A
OF LATERAL AND RADIAL DISTRIBUTION OF RADIONUCLIDES IN THE SOILS OF MOUNTAIN ADYGEA

The paper presents the results of long-term studies of the lateral and radial distribution of natural radionuclides ^{226}Ra , ^{232}Th , ^{40}K and artificial ^{137}Cs in various soils of mountainous Adygea. The data of radioecological expeditions from 2012 to 2018 to the Maikop region of the Republic of Adygea were used. It is shown that the accumulation of ^{137}Cs occurs in the areas located in the depressions of the relief. The distribution

of natural radionuclides ^{226}Ra , ^{232}Th and ^{40}K over soil profiles is uniform and depends on the type of soil and parent rocks.

Keywords: radionuclide, soil, accumulation, distribution, specific activity.

Буреаева Елена Анатольевна, к.х.н., доцент, в.н.с. НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону.
E-mail: buraeva_elena@mail.ru

Buraeva Elena Anatolievna, PhD in Chemistry, associate professor, leading researcher of the Research Institute of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don .

Ширяева Анастасия Андреевна, студент 4 курса физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.
E-mail: anastasia.shiryayeva00@mail.ru

Shiryayeva Anastasia Andreevna, third year student of Faculty of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Рецензент: Кривоколыско Сергей Геннадиевич, д.х.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021

УДК551.521.2

РАДИАЦИОННАЯ ОБСТАНОВКА НА РЕКРЕАЦИОННЫХ, УРБАНИЗИРОВАННЫХ И ПРИРОДНО-ТЕХНОГЕННЫХ ТЕРРИТОРИЯХ РОСТОВСКОЙ ОБЛАСТИ

Ляхова Н.В., Швецова Д.А., Шадин А.Е., Бураева Е.А., Михайлова Т.А.

RADIATION SITUATION IN RECREATIONAL, URBANIZED AND NATURAL-MAN- MADE TERRITORIES OF THE ROSTOV REGION

Lyakhova N.V., Shvetsova D.A., Shadin A.E., Buraeva E.A., Mikhailova T.A.

Данное исследование посвящено оценке радиационной обстановки природных и урбанизированных территорий Ростовской области. Показано, что распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения в регионе исследования достаточно неоднородное и обусловлено, в первую очередь, активностью радионуклидов, содержащихся в почвах. Деятельность промышленных предприятий на гамма-фон значим в районах с развитой угольной промышленностью. При этом, все полученные значения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения в Ростовской области не превышают Норм радиационной безопасности (НРБ-99/2009).

Ключевые слова: гамма-фон, радионуклид, накопление, распределение, удельная активность.

Введение. На территории Ростовской области расположены крупные особо охраняемые природные территории (ООПТ): Каменная (КБ) и Черная балки (ЧБ), Персиановская (ПСС) и Приазовская (АС) степи, а также Ботанический сад Южного федерального университета (БС). Данные территории относятся к рекреационным территориям. Выбранные объекты обладают схожими атмосферными условиями и рельефом в своих группах. Эти территории претерпели незначительное изменение в результате деятельности человека, их исследование – вклад в формирование представления о нормальном радиационном фоне, который может выступать эталоном.

В качестве урбанизированных территорий (УТ) были выбраны крупные промышленные города Ростовской области: Ростов-на-Дону (РНД), Новочеркасск (НВЧ) и Волгодонск (ВЛД). Радиационная обстановка данных территорий осложнена большим количеством сжигаемого топлива, транспортом, обогревательными системами, энергетическими станциями. Следствием сжигания большого количества ископаемого топлива является выброс в атмосферу с последующим оседанием в водоёмах и почвах относительно большого количества естественных

радионуклидов, вносящих вклад в общий радиационный фон.

На территории Ростовской области расположены крупные промышленные предприятия: Новочеркасская тепловая электростанция (НЧГРЭС), пункт захоронения радиоактивных отходов (РосРАО). Кроме этого, в регионе находится зона наблюдения Ростовской атомной Электростанции (РО АЭС). Данные территории относятся к природно-техногенным (ПТ). Радиационная обстановка данных территорий обусловлена не только естественной радиоактивностью окружающей среды, но и антропогенным влиянием.

В работе использованы материалы экспедиций 2013-2019 гг. по особо охраняемым природным территориям Ростовской области, материалы экспедиций 2012-2019 гг. по особо природно-техногенным территориям Ростовской области и материалы экспедиций 2012-2020 гг. по урбанизированным территориям Ростовской области.

Для проверки соответствия распределения выборки к нормальному закону распределения применялся непараметрический критерий Крамера-Мизеса-Смирнова или W2-критерий, который основывается на порядковой статистике [1].

При расположении n выборочных значений $x_1, x_2, \dots, x_n$ в порядке возрастания, можно использовать следующее представление статистики:

$$w_n^2 = \sum_{i=1}^n \left(f(x_i) - \frac{2i-1}{2n} \right)^2 + \frac{1}{12n} \quad (1)$$

В случае соответствия экспериментальных данных искомому распределению значение W^2 не должно превышать критического значения $Z_{кр} = 0,74$ при 0,01 уровне значимости [2].

Для проверки соответствия распределения случайной величины логнормальному распределению применялся приближенный критерий проверки [3]:

$$\sigma_{\ln x} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\ln x_i - \overline{\ln x})^2 \quad (2)$$

$$\ln Me = \overline{\ln x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln x_i \quad (3)$$

Если выполняются равенства формул 2 и 3, то гипотеза о логнормальном распределении считается верной, иначе верной считается альтернативная гипотеза: распределение в выборке не подчиняется логнормальному распределению.

Для исследования законов пространственного распределения радиационного параметра изучались как общие по всем территориям Ростовской области выборки, так и с их антропогенной дифференциацией.

Целью данной работы является оценка радиоэкологического состояния приземного воздуха атмосферы на рекреационных, урбанизированных и природно-техногенных территориях Ростовской области в условиях умеренно-континентального климата и сухих засушливых степей в период с 2012 по 2020 гг.

Результаты исследований. Гамма-излучение существует с момента образования планеты. Оно формируется за счет естественных и искусственных радионуклидов, которые воздействует на окружающую среду.

На рис. 1 представлено обобщенное распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения по всем годам в регионе исследования.

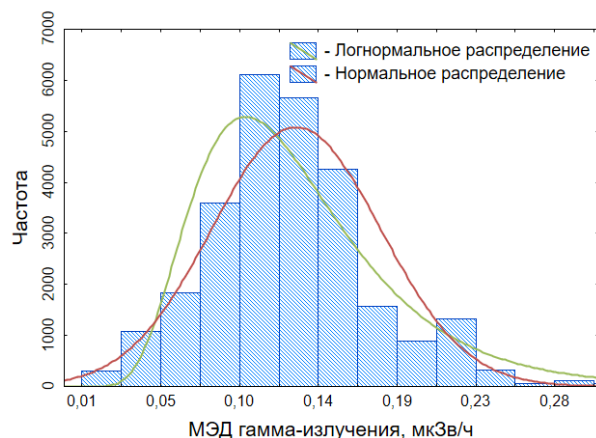


Рис. 1. Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения на территории Ростовской области

Как видно из рис. 1, распределение близко к нормальному или к логарифмически нормальному распределению. Проведя анализ на подчинение нормальному распределению с помощью критерия Крамера-Мизеса-Смирнова, было установлено, что данное распределение выборки не подчиняется

нормальному закону распределению при уровне значимости 0,01 ($W_{\text{расч}} = 23,1$, $W_{\text{крит}} = 0,74$). Анализ с использованием приближенного критерия показал, что данное распределение близко к логнормальному распределению. Среднее значение определяется в данном случае как среднегеометрическое значение выборки и составляет 0,13 мкЗв/ч. Рассчитанное среднее значение МЭД гамма-излучения для рекреационных территорий Ростовской области не превышает норм радиационной безопасности НРБ-99/2009 (0,30 мкЗв/ч) [4].

В табл. 1 представлены результаты статистического анализа распределения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения для территорий исследования в отдельности.

Значения МЭД гамма-излучения, характерные для всех ООПТ кроме ЗР, можно назвать эталонными, так как все зарегистрированные значения гамма-фона удовлетворяют нормам, установленным в НРБ-99/2009 [4]. Единичные случаи превышения МЭД на территории заповедника «Ростовский» могут быть обусловлены наличием естественных радионуклидов в почве. Почвы на данной ООПТ — черноземы, в непосредственной близости располагаются сельскохозяйственные угодья, Новочеркасская ГРЭС и г. Новочеркасск.

Анализ данных показал, что только нормальному распределению не подчиняется ни одна из проверенных выборок, большая часть выборок (58%) подчиняется только логнормальному распределению, вторая группа выборок (33%) — подчиняется сразу двум законам распределения. Выборка АС не подчиняется предполагаемым законам распределения, что говорит о возможном неоднородном распределении МЭД гамма-излучения на данной территории. Для остальных рекреационных, природно-техногенных и урбанизированных территорий наблюдаемая принадлежность к статистическим законам распределения, дает возможность предполагать статистически однородное распределение гамма-фона на рассматриваемых территориях Ростовской области. При этом среднее значение для рассматриваемых территорий Ростовской области следует определять, как среднегеометрическое значение.

Аналогичный анализ подчинения тому или иному закону распределения был проведен и для выборок, дифференцированных по антропогенному влиянию. В табл. 2 приведены значения рассчитанного W^2 -критерия для проверки на нормальное распределение (Н) и примерного критерия для проверки логнормального распределения (ЛН) при уровне значимости 0,01.

Таблица 1

Распределение МЭД гамма-излучения за весь период наблюдения

Параметр	ООПТ						ТТ			УТ		
	ЧБ	ЗР	БС	АС	ПСС	КБ	РО АЭС	НЧ ГРЭС	Рос РАО	РНД	ВЛД	НВЧ
Минимум, мкЗв/ч	0,05	0,05	0,01	0,05	0,11	0,08	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01	0,02
Максимум, мкЗв/ч	0,24	0,32	0,23	0,19	0,22	0,19	0,32	0,38	0,43	0,35	0,40	0,35
Среднеариф., мкЗв/ч	0,15	0,13	0,12	0,11	0,16	0,14	0,13	0,12	0,13	0,13	0,12	0,12
Медиана, мкЗв/ч	0,16	0,14	0,12	0,11	0,16	0,14	0,14	0,12	0,14	0,13	0,12	0,12
Мода, мкЗв/ч	0,16	0,14	0,11	0,11	0,16	0,16	0,14	0,14	0,14	0,12	0,12	0,12
СКО, 10^{-2}	3,8	3,5	3,8	2,8	2,5	3,0	3,4	3,9	3,9	5,7	5,0	4,8
Кол-во измерений, шт.	318	803	749	304	105	60	5780	3336	1791	10000	3010	965

Таблица 2

Соответствие законам распределения для выборок по гамма-фону на территориях Ростовской области

Параметр	W^2	σ_{ln}	Критерий	$ln Me$	$\overline{lnx}$	Соответствие закону
ООПТ	4,8	0,001	0,001	0,14	0,14	ЛН
ПТ	14,8	0,001	0,001	0,14	0,14	ЛН
УТ	17,1	0,003	0,003	0,12	0,12	ЛН

Анализ данных показал, что дифференцированные по степени антропогенного влияния выборки значений МЭД гамма-излучения подчиняются преимущественно логнормальному закону распределения. Учитывая это, оценить среднее значение выборок через среднеарифметическое выборки не правомочно, среднее значение в данном случае должно оцениваться как среднегеометрическое значение. Для природных территорий, природно-техногенных и урбанизированных территорий Ростовской области данное значение равно 0.14, 0.14 и 0.12 мкЗв/ч соответственно.

Выводы.

1. На территории Ростовской области мощность эквивалентной дозы гамма-излучения на территориях соответствует Нормам радиационной безопасности (НРБ-99/2009) и составляет 0,13 мкЗв/ч.

2. Распределение мощности эквивалентной дозы гамма-излучения на территории Ростовской области имеет преимущественно логарифмически нормальный закон распределения, что предполагает оценку средних показателей гамма-фона по территории региона как среднегеометрическое значение.

3. Рассчитанные среднегеометрические значения мощности эквивалентной дозы гамма-излучения для различных по степени антропогенного влияния территорий находятся в пределах рекомендованных Норм радиационной безопасности.

4. Наблюдается несущественное различие между средними значениями, рассчитанными для

рекреационных, природно-техногенных территорий и урбанизированными территориями.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032) / (БА30110/20-3-07ИФ).

Л и т е р а т у р а

1. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов: Пер. с нем. М.: Наука, 1980.
2. Большев Л.Н., Смирнов Н.В. Таблицы математической статистики. М.: Наука, 1983.
3. Кобзарь А.И. Прикладная математическая статистика. М.: Физматлит, 2006
4. СанПин 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009). Утверждены и введены в действие постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г.Г. Онищенко от 7 июля 2009 г № 47 с 01 сентября 2009 г

References

1. Bronshteyn I.N., Semendyaev K.A. Spravochnik po matematike dlya inzhenerov i uchashchikhsya vtuzov: Per. s nem. M.: Nauka, 1980.
2. Bol'shev L.N., Smirnov N.V. Tablitsy matematicheskoy statistiki. M.: Nauka, 1983.
3. Kobzar' A.I. Prikladnaya matematicheskaya statistika. M.: Fizmatlit, 2006
4. SanPin 2.6.1.2523-09 Normy radiatsionnoy bezopasnosti (NRB-99/2009). Utverzhdeny i vvedeny v deystviye postanovleniyem Glavnogo gosudarstvennogo sanitarnogo vracha Rossiyskoy Federatsii G.G. Onishchenko ot 7 iyulya 2009 g № 47 s 01 sentyabrya 2009 g

**Lyakhova N.V., Shvetsova D.A., Shadin A.E.,
Buraeva E.A., Mikhailova T.A.**

**RADIATION SITUATION IN RECREATIONAL,
URBANIZED AND NATURAL-MAN-MADE
TERRITORIES OF THE ROSTOV REGION**

This study is devoted to the assessment of the radiation situation in the natural and urbanized areas of the Rostov region. It is shown that the distribution of the equivalent dose rate of gamma radiation in the study region is rather heterogeneous and is primarily due to the activity of radionuclides contained in the soils. The activity of industrial enterprises against gamma background is significant in areas with a developed coal industry. At the same time, all the obtained values of the equivalent dose rate of gamma radiation in the Rostov region do not exceed the Radiation Safety Standards (NRB-99/2009).

Key words: equivalent dose rate, specially protected areas, reserve, dose, ecosystem

Ляхова Наталья Викторовна, студент физического факультета кафедры «Общая физика» ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", г. Ростов-на-Дону.
E-mail:llia.2013@yandex.ru

Lyakhova Natalia Viktorovna, student of the faculty of physics, Department of General physics, southern Federal University, Rostov-on-don

Швецова Дарья Алексеевна, студент 4 курса физического факультета кафедры «Общая физика» ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", г. Ростов-на-Дону.
E-mail:dashik.shvet@yandex.ru

Shvetsova Darya Alekseevna, student of the faculty of physics, Department of General physics, southern Federal University, Rostov-on-don

Шадин Антон Евгеньевич, студент физического факультета кафедры «Общая физика» ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", г. Ростов-на-Дону.
E-mail: antonshadin@yandex.ru

Shadin Anton Evgenievich, student of the faculty of physics, Department of General physics, southern Federal University, Rostov-on-don

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н., доцент, ведущий научный сотрудник, зав. лабораторией радиозоологических исследований НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.
E-mail: buraeva_elena@mail.ru

Buraeva Elena Anatolevna, PhD in Chemistry, associate professor, leading researcher of the Research Institute of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don.

Михайлова Татьяна Андреевна, сотрудник НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону.
E-mail: tanmisha@mail.ru

Mikhailova Tatyana Andreevna, employee of the Research Institute of Physics of the Southern Federal University, Rostov-on-Don.

Рецензент: Кривоколыско Сергей Геннадиевич, д.х.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021

УДК 551.521.2

РАДИОНУКЛИДНЫЙ И ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВЫ АЭРОЗОЛЬНОЙ ПЫЛИ НА ТЕРРИТОРИИ РОСТОВСКОЙ АГЛОМЕРАЦИИ

Михайлова Т.А., Машаров К.С., Бураева Е.А., Кашаева Е.А., Ширяева А.А.

RADIONUCLIDE AND ELEMENTAL COMPOSITIONS OF AEROSOL DUST IN THE ROSTOV AGGLOMERATION

Mikhaylova T.A., Masharov K.S., Buraeva E.A., Kaschaeva E.A., Shiryayeva A.A.

Данная статья посвящена исследованию радионуклидного и элементного составов аэрозольной пыли г. Ростова-на-Дону и Ростовской области. Было установлено, что основным источником поступления ^{137}Cs , ^{232}Th и ^{40}K в атмосферу является ветровой подъем пыли с подстилающей поверхности. При проведении измерений на гамма-спектрометре была замечена тенденция увеличения удельной активности ^{137}Cs , при уменьшении размера частиц. Показано, что максимальная концентрация ^{226}Ra зафиксирована в атмосферных аэрозолях и обусловлена сжиганием углеводородов.

Ключевые слова: радионуклиды, атмосферные аэрозоли, атмосферная пыль, удельная активность, элементы.

Введение. Человечество в своей обычной жизни сталкивается с большим разнообразием аэрозольных систем – одних из важнейших компонентов атмосферы, которые активно участвуют в формировании различных процессов в атмосфере. Основным резервуаром и переносчиком естественных и искусственных радионуклидов в приземной атмосфере являются атмосферные аэрозоли. В последние годы из-за изменений климата Земли, растущего влияния деятельности человека на окружающую среду, изучение состава атмосферы и, конкретно, атмосферных аэрозолей и аэрозольной пыли, приобретает все большее значение. Однако положение аэрозолей в экосистеме все еще довольно сильно недооценивается.

Работа посвящена исследованию элементного и радионуклидного составов атмосферной пыли в условиях крупного промышленного города на примере Ростова-на-Дону в условиях сухих степей и умеренно-континентального климата.

Материалы и методы. Отбор проб атмосферной пыли проводился на крыше физического факультета ЮФУ (КФФ) и на крыше НИИ физики ЮФУ (КИФ) на высоте 15 м и 46 м соответственно, а также вдоль трасс Ростовской агломерации. Полученные образцы сухой пыли, при помощи колонки сит, были разделены на пять фракций: 2 мм - 1 мм; 1 мм - 0,5 мм; 0,5 мм - 0,25 мм; 0,25 мм - 0,063 мм; менее 0,063 мм.

Элементный состав отобранных образцов определяли методом рентгенофлуорисцентного анализа, с использованием спектрометра на основе полного внешнего отражения РФС-001, а радионуклидный состав атмосферной пыли измерения на сцинтилляционном гамма-спектрометре «Прогресс-гамма».

Для отбора проб атмосферных аэрозолей (АА) использовали фильтровентиляционную установку (ФВУ) на базе канального электровентилятора с фильтрами из ткани Петрянова [1].

Содержание радионуклидов в атмосферных аэрозолях определяли гамма-спектрометрическим методом радионуклидного анализа. Использовали спектрометр гамма-излучения с GeHP-детектором (модель 7229N-7500sl-2520, фирмы Canberra) и набор счетных геометрий «фильтр» (диск высотой $h=7\text{мм}$, диаметром 50мм, $V=0,015\text{л}$). [2]

Результаты исследований. Контроль загрязненности атмосферы радионуклидами проводился с помощью индекса загрязненности атмосферы (ИЗА, от. ед.). $\text{ИЗА} = \frac{A}{\text{ДОА}}$, где A – объемная активность радионуклида в атмосфере, ДОА – допустимая объемная активность радионуклида [3].

Таблица 1

Индекс загрязненности атмосферы

Радионуклид	Объемная активность, мкБк/м ³			ДОА, Бк/м ³	ИЗА
	Минимум	Максимум	Среднее		
^{137}Cs	0,07	4,21	1,34	$1,7 \cdot 10^3$	$1,33 \cdot 10^{-07}$
^{40}K	8,12	104,13	39,9	$3,8 \cdot 10^3$	$1,48 \cdot 10^{-06}$
^{226}Ra	2,52	21,73	11,15	2,5	$4,48 \cdot 10^{-04}$
^{232}Th	0,49	11,03	4,21	0,19	$1,22 \cdot 10^{-03}$

Исходя из полученных уровней ИЗА, можно сделать вывод, что ^{137}Cs и ^{40}K относится к группе 1 – низкий уровень загрязнения ($<10^{-4}$), а ^{226}Ra и ^{232}Th к группе 2 – повышенный уровень загрязнения ($10^{-4} - 10^{-2}$)

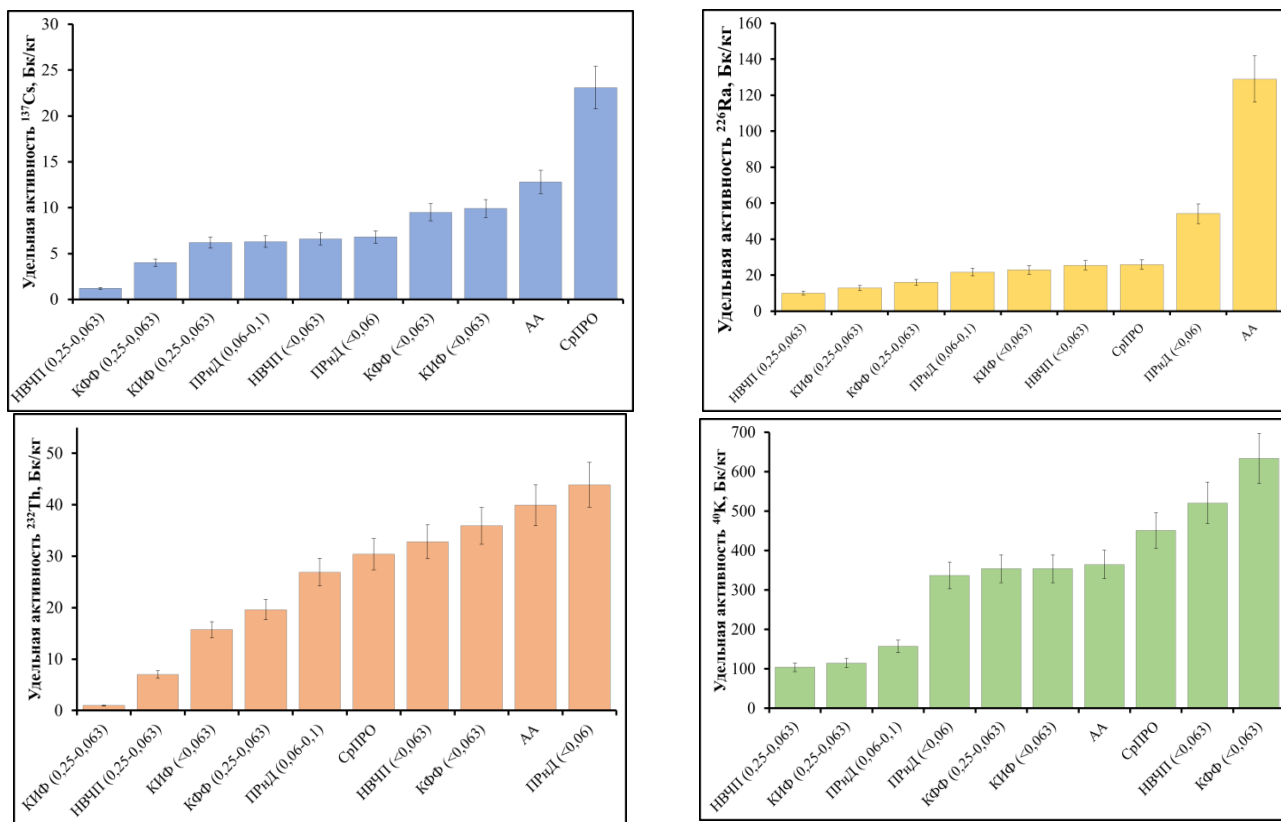


Рис. 1. Распределения удельной активности ^{137}Cs , ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K в атмосферных аэрозолях, атмосферной пыли в почвах 0-10 см.

Из рис. 1 следует, что распределение искусственного ^{137}Cs в АА и фракциях атмосферной пыли сопоставимы в пределах погрешности, со средним значением 7,8 Бк/кг. В большинстве случаев, перенос радионуклида происходит в мелких фракциях. Наибольшее содержание ^{137}Cs в почвах. Цезий – это активный, щелочной металл, легко растворимый в воде, а отбор проб проводился в засушливый период времени, за счет миграции вверх по почвенному профилю ^{137}Cs сосредотачивается в верхнем 0-10 см слое почв.

Содержание ^{226}Ra и ^{232}Th в почвах и пыли близко, и в среднем составляет 23 Бк/кг и 25 Бк/кг соответственно. Такое высокое содержание радия в атмосферных аэрозолях может быть связано с тем, что данный радионуклид также поступает в атмосферу с ветровым подъемом пыли с подстилающей поверхности. Однако в АА концентрация радия в несколько раз больше, 129 Бк/кг. Такое поведение говорит о том, что существуют техногенные источники загрязнения. К возможным источникам радионуклидов в АА можно отнести автотранспорт и продукты сжигания угля. Особое внимание хочется заострить внимание на Новочеркасской ГРЭС, которая находится на северо-востоке от города Ростов-на-Дону.

Наибольшая активность ^{40}K обнаружена в почвах, мелких фракциях пыли и АА, со средним значением 430 Бк/кг. ^{40}K входит в состав природного калия и является одним из самых распространенных элементов, поэтому его активность выше по сравнению с другими радионуклидами и для Ростовской области характерно его концентрация около 300-500 Бк/кг. В пределах города источниками поступления данного радионуклида могут быть разные конструкционные материалы. Также для части почв Ростовской области характерно засоление, не смотря на то, что засоление в основном происходит натриевыми и магниевыми солями (NaCl и MgCl_2), также присутствует достаточное количество KCl .

В регионах, с развитой промышленностью и транспортом, в атмосфере находятся значительные количества ионов металлов. В общей эмиссии пыли топливно-энергетическая промышленность дает около 60% пыли. На рис. 2 представлен сравнительный анализ процентного содержания химических элементов в пыли в г. Новочеркасске и г. Ростове-на-Дону, размер частиц менее 63 мкм. Данные пробы очень близки по соотношению элементов. Во всех пробах обнаружено более 50% железа, большое содержание кальция до 13 %, цинка до 6%, калия до 2 % и стронция 1-2 %.

Вместе с воздухом, которым мы дышим, суспендированная в нем пыль попадает в организм человека и оказывает влияние на различные процессы жизнедеятельности. Так, например, цинк и марганец оказывает пагубное влияние на

кровеносную, нервную, дыхательную и пищеварительную систему. А большое содержание железа в организме может вызвать проблемы с пищеварением, а также повышается риск онкологических заболеваний.

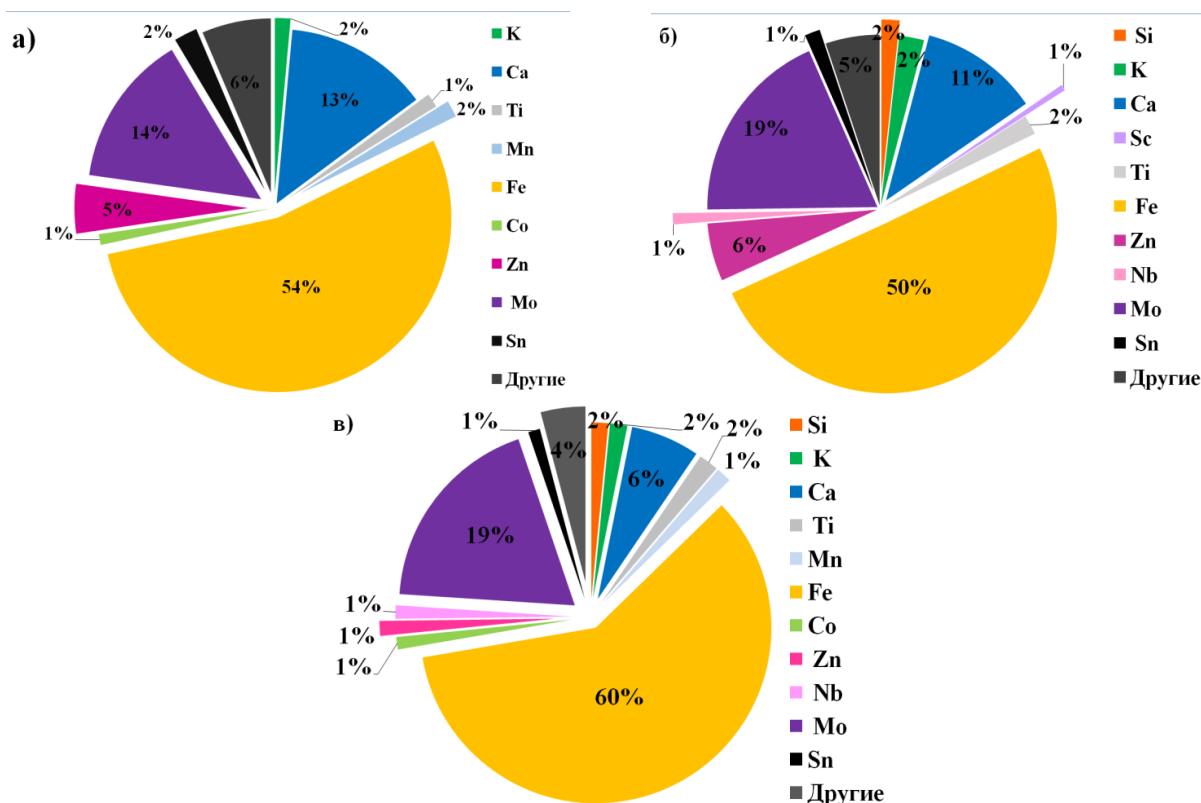


Рис. 2. Элементный состав атмосферной пыли с крыши ННУ физики Южного федерального университета (а), с крыши физического факультета Южного федерального университета (б), г. Новочеркасск (в) (фракция <0,063 мм)

Выводы. В данной работе проведен анализ особенности распределения радионуклидов в атмосферной пыли Ростовской агломерации. Основным источником ^{137}Cs , ^{232}Th и ^{40}K в атмосфере является ветровой подъем.

Наибольшее содержание ^{137}Cs , ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K в образцах атмосферной пыли было обнаружено во фракциях пыли менее 63 мкм, 10 Бк/кг, 54 Бк/кг, 44 Бк/кг, 634 Бк/кг соответственно.

В ходе рентгенофлуоресцентного анализа в образцах были обнаружены различные элементы. Чаще всего в пробах встречаются такие элементы как: Fe, Si, Al, Sn, Ni, Cu, Mn, Co, Zn.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032) / (БА30110/20-3-07ИФ).

Литература

1. Buraeva E. A., Davydov M. G., Zorina L. V., Stasov V. V. Components OF The Background OF Ge(Li) And Ge Detectors In Passive Shielding // *Atom. Ener.* 2007. V. 103, №. 5. P. 895-900.

2. Bodrov I. V., Buraeva E. A., Davydov M. G., and Mareskin S. A. Instrumental Determination Of Uranium And Thorium In Natural Objects // *Atom. Ener.* 2004. V. 96, №. 4. P. 246-249.

3. Михайлова Т.А., Кашаева Е.А., Машаров К.С., Буряева Е.А., Попов В.Ю., Вербенко И.А. Влияние климатических факторов на радионуклидный состав атмосферных аэрозолей в условиях г. Ростова-на-Дону // *Статья. Оптика атмосферы и океана.* – 2020. – 33. – №10. – С. 762–766.

References

1. Buraeva E. A., Davydov M. G., Zorina L. V., Stasov V. V. Components OF The Background OF Ge(Li) And Ge Detectors In Passive Shielding // *Atom. Ener.* 2007. V. 103, №. 5. P. 895-900.

2. Bodrov I. V., Buraeva E. A., Davydov M. G., and Mareskin S. A. Instrumental Determination Of Uranium And Thorium In Natural Objects // *Atom. Ener.* 2004. V. 96, №. 4. P. 246-249.

3. Mikhailova T. A., Kaschaeva E. A., Masharov K. S., Buraeva E. A., Popov Yu. V., Verbenko I. A. Climatic Factors of the Radionuclide Composition of Atmospheric Aerosols in Rostov-on-Don. // *Atmospheric and Oceanic Optics.* – 2021. – Vol. 34. – № 1. – P. 14–18.

**Mikhaylova T.A., Masharov K.S., Buraeva E.A.,
Kaschaeva E.A., Shiryayeva A.A.**
**RADIONUCLIDE AND ELEMENTAL COMPOSITIONS
OF AEROSOL DUST IN THE ROSTOV
AGGLOMERATION**

This article is devoted to the study of the radionuclide and elemental compositions of aerosol dust in Rostov-on-Don and the Rostov region. It was found that the main source of ^{137}Cs , ^{232}Th and ^{40}K entering the atmosphere is wind-driven dust lifting from the underlying surface. When performing measurements on a gamma-ray spectrometer, a tendency was observed to increase the specific activity of ^{137}Cs , with a decrease in the particle size. It is shown that the maximum concentration of ^{226}Ra is recorded in atmospheric aerosols and is caused by the combustion of hydrocarbons.

Keywords: radionuclides, atmospheric aerosols, atmospheric dust, specific activity, elements.

Михайлова Татьяна Андреевна, н.с. НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону.
E-mail: tatmihaylova@sfedu.ru

Mikhailova Tatyana Andreevna, research associate of the Research Institute of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don.

Машаров Кирилл Сергеевич, студент 4 курса физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону
E-mail: masharovkirill@gmail.ru

Masharov Kirill Sergeivich, fourth year student of Faculty of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Бураева Елена Анатольевна, к.х.н., доцент, в.н.с. НИИ физики Южного федерального университета г. Ростов-на-Дону.
E-mail: buraeva_elena@mail.ru

Buraeva Elena Anatolievna, PhD in Chemistry, associate professor, leading researcher of the Research Institute of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don.

Кашаева Елизавета Александровна, аспирант 1 года обучения физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.
E-mail: lizakashaeva1997@gmail.com

Kashchaeva Elizaveta Alexandrovna, 1st-year postgraduate student of Faculty of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Ширяева Анастасия Андреевна, студент 4 курса физического факультета Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.
E-mail: anastasia.shiryayeva00@mail.ru

Shiryayeva Anastasia Andreevna, fourth year student of Faculty of Physics of South Federal University, Rostov-on-Don.

Рецензент: Кривоколыско Сергей Геннадиевич, д.х.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 15.04.2021

УДК 537.6/8

МАГНИТНЫЕ ЖИДКОСТИ: СВОЙСТВА И ОСНОВНЫЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ

Алиев И. М., Дудаева М.А., Сайд-Ахматова Ф.С., Хапаева М. С.

MAGNETIC FLUIDS: PROPERTIES AND MAIN APPLICATIONS

Aliev I. M., Dudaeva M. A., Sayd-Akhmatova F S., Khapaeva M. S.

В данной статье представлен краткий обзор основных методов получения магнитных жидкостей, их свойств. Также в работе приводится перечень областей науки, техники и медицины, где магнитные жидкости уже нашли достаточно широкое применение

Ключевые слова: магнитная жидкость, феррожидкость, ферромагнетик, поверхностно-активные вещества, магнитное поле, намагниченность.

Введение. Как знаем мы в основном магнитные свойства имеют твердые тела. А есть ли и возможно ли создание жидких тел с такими же магнитными характеристиками? И ответ на этот вопрос однозначный, да возможно! Таковым можно назвать ферромагнитную жидкость, которая обладает магнитными свойствами, находясь в магнитном поле.

На сегодняшний день исследованием магнитных жидкостей занимаются такие страны как Японии, Франции, Германии, и др.

Несомненно, актуальным вопросом является проблема получения и применение магнитных жидкостей в разных областях науки. Также остается однозначным и открытым вопрос о механизме электропроводности магнитной жидкости. Неопределенным является и вопрос возникновения анизотропии электропроводности магнитной жидкости при воздействии на неё однородного и неоднородного магнитного поля. Наряду с исследованием поведения магнитной жидкости в магнитном поле, интерес представляет изучение поведения в электрическом и магнитном полях композиционных сред – магнитных жидкостей с немагнитным наполнителем.

Применение магнитных жидкостей целевого назначения в промышленности и медико-биологических исследованиях предусматривает изучение особенностей их взаимодействия, как с поверхностью исполнительных механизмов технических устройств, так и с поверхностью клетки тканей живых организмов. Они представляют большой интерес для специалистов в физике, химии, технике, биологии и медицине.

Свойства магнитной жидкости определяются совокупностью характеристик, входящих в нее

компонентов: твердой фазы, жидкости-носителя и стабилизатора [1].

Получение магнитных жидкостей.

Магнитная жидкость – это высокодисперсная система ферромагнитных или ферримагнитных частиц в жидкой среде – основе (органические и неорганические жидкости, вода). Каждая частица покрыта слоем ПАВ (ПАВ), который изолирует частицы друг от друга и не дает им слипаться и образовывать слишком тяжелые скопления (рис. 1). В результате получается стабильное и очень чувствительное к внешнему магнитному полю двухфазное жидкое тело, свойства которого близки к свойствам однородной жидкости. Обладая свойствами жидкого ферромагнетика, он позволяет по-новому решить многие научно-технические и медико-биологические проблемы [2].

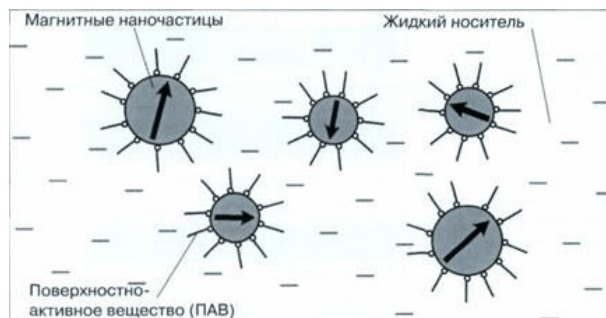


Рис. 1. Схема строения магнитных жидкостей: характерный размер (2–20 нм) магнитных наночастиц, покрытых поверхностно-активным покрытием, соответствует его однодоменному состоянию намагниченности, обозначенному стрелками

Как было сказано выше, магнитная жидкость или ферромагнитная жидкость представляет собой устойчивую и не выпадающую в осадок с течением времени взвесь дисперсных наноразмерных магнитных частиц в жидкости, притягиваемую магнитом, иными словами, жидкость, реагирующая на магнитное поле, как это наглядно представлено на рис. 2.

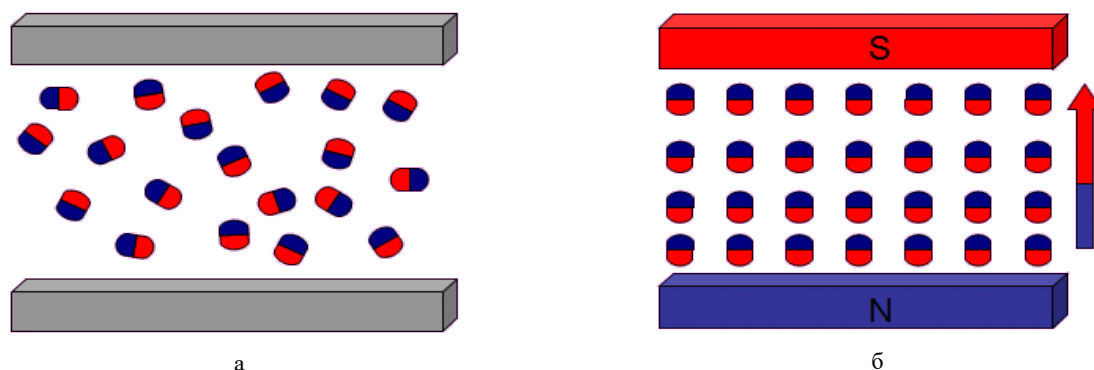


Рис. 2. Положение магнитных частиц в жидкости-носителе:
а) в отсутствии магнитного поля; б) при воздействии магнитного поля

Однако, жидкость может утратить свою текучесть в сильных магнитных полях, переходя в твёрдое агрегатное состояние. Основными жидкостями для технического использования магнитных жидкостей являются керосин и жидкие технические масла, для медико-биологических применений - разные виды органических жидкостей.

Твердая фаза магнитных жидкостей состоит из нанометровых кластеров (5–10 нм) магнетита, гематита, которые имеют примеси железа, стабилизированные в полярной (водной или спиртовой) или неполярной (углеводороды и силиконы) средах с помощью поверхностно-активных веществ. В качестве поверхностно-активных веществ (ПАВ) применяются полиакриловая кислота, полиакрилат натрия, соевый лецитин [3].

Методик получения магнитных жидкостей огромное количество. Но некоторые из них в основе своем заложен принцип размельчения таких металлов как железа, никеля и др. металлов до размеров кластера при помощи мельницы и искрового разряда [4].

Главную составляющую магнитной жидкости – магнетит (Fe_3O_4), получают методами диспергирования или конденсации: электролитической, вакуумной и химической [5].

Метод диспергирования. Из множества существующих методов раздробления твердых частиц продуктивным оказался механический метод для того чтобы получить магнитную жидкость. Нужно заметить, что первым магнитную жидкость получил С. Пейпеломиз (НАСА) в 1965 году механическим дроблением магнетита шаровой мельницей [6]. Полученная этим методом магнетитовая пудра смешивалась с жидкой основой (керосином) и поверхностно-активным веществом (олеиновой кислотой), содержание которого составляло 10-20% объёма основы. Такое соотношение между магнетитом и поверхностно-активным веществом создавало благоприятные условия для получения мономолекулярного защитного слоя на каждой частице, средний размер

которой в конечном продукте составлял около 10 нм.

Методы конденсации. Первым был развит *карбонильный метод*, основанный на термическом разложении карбониллов металлов. Пары карбонила металла, испаряющегося в специальном резервуаре, разбавленные в целях безопасности инертным газом (например, азотом или аргоном), поступали в реактор, где при повышенной температуре (порядка 250 °С) происходило разложение металла. При этом атомы металла объединялись в частицы, а летучие продукты разложения конденсировались в специальном аппарате. Изменяя условия протекания процесса в реакторе (температуру, соотношение растворителя и ПАВ, их состав) можно было получать частицы металлов размером от 2 до 30 нм. Тома получил магнитные жидкости путём разложения пентакарбонила железа $\text{Fe}(\text{CO})_5$, дикобальтокарбонила и других [7]. Кроме того, частицы металлов, как правило, имели несферическую форму, что приводило к усилению сил притяжения частиц (по сравнению с притяжением сферических частиц), то есть требовало дополнительного увеличения слоя ПАВ.

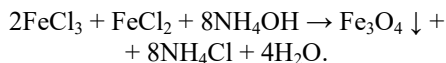
Методом *электролитической конденсации* можно получать частицы металла различной дисперсности в зависимости от скорости вращения катода, глубины его погружения, концентрации электролита, температурного режима, материала катода. Этим методом были получены магнитные жидкости с частицами кобальта и магнетита, имеющие намагниченность насыщения до 10 кА/м [8].

Методы *вакуумной конденсации* до последнего времени не использовали для получения магнитных жидкостей ввиду сложности их реализации. Однако развитие вакуумной технологии позволило добиться хороших результатов, объединив вакуумное испарение металлов с их конденсацией в жидкости.

Метод *химической конденсации* заключается во взаимодействии солей Fe^{2+} и Fe^{3+} с гидроксидом аммония (NH_4OH). Известно, что соли Fe^{2+} и Fe^{3+} возможно получить из железосодержащих отходов (ЖСО) металлургии: пыль, шламы газоочистных

сооружений агломерационных фабрик, сталеплавильных и доменных производств.

Замена гидроксида натрия (NaOH) на гидроксид аммония (NH₄OH, 25%-ный) позволила создать более мягкие условия соосаждения солей, что способствовало образованию в ходе реакции осадка FeO•Fe₂O₃ с определённым соотношением оксидов:

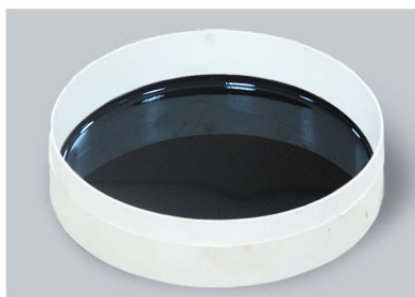


Образующийся в ходе реакции хлорид аммония удаляли из осадка многократной промывкой дистиллированной водой, что предотвращало коагуляцию частиц магнетита и обеспечивало в дальнейшем взаимодействие молекул стабилизатора с частицами магнетита. Кроме того, использование гидроксида аммония позволило

проводить реакцию соосаждения при температуре 25–40⁰С. Характерной особенностью процесса явилось требование полуторного избытка основания (по объёму или концентрации) – только в этом случае происходило полное осаждение образующихся частиц магнетита.

Свойства магнитных жидкостей.

Особенность магнитной жидкости связана тем что ее текучесть сочетается с намагниченностью. У них достаточно высокая магнитная восприимчивость, чтобы на поверхности жидкости с парамагнитными свойствами возникла регулярная структура из складок. Если приложить к магнитной жидкости магнитное поле, то утонувшие тела начинают всплывать. Чем, сильнее поле, тем более тяжелые тела поднимаются на поверхность [9].



а



б

Рис. 3. Ферромагнитная жидкость: а) отсутствии магнитного поля; б) при магнитном поле

При приложении к магнитной жидкости магнитного поля у неё изменяется вязкость. Вязкость – это внутреннее трение жидкости, препятствующее соседним слоям двигаться с различной скоростью. В обычном состоянии магнитная жидкость растекается по поверхности, (её вязкость в 10 раз больше, чем у молока, и в 10 раз меньше, чем у масла), а при приложении магнитного поля вязкость МЖ резко возрастает. Наглядно это демонстрируется тем, что жидкость не растекается вдоль магнита, а образуются «шпицы» вдоль линий магнитного поля.

Использование магнитных жидкостей.

Использование магнитной жидкости позволяет создать малый момент трения, что увеличивает срок службы деталей на 5-10 лет, отсутствие износа и возможность подпитки уплотняющего кольца жидкости без разбора конструкции узла. Основной проблемой из-за которой нет возможности использовать в повсеместное применение является стоимость магнитных жидкостей [10].

Высокий потенциал использования магнитные жидкости нашли в современных областях науки и техники. На их основе ведутся разработки демпферов, датчиков, узлов трения и др., методик и программ расчета и оптимизации магнитной системы различных магнитожидкостных устройств.

В медицине, да и в биологии магнитные жидкости используют для диагностики и лечения разных заболеваний. Феррожидкости в данный момент изучаются для лечения опухолей. Противоопухолевые препараты, к примеру, вредны для здоровых клеток. Но если их смешать с магнитной жидкостью и ввести в кровь, а у опухоли расположить магнит и магнитную жидкостью вместе с лекарством сосредоточиваются у пораженного участка, не вредя организму в целом, а именно той пораженной области, где это необходимо [11].

В последнее время особый интерес исследователей представляет возможность очистки сточных вод от нефтепродуктов при помощи магнитных жидкостей. В основе данного процесса лежит принцип омагничивания нефтепродуктов путем добавления МЖ в сточные воды и последующего отделения омагниченных нефтепродуктов специальными магнитными системами [12].

Магнитные жидкости постепенно начинают использоваться в космической и авиационной промышленности для облегчения перемещения ракетного топлива в условиях микрогравитации.

В химическом машиностроении на основе применения магнитных жидкостей в качестве рабочего тела начали создавать новые машиностроительные конструкции. Например,

вместо широко используемых редукционных пневмоклапанов с чувствительным элементом и регулирующим органом в виде подпружиненной мембраны, используют пневмоклапаны, в которых роль этих элементов выполняет магнитная жидкость, расположенная в канале переменного сечения и находящаяся в зоне действия регулируемого магнитного поля. Исключение из конструкции механических подвижных элементов повышает надёжность редуктора [10].

Магнитные жидкости становятся все более популярными в качестве художественной среды. В некоторых художественных и научных музеях есть специальные экспонаты, посвященные этим удивительным жидкостям [11].

Одной из важных отраслей, где, возможно в будущем, при качественной разработке методов и конструкций могут найти применение магнитные жидкости, является производство электроэнергии. На данное время имеются прототипы этого источника, а именно катушка, в которой находится ампула с магнитной жидкостью. Идея данного устройства - преобразовать энергию колебательного движения данной системы в электрическую. Минимальное колебание приводит к перетеканию жидкости, и это приводит к изменению магнитного потока. При изменении числа линий магнитного потока, пронизывающих площадь, ограниченную витками катушки, в ней наводится ЭДС индукции. Катушка соединена с накопителем энергии (в данном случае - с конденсатором) через выпрямитель. Развиваемое напряжение зависит от числа витков катушки [12].

Выводы. Таким образом, получение и исследование свойств магнитных жидкостей является достаточно актуальным, прежде всего, с практической точки зрения. При соответствующем подходе можно найти значительное количество областей, где могут использоваться магнитные жидкости с их уникальными физическими свойствами. Прежде всего, это медицина, где возможно найти наиболее оптимальный и неинавaziный метод борьбы с онкологическими заболеваниями.

А потом в будущем, может кто-нибудь придумает такое применение магнитной жидкости, которое станет толчком к новым открытиям и преобразованию мира!

Литература

1. Состав и свойства ферромагнитной жидкости. Эл. ресурс: https://studopedia.ru/11_69968_sostav-i-svoystva-ferromagnitnoy-zhidkosti.html.
2. Магнитные жидкости. Эл. ресурс: <https://extxe.com/14498/magnitnye-zhidkosti/>
3. Каитов М.Р., Конева А.В. Магнитные жидкости. Изготовление магнитной жидкости / В сбор.: Студенческая наука в XXI веке. - 2016. - С. 148-155.
4. Сенатская И., Байбуртский Ф. Магнитная жидкость // Химия и химик. - 2009. - № 3. - С. 93-100.

5. Байбуртский Ф. Магнитные жидкости: способы получения и области применения. Эл. ресурс: <http://magneticliquid.narod.ru/authority/008.htm>

6. Papell S. S. Low viscosity magnetic fluid obtained by the colloidal suspension of magnetic particles. Patent USA № 3215572, USA Cl. 149 - 2. 1965.

7. Thomas J. R. // J. Appl. Phys., 1966, V. 37, P. 2914 - 2916.

8. Windle P. L., Popplewell J., Charles S. W. // IEEE Trans. Mag., 1975, MAG-11, P. 1367 - 1370.

9. Мартиров И.В. Свойства магнитной жидкости // Международный школьный научный вестник. - 2016. - № 1. - С. 142-149.

10. Баглаева М.С., Ушаков А.Г. Изучение способов ресурсосберегающего получения магнитной жидкости для применения ее в машиностроении / «Инновационные технологии и экономика в машиностроении»: VI Международная научно-практическая конференция с элементами научной школы. - 2015. - С. 385-386.

11. New-Science.ru <https://new-science.ru/15-interesnyh-faktov-o-magnitnyh-zhidkostyah/>

12. Контарев А.В., Стадник С.В., Лешуков В.А. Применение магнитных жидкостей // Успехи современного естествознания. - 2006. - № 10. - С. 67.

References

1. Composition and properties of ferromagnetic liquid. El. resource: https://studopedia.ru/11_69968_sostav-i-svoystva-ferromagnitnoy-zhidkosti.html.

2. Magnetic liquids. El. resource: <https://extxe.com/14498/magnitnye-zhidkosti/>

3. Kaitov M. R., Koneva A.V. Magnetic liquids. Production of magnetic liquid / In collection: Student science in the XXI century. - 2016. - p. 148-155.

4. Senatskaya I., Bayburtsky F. Magnetic liquid / / Chemistry and Chemists. - 2009. - No. 3. - pp. 93-100.

5. Bayburtsky F. Magnetic liquids: methods of production and areas of application. El. resource: <http://magneticliquid.narod.ru/authority/008.htm>

6. Papell S. S. Low viscosity magnetic fluid obtained by the colloidal suspension of magnetic particles. Patent USA № 3215572, USA Cl. 149 - 2. 1965.

7. Thomas J. R. // J. Appl. Phys., 1966, V. 37, P. 2914 - 2916.

8. Windle, P. L., J. Popplewell, Charles S. W. // IEEE Trans. Mag., 1975, MAG-11, P. 1367 - 1370.

10. Martirov I. V. Properties of magnetic fluid // International School Scientific Bulletin. - 2016. - No. 1. - pp. 142-149.

11. Baglaeva M. S., Ushakov A. G. Study of methods of resource-saving production of magnetic fluid for its application in mechanical engineering / "Innovative technologies and economics in mechanical engineering": VI International scientific and practical conference with elements of a scientific school. - 2015. - p. 385-386.

12. New-Science.ru <https://new-science.ru/15-interesnyh-faktov-o-magnitnyh-zhidkostyah/>

13. Kontarev A.V., Stadnik S. V., Leshukov V. A. Application of magnetic liquids // Achievements of modern natural science. - 2006. - No. 10. - p. 67.

Aliev I. M., Dudaeva M. A., Sayd-Akhmatova F S., Khapaeva M. S.

MAGNETIC FLUIDS: PROPERTIES AND MAIN APPLICATIONS

This article provides a brief overview of the main methods for obtaining magnetic liquids and their properties.

The paper also provides a list of areas of science, technology and medicine where magnetic fluids have already found a fairly wide application.

Keywords: magnetic liquid, ferrofluid, ferromagnet, surfactants, magnetic field, magnetization.

Дудаева Малика Ахметовна, младший научный сотрудник лаборатории «Металлов сплавов и композиционных материалов» ФБГУН «Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН»

Dudaeva Malika Akhmetovna, Junior Researcher, Laboratory of Metals, Alloys and Composite Materials, Federal State Budgetary Scientific Institution, Integrated Research Institute named after H.I. Ibragimov RAS "

Алиев Ислам Магомедович, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории «Металлов сплавов и композиционных материалов» ФБГУН «Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН». Доцент кафедры «Физическая электроника», ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет» г. Грозный.

Aliev Islam Magomedovich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Laboratory of Metals, Alloys and Composite Materials, Federal State University of Science and Technology; H.I. Ibragimov RAS ". Associate Professor of the Department of Physical Electronics, Chechen State University, Grozny.

Сайд-Ахматова Фатима Сайд-Алиевна, старший лаборант лаборатории «Металлов сплавов и композиционных материалов» ФБГУН «Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН»

Said-Akhmatova Fatima Said-Alievna, Senior Laboratory Assistant of the Laboratory of Metals, Alloys and Composite Materials, FBGUN Comprehensive Research Institute named after H.I. Ibragimov RAS "

Хапаева Мадина Сайд-Салаховна, младший научный сотрудник лаборатории «Металлов сплавов и композиционных материалов» ФБГУН «Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН»

Khapaeva Madina Said-Salakhovna, Junior Researcher, Laboratory of Metals, Alloys and Composite Materials, Federal State University of Science and Technology, Integrated Research Institute named after H.I. Ibragimov RAS "

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 14.04.2021

УДК533.9.072:621.385.69

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ВЧ И СВЧ ПЛАЗМЕННОГО ТЕРМОЛИЗА ТВЕРДЫХ БЫТОВЫХ ОТХОДОВ

Сорока Н.В., Корсунов К.А.

SPECIFIC FEATURES APPLICATION OF THE HF AND MICROWAVE PLASMA THERMOLYSIS OF SOLID HOUSEHOLD WASTE

Soroka N.V., Korsunov K.A.

В работе проанализированы технологии и методы плазменной переработки твердых бытовых отходов, выявлены факторы, которые должна иметь эффективная технология утилизации ТБО. Рассмотрены характеристики и конструкции существующих лабораторных и промышленных установок плазменного термоллиза ТБО, выявлены закономерности плазменной технологии утилизации отходов. Предложен и обоснован метод использования СВЧ-плазматрона в качестве основы в процессах плазменной технологии утилизации техногенных отходов.

Ключевые слова: отходы, ТБО, утилизация, плазма, технология, переработка, мусор, реактор, генератор, пиролиз.

Введение. Решение проблемы утилизации твердых бытовых и техногенных отходов уже на протяжении длительного времени является актуальной природоохранной задачей как для крупных городов, так и для мало урбанизированных территорий. В России ежегодно вырабатывается около 6,2 млрд тонн различных видов отходов.

Среднестатистический современный городской житель производит ежедневно более 1 кг твердых бытовых отходов (ТБО). Объем ежегодно производимых твердых бытовых отходов на душу населения в России составляет порядка 450 кг, тогда как в США данный показатель еще значительно выше – 750 кг на человека. Общее количество производимого в России ТБО составляет более 70 млн т/год. Перерабатывается всего около 6-7% мусора, остальное подлежит захоронению. В то время как городские агломерации наиболее развитых стран мира имеют резервы мусороперерабатывающих мощностей от 40 до 100% от производимых объемов [1]. Если не использовать альтернативные технологии утилизации ТБО, и не наращивать мощности переработки и уничтожения мусора, в ближайшие 5-7 лет придется вдвое увеличить земельные площади для захоронения твердых бытовых отходов. На сегодняшний день, зарубежные страны уже взяли курс на устранение проблем утилизации отходов, и повсеместно внедряют проекты мусороперерабатывающих заводов, при этом отказываясь от свалок. Открытое складирование

ТБО вызывает загрязнение почвы и залегающих под ней подземных вод, что несет за собой выведение земли из сельскохозяйственного использования, выбросы большого количества опасных для атмосферы Земли газов, а также уменьшение рекреационного потенциала земельных ресурсов.

В связи с вышеизложенным имеется необходимость рационализации способов взаимодействия с отходами, среди которых ключевую роль играют следующие факторы, которыми должна обладать технология утилизации ТБО:

- максимально уменьшить объем отходов, требующих захоронения на специальных полигонах, и максимально уменьшить объем уже захороненных отходов, разлагающихся на местах захоронений и наносящих урон окружающей среде;
- иметь достаточную рентабельность, небольшие конструкционные и эксплуатационные затраты, небольшую энергоемкость;
- отвечать современным технологическим, а главное экологическим требованиям;
- иметь на выходе процесса вторичное минеральное или газовое сырье, которое можно использовать в продуктивных целях, и которое будет покрывать затраты на поддержание мусороперерабатывающей деятельности.

Наиболее рентабельными являются технологии, использующие термические и биологические методы переработки и уничтожения ТБО, с одновременным получением полезной энергии [2]. В европейских странах в начале текущего столетия обширное распространение получили мусороперерабатывающие заводы, использующие технологию высокотемпературного сжигания ТБО, однако в 10-е годы текущего столетия выяснилось, что в процессе сжигания отходов выделяются крайне опасные для экологии вещества: диоксины и фураны, которые в свою очередь требуют специальной, весьма дорогостоящей, технологии очистки. В ходе решения данной проблемы было установлено, что уничтожение ТБО возможно в плазматронах - генераторах термической плазмы. Использование

плазмотронов позволяет не только производить аннигиляцию отходов безопасно для окружающей среды, но и получать вместе с этим полезную тепловую и электрическую энергию.

Основными методами высокотемпературной обработки ТБО являются:

- Инсинерация – процесс сжигания отходов в специальных печах при температуре 800–1200°C. Достоинства: применимость к любым отходам, отсутствие необходимости в предварительной сортировке и подготовке мусора. Полная стерилизация и уменьшение объема на 90%. Недостатки: образование новых отходов в процессе сжигания, выброс опасных газов, необходимость в создании сложных и дорогостоящих систем очистки газов. В России существуют инсинераторы моделей «Вулкан», «ИН», «ИУ» и пр.

- Пиролиз – процесс термического разложения органических соединений при недостатке кислорода при температуре 1200–1300°C. Достоинства: отсутствие диоксинов и фуранов при сжигании отходов, управляемость процесса. Недостатки: небольшая производительность установки (100–200 кг/ч). В России используются отечественная установка «ЭЧУТО» и установка французского изготовления «Мюллер».

- Плазменная технология – процесс высокотемпературной обработки с полным разложением отходов при 1300–1700°C. За счет высокой температуры, получаемой в плазмотроне, данный вид переработки позволяет уничтожать опасные и токсичные вещества, в том числе медицинские отходы. Достоинства: полная переработка любых видов мусора, небольшие габариты установок, уменьшение объема очищаемого газа и объемов очистительных конструкций, получение вторичного сырья (топливные газы и строительный шлак). Недостатки: высокие энергозатраты на поддержание процесса (0,5–20 кВт·ч/кг ТБО), увеличение концентрации тяжелых металлов в производимых в процессе плазменного сжигания газов, высокая стоимость обслуживания плазмотронов и мусороперерабатывающего реактора.

Основное преимущество плазменной технологии – ее универсальность, возможность утилизации любого вещества в твердом, жидком и газообразном состояниях. В связи с чем используя данную технологию можно одновременно перерабатывать разнообразные отходы техногенного происхождения: бытовые, биологические, органические. В процессе плазменной переработки отходов производится синтетический газ, в состав которого входят монооксиды углерода и водорода. Синтез-газ – это горючий газ, который может быть использован в качестве сырья для энергетики, для теплоснабжения строительных объектов или путем преобразования

тепловой энергии в электрическую, для повторного использования в реакторе плазменной утилизации.

Целью настоящей работы является исследование характеристик и конструкций установок плазменного термолитиза ТБО, изучение закономерностей плазменной технологии утилизации отходов, выявление возможностей и перспектив применения СВЧ-плазмотронов в процессах плазменной утилизации ТБО.

Проблема исследования. Основная проблематика термического уничтожения отходов заключается в отсутствии достаточной теоретической основы процессов. Методики проектного расчета установок термической обработки ТБО либо не обладают необходимой надежностью, либо и вовсе отсутствуют. Методы оценки технологической, экологической и экономической надежности плазменных технологий обработки также ненадежны или отсутствуют. Данный факт значительно снижает инвестиционную привлекательность направления утилизации ТБО. Вызвано это рядом причин, среди которых: нестабильный многокомпонентный состав отходов по качественным, гранулометрическим, физико-химическим и морфологическим свойствам [3]; сложность основных зависимостей, характеризующих термодинамику и кинетику процесса термолитиза ТБО (нелинейные функции 3 и более порядков) [4]; низкая конкурентоспособность применения вторичного сырья получаемого в ходе плазменной обработки ТБО, ввиду низкого качества получаемых продуктов [5].

Результаты исследований. *Общий принцип* плазменной обработки ТБО заключается в разложении с неполным окислением под воздействием температуры, водяного пара, кислорода и давления. Во избежание сгорания исходного сырья, существует потребность в контроле поступления окислителя – кислорода. Пиролиз отходов происходит при температурах порядка 700 К. На выходе из установки создается водородная смесь, монооксид углерода и примеси других горючих газов, которые и имеют название синтез-газ. Синтез-газ является топливом для электрогенераторов, сырьем для получения аммиака, метанола, высших спиртов, азотных удобрений, горючего и синтетического моторного масла.

На сегодняшний день в мире насчитывается ограниченное количество действующих установок плазменной переработки и уничтожения отходов, некоторые из которых предназначены также для других высокотехнологических процессов. Среди них:

Франция:

- Bordeaux - мусоросжигательный завод в Бордо, производящий витрификацию золы (муниципальные твердые отходы);

- Evroplasma – CHORPower, установка переработки ТБО в плазме.

Германия:

- Munster (Plasmoх) - уничтожение токсических химических веществ.

Швейцария:

- Muttentz (Plasmoх) - уничтожение опасных МГС отходов – Plasma AG;

- Zwiilag - уничтожение радиоактивных МГС отходов – Plasma AG.

США:

- Westinghouse Plasma Corp. (WPC) совместно с компанией Alter NRG (Канада): разработка плазменной установки для газификации ТБО производительностью 680 т отходов в сутки;

- PEPS I и PEPS II – 500 кВт; передвижная и стационарная установки, построенные для исследований лаборатории CERL в штатах Джорджия и Виржиния;

- MSE – устройство PODS/ARDEC, Hawthorne Ammo Depot, в штате Невада, для уничтожения боеприпасов;

– PET – компания, построившая аппарат для уничтожения химического оружия в штате Северная Каролина;

- PAWDS - научно-исследовательская лаборатория, плазменно-дуговая система уничтожения отходов на борту корабля авианосца. Прототип проекта разработан компанией Pyrogenesis в Канаде;

– Retek – плазменная установка на электрической дуге, мощностью 6,5 МВт применяемая для плавления титана и его сплавов.

Южно-Африканская Республика:

- плазмохимический реактор для уничтожения жидких промышленных отходов на основе ВЧ-плазмотрона;

- плазменная иммобилизация ядерных топливных отходов в ВЧФ-разряде. Разработка ТПУ, Томск.

Южная Корея:

- лабораторные плазмотермические установки, перерабатывающие медицинские отходы от мусороперерабатывающего завода в г. Инчон, совместно с Институтом теоретической и прикладной механики Сибирского отделения РАН, Новосибирск.

В России разработки в сфере плазменной технологии утилизации ТБО представлены [6] электродуговыми плазменными печами ИТ СО РАН г. Новосибирск и ИЭЭ РАН г. Санкт-Петербург (табл. 1). В технологии ИТ СО РАН, использующей пароводяной плазмотрон, получаемый газ оказывается значительно меньше балластного азота. В связи с чем, теплота сгорания синтез-газа на выходе получается в 1,5 раза выше, и такой газ является пригодным для электрических генераторов.

В США корпорация Westinghouse разрабатывает плазматроны, позволяющие уже сегодня производить переработку ТБО при температуре плазмы до 6273 К. Данные установки уже прошли тестирование в Японии, Канаде и Нидерландах.

Ведущая технология, по которой проектируются крупные предприятия по электродуговой плазменной переработке ТБО - технология плазменной газификации WPC [7]. Более 30 лет опытно-конструкторских и научно-исследовательских работ, а также свыше 500000 часов работы серийных плазменных устройств позволили компании WPC разработать данную технологию (рис. 1). Конечный продукт плазменной газификации по технологии WPC может быть различным, это может быть электроэнергия, жидкое топливо или пар.

Таблица 1

Сравнение плазменных технологий ИЭЭ РАН и ИТ СО РАН для переработки древесины

Параметры процесса	ИЭЭ РАН	ИТ СО РАН
Теплота сгорания сырья, МДж/кг	16	14,5
Затраты энергии, кВт·ч/кг	1,0	1,02
Температура плазмы, К	2220	2070
Общая калорийность синтез-газа с 1 кг сырья, МДж/м ²	15,28	17,15
Содержание горючих (H ₂ +CO) в газе, % об.	55,9	86,55
Теплота сгорания синтез-газа, МДж/м ³	6,16	9,8
Состав газа, % об.:		
водород (H ₂),	24,5	61,54
монооксид углерода (CO),	31,4	24,8
углекислый газ (CO ₂),	3,5	7,3
вода (H ₂ O),	4,9	-
азот (N ₂),	35,7	5,1
кислород (O ₂),	-	1,1
метан (CH ₄),	-	0,16
этан (C ₂ H ₆),	-	0,05

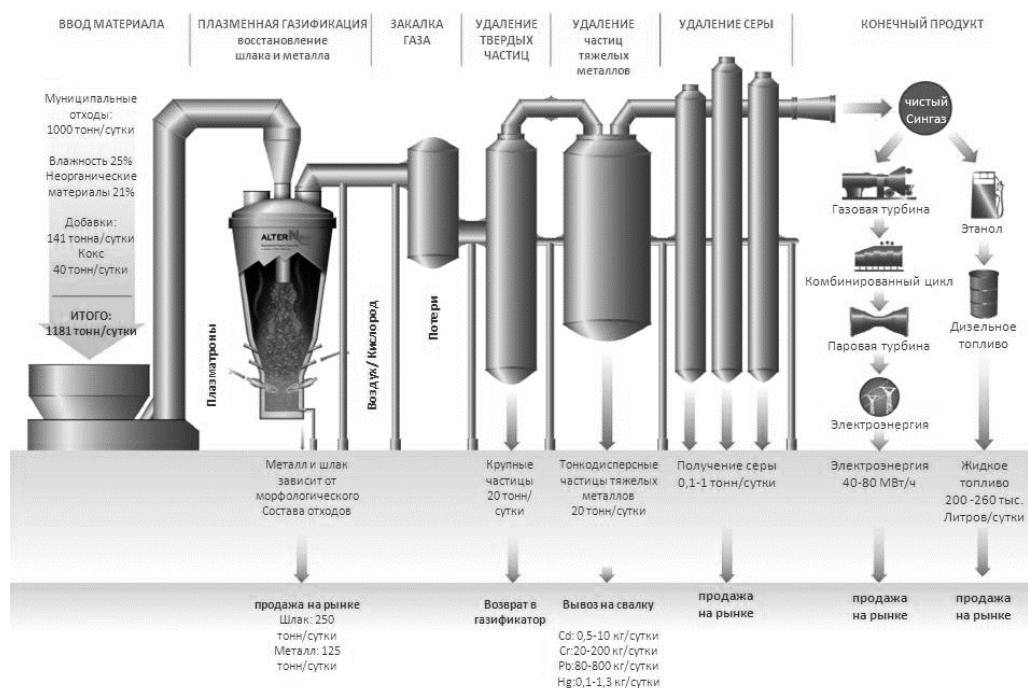


Рис. 1. Схема мусороперерабатывающей установки плазменной газификации WPC [7]

Установка плазменной газификации работает при температуре, превышающей 5500°C , гарантируя почти полное преобразование первичного сырья в синтез-газ [7]. Неорганические вещества выводятся в основании газификатора как инертный шлак, который остывает и превращается в безопасный продукт, который не выщелачивается и является пригодным для продажи, как наполнитель для строительного материала. Общее количество энергии, извлеченной из исходного сырья, которое перерабатывает газификатор, составляет примерно 80%. Из общего количества энергии, которая необходима для поддержания процесса газификации, на питание плазмотронов расходуется от 2 до 5%. Два типовых реактора-газификатора (ПРГ) G65 выполняют превращение органической составляющей подаваемой смеси опасных отходов в синтетический газ. Каждый реактор оборудован 6 плазмотронами «Marc 11», разработанными при поддержке Российского Курчатовского института. Диапазон мощности каждого плазмотрона составляет от 300 до 800 кВт. Плазмотроны работают в нормальных условиях при мощности 600 кВт, что в сумме дает 3,6 МВт. Запас мощности необходим для пусконаладочных работ, технического обслуживания и преодоления внешних ситуаций. Система плазмотронов используется для работы в непрерывном режиме в агрессивных средах. Для максимальной газификации отходов реакторы продуваются струями воздушной смеси с 95% содержанием кислорода. Получаемый на выходе синтез-газ проходит через системы охлаждения, очистки и удалений примесей.

Продуктивные показатели плазменной газификации по технологии WPC, рассчитанные компанией ТБК Инновации для комплекса по переработке отходов производства и потребления:

- Переработка промышленных и бытовых отходов: 1500 тонн в сутки
- Выработки и передача потребителям электроэнергии: 50 МВт/ч
- Производства стекловидного шлака для изготовления блоков утепления из минеральной ваты: >300 тонн в сутки
- Восстановление металлов: >150 тонн в сутки
- Производство серы: >1.5 тонны в сутки

В 2013 году в Израиле вблизи Кармизеля был реализован проект завода плазменной переработки твердых бытовых отходов – Environmental Energy Resources [8]. Во время запуска плазменной установки на первом в мире демонстрационном заводе по плазменной переработке ТБО, при монтаже плазмотронов с несколько отличающейся от спроектированной мощностью, случилось прожигание высокотемпературной футеровки реакторной камеры. Потому как на установке использовались плазмотроны со стационарным значением мощности и неизменяемой геометрией плазменного потока, то решение проблемы предупреждения прожигания футеровки в рамках имевшегося оборудования являлась фактически не решаемой. Так как в создавшихся условиях требовали замены либо плазмотроны, либо камера плазменной обработки, либо вся установка целиком. На сегодняшний день, информация о функционировании завода и компании отсутствует.

В России плазменную технологию переработки мусора планирует использовать в Московской области ЗАО «ТБК Инновации», представитель компании AlterNRG Corp.(WPC) [7]. Заводы планируется разместить в муниципальных районах, граничащих с городом Москва. Производительность одного завода по переработке отходов должна составлять 1500 тонн/сутки (500 000 тонн в год), а получаемый синтез-газ может быть использован для получения 50 МВт/ч электроэнергии.

В современных научных работах рассматривался вопрос создания устройства утилизации отходов СВЧ-плазмотроном [10, 11]. Российскими вузами, а именно, Российским химико-технологическим университетом имени Менделеева и Иркутским техническим университетом была предложена технология переработки твердого топлива и горючих отходов СВЧ-плазмотроном, с получением полезных полупродуктов [12]. Было рассчитано, что такая установка сможет, подобрав оптимальные режимы, создать из 1 тонны отходов 300 кг кокса, 120 кг светлого печного топлива, 200 кг синтез-газа, и небольшое количество балластной фракции, которая может быть использована в качестве стройматериалов и удобрений.

Ввиду отсутствия достаточного количества экспериментальных данных, предлагается, так как представляется весьма перспективным, использование в качестве устройства для генерации плазмы СВЧ-плазмотрон, и, следовательно, разработка конструкции переработки отходов СВЧ-плазмой. В основе работы такого плазмотрона находится импульсный магнетрон непрерывного действия, который обеспечивает постоянное электромагнитное воздействие на отходы в камере реактора. Использование СВЧ-генератора плазмы позволит устранить фактор загрязнения плазмы продуктами эрозии электродов, а также упростить устройство плазменного реактора в связи с повышенной энергетической эффективностью подвода электромагнитной энергии к реакторной камере.

Выводы. Использование низкотемпературной плазмы в процессах переработки и уничтожения твердых бытовых отходов на данный момент является перспективным технологическим направлением. Технологии плазменной обработки отходов развиваются, и сейчас существуют не только лабораторные образцы, но и промышленные установки, успешно выполняющие свои функции, однако не получившие широкого распространения ввиду отладки и проработки некоторых факторов. Плазменная технология переработки ТБО может быть использована для уничтожения любых видов отходов, в том числе токсичных и опасных, что делает ее незаменимой для данного вида отходов. Однако, основной минус технологии – ее дороговизна, ввиду использования довольно большого количества электрической энергии на поддержание процесса. При условии получения в

ходе плазменной утилизации, и последующего использования вторичных продуктов, в том числе строительного шлака и синтез-газа, высокая затратность технологии может быть снижена, путем сжигания вторичного сырья в генераторах электрической энергии. В технологии плазменной переработки отходов представляется перспективным внедрение СВЧ-плазмотронов, в связи с их энергоэффективностью и повышенной чистотой получаемого плазменного образования.

Л и т е р а т у р а

1. Н. И. Пляскина, В. Н. Харитонов. Плазменные технологии утилизации ТБО: продвижение инноваций на рынок // Инновации. № 12 (194), 2014.
2. Т. В. Боравская, Б. В. Боравский, Л. П. Ветошкина и др. Европейский опыт обращения с отходами производства и потребления. М.: Торгово-промышленная палата РФ, 2010.
3. Борисов А.Ю., Брусникина С.А., Степанова Т.А. Уничтожение твердых бытовых отходов методом окислительного пиролиза. Радиоэлектроника, электротехника и энергетика // Международная научно-техническая конференция студентов и аспирантов: Тезисы докладов. – Том 3. – М.: Изд-во МЭИ. 2001, с. 24-25.
4. Гонопольский А.М., Дыган М.М. Оценка экологической безопасности мусоросжигательных заводов при увеличении их производительности // Безопасность в техносфере. – 2009. - № 3. – с. 23-26.
5. Гнеденко В.Г., Горячев И.В. Производство водорода при плазменной переработке твердых бытовых отходов // Тяжелое машиностроение. – 2007. - № 7. – с. 16-19.
6. Аньшаков А. С., Урбах Э. К., Радько С. И., Урбах А. Э., Фалеев В. А. Генератор плазмы водяного пара для газификации твёрдых топлив // Теплоэнергетика. – 2013. – № 12. – С. 29–32.
7. Технология плазменной газификации WestinghousePlasmaCorporation - http://www.cleandex.ru/articles/2016/03/07/zavody_po_pererabotke_othodov_proizvodstva_i_potrebleniya_v_elektroenergiyu
8. Всепобеждающая плазма / Твердые бытовые отходы - <http://www.solidwaste.ru/publ/view/425.html>
9. ЧжанЦинлинь, Дор Лирап, ФенингштейнДикла, Ян Вэйхонг и БласиакВлодзмирц (2012). Газификация твердых бытовых отходов в процессе плазменной газификации плавки. Прикладная энергия, 90 (1), 106-112. DOI: 101016 / japenergy201101041
10. Морозов М. С. Утилизация отравляющих веществ свч-плазмотроном // Проблемы Науки. 2017. №13 (95). С. 46-49.
11. Жерлицын А. Г., Шиян В. П., Шиян Л. Н., Магомадова С. О. Деструкция органических соединений в газовой и жидкой средах в плазме СВЧ-разряда // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов, р. 326, № 10, 2015, с. 65-71.
12. Переработка отходов с помощью СВЧ-волн - https://akvobr.ru/pererabativat_othodi_s_pomoschyu_svchvoln.html

R e f e r e n c e s

1. N. I. Plyaskina, V. N. Kharitonova. Plasma technologies for utilization of solid waste: promoting innovations to the market // Innovations. No. 12 (194), 2014.
2. T. V. Boravskaya, B. V. Boravsky, L. P. Vetooshkina et al. European experience in handling production

and consumption wastes. M.: Chamber of Commerce and Industry of the Russian Federation, 2010.

3. Borisov A.Yu., Brusnikina S.A., Stepanova T.A. Destruction of solid household waste by the method of oxidative pyrolysis. Radio electronics, electrical engineering and power engineering // International scientific and technical conference of students and graduate students: Abstracts. - Volume 3. - M.: Publishing house of MEI. 2001, p. 24-25.

4. Gonopolsky A.M., Dygan M.M. Assessment of the ecological safety of incineration plants with an increase in their productivity // Safety in the technosphere. - 2009. - No. 3. - p. 23-26.

5. Gnedenko V.G., Goryachev I.V. Hydrogen production at plasma processing of solid household waste // Heavy mechanical engineering. - 2007. - No. 7. - p. 16-19.

6. Anshakov AS, Urbakh EK, Radko SI, Urbakh AE, Faleev VA Generator of water vapor plasma for gasification of solid fuels // Teploenergetika. - 2013. - No 12. - P. 29-32.

7. Westinghouse Plasma Corporation plasma gasification technology - http://www.cleandex.ru/articles/2016/03/07/zavody_po_pererabotke_othodov_proizvodstva_i_potrebleniya_v_elektroenergiyu

8. All-conquering plasma / Solid household waste - <http://www.solidwaste.ru/publ/view/425.html>

9. Zhang, Qinglin, Dor, Liran, Fenigshtein, Dikla, Yang, Weihong, & Blasiak, Wlodzimirz (2012). Gasification of municipal solid waste in the Plasma Gasification Melting process. Applied Energy, 90 (1), 106-112. doi: 101016 / japenergy201101041

10. Morozov M.S. Utilization of toxic substances by microwave plasmatron // Problems of Science. 2017. No. 13 (95). S. 46-49.

11. Zherlitsyn AG, Shiyan VP, Shiyan LN, Magomadova SO Destruction of organic compounds in gas and liquid media in microwave discharge plasma // Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Engineering of georesources, r. 326, No. 10, 2015, p. 65-71.

12. Waste processing using microwave waves - https://akvobr.ru/pererabativat_othodi_s_pomoschyu_svchvoln.html

Soroka N.V., Korsunov K.A.

APPLICATION OF MICROWAVE ATMOSPHERIC PRESSURE PLASMA FOR DIELECTRIC MATERIALS STERILIZATION

The paper analyzes the technologies and methods of plasma processing of solid household waste, identifies the factors that an effective technology of solid waste disposal should have. The characteristics and designs of existing laboratory and industrial plants for plasma thermolysis of solid waste are considered, and the regularities of the plasma technology of waste disposal are revealed. A method for using a microwave plasmatron as a basis in the processes of plasma technology for the utilization of industrial waste is proposed and substantiated.

Keywords: waste, solid waste, utilization, plasma, technology, processing, garbage, reactor, generator, pyrolysis.

Сорока Никита Владимирович, ассистент кафедры физики, аспирант кафедры технологии машиностроения и инженерного консалтинга ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: winterevil@ya.ru

Soroka Nikita Vladimirovich, Physics Department Assistant, graduate student of the Department of Mechanical Engineering Technology and Engineering Consulting, SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н. профессор кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: korsunof@mail.ru

Korsunov Konstantin Anatolievich, Doctor of Technical Sciences, professor of the department of physics, SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 22.04.2021

СЕКЦИЯ 3

МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ

УДК 37.378

РЕАЛИЗАЦИЯ КОМПЕТЕНТНОСТНОГО ПОДХОДА ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ
СТУДЕНТАМИ-ФИЗИКАМИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ

Корсунов К.А., Харченко Е.И., Чаленко А.В.

IMPLEMENTATION OF THE COMPETENCE-BASED APPROACH WHEN
PERFORMING RESEARCH WORK BY PHYSICS STUDENTS

Korsunov K.A., Kharchenko E.I., Chalenko A.V.

Рассматривается компетентностный подход в формировании профессиональных компетенций студентов-физиков в области научно-исследовательской деятельности, позволяющей повысить качество подготовки высококвалифицированных, конкурентно-способных специалистов физиков.

Ключевые слова: научно-исследовательская деятельность, компетенция, математическое моделирование

Введение. Возрастающие темпы научно-технического прогресса, происходящие в современном обществе, требуют внедрения современных инновационных педагогических технологий в образовательный процесс, призванных к формированию творческой личности, способной к профессиональной деятельности и к профессиональному саморазвитию.

К таким инновационным технологиям относится, в частности, компетентностный подход. Целью компетентностного подхода является формирование у студента набора компетенций, соответствующего выбранной специальности [1]. Такой набор определяется соответствующей компетентностной моделью, включающей такие компетенции как «общенаучные компетенции», «профессиональные компетенции».

Профессиональные компетенции в свою очередь, включают в себя компетенции в области «научно-исследовательской деятельности», «научно-инновационной деятельности» и другие.

Так, магистр по направлению «Физика» должен решать такие профессиональные задачи, как освоение методов научных исследований, теорий и моделей; проведение исследований и обработка их результатов; работа с научной литературой;

знакомство с основами организации и планирования физических исследований [2]. Отсюда вытекает необходимость вовлечения студентов в научно-исследовательскую деятельность, как одно из условий формирования профессиональной компетентности будущего специалиста-физика [2]. Исследовательские умения представляют собой сложную систему практических и интеллектуальных действий, позволяющих выполнять исследовательскую деятельность при наличии соответствующих знаний, умений и навыков. [3].

Изложение основных материалов. Проблемам компетентностного подхода в литературе посвящено достаточно работ. В работе [4] приводится список ключевых компетенций и дано их определение. Соотношение видов компетенций и этапов обучения рассматривается в работе [5]. Компетентностные модели бакалавра и магистра в области техники и технологий были предложены в работе [6]. В работе [7] рассматриваются ключевые компетенции для различных типов профессий.

Ранее была предложена компетентностная модель специалиста по направлению подготовки «Физика», включающая в себя следующие группы компетенций: 1. Личностные; 2. Социальные; 3. Экономические и организационно-управленческие; 4. Общенаучные; 5. Общепрофессиональные (инвариантные к области деятельности); 6. Специальные компетенции или профессионально-функциональные знания и умения, которые обеспечивают привязку к конкретному объекту.

Рассмотрим основные компетенции этой модели для магистров направления подготовки «Физика».

Общепрофессиональные компетенции (ОПК):

– способность адаптироваться к изменению научного профиля своей профессиональной

деятельности, социокультурных и социальных условий деятельности (ОПК-4);

– способность использовать свободное владение профессионально профилированными знаниями в области компьютерных технологий для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами направленности (профиля) подготовки (ОПК-5);

– способность использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе (ОПК-6);

Профессиональные компетенции:

научно-исследовательская деятельность:

– способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта (ПК-1);

научно-инновационная деятельность:

– способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности (ПК-2);

– способность принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности (ПК-3);

организационно-управленческая деятельность:

– способность планировать и организовывать физические исследования, научные семинары и конференции (ПК-4);

– способность использовать навыки составления и оформления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов и статей (ПК-5).

К основным формам организации образовательного процесса при подготовке студентов-физиков можно отнести следующие: лабораторные работы, курсовое проектирование, совместные научно-исследовательские работы студентов и преподавателей по темам, направленным на решение реальных практических и научных задач, научно-производственная практика, научно-исследовательская работа.

На базе сформированных компетенций в области экспериментально- и научно-исследовательской деятельности специалист должен уметь решать целый ряд задач, таких как:

– сбор, изучение, анализ и систематизация научно-технической информации по тематике исследования;

– разработка программы проведения научных исследований по выбранной тематике;

– разработка методики и организация проведения экспериментов, анализ и обобщение их результатов;

– разработка физических и математических моделей исследуемых процессов и явлений;

– математическое моделирование физических процессов и явлений.

Отдельную роль с точки зрения формирования профессиональных компетенций в научно-исследовательской области у студентов физиков играют научно-исследовательские проекты, выполняемые в процессе научно-исследовательской работы (НИР) [8].

Результаты исследований. Научно-исследовательскую работу можно разбить на следующие этапы:

I этап. Предварительный.

1. Анализ и систематизация существующих научных подходов к решению проблемы исследования.

2. Анализ и уточнение категориального аппарата исследования.

II этап. Теоретический.

1. Разработка теоретической или функциональной модели.

2. Проектирование экспериментальной работы.

3. Разработка (выбор и адаптация) диагностической методики (корпуса методик) для проведения констатирующего эксперимента.

III этап. Экспериментальный.

1. Разработка модели формирующего эксперимента и программы формирующего этапа экспериментальной работы

2. Подготовка доклада.

IV этап. Заключительный.

1. Анализ научных результатов, полученных в процессе теоретического и экспериментального исследования.

2. Формулирование выводов из проведенного исследования и определение перспектив дальнейшего исследования темы магистерской диссертации.

Научно-исследовательская работа позволяет закрепить умения оценивать и обобщать теоретические знания, использовать современные методы и подходы при решении проблем в области физики. Знания, умения и навыки, приобретенные при выполнении научно-исследовательской работы необходимы для написания выпускной квалификационной работы магистра и в дальнейшей профессиональной деятельности.

Содержание научно-исследовательской работы определяется темой магистерской диссертации, ее целями и задачами, ее научной новизной, а также компетенциями, которыми должен овладеть магистрант по завершении научно-исследовательской работы. Научная новизна и практическая значимость формулируются в начале научно-исследовательской работы и носят предварительный характер. При этом новизна должна быть доказана, т.е. теоретически обоснована, а также подтверждена практически и экспериментально.

В процессе прохождения НИР студенты должны получить следующие профессиональные навыки:

- самостоятельное проведения научно-исследовательских работ в области физики и оформление результатов исследований;
- использование компьютерных и информационных технологий и средств коммуникации;
- применение современного научно-исследовательского оборудования.

Компетентностный подход при прохождении магистрантами «Научно-исследовательской работы» подразумевает применение инновационных технологий, стимулирующих активную мыслительную, познавательную деятельность обучающихся и формирование у будущих специалистов способности действовать в изменяющихся условиях профессиональной деятельности и, исходя из конкретной ситуации, принимать наиболее рациональные решения.

При выполнении различных видов работ НИР используются следующие технологии:

- образовательные технологии (контекстная, поисково-исследовательская, учебного проектирования): в форме пояснений, изучения специальной литературы, демонстрации приборов и пояснения принципов их работы. Обучающиеся получают информацию о задачах научно-исследовательской работы, условиях проведения научного исследования, оборудовании и приборах, о технике безопасности при проведении различных исследований;
- научно-исследовательские технологии: отбор методик и инструментальных средств для проведения исследований и обработки информации; приемы работы с пакетами профессиональных компьютерных программ; моделирование физических полей, процессов и явлений; организация и проведение экспериментального исследования; сбор, обработка и анализ данных.
- информационные и интерактивные: интерактивное общение, консультирование с помощью электронной почты; применение средств мультимедиа; анализ и оформление результатов научно-исследовательской работы с помощью компьютерных технологий. Студенты используют программные средства в компьютерных сетях; создают базы данных и используют ресурсы Интернета, работают с информацией из различных источников.

В результате прохождения научно-исследовательской работы студенты должны:

Знать:

- современные проблемы, концепции и новейшие достижения физики;
- основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации, основы информационной безопасности;
- основные научные направления и концепции в области физики, методы и способы постановки и решения задач физических исследований, принципы действия, функциональные и метрологические

возможности современной аппаратуры для физических исследований, возможности, методы и системы компьютерных технологий для физических теоретических и экспериментальных исследований;

- разделы физики, необходимые для решения научно-инновационных задач;
- новые методы и методические подходы в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности в области физики;
- как планируются и организуются физические исследования, а также научные семинары и конференции.

Уметь:

- использовать знания современных проблем и новейших достижений физики в научно-исследовательской работе;
- работать с компьютером на профессиональном уровне; использовать компьютерные технологии для решения задач как профессиональной, так и произвольной направленности; преобразовывать информацию в звуковую или зрительную;
- самостоятельно ставить и решать конкретные физические задачи научных исследований в области физики с использованием современной аппаратуры и компьютерных технологий;
- применять теоретические и экспериментальные навыки для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности;
- самостоятельно разрабатывать новые методы и методические подходы в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности;
- планировать и организовывать физические исследования, научные семинары и конференции.

Владеть:

- современными методами исследований в контексте понимания современных проблем и новейших достижений физики;
- навыками обработки, сохранения, подачи и защиты полученной информации;
- навыками постановки и решения задач научных исследований в области физики с помощью современных методов и средств теоретических и экспериментальных исследований;
- разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности

Выводы. Таким образом можно сказать, что внедрение компетентностного подхода в процесс выполнения научно-исследовательской работы студентами-физиками будет стимулировать научно-исследовательскую деятельность студентов, развивать их исследовательские умения: умение анализировать проблемную ситуацию, проводить поиск проблемы, осуществлять отбор необходимой информации, проводить эксперимент; фиксировать и анализировать результаты, строить гипотезы,

обобщая, делать выводы. Все это будет в значительной мере способствовать формированию профессиональных компетенций студентов в области научно-исследовательской деятельности.

Л и т е р а т у р а

1. Харченко Е.И. Проблемы формирования компетентностной модели специалиста по специальности «Прикладная физика» / Е.И. Харченко, А.В. Чаленко // Вісник Кременчуцького державного університету. – Кременчук, 2008. – № 5 (52), ч. 1. – С.101-103.

2. Дамбуева А.Б. Формирование исследовательских умений студентов-физиков как условие развития их профессиональной компетентности / А.Б. Дамбуева. – Вестник Красноярского государственного педагогического университета имени В. П. Астафьева. – Красноярск, 2012. – №3. – С.59-63.

3. Федина О.В. Формирование исследовательских умений студентов-физиков младших курсов средствами практикума / О.В. Федина – Вестник Ставропольского государственного университета. – Ставрополь, 2008. – №56. – С.36-45.

4. Равен Дж. Педагогическое тестирование: проблемы, заблуждения, перспективы / Дж. Равен – Пер. с англ. – М.: Кошто-центр, 1999.

5. Уиддет С., Холлифорд С. Руководство по компетенциям / С. Уиддет, С. Холлифорд. – Пер. с англ. – М.: НІРРО, 2003. – 224 с.

6. Шадриков В.Д., Пузанков Д.В., Федоров И.Б. Двухступенчатая система подготовки специалистов в области техники и технологии. / В.Д. Шадриков, Д.В. Пузанков, И.Б. Федоров. – Методические материалы. Санкт-Петербург, 2004.

7. Харченко Е.И. Определение ключевых компетентностей при разработке проектов профессионального самоопределения молодежи. / Е.И. Харченко, О.П. Савенко. – Управління проектами та розвиток виробництва. Збірник наукових праць. – №3 (8) – 2003. – С.41-46.

8. Лыштван Е.Ю. Формирование профессиональных компетенций в области научно-исследовательской деятельности у студентов направления «Физика» / Е.Ю. Лыштван, Е.И. Харченко, А.В. Чаленко. – Вестник Луганского нац. ун-та им. В. Даля, №2(4), Ч.1. 2017. С. 289-291.

R e f e r e n c e s

1. Kharchenko Ye.I. Problemy formirovaniya kompetentnostnoy modeli spetsialista po spetsial'nosti «Prikladnaya fizika» / Ye.I. Kharchenko, A.V. Chalenko // Visnik Kremenchuts'kogo derzhavnogo universitetu. – Kremenchuk, 2008. – № 5 (52), ch. 1. – S. 101-103.

2. Dambuyeva A.B. Formirovaniye issledovatel'skikh umeniy studentov-fizikov kak usloviye razvitiya ikh professional'noy kompetentnosti / Vestnik Krasnoyarskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta imeni V.P. Astaf'yeva. – Krasnoyarsk, 2012. – №3. – S. 59-63.

3. Fedina O.V. Formirovaniye issledovatel'skikh umeniy studentov-fizikov mladshikh kursov sredstvami praktikuma // Vestnik Stavropol'skogo gosudarstvennogo universiteta. – Stavropol', 2008. – №56. – S. 36-45.

4. Raven J. Pedagogicheskoe testirovanie:problemy, zabluzhdeniya, perspektivy. Per.s angl. – M.: Koshto-centr, 1999.

5. S.Uiddet, S.Holliford Rukovodstvo po kompetencyam. Per. s angl.-M.: HIPPO, 2003. – 224 c.

6. Shadrikov V.D., Puzankov D.V., Fedorov I.B. Dvuhstupenchataja sistema podgotovki specialistov v oblasti tehniki i tehnologii. / V.D. Shadrikov, D.V. Puzankov, I.B. Fedorov. – Metodicheskie materialy. Sankt-Peterburg, 2004.

7. Harchenko E.I., Savenko O.P. Opredeleniye klyuchevyh kompetentnostey pri razrabotke proektov professional'nogo samoopredeleniya molodyozhi // Upravlinnya proektamy ta rozvytok vyrobnytstva. Zbirnyk naukovykh prac'. – №3 (8) – 2003. – С.41-46.

8. Lyshtvan E.Yu., Kharchenko E.I., Chalenko A.V. Formation of professional competences in the field of scientific research activities among students of «Physics». Bulletin of Luhansk National University named after Vladimir Dahl, №2(4) p.1. 2017. p. 289-291.

Korsunov K.A., Kharchenko E.I. Chalenko A.V. IMPLEMENTATION OF THE COMPETENCE-BASED APPROACH WHEN PERFORMING RESEARCH WORK BY PHYSICS STUDENTS

The article considers the competence approach in the formation of professional competencies of physics students in the field of research activities, which allows to improve the quality of training of highly qualified, competitive and capable specialists in physics.

Keywords: research activity, competence, mathematical modeling.

Корсунов Константин Анатольевич, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: korsunof@mail.ru

Korsunov Konstantin, doctor of technical Sciences, Professor, head of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Харченко Евгений Иванович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
Email: kharchenko_ei@mail.ru

Kharchenko Evgenyi, candidate of physical and mathematical sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Чаленко Анжелика Валериевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».
E-mail: anghiel.anghiel.2014@mail.ru

Chalenko Anzhelika, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the state institution of higher education «Lugansk Vladimir Dahl state University».

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 37.378

ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УМЕНИЙ СТУДЕНТОВ ФИЗИКОВ В ПРОЦЕССЕ ПРЕДИПЛОМНОЙ ПРАКТИКИ

Харченко Е.И., Чаленко А.В., Лыштван Е.Ю.

FORMATION OF RESEARCH SKILLS OF PHYSICS STUDENTS IN THE COURSE OF PRE-GRADUATE PRACTICE

Kharchenko E.I., Chalenko A.V., Lyshtvan E.Y.

Рассматривается проектный и компетентностный подходы в формировании профессиональных компетенций студентов-физиков в области научно-исследовательской деятельности в процессе преддипломной практики, позволяющей повысить качество подготовки высококвалифицированных, конкурентно-способных специалистов физиков.

Ключевые слова: научно-исследовательская деятельность, компетенция, проект, проектный метод, исследовательский проект.

Введение. Современная эпоха характеризуется все возрастающими темпами научно-технического прогресса, усложнением основных видов человеческой деятельности, увеличением динамики жизни общества, что обуславливает с одной стороны, появление новых более высоких требований к качеству образования, с другой – поиск и реализацию новых форм и способов оказания образовательных услуг учебным заведением. Актуальными становятся такие задачи, как внедрение в образовательный процесс современных инновационных технологий, призванных к формированию творческой личности, способной к активной профессиональной деятельности и к профессиональному саморазвитию.

К таким инновационным технологиям, в первую очередь, относятся компетентностный и проектный подходы.

Изложение основных материалов. Целью компетентностного подхода является формирование у студента определенного набора компетенций, определяемого соответствующей компетентностной моделью [1]. Так, например, «профессиональные компетенции» включают в себя компетенции в области «научно-исследовательской деятельности и другие.

Студенты, обучающиеся по программе бакалавриата по направлению «Физика», должны уметь решать такие профессиональные задачи, как освоение новых методов научных исследований, теорий и моделей; проведение научных исследований и обработка их результатов; работа с научной литературой; знакомство с основами организации и планирования физических исследований [2]. Отсюда

вытекает необходимость вовлечения студентов в научно-исследовательскую деятельность, как одно из условий формирования профессиональной компетентности будущего специалиста-физика [2]. Исследовательские умения представляют собой сложную систему практических и интеллектуальных действий, позволяющих выполнять исследовательскую деятельность при наличии соответствующих знаний, умений и навыков. [3].

Под проектным подходом к образованию понимается подход, основанный на идее использования проектирования как основы учебно-познавательной деятельности обучающихся. [5]. При реализации проектного подхода к обучению подразумевается использование современных образовательных технологий. Это технологии активного обучения, технологии проблемного обучения, технологии рейтингов оценки и контроля знаний и умений и т.д. [5].

Цель проектного обучения состоит в том, чтобы создать условия, при которых студенты учатся пользоваться приобретенными знаниями для решения познавательных и практических задач; развивают у себя исследовательские умения – умения выявлять проблемы, сбора информации, наблюдения, проведение эксперимента, анализа, построения гипотез, обобщения.

К основным формам организации образовательного процесса при подготовке студентов-физиков можно отнести следующее: лабораторные работы, курсовое проектирование, совместные научно-исследовательские работы студентов и преподавателей по темам, направленным на решение реальных практических и научных задач. Особое внимание должно уделяться преддипломной практике.

Целью преддипломной практики закрепление и углубление теоретической подготовки студента; приобретение и совершенствование практических навыков и компетенций, опыта самостоятельной научно-исследовательской работы; сбор, обобщение и анализ материалов, необходимых для подготовки выпускной квалификационной работы, по защите

которой Государственной аттестационной комиссией оценивается готовность будущего специалиста к самостоятельной трудовой деятельности.

Можно выделить основные задачи преддипломной практики:

- закрепление и углубление знаний, умений и навыков, полученных студентами в процессе освоения учебных дисциплин и их применение в решении конкретных исследовательских задач;
- получение навыков самообразования и самосовершенствования;
- решение математических и физических проблем, соответствующих направленности (профилю) образования, возникающих при проведении научных и прикладных исследований;
- подготовка материалов по тематике проводимых исследований;
- использование математических методов обработки информации, полученной в результате экспериментальных исследований или производственной деятельности

Процесс выполнения преддипломной практики обучающихся должен быть направлен на формирование элементов следующих компетенций и практических навыков:

Общепрофессиональных компетенций (ОПК-3, ОПК-4):

- способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач (ОПК-3);
- способность понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, осознавать опасность и угрозу, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности (ОПК-4).

Профессиональных компетенций (ПК-2, ПК-3, ПК-4):

- способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2);
- готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований (ПК-3);
- способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин (ПК-4).

В результате прохождения производственной практики студент должен:

Знать:

- методы экспериментальных исследований в физике, возможности и области использования аппаратуры и оборудования для выполнения физических исследований;

- теоретические основы физических методов исследования;

- теоретические основы, основные понятия, законы и модели основных разделов физики.

Уметь:

- осуществлять выбор оборудования и методик для решения конкретных задач;
- эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование;
- использовать возможности современных методов физических исследований для решения физических задач;
- понимать, излагать и критически анализировать физическую информацию;
- пользоваться теоретическими основами, основными понятиями, законами и моделями физики.

Владеть

- методами решения практических задач с применением информационных технологий;
- методами компьютерного моделирования;
- физическими и математическими методами обработки и анализа информации в области основных разделов физики.

В процессе преддипломной практики студент выполняет теоретические исследования, предусматривающие сбор информации об объекте исследований через источники литературы, имеющиеся в широком доступе в научно-технической библиотеке и в сети Интернет, а также экспериментальные исследования, позволяющие работать непосредственно с исследуемыми объектами, в т.ч. исследования с использованием компьютерного моделирования изучаемых процессов.

В исследовательскую работу студента в период практики входит:

- выполнение заданий научного руководителя в соответствии с утвержденным планом научно-исследовательской работы кафедры;
- участие в семинарах (по тематике исследования), а также в научно-исследовательских проектах, выполняемых на кафедре;
- подготовка и публикация тезисов докладов, научных статей

Результаты исследований. Процесс прохождения преддипломной практики можно разбить на следующие этапы:

Основной (практический) этап. Он включает следующие этапы:

1. Ознакомительный. На этом этапе формулируются задачи для решения в ходе практики, составляется проект научно-исследовательской работы, намечаются сроки выполнения, вид и объем результатов, которые должны быть получены.

2. Экспериментальный. Освоение методики работы на оборудовании и приборах при выполнении конкретного исследования. Проведение научно-исследовательской деятельности, сбор материалов в ходе исследования.

Заключительный этап. Оформление необходимой документации: заполнение дневника практики; подготовка отчета по практике; защита отчета.

С точки зрения формирования профессиональных компетенций в научно-исследовательской области у студентов физиков отдельную роль должны играть научно-исследовательские проекты [5]. Данные проекты должны быть максимально приближены к подлинным научным исследованиям, их целью является получение научного знания, обладающего признаками новизны, практической значимости.

В структуру научно-исследовательских проектов должны входить:

- актуальность избранной темы, формулировка проблемы, определение объекта и предмета исследования;
- постановка цели и связанных с ней задач;
- выдвижение гипотезы решения обозначенной проблемы с последующей ее проверкой;
- описание теоретических и экспериментальных методов исследования,
- обсуждение и оформление результатов исследования, выводы;
- внешняя оценка [6].

Научно-исследовательские проекты могут реализовываться при курсовом проектировании, дипломном проектировании.

Выводы. Таким образом можно сказать, что внедрение проектного и компетентностного подходов в процесс обучения студентов-физиков будет стимулировать научно-исследовательскую деятельность студентов. При этом будет происходить формирование у студентов набора компетенций, соответствующих компетентностной модели специалиста. Это позволит развивать такие исследовательские умения как: умение анализировать проблемную ситуацию, осуществлять отбор необходимой информации, проводить эксперимент; фиксировать и анализировать результаты, строить гипотезы, обобщать, делать выводы. Все это будет в значительной мере способствовать формированию профессиональных компетенций студентов в области научно-исследовательской деятельности и проектной деятельности.

Л и т е р а т у р а

1. Харченко Е.И. Проблемы формирования компетентностной модели специалиста по специальности «Прикладная физика» / Е. И. Харченко, А. В. Чаленко, // Вестник Кременчужского государственного университета. – Кременчук, 2008. – № 5 (52), ч. 1. – С.101-103.
2. Дамбуева А.Б. Формирование исследовательских умений студентов-физиков как условие развития их профессиональной компетентности / Вестник Красноярского государственного педагогического университета имени В.П. Астафьева. – Красноярск, 2012. – №3. – С.59-63.
3. Федина О. В. Формирование исследовательских умений студентов-физиков младших курсов средствами

практикума // Вестник Ставропольского государственного университета. – Ставрополь, 2008. – №56. – С. 6-45.

4. Махотин Д.А. Проектный подход к технологии обучения в системе высшего профессионального образования / Д.А. Махотин // Качество. Инновация. Образование. 2005. – №1. – С.11-21.

5. Лыштван Е.Ю., Харченко Е.И., Чаленко А.В. Формирование профессиональных компетенций в области научно-исследовательской деятельности у студентов направления «Физика». Вестник Луганского нац. ун-та им. В. Даля, №2(4) Ч.1. 2017. С. 289-291.

6. Яковлев Н. Ф. Проектная деятельность в образовательном учреждении [электронный ресурс]: учеб. пособие. – 2-е изд., стер. – М.: ФЛИНТА, 2014. – 144 С.

References

1. Kharchenko Ye. I. Problemy formirovaniya kompetentnostnoy modeli spetsialista po spetsial'nosti «Prikladnaya fizika» / Ye. I. Kharchenko, A. V. Chalenko, // Visnik Kremenchuts'kogo derzhavnogo universitetu. – Kremenchuk, 2008. – № 5 (52), ch. 1. – S. 101-103.
2. Dambuyeva A. B. Formirovaniye issledovatel'skikh umeniy studentov-fizikov kak usloviye razvitiya ikh professional'noy kompetentnosti / Vestnik Krasnoyarskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta imeni V. P. Astaf'yeva. – Krasnoyarsk, 2012. – №3. – S. 59-63
3. Fedina O. V. Formirovaniye issledovatel'skikh umeniy studentov-fizikov mladshikh kursov sredstvami praktikuma // Vestnik Stavropol'skogo gosudarstvennogo universiteta. – Stavropol', 2008. – №56. – S. 36-45.
4. Makhotin D. A. Proyektnyy podkhod k tekhnologii obucheniya v sisteme vysshego professional'nogo obrazovaniya / D. A. Makhotin // Kachestvo. Innovatsiya. Obrazovaniye. 2005. – №1. – S. 11-21.
5. . Lyshtvan E.Yu., Kharchenko E.I., Chalenko A.V. Formation of professional competences in the field of scientific research activities among students of «Physics». Bulletin of Luhansk National University named after Vladimir Dahl, №2 (4) p.1. 2017. p. 289-291.
6. Yakovlev N.F. Project activity in the educational institutions [electronic resource]: Textbook. – 2-e ed., ster. – M.: FLINTA, 2014. – 144 p.

Kharchenko E.I., Chalenko A.V., Lyshtvan E.Y. FORMATION OF RESEARCH SKILLS OF PHYSICS STUDENTS IN THE COURSE OF PRE-GRADUATE PRACTICE

The article considers the project and competence-based approaches to the formation of professional competencies of physics students in the field of research activities in the process of pre-graduate practice, which allows to improve the quality of training of highly qualified, competitive and capable physicists.

Keywords: research activity, competence, project, project method, research project.

Харченко Евгений Иванович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: kharchenko_ei@mail.ru

Kharchenko Evgeniy, candidate of physical and mathematical sciences, associate Professor of the Department of physics of the state institution of higher education «Lugansk Vladimir Dahl state University».

Чаленко Анжелика Валериевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: anghiel.anghiel.2014@mail.ru

Chalenko Anzhelika, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Лыштван Елена Юрьевна, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: lustva_lena@mail.ru

Lyshtvan Elena, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Витренко Владимир Алексеевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК [371.134:53]:001.891

ОРГАНИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ФИЗИКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Горбенко Е.Е., Грицких А.В.

ORGANIZATION OF RESEARCH WORK OF FUTURE TEACHERS OF PHYSICS BY EXPERIMENTAL METHODS

Gorbenko E.E., Hrytskykh A.V.

В работе рассматривается организация исследовательской деятельности студентов-физиков, раскрываются возможности повышения эффективности лабораторного эксперимента в организации исследовательской работы учащихся средних школ.

Ключевые слова: творческие способности, исследовательская деятельность, физический эксперимент, самостоятельность.

Исследовательская работа студентов является основой научно-предметной и профессионально-педагогической подготовки будущего учителя. Освоение современными достижениями физики и педагогики должно происходить в процессе управляемой со стороны преподавателя самостоятельной работы студента. Методологической основой профессионально-педагогической подготовки студентов становится квазисамостоятельная поисковая деятельность студента и творческое общение с преподавателем, который выполняет функции научного консультанта (научного руководителя). Качественная подготовка студентов в условиях перманентного уменьшения количества аудиторных занятий возможна только при четко организованной и методически обеспеченной квазисамостоятельной работе каждого из студентов.

Квазисамостоятельная профессионально направленная исследовательская деятельность студентов характеризуется следующими особенностями:

Цель: самостановление, саморазвитие, самореализация и самореализация личности студента, как активного, инициативного субъекта;

Отношение: субъект-субъектные на основе духовного равенства при общении и распределения ответственностей;

Процесс: личностно ориентированная профессионально-педагогическая подготовка с оптимальной степенью педагогической помощи;

Результаты: творческая направленность нравственной личности с необходимостью профессиональной самореализации в пользу государства, общества и собственного

удовлетворения духовных и материальных потребностей.

Творчество студентов должно проявляться в поисках исследования вариативных логических структур содержания учебного материала и интересных оригинальных средств его материализации, в конструировании теоретических моделей наиболее оптимального конкретного сочетания методов обучения, в изготовлении демонстрационного физического оборудования, исследовательских лабораторных работ и пр.

При этом надо иметь в виду одну достаточно особенность видения студентами научно-педагогических (дидактических, методических, технологических) проблем. Дело в том, что научные проблемы «просматриваются» через систему знаний и большого педагогического опыта, чего, безусловно, не хватает студентам [5].

В связи с этим «видение» студентами научно-педагогических проблем и тем должно происходить «глазами преподавателя» при условии отношений доверия и признания студентами научного авторитета преподавателя (как научного руководителя в исследовании).

Таким образом, творчество, творческая направленность личности является и предпосылкой, и результатом «тонких педагогических технологий», характерной чертой которых является единство логического и интуитивного в поисках и исследованиях.

Практика организации исследовательской деятельности студентов показала, что студенты одинаково успешно выполняют исследования, как теоретического характера, так и исследования, требующие проведения эксперимента (в том числе с изготовлением экспериментальной установки) [1-2,4].

Студенты 3 курса 2020-2021 года обучения в качестве темы исследования выбрали: «Моделирование и исследование двигателей внешнего сгорания». Данная тема имеет важное дидактическое значение, так как тема «Тепловые двигатели» рассматривается в 8 и 10 классах (на

разных уровнях). Вводится понятие КПД тепловой машины. Рассматриваются устройство двигателя внешнего сгорания (существует штатная демонстрационная установка паровой машины) и двигателя внутреннего сгорания на примере четырехтактного двигателя (в школьном оборудовании существует модель работы двигателя внутреннего сгорания с газораспределительным механизмом). Ознакомление с материалом темы происходит только на теоретическом уровне и не подразумевает выполнение лабораторных работ или демонстрации действующих моделей.

Студентами третьего курса специальности «Физика. Математика» (Лейбенко Д.С., Руденко А.А.) было выбрано направление исследований Роберта Стирлинга. В 1816 году уроженец Шотландии Роберт Стирлинг запатентовал тепловую машину, которую сегодня называют в честь своего создателя. Однако сама идея двигателей горячего воздуха была придумана вовсе не им. Но первый осознанный проект по созданию такого агрегата реализовал именно Стирлинг. Он усовершенствовал систему, добавив в неё очиститель, в технической литературе называвшийся теплообменником. Благодаря этому сильно возросла производительность мотора благодаря удержанию его в тепле. Эта модель для того времени была признана самой прочной, поскольку никогда не взрывалась. Он преобразует тепловую энергию, подводимую извне, в полезную механическую работу. Этот процесс происходит за счёт изменения температуры газа или жидкости, циркулирующих в замкнутом объёме. В нижней части агрегата рабочее вещество нагревается, увеличивается в объёме и выталкивает поршень вверх. Горячий воздух поступает в верхнюю часть мотора и охлаждается с помощью радиатора. Давление рабочего тела понижается, а поршень опускается для повторения всего цикла. Система полностью герметична, благодаря чему рабочее вещество не расходуется, а лишь перемещается внутри цикла. Кроме того, существуют моторы с открытым циклом, в которых регулирование потоком реализуется с помощью клапанов. Эти модели называют двигателем Эриксона. В целом принцип работы двигателя внешнего сгорания схож с ДВС. При низких температурах в нём происходит сжатие и наоборот. Нагрев же осуществляется по-разному. Тепло в двигателе внешнего сгорания подводится через стенку цилиндра извне. Стирлинг догадался применять периодическое изменение температуры с вытеснительным поршнем. Этот поршень перемещает газы с одной полости цилиндра в другую. При этом с одной стороны постоянно поддерживаются низкие температуры, а с другой — высокие. При перемещении поршня вверх газ перемещается из горячей в холодную полость. Система вытеснителя в двигателе соединена с рабочим поршнем, который сжимает газ в холоде и позволяет расширяться в тепле. Полезная работа

совершается как раз благодаря сжатию в более низких температурах. Непрерывность обеспечивается кривошипно-шатунным механизмом. Особых границ между стадиями цикла не наблюдается. Благодаря этому КПД двигателя Стирлинга не уменьшается.

Самые первые реализованные в металле образцы двигателя обладали низким КПД, поскольку варианты теплоносителя были неэффективны и ограничивали максимальную температуру нагрева, отсутствовали конструкционные материалы, устойчивые к высокому давлению. Во второй половине XX века двигатель с ромбическим приводом во время испытаний превысил показатель 35 % КПД на водном теплоносителе и с температурой 55 градусов по Цельсию. Совершенствование конструкции в некоторых экспериментальных образцах позволило достичь практически 39 % КПД. Почти все современные бензиновые двигатели, имеющие аналогичную мощность, обладают КПД 28 — 30 %. Турбированные дизели достигают около 35 %. Самые современные образцы двигателей Стирлинга, разработанные компанией Mechanical Technology Inc в США, показывают эффективность до 43 % [3].

Благодаря разнообразию конструкций и типов двигателей Стирлинга, мы можем выбрать наиболее практичную модель, применимую в домашних условиях. Рассмотрев вариации двигателей «Альфа», «Бета» и «Гамма» мы сделали следующие выводы:

У двигателя типа «Альфа» отношение мощности к объёму достаточно велико, но, к сожалению, высокая температура «горячего» поршня создаёт определённые технические проблемы. Бета-Стирлинг — цилиндр всего один, горячий с одного конца и холодный с другого. Внутри цилиндра движутся поршень (с которого снимается мощность) и «вытеснитель», изменяющий объём горячей полости. Газ перекачивается из холодной части цилиндра в горячую через регенератор. Данный тип сложен в построении и поэтому не подходит нам.

Гамма-Стирлинг двигатель. Есть поршень и «вытеснитель», но при этом два цилиндра — один холодный (там движется поршень, с которого снимается мощность), а второй горячий с одного конца и холодный с другого (там движется «вытеснитель»). Регенератор может быть внешним, в этом случае он соединяет горячую часть второго цилиндра с холодной и одновременно с первым (холодным) цилиндром. Нет необходимости в регенераторе так как регенератор является частью вытеснителя.

Студентами были смоделированы и путем печати на 3D принтере получены детали двигателя. После сборки и испытаний работы двигателя приступили к снятию энергетических характеристик полученной модели — студентами была исследована

мощность двигателя в зависимости от различных охладителей.

Заинтересованность и настойчивость студентов в проведенных исследованиях (теоретических и экспериментальных) привели к продолжению исследования – необходимости создания двигателя, который можно было бы предложить обучающимся для исследования (в соответствии с требованиями техники безопасности). Это позволит ввести в школьный лабораторный практикум лабораторную работу по исследованию различных энергетических характеристик двигателя Стирлинга в зависимости от различных параметров. Таким образом, теоретическая и экспериментальная деятельность студентов может быть организована таким образом, что она будет пусковым механизмом для их будущей педагогической деятельности в школе.

Литература

1. Безверхний А.Л. Развитие творческой деятельности учащихся средствами лабораторного эксперимента. – Международная научно-практическая конференция «Открытые физические чтения – 2017». Вестник ЛНУ имени Владимира Даля. № 2, часть 1. – Луганск. 2017. – С. 266-269.
2. Уокер Г. Двигатели Стирлинга // Сокращенный перевод с англ. Сутугина - М.: Машиностроение, 2011. – 408 с.
3. Грицких А.В. Система организации исследовательской работы учеников профильных классов посредством электронных и натуральных физических лабораторных практикумов // Электронные ресурсы в непрерывном образовании: труды VI Международного научно-методического симпозиума «ЭРНО-2017» (Адлер). – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2017. – С.16-19
4. Дик Ю.И., Кабардин О.Ф., Орлов В.А. и др. Физический практикум для классов с углублённым изучением физики.- М., 1993. –122 с.
5. Грицких А.В., Проказа А.Т. Науково-педагогічні дослідження студентів з дидактики та методики фізики – один із ефективних засобів управління якістю підготовки майбутнього вчителя // Збірник наукових праць Кам'янець-Подільського національного університету. Серія педагогічна / Кам'янець-Подільський: КПДУ імені Івана Огієнка, 2009. – Вип. 15: Управління якістю підготовки майбутніх учителів фізики та трудового навчання. – С. 277-279.

References

1. Bezverkhniy A.L. Razvitiye tvorcheskoy deyatel'nosti uchashchikhsya sredstvami laboratornogo e'ksperimenta. – Mezhdunarodnaya nauchno-prakticheskaya konferenciya «Otkry'ty'efizicheskiccheniya – 2017». Vestnik LNU imeni Vladimira Dal'ya. № 2, chast' 1. – Lugansk. 2017. – S. 266-269.
2. Uoker G. Dvigateli Stirlinga // Sokrashhenny'j perevod s angl. Sutugina - M.: Mashinostroenie, 2011. – 408 s.
3. Griczkikh A.V. Sistema organizaczii issledovatel'skoj raboty' uchениkov profil'ny'kh klassov

posredstvom e'lektronny'kh i naturny'kh fizicheskikh laboratorny'kh praktikumov // E'lektronny'e resursy' v neprery'vnom obrazovanii: trudy' VI Mezhdunarodnogo nauchno-metodicheskogo simpoziuma «E'RNO-2017» (Adler). – Rostov-na-Donu: Izdatel'stvo Yuzhnogo federal'nogo universiteta, 2017. – S.16-19.

4. Dik Yu.I., Kabardin O.F., Orlov V.A. i dr. Fizicheskij praktikum dlya klassov s uglublyonny'm izucheniem fiziki.- M., 1993. – 122 s.

5. Griczkikh A.V., Prokaza A.T. Naukovo-pedagogi'chni' dosli'dzhennya studentiv'v z didaktiki ta metodiki fi'ziki – odin iz effektivnikh zasobi'v upravli'nnya yaki'styu pi'dgotovki majbutn'ogo vchitelya // Zbi'rnik naukovikh prac' Kam'yanecz'-Podi'l's'kogo naczi'onal'nogo uni'versitetu. Seri'ya pedagogi'chna / Kam'yanecz'-Podi'l's'kij: KPDU i'meni' I'vana Ogi'yenka, 2009. – Vip. 15: Upravli'nnya yaki'styu pi'dgotovki majbutni'kh uchiteli'v fi'ziki ta trudovogo navchannya. – S.277-279.

Gorbenkole.Ie., Hrytskykh A.V.

ORGANIZATION OF RESEARCH WORK OF FUTURE TEACHERS OF PHYSICS BY EXPERIMENTAL METHODS

The paper discusses the organization of research activities of physics students, reveals the possibilities of increasing the effectiveness of laboratory experiments in organizing the research work of pupils at school in classes with in-depth study of physics.

Key words: creativity, research activity, physical experiment, independence.

Горбенко Евгений Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, доцент, директор Института физико-математического образования, информационных и обслуживающих технологий Луганского государственного педагогического университета.

E-mail: e_g81@mail.ru

Gorbenko Ievgen, PhD in Physics and Mathematics, Docent, Director of the Institute of Physics and Mathematics Education, Information and Service Technologies of Lugansk State Pedagogical University.

Грицких Алексей Владимирович, старший преподаватель кафедры физики и методики преподавания физики Луганского государственного педагогического университета

E-mail: aleksiig@gmail.com

Hrytskykh Oleksii, Senior Lecturer of the Department of Physics and Methods of Teaching Physics, Lugansk State Pedagogical University.

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 371.134:53

ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Акулов Ю.В., Безверхний А.Л., Грицких А.В.

FORMATION OF RESEARCH COMPETENCE OF STUDENTS OF HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS OF PHYSICAL SPECIALTIES

Akulov Y. V., Bezverhniy A.L., Hrytskykh A.V.

В работе рассматриваются идеи развития творческих способностей учащихся, раскрываются возможности повышения эффективности лабораторного эксперимента в организации исследовательской работы учащихся в классах с углубленным изучением физики.

Ключевые слова: творческие способности, исследовательская деятельность, физический эксперимент, самостоятельность, метапредметность.

Современное общество характеризуется быстрым темпом развития наукоемких технологий, что формирует социальный заказ на подготовку будущих специалистов, способных к исследовательской деятельности, способных самостоятельно решать профессиональные задачи и задачи общества.

Развитие современной науки строится на использовании экспериментальной деятельности, основы навыков которой закладываются в курсе физики.

Изучение физики в современной школе базируется на использовании компетентностного и деятельностного подходов: в рамках школьного курса физики деятельностный подход можно рассматривать в качестве основополагающего, поскольку в основе познания ряда физических явлений лежит экспериментальная деятельность, которая направлена на формирование у учащихся представлений о методологических основах познания с помощью учебного физического эксперимента. Это обуславливает подготовку будущих учителей физики в процессе изучения дисциплин профильного характера в контексте современной доктрины образования. В соответствии с ней студенты должны не просто получать знания, умения и навыки, но, обязаны, в первую очередь уметь организовать исследовательскую деятельность учащихся (если в вузе речь идет о научно-исследовательской деятельности обучающихся, то в школах, в первую очередь, - учебно-исследовательской).

Одним из способов формирования исследовательской компетентности (как процесса) будущих учителей является приобщения их исследовательским экспериментальным задачам различной направленности. Это позволяет сформировать у студентов-физиков экспериментальные исследовательские компетенции (как экспериментатора и педагога).

В литературе физический эксперимент в обучении рассматривается с нескольких позиций: как основной метод изучения явлений окружающего мира; как способ связи теории с практикой; как необходимый элемент содержания физического образования; как методическое средство, обеспечивающее наглядность обучения; развивающее интерес к физике; способ организации самостоятельной, творческой, и исследовательской деятельности учащихся.

Использование физического эксперимента является процессуальной основой реализации исследовательского подхода в основе которого лежит в организации и учебной и внеучебной научно-образовательной, поисково-творческой деятельности; в актуализации внутрипредметных, межпредметных и межцикловых связей; в усложнении содержательной и совершенствовании процессуальной сторон познавательской деятельности; в изменении взаимоотношений «учитель-ученик-коллектив учащихся» [1].

При реализации исследовательского подхода в обучении физике школа должна быть обеспечена необходимым физическим оборудованием, однако оборудование, имеющееся в школах, зачастую не позволяет реализовать задуманный эксперимент, но иногда проблему реализации эксперимента можно решать с использованием виртуального эксперимента, что не всегда целесообразно. В данном контексте как раз рационально предлагать студентам на выбор теоретически обосновать, разработать, сконструировать и испытать различное физическое оборудование для физического

школьного эксперимента (например, демонстрационного или лабораторного).

В практике физического школьного образования учебно-исследовательская деятельность направлена лишь на формирование исследовательских умений и навыков учащихся, при этом не достаточно учитываются личностно-смысловые аспекты рассматриваемой деятельности, позволяет сформировать у учащихся систему методологических знаний и опыт (самостоятельной) постановки применения исследовательских задач с различными условиями. Наиболее часто в качестве учебно-исследовательской деятельности по физике учащихся рассматривается выполнение лабораторных работ по подтверждению или проверки различных физических законов.

Важным элементом такой деятельности должно быть не получение уже известных констант и закономерностей, а получение: опыта, умений и навыков работы с оборудованием; умений изменить условия эксперимента с целью альтернативной проверки полученных результатов, выяснение начальных и краевых условий; и т.д.

Деятельностный подход к процессу обучения призван в значительной мере способствовать решению этой задачи. Одна из форм активной деятельности учащихся – мышление. Его развитие через добывание новых знаний путями решения учебных проблем, исследовательскую экспериментальную деятельность и другими способами значительно повышает эффективность процесса обучения, потому что теоретические знания, добытые осмысленно и многократно применённые в практической деятельности, становятся более прочными и значащими. Мы считаем, что основной целью осуществления деятельностного подхода не должна быть интенсификация обучения. Главное – приобретение учениками опыта творческой деятельности, как одного из компонентов содержания образования, а также развитие практических умений и навыков, аналитического мышления, способностей к самостоятельному добыванию информации и анализу проделанной работы.

Придание исследовательского характера всем видам физического эксперимента, как мы считаем, является важнейшим компонентом развития творческой деятельности учащихся в процессе обучения физике. В работах [1] – [3], [5] мы говорили о необходимости развития творческих способностей учащихся через выполнение лабораторных работ исследовательского характера. Под творческими навыками, которые можно формировать при выполнении физического эксперимента, мы понимаем такие:

- спланировать эксперимент, который дает возможность исследовать то или иное явление или проверить физический закон;
- самостоятельно выбрать метод решения теоретической задачи;

- самостоятельно выполнить исследование;
- уметь изменять условия эксперимента для достижения наиболее достоверного результата;
- самостоятельно оформить результаты эксперимента, математически их обработать;
- выделить причины погрешностей, проанализировать точность полученных результатов, сделать выводы из результатов эксперимента [2].

Для решения этих задач нами был разработан спецкурс «Исследование физических закономерностей экспериментальными методами» для 7-9 классов, который успешно внедряется в ГУ «Луганская специализированная школа № 1 имени профессора Льва Михайловича Лоповка». В рамках разработки данного курса была проведена исследовательская работа совместно со студентами по разработке и реализации лабораторных работ и исследовательского (проблемного) демонстрационного физического эксперимента.

Основное содержание программы

1. Введение – 17 ч

Эксперимент – основной метод исследования явлений природы.

Значение физического эксперимента, его виды. Теоретические основы исследований. Правила проведения опытов, техника безопасности. Планирование эксперимента. Обработка результатов эксперимента.

Запись результатов. Построение и анализ графиков по результатам эксперимента. Погрешности измерений. Выводы. Математический аппарат, необходимый для оформления и анализа результатов эксперимента. Практические измерения.

Лабораторные работы

Определение объёма цилиндра различными способами

1. Строение вещества – 5 ч

Атомистическая гипотеза. Молекулы. Движение молекул. Явление диффузии в природе и технике. Связь температуры тела со скоростью движения его молекул. Различные состояния вещества и их объяснение на основе молекулярно-кинетических представлений. Лабораторные работы, направленные на определение характеристик молекул и исследование их движения. Расчет характеристик молекул.

Лабораторные работы

Исследование броуновского движения с помощью микроскопа

Оценка диаметра молекул олеиновой кислоты

2. Движение и взаимодействие тел – 29 ч

Равномерное движение. Неравномерное движение, равноускоренное движение. Построение графиков реальных движений. Графический метод решения задач на движение. Экспериментальное исследование различных движений. Масса тела, плотность вещества, их экспериментальное определение. Силы в природе. Методика решения задач с непостоянными физическими величинами.

Закон сохранения импульса. Закон сохранения энергии. Методы решения сложных, комбинированных и нестандартных задач механики. Элементы статики. Динамика вращения. Элементы аэродинамики.

Лабораторные работы

Исследование движения пузырька воздуха в трубке с водой

Изучение неравномерного движения

Исследование зависимости плотности твердого тела от температуры

Исследование зависимости плотности жидкостей от температуры

Изучение движения тел при помощи стробоскопических фотографий

Определение ускорения свободного падения

Проверка закона сохранения импульса

Определение коэффициента восстановления при ударе тел

Определение моментов инерции тел

Изучение условий равновесия тел на наклонной плоскости

Моделирование распределения молекул атмосферы в поле тяготения

3. Давление твердых тел, жидкостей и газов – 5 ч

Механизмы передачи давления в различных телах. Закон Паскаля и его применение. Методика решения задач с применением закона Паскаля. Исследование атмосферного давления. Закон Архимеда. Методика решения задач с использованием закона Архимеда.

Лабораторные работы

Определение плотности неизвестной жидкости при помощи сообщающихся сосудов

4. Механизмы – 4 ч

Механизмы древности, труды Архимеда, Леонардо да Винчи и других ученых. Виды рычагов, рычаги в природе и технике. Блоки и их системы. Наклонная плоскость. «Золотое правило» механики. Экспериментальное изучение механизмов. Методика решения задач с применением «золотого правила» механики и свойств механизмов. Комбинированные механизмы.

Лабораторные работы

Изучение факторов, влияющих на КПД систем блоков

5. Тепловые явления – 10 ч

Температура. Виды теплопередачи. Теплопередача в природе и технике. Закон сохранения энергии в тепловых и механических процессах. Тепловые потери. Изменение агрегатных состояний вещества. Уравнение теплового баланса. Построение графиков тепловых процессов. Экспериментальное исследование тепловых характеристик веществ. Некоторые общие методы решения задач по термодинамике.

Лабораторные работы

Исследование процесса охлаждения жидкости

Определение удельной теплоёмкости неизвестной жидкости

Исследование тепловых свойств соленой воды

Определение удельной теплоты парообразования воды

6. Электрические явления – 13 ч

Основные понятия электростатики. Механизм перераспределения зарядов в проводниках. Характеристики электрического поля: напряженность, потенциал. Объяснение электростатических явлений. Принцип суперпозиции электрических полей. Конденсаторы. Принципы устройства источников тока. Электрические цепи. Исследование разветвленных электрических цепей. Правила расчета электрических цепей. Некоторые общие методы решения задач по электричеству.

Лабораторные работы

Исследование работы гальванического элемента и аккумулятора

Исследование электрических цепей

Исследование процесса разрядки конденсатора

7. Электромагнитные явления – 11 ч

История становления представлений о магнитном поле. Магнитные линии. Магнитная индукция. Принцип суперпозиции магнитных полей. Электромагниты. Электродвигатель. Электромагнитное реле. Магнитные свойства вещества. Постоянные магниты. Электромагнитная индукция. Самоиндукция. Системы электроизмерительных приборов. Магнитные явления в природе и технике.

Лабораторные работы

Исследование магнитного поля электромагнита

Исследование электромагнитных цепей

Исследование магнитных свойств катушек

Электроизмерительные приборы

8. Механические и электромагнитные колебания и волны – 7 ч

Условия возникновения колебаний, колебательные системы. Физический маятник. Нестандартные колебательные системы. Методы решения задач. Затухающие колебания. Вынужденные колебания. Механические волны. Звук. Электромагнитные колебания. Исследование затухающих электромагнитных колебаний. Световые волны. Законы геометрической оптики.

Лабораторные работы

Исследование колебаний физического маятника

Исследование затухающих колебаний

9. Световые явления – 4 ч

Лабораторные работы

Исследование законов преломления при помощи призм и лазерной указки

Обучающиеся выполняют работы фронтально, то есть имеют примерно одинаковое оборудование и выполняют одновременно какую-то одну работу. Им приходится больше помогать, они получают достаточно подробные описания работ и иногда

время на выполнение работы увеличивается. Но все работы предполагают изменение условий эксперимента, вариативность оборудования. Постепенно учащимся предоставляется больше самостоятельности в оформлении работ и планировании эксперимента.

В начале изучения физики (7 класс) самым доступным вариантом проведения лабораторных работ учащимися можно считать: а) фронтальный лабораторный эксперимент, в ходе которого учащиеся приобретают навыки работы с физическим оборудованием (одна из важных его задач); б) выполнение домашних лабораторных работ - во время которых ученики должны развивать в себе навыки проведения экспериментальной работы, в частности наблюдения и умение делать выводы. Если на этом этапе деятельности учащихся уделить достаточно внимания, то уже в 8-9 классах можно будет говорить о выполнении исследовательских экспериментальных задач на высоком уровне. Кроме выполнения фронтальных лабораторных работ и домашних экспериментов (домашнее задание), ученики выполняли свои первые научные исследования, результаты которых были представлены в виде докладов на «днях науки», которые проводятся в учебном заведении. Результатом такого взаимодействия должна быть соответственно выбрана мера педагогической помощи. По мере внедрения предложенных работ, совместно со студентами (благодаря анализу их деятельности по выполнению и описанию действий при выполнении экспериментов) были сформированы критерии и показатели к уровням педагогической помощи в соответствии с классом (7-9) и типом экспериментального задания, которые будут предложены учащимся школ.

Литература

1. Грицких А.В. Система организации исследовательской работы учеников профильных классов посредством электронных и натуральных физических лабораторных практикумов // Электронные ресурсы в непрерывном образовании: труды VI Международного научно-методического симпозиума «ЭРНО-2017» (Адлер). – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2017. С.16-19
2. Дик Ю.И., Кабардин О.Ф., Орлов В.А. и др. - Физический практикум для классов с углублённым изучением физики. – М., 1993. – 122с.
3. Грицких А.В., Проказа А.Т. Науково-педагогічні дослідження студентів з дидактики та методики фізики – один із ефективних засобів управління якістю підготовки майбутнього вчителя // Збірник наукових праць Кам'янець-Подільського національного університету. Серія педагогічна/ Кам'янець-Подільський: КПДУ імені Івана Огієнка, 2009. – Вип. 15: Управління якістю підготовки майбутніх учителів фізики та трудового навчання. – С.277-279.
4. Грицких А.В. Система организации исследовательской работы учеников профильных классов посредством электронных и натуральных физических лабораторных практикумов // Электронные ресурсы в

непрерывном образовании :труды VI Международного научно-методического симпозиума «ЭРНО-2017» (Адлер). – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2017. С.16-19

5. Грицких А.В. Лабораторный физический практикум в системе организации исследовательской работы будущих учителей физики // Труды Четвертого Международного Междисциплинарного молодежного симпозиума. Вып. 4.: Т2. – Ростов-на-Дону. Издательство Южного федерального университета, 2015. с.151-154.

References

1. Griczkikh A.V. Sistema organizacii issledovatel'skoj raboty' uchenikov profil'ny'kh klassov posredstvom e'lektronny'kh i naturny'kh fizicheskikh laboratorny'kh praktikumov // E'lektronny'e resursy' v nepreryvnom obrazovanii: trudy' VI Mezhdunarodnogo nauchno-metodicheskogo simpoziuma «E'RNO-2017» (Adler). – Rostov-na-Donu: Izdatel'stvo Yuzhnogo federal'nogo universiteta, 2017. S.16-19
2. Dik Yu.I., Kabardin O.F., Orlov V.A. i dr. Fizicheskij praktikum dlya klassov s uglublyonny'm izucheniem fiziki.- M., 1993. –122 s.
3. Griczkikh A.V., Prokaza A.T. Naukovo-pedagogi'chni' dosli'dzhennya studentiv'v z didaktiki ta metodiki fi'ziki –odin i'z effektivnikh zasobi'v upravli'nnya yaki'styu pi'dgotovki majbutn'ogo vchitelya // Zbi'rnik naukovikh pracz' Kam'yanecz'-Podi'l's'kogo naczion'al'nogo uni'versitetu. Seri'ya pedagogi'chna / Kam'yanecz'-Podi'l's'kij: KPDU i'meni I'vana Ogi'yenka, 2009. – Vip. 15: Upravli'nnya yaki'styu pi'dgotovki majbutni'kh uchiteli'v fi'ziki ta trudovogo navchannya. - S.277-279.
4. Griczkikh A.V. Sistema organizacii issledovatel'skoj raboty' uchenikov profil'ny'kh klassov posredstvom e'lektronny'kh i naturny'kh fizicheskikh laboratorny'kh praktikumov // E'lektronny'e resursy' v nepreryvnom obrazovanii: trudy' VI Mezhdunarodnogo nauchno-metodicheskogo simpoziuma «E'RNO-2017» (Adler). – Rostov-na-Donu: Izdatel'stvo Yuzhnogo federal'nogo universiteta, 2017. - S.16-19.
5. Griczkikh A.V. Laboratorny'j fizicheskij praktikum v sisteme organizacii issledovatel'skoj raboty' budushhikh uchitelej fiziki // Trudy' Chetvertogo Mezhdunarodnogo Mezhdisciplinarnogo molodezhnogo simpoziuma. Vy'p. 4.: T2. – Rostov-na-Donu: Izdatel'stvo Yuzhnogo federal'nogo universiteta, 2015. - S.151-154.

Akulov Y.V., Bezverhnyy A.L., Hrytskykh A.V. FORMATION OF RESEARCH COMPETENCE OF STUDENTS OF HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS OF PHYSICAL SPECIALTIES

The paper discusses the ideas of developing the creative abilities of students, reveals the possibilities of increasing the effectiveness of laboratory experiments in organizing the research work of students in classes with in-depth study of physics.

Key words: *creativity, research activity, physical experiment, independence, meta-subjectness.*

Акулов Юрий Васильевич, преподаватель физики «Ровеньковский строительный колледж»
E-mail: Auv.rvn@gmail.com

Akulov Yuriy, the teacher of physics of the State Institution «Construction College of Rovenki»

E-mail: Auv.rvn@gmail.com

Безверхний Андрей Лаврентьевич, учитель физики ГУ «Луганская специализированная школа I-III ступеней № 1 имени профессора Льва Михайловича Лоповка», учитель высшей категории, учитель-методист.

E-mail: bezverkhniy_andrey@mail.ru

Bezverkhny Andrey, Physics teacher, State Institution «Luhansk Specialized School of I-III Grades № 1 named after Professor Lev Mikhailovich Lopovok», teacher of the highest category

Грицких Алексей Владимирович, старший преподаватель кафедры физики и методики преподавания

физики Луганского государственного педагогического университета.

E-mail: aleksiig@gmail.com

Hrytskykh Oleksii. Senior Lecturer of the Department of Physics and Methods of Teaching Physics, Lugansk State Pedagogical University.

Рецензент: Рябичев Виктор Дронович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

Статья подана 14.04.2021

УДК 378

МЕТОДИКА И ТЕХНОЛОГИИ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ОДАРЕННЫХ ШКОЛЬНИКОВ

Воробьев С.Г., Каменев С.А., Чернопятко Е.А., Христиди Т.А., Сорока Н.В.

METHODS AND DISTANCE LEARNING TECHNOLOGIES OF GIFTED STUDENTS

Vorobjov S.G., Kamenев S.A., Chernopyatko E.A., Khristidi T.A., Soroka N.V.

В статье рассмотрена одна из форм работы с одаренными учащимися – использование дистанционных технологий обучения. Преимуществом дистанционного обучения является возможность учета индивидуальных темпов обучения учащихся, насыщенная и быстрая обратная связь с педагогом и другими учащимися. Участники дистанционных мероприятий имеют возможность по своему усмотрению дозировать взаимодействие с учебным материалом и педагогом, задавать ему свои вопросы по мере необходимости.

Ключевые слова: дистанционное обучение, методика и технологии дистанционного обучения, оболочка дистанционного обучения Moodle, обучение одаренных учащихся.

Введение. Одним из важнейших механизмов модернизации системы образования является внедрение информационно-коммуникационных технологий в учебный процесс. Это связано с развитием техники и образовательных технологий, а так же с переменами, которые вызваны развитием информационного общества, в котором основной ценностью становится информация и умение работать с ней. Главной задачей современной системы образования является разработка и реализация проектов и программ, способствующих формированию личности современного общества. Поэтому основной целью педагогических коллективов является создание условий для выявления и развития способностей каждого учащегося, формирования личности, имеющей прочные базовые знания и способной адаптироваться к условиям современной жизни. Для выявления и поддержки именно одаренных детей необходима индивидуализация образовательного процесса, внедрение профильного обучения, а также привлечение учащихся к обучению в дополнительных образовательных учреждениях. Решить эти задачи помогают технологии дистанционного обучения, предоставляющие возможность создания индивидуальной образовательной траектории для каждого учащегося.

Изложение основных материалов. Дистанционное обучение (ДО) – это способ организации процесса обучения, основанный на

использовании современных информационных и телекоммуникационных технологий, позволяющих осуществлять обучение на расстоянии без непосредственного контакта между преподавателем и обучающимися.

Большой вклад в решение проблем, связанных с информационно-коммуникационными технологиями в обучении внесли как российские, так и зарубежные ученые, а именно: Громов Г.Р., Гриценко В.И., Шолохович В.Ф., Агапова О.И., Кривошеев О.А., Пейперт, Клейман Г., Сендов Б., Хантер Б., Бондаренко С.В., Коваленко Н.Д., Бухарина М.Ю., Владимирова Л.П., Гершунский Б.С., Машбиц Е.И., Грейдина Н.Л., Дмитриева Е.И., Захарова М.К., Карамышева Т.В. и др.

С точки зрения Е.И. Машбиц и Б.С. Гершунского использование дистанционных технологий в образовании повышает возможность вариативности способов получения образования, облегчает доступ к информации всех участников образовательного процесса, позволяет по-новому организовать их взаимодействие, способствует развитию познавательной самостоятельности обучаемых.

Анализ научных трудов [1-5] показал, что технология дистанционного обучения заключается в обучении и контроле над усвоением материала с помощью компьютерной сети Интернет. Использование дистанционных технологий позволяет наладить обратную связь в процессе обучения, повысить степень усвоения учебных, коммуникативных и личностно-адаптивных компетенций. При применении дистанционных технологий у учащихся формируются навыки творческого, критического мышления, в значительной степени повышается уровень ИКТ-компетентности. Ученик работает максимум времени самостоятельно, учится самопланированию, самоорганизации, самоконтролю и самооценке. Это дает возможность ему осознать себя в деятельности, самому определять уровень усвоения знаний, видеть пробелы в своих знаниях и умениях.

При дистанционном обучении теоретический материал представлен информационными модулями, которые нацеливают учащихся на активную познавательную деятельность через использование интерактивных учебных материалов. Подача новой информации обеспечивается за счет использования различных средств: конспектов, презентаций, слайд-шоу, интерактивных лекций, лабораторных работ, пошагового объяснения, видеофрагментов, электронных версий книг, статей, журналов, электронной почты и т.п.

Рассмотрим виды интерактивных электронных ресурсов и их комбинации, используемые при ДО: лекция и конспект; виртуальная лабораторная работа; электронный учебник; средства коммуникации.

1. Интерактивная лекция и конспект – являются своеобразным контейнером для подачи информации.

Интерактивная лекция представляет собой последовательность блоков информации, сопровождаемых текстом, продублированных диктором, а также сопровождающихся анимацией, иллюстрациями, интерактивными схемами и видеорядом. Интерактивная лекция позволяет достичь целостного восприятия фрагмента учебного содержания в удобных для учащегося темпе и форме. Конспект – это электронный информационный ресурс, представляющий собой текст с иллюстрациями, формулами и таблицами, поэтому конспект удобно использовать как материал, сопровождающий и систематизирующий информацию интерактивной лекции.

Использование интерактивной лекции и конспекта позволяет ученику:

а) работать в индивидуальном темпе с возможностью просмотра наиболее сложного для него фрагмента теоретического или практического материала;

б) развивать способность самостоятельного проведения мысленных операций сравнения, анализа, синтеза, классификации и абстрагирования;

в) воспитать самостоятельность в изучении нового материала через активные виды деятельности.

Применение интерактивной лекции и конспекта дает учителю следующие возможности:

а) создать учебную ситуацию с гибкой и ветвящейся системой постановки проблемы и перечня задач, например: учащемуся предлагается новое задание с пошаговыми наводящими подсказками, что раскрывает возможность самостоятельного освоения новых знаний или новых способов деятельности;

б) предметно формировать общеучебные умения по составлению плана, контролю и оцениванию собственной деятельности. Этот достигается за счет того, что пошаговое объяснение материала разбито на логически завершённые части;

в) контролировать процесс усвоения знаний и новых способов деятельности учащегося на любом этапе процесса познания, т.е. оказаться «в нужный момент в нужном месте».

2. Интерактивные виртуальные лабораторные работы обеспечивают формирование умений и навыков, значимых для реализации учебной потребности в экспериментальной деятельности и в качестве ее альтернативы. Рассматривая виртуальную лабораторную работу в качестве одной из форм организации деятельности учащихся на основе электронных образовательных ресурсов (ЭОР), можно выделить следующие ее преимущества: возможность индивидуализации деятельности учащихся, самостоятельное получение выводов и самопроверка. Эти ресурсы обеспечивают развитие активно-деятельной формы обучения.

Использование этого вида ресурсов позволяет ученику:

а) включиться в новый вид деятельности и в изучение свойств объекта познания путем эксперимента;

б) приходить к верному решению самостоятельно, тем самым повышая успешность своей деятельности и, следовательно, мотивацию обучения;

в) повысить интерес к выполнению задания, т.к. имеется уникальная возможность проводить различные действия (двигать, перемещать, растягивать, сжимать, т.е. выбирать и изменять параметры) с виртуальными объектами, становясь активным участником исследования, а не пассивным потребителем информации из учебника.

Педагог (учитель), применяя в дистанционном обучении виртуальные лабораторные работы из ЭОР, получает возможность:

а) организовать продуктивную работу учащихся по получению субъективно нового знания и опыта;

б) включать лабораторные работы в изучение нового материала, дополняя его исследовательской составляющей, т.е. создавая проблемную ситуацию и предлагая к ее разрешению алгоритм: выдвигай гипотезы, пробуй, изучай и делай выводы;

в) показать визуализированное решение наиболее сложных задач по этапам от простого к сложному, как наглядное средство демонстрации;

г) реализовать исследовательскую деятельность учебного процесса: исследование свойств различных объектов через интерактив и моделинг.

3. Электронный учебник – это ресурс, предлагающий ребенку выбор образовательной траектории, что позволяет установить четкие логические соответствия между обязательной, базовой, и дополнительной, углубленного уровня, информацией [5].

Важным является также то, что электронный учебник позволяет обучающемуся, имея неограниченные пространственные и временные

рамки получения информации, в процессе самостоятельной работы находиться в режиме постоянной консультации с различными источниками информации (различные информационные и справочные мультимедийные приложения, ссылки на сетевые ресурсы), что также способствует удовлетворению повышенных образовательных потребностей.

В электронном учебнике может быть предусмотрена возможность протоколирования действий обучаемого для их дальнейшего анализа педагогом и для самоанализа. Момент самоанализа является особенно актуальным для одаренных детей, которые в силу своих личностно-возрастных характеристик нередко обладают большим количеством знаний, но не владеют методами их систематизации и оценивания.

4. Средства коммуникации представлены технологиями чатов, форумов, мозговых штурмов, электронных конференций, которые позволяют проводить обмен информацией, оперативные коллективные обсуждения, дискуссии и продолжительные по времени электронные семинары, конференции, выполнение проектов и другие виды работ, требующие оперативного вмешательства.

Рассмотрим подробнее отдельные средства коммуникативного взаимодействия, которые можно использовать при дистанционном обучении.

Электронная почта (E-mail) – один из наиболее часто используемых сервисов Интернет. Это асинхронная коммуникационная среда. При использовании не требуется согласование времени и места передачи и получения информации. Электронная почта позволяет обмениваться текстовыми, графическими и аудио сообщениями. И на сегодняшний день индивидуальное общение в приватной форме реализуется посредством именно электронной почты, которая имеется и внутри обучающих сред.

Электронная конференция – асинхронная или синхронная коммуникационная среда. Электронным средством общения здесь является электронная почта или структурированный форум, в соответствующих рубриках которого можно в письменном виде изложить свое мнение, задать вопрос и прочитать реплики других участников конференции. Считается, что участие в электронной конференции очень плодотворно для самообразования. Система Chat Room для общения имеет большое число разновидностей, но принципиальное назначение этих систем одно – кратковременное, интерактивное общение субъектов. Участники диалога должны войти в чат по заранее согласованному времени. Сообщения доступны внутри, пока идет сеанс чата. При закрытии сообщения автоматически уничтожаются.

Для проведения лекций онлайн удобно использовать сервис Zoom. Основными преимуществами данного сервиса являются:

возможность подключения большого количества участников; эффект очного взаимодействия (все друг друга видят и слышат); возможность показа презентации и организации виртуальной доски при помощи любой из программ на личном компьютере. Сервисом Zoom предусмотрен чат, в котором участники могут задавать дополнительные вопросы, не перебивая говорящего.

Форум – одна из разновидностей телекоммуникационных способов межличностного многостороннего интерактивного общения в обучающей или Интернет среде. Возможности: обсуждение научно-исследовательских проблем, проведение совещаний, ведение диспутов, круглых столов, дискуссий, мозговых штурмов, организация конференций, защита проектов, ведение консультаций, установочных семинаров, электронных семинаров-отчетов, обмен сообщениями. Оболочка позволяет организовать обратную связь педагога с обучающимися, например, результаты выполненных заданий можно комментировать, а по завершению модуля есть возможность заполнить рефлексивные анкеты.

Для реализации задач дистанционного обучения и работы с одаренными школьниками может широко использоваться оболочка дистанционного обучения Moodle (Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment). Moodle – свободно распространяемая, популярная, международная платформа поддержки дистанционного обучения (<http://www.moodle.org/>). Одно из важных свойств Moodle – универсальность. Преимущества оболочки заключается в том, что материал может быть представлен в любом виде – видео, аудио, текст, картинка. В Moodle можно разрабатывать разнообразные учебно-методические материалы – рабочие тетради, лекции, практические задания, уроки, тесты. [5].

Оболочка дистанционного обучения Moodle включает в себя:

- ресурсы – теоретические материалы, которые могут быть представлены в виде файлов, либо в виде ссылок на внешние сайты, т.е. в формате электронных документов;
- активные элементы, предназначенные для коммуникации (форум, чат, обмен сообщениями и т.п.) и проверки знаний (тесты, задания и т.п.);
- задания – эта задачи, ответ на которые должен быть предоставлен в электронном виде (ответ должен быть направлен в виде одного или нескольких файлов);
- рабочая тетрадь – эта письменная работа, реферат, отчет по длительной исследовательской или проектной деятельности, вариант контрольной работы. Получив задание, обучаемый должен внести ответ, который может редактировать после или до комментария педагога в течение определенного срока, если он установлен;
- опрос – механизм, позволяющий задать обучаемому вопрос с выбором одного или

нескольких вариантов ответа. Используя опрос можно узнать мнение слушателей дистанционного обучения по тому или иному вопросу;

- база данных – статьи, книги, гиперссылки, фотографии, плакаты и т.д., а также места для хранения файлов;

- семинар – вид занятий, где обучаемые дистанционного обучения должны оценивать результаты работы друг друга;

- урок – вид занятий, где учебный материал может выдаваться по частям. В конце части учебного материала можно задавать вопросы, по результатам ответа на которые, можно направлять обучающегося по определенной образовательной траектории;

- тесты – основное средство контроля знаний в системе дистанционного обучения Moodle.

Результаты исследований. Учебно-познавательная деятельность одаренных учащихся в системе дистанционного образования осуществляется посредством следующих технологий:

- педагогического общения в аудитории или с использованием электронных средств связи;

- самостоятельной работы обучающегося с учебными материалами.

Как правило, обучение одаренных школьников осуществляется по индивидуальному календарному графику, составленному на основе индивидуального учебного плана при условии использования в качестве содержательной базы образовательного стандарта.

Информационно-коммуникативные технологии позволяют привлечь к работе с одаренными учащимися ведущих преподавателей вузов.

При организации и проведении дистанционного обучения одаренных учащихся специфические особенности приобретает роль преподавателя – организатора учебного процесса. Принцип индивидуализации преподавания оказывается наиболее продуктивным для развития творческих способностей ребенка.

Роль преподавателя в процессе работы с одаренными школьниками по мере совершенствования технологий все более и более сводится к управлению учебным процессом, однако это не принижает его влияния в познавательной деятельности и не вытесняет его из учебного процесса. Процесс обучения строится, в основном, на самостоятельной познавательной деятельности обучающегося.

Апробация методики использования дистанционных технологий для обучения одаренных школьников проходит на экспериментальных площадках ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля», в частности, на кафедре «Физика». Преподаватели кафедры проводят регулярные видеоконференции, сетевые консультации по вопросам, касающимся физики,

прикладной физики, астрономии, астрофизики, радиоэлектроники и др., рассказывают об особенностях организации учебного процесса в университете и т.п. В ГОУ ВО ЛНР «ЛГУ им. В.Даля» ведется работа с одаренными учащимися с использованием дистанционных технологий по подготовке их к научно-исследовательской деятельности.

Авторами статьи разработан дистанционный курс «Основы исследовательской деятельности» по подготовке и написанию научно-исследовательских работ или проектов. Курс рассчитан на один учебный год и построен следующим образом: на страницах персонального сайта размещаются поэтапно «уроки» по выбору темы, плана исследования, постановки целей и задач исследования, объекта, предмета исследования; изучения и отбора нужной информации, составления плана практической части работы, оформление результатов. Публикация «уроков» отсрочена во времени. Каждый «урок» содержит не только теоретическую часть, но и практическое задание, которое необходимо выполнить за определенный период времени. Выполненная работа отправляется на проверку научному руководителю.

Несмотря на все видимые преимущества дистанционного обучения, оно не может служить основным способом обучения. Считаем, что ДО может использоваться только в качестве дополнительного, дающего возможность одаренным учащимся развивать свои способности. К тому же подмена преподавателя (учителя) компьютером разрушает систему тонкого учебного воздействия, обращенного к специфически человеческим особенностям взрослеющего организма.

Выводы. Дистанционное обучение – это одна из форм современного обучения и, соответственно, образования без посещения учебного заведения с помощью современных информационных технологий и систем телекоммуникации. Основными элементами современного дистанционного обучения являются:

- среда передачи информации (почта, телевидение, радио, информационные коммуникационные сети);

- методы, соответствующие технической среде обмена информацией.

Дистанционное обучение обладает рядом специфических достоинств:

- повышение качества обучения за счет применения современных средств, объемных электронных библиотек, разработанных интерактивных электронных ресурсов;

- возможность проведения обучения для большого количества учащихся;

- возможность создания единой образовательной среды, что особенно актуально для корпоративного обучения;

- снижение затрат на проведение обучения, связанных с арендой помещений, оплаты проезда и т.д.

Использование дистанционных технологий обучения – одна из форм работы с одаренными учащимися. Научные руководители ведут работу с одаренными детьми с использованием дистанционных технологий по подготовке их к научно-исследовательской деятельности, дают практические рекомендации по организации данного вида деятельности с применением информационных технологий и телекоммуникационных сервисов.

Представленные методические рекомендации могут быть применены для организации дистанционных школ и проведения дистанционного обучения одаренных школьников.

Л и т е р а т у р а

1. Чаленко А.В. Особенности организации компьютерного контроля знаний по курсу физики в системе дистанционного обучения студентов / Чаленко А.В., Лыштан Е.Ю., Воробьев С.Г., Каменев С.А. – Вестник Луганского гос. ун-та им. В. Даля, №10(40) 2020. С. 192-195.
2. Демкин В.П., Можаява Г.В. Технологии дистанционного обучения в школе: электронное учебное пособие. Томск, 2007. [Эл. ресурс]. Электрон. дан. URL: http://ido.tsu.ru/other_res/ep/do_umk/
3. Заседатель В.С. Организация дистанционного образовательного процесса в Томском государственном университете на основе Adobe Connect / XVIII Всероссийская научно-методическая конференция «Телематика'2011», Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, июнь 2011, Санкт-Петербург. С. 203-205.
4. Бордовский Г.А., Готская И.Б., Ильина С.П., Снегуров В.И. Использование электронных образовательных ресурсов нового поколения в учебном процессе: Научно-методические материалы / – СПб.: Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2007.
5. Андреев А.В., Андреева С.В., Доценко И.Б. Практика электронного обучения с использованием Moodle. – Таганрог: Изд-во. ТТИ ЮФУ, 2008. – 146 с.

R e f e r e n c e s

1. Chalenko A.V. Osobennosti organizacii komp'yuternogo kontrolja znanij po kursu fiziki v sisteme distancionnogo obuchenija studentov / Chalenko A.V., Lyshtvan E.Ju., Vorob'ev S.G., Kamenev S.A. – Vestnik Luganskogo gos. un-ta im. V. Dalja, №10(40) 2020.– S. 192-195.
2. Demkin V.P., Mozhaeva G.V. Tehnologii distancionnogo obuchenija v shkole: jelektronnoe uchebnoe posobie. Tomsk, 2007. [Jel. resurs]. Jelektron. dan. URL: http://ido.tsu.ru/other_res/ep/do_umk/
3. Zasedatel' V.S. Organizacija distancionnogo obrazovatel'nogo processa v Tomskom gosudarstvennom universitete na osnove Adobe Connect / XVIII Vserossijskaja nauchno-metodicheskaja konferencija «Telematika'2011», Sankt-Peterburgskij gosudarstvennyj universitet informacionnyh tehnologij, mehaniki i optiki, ijun' 2011, Sankt-Peterburg. S. 203-205.

4. Bordovskij G.A., Gotskaja I.B., Il'ina S.P., Snegurov V.I. Ispol'zovanie jelektronnyh obrazovatel'nyh resursov novogo pokolenija v uchebno-metodicheskom processe: Nauchno-metodicheskie materialy / – SPb.: Izd-vo RGPU im. A. I. Gercena, 2007.

5. Andreev A.V., Andreeva S.V., Docenko I.B. Praktika jelektronnogo obuchenija s ispol'zovaniem Moodle. – Taganrog: Izd-vo. TTI JuFU, 2008. – 146 s.

Vorobjov S.G., Kamenev S.A., Chernopyatko E.A., Khristidi T.A., Soroka N.V.

METHODS AND DISTANCE LEARNING TECHNOLOGIES OF GIFTED STUDENTS

The article considers one of the forms of work with gifted students – the use of distance learning technologies. The advantage of distance learning is the ability to take into account the individual learning rates of students, rich and fast feedback from the teacher and other students. Participants of remote events have the opportunity to dose communication with the educational material and the teacher at their own discretion, and ask them their questions as necessary.

Key words: distance learning, methods and technologies of distance learning, Moodle remote learning shell, teaching gifted students.

Воробьев Сергей Германович, кандидат технических наук, доцент кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: delfin_lg@mail.ru

Vorobjov Sergey, candidate of technical Sciences, associate Professor of the Department of physics of the state institution of higher education «Lugansk Vladimir Dahl state University».

Каменев Степан Александрович, старший преподаватель кафедры физики ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

E-mail: neiroxxx@mail.ru

Kamenev Stepan, senior lecturer of the Department of physics of the state institution of higher education «Lugansk Vladimir Dahl state University».

Чернопятко Екатерина Алексеевна, учитель английского языка высшей категории ГУ ЛНР «Луганское общеобразовательное учреждение – лингвистическая гимназия № 36 имени маршала Г.К. Жукова».

E-mail: chernopyatko.ekaterina@mail.ru

Chernopyatko Ekaterina, English teacher of the Higher qualification category. State Institution LPR «Lugansk educational institution-linguistic gymnasium № 36 named after Marshal G.K. Zhukov»

Христиди Татьяна Александровна, заместитель директора по учебно-воспитательной работе, учитель математики высшей категории, Муниципальное бюджетное общеобразовательное учреждение средняя общеобразовательная школа № 34 имени Героев Советского Союза братьев Игнатовых пгт. Джубга муниципального образования Туапсинский район.

E-mail: school4@tpi.kubannet.ru

Khristidi Tatyana, Deputy Director for educational work, teacher of mathematics of the highest category, municipal budget educational institution secondary school №34 named after the heroes of the Soviet Union Ignatov brothers village. DzhubgaTuapse municipal formation district.

Сорока Никита Владимирович, ассистент кафедры физики, аспирант кафедры технологии машиностроения и инженерного консалтинга ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

E-mail: winterevil@ya.ru

Soroka Nikita Vladimirovich, Physics Department Assistant, graduate student of the Department of Mechanical Engineering Technology and Engineering Consulting, SEE HT LPR "Lugansk Vladimir Dahl State University".

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 378

СОВРЕМЕННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Дадашева З.И. Дадашев Р.Р., Мисирова Л.М.

MODERN EDUCATION IN THE CONDITIONS OF DEVELOPMENT OF INFORMATION TECHNOLOGIES

Dadasheva Z.I., Dadashev R.R., Misirova L.M.

В данной статье мы рассматриваем формирование информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях реализации компетентностного подхода. В работе показано, что особое место в ней должны занимать электронные средства обучения, одним из которых является электронный учебно-методический комплекс по курсу «Общая физика».

Ключевые слова: компетентностный подход, электронный образовательный ресурс, электронный учебно-методический комплекс, модель, электронные средства обучения.

Сегодня мир вступил в новую эпоху — эпоху информационного общества, развитие которого связано с разработкой и применением информационно-коммуникационных технологий (ИКТ), подготовки населения к жизни и работе в условиях массового применения информационных и коммуникационных технологий, в том числе Интернета.

Информатизация предполагает существенное изменение содержания, методов и организационных форм образования, а также компетентностного подхода в образовании [1].

При этом должна быть решена проблема содержания образования на современном этапе, соотношения традиционных составляющих учебного процесса и новых информационных технологий.

Сегодня, реализуя компетентностный подход, мы опираемся на международный опыт, адаптируя его к традициям и потребностям России. И в этом направлении, на наш взгляд, актуальным является информатизация образовательного процесса [2].

Изменения в образовании коснулись и преподавания курса «Общая физика» в большей степени, чем других учебных дисциплин. Необходимо, чтобы данный курс, с одной стороны обеспечивал высокий уровень фундаментальных знаний, необходимых для изучения специальных учебных дисциплин, с другой - соответствовал новым требованиям гуманизации, открытости.

Возникла необходимость разработки конкретной технологии формирования

информационно-дидактических умений студентов будущих учителей физики на основе компетентностного подхода. Сложность педагогических систем ставит задачу формализации и, в конечном счете, моделирования учебного процесса. Таким образом, связующим звеном между педагогической теорией и практикой является педагогическое моделирование.

Моделирование в дидактике успешно применяется для решения следующих важных задач: оптимизации структуры учебного материала, улучшения планирования учебного процесса, управления познавательной деятельностью, управления учебно-воспитательным процессом, диагностики, прогнозирования, проектирования обучения.

В пользу этого исследовательского шага говорит то, что, во-первых, с помощью моделей можно спроектировать ту или иную область знаний, умений, способностей любого участника педагогической системы, какими они должны быть с точки зрения искомого результата; во-вторых, на основе модели можно рассмотреть изучаемое явление как систему, проверить истинность и полноту теоретических представлений; в-третьих, сопоставление того, что формирует система, с тем, что должно быть сформировано, позволяет квалифицировать имеющуюся педагогическую систему и осуществлять сознательный поиск путей ее совершенствования. В предлагаемой нами модели формирования информационно-дидактических умений будущих учителей физики на основе компетентностного подхода осуществляем в курсе: «Общая физика», в которой выделены следующие блоки:

Уровни подготовленности (знания и умения по школьному курсу физике, информатике и ИКТ). В нашей модели мы для определения уровня подготовленности студентов предлагаем использовать классификационную трехуровневую измерительную шкалу, где будут использоваться тесты двух первых уровней усвоения по В.П. Беспалько.

- 1) низкий – не достигшие 1 уровня усвоения;
- 2) средний – достигшие 1 уровня усвоения;
- 3) высокий – достигшие 2 уровня усвоения.

В условиях информатизации образования для диагностики уровня подготовленности студентов обоснованно проводить мониторинг образовательного процесса с использованием компьютерного тестирования, так как оно является наиболее продуктивной и прогрессивной формой контроля на сегодняшний день, позволяющей сочетать содержательную наполненность измерительных материалов с большой точностью оценки результатов испытаний.

Одним из значимых компонентов профессиональной подготовки будущего учителя физики в вузе являются знания и умения, опирающиеся на курсы общей физики.

Организационно курс «Общая физика» обеспечивается следующим учебно-методическим комплексом:

Лекционные занятия, которые предполагают компьютерное сопровождение в демонстрационном режиме. Для обеспечения визуализации учебной информации лекционного курса нами были разработаны *компьютерные слайд-лекции* для демонстрации учебного материала. *Компьютерные демонстрации* как один из видов мультимедийных средств обучения (МСО) удовлетворяют фундаментальному принципу дидактики — принципу наглядности. Обеспечение наглядности при использовании МСО реализуется на принципиально новом, более высоком уровне, позволяя, по утверждению специалистов, в 2—3 раза (до 75 %) увеличить долю усваиваемого материала, так как параллельно задействованы органы зрения и слуха.

Не имея достаточного уровня подготовки в области физики, учитель не сможет эффективно решать методические задачи. На научно-теоретической подготовке базируются и методические умения учителя в области специфических методов и приемов обучения физике: планировать и ставить демонстрационный эксперимент как ведущий специфический метод обучения; организовать работу учащихся с учебником на уроках и дома; правильно подобрать учебные задачи для достижения учащимися запланированного программой уровня умений и навыков; организовать лабораторную работу с учетом ее места в учебном процессе, в зависимости от ведущего метода обучения, в сочетании с другими элементами урока.

Важнейшей задачей учителя является моделирование, проектирование и конструирование учебного процесса для любого сочетания начальных условий педагогической ситуации.

Нужно приложить не мало усилий, чтобы подготовить учащихся к жизни и работе в условиях массового применения информационных и коммуникационных технологий, в том числе Интернета.

Другое ключевое условие — создание эффективной системы информационной подготовки педагога для работы в образовательных учреждениях различного уровня и типа.

Развитие информационного общества, предполагает широкое применение информационно-коммуникационных технологий в образовании.

То есть, педагог из функционера должен превращаться в менеджера учебного процесса, где последний «начинает осознаваться в качестве двух взаимосвязанных деятельностей — преподавательской (педагогической) и ученической (учебной)...» [3].

Глобальное внедрение компьютерных технологий во все сферы деятельности, формирование новых коммуникаций и высокоавтоматизированной информационной среды стали не только началом преобразования традиционной системы образования, но и первым шагом к формированию информационного общества.

Применение компьютеров в образовании уже привело к появлению нового поколения информационных образовательных технологий, которые позволили повысить качество обучения, создать новые средства воспитательного воздействия, более эффективно взаимодействовать с вычислительной техникой.

Появление Интернета — глобальной компьютерной сети с ее практически неограниченными возможностями сбора и хранения информации, передачи ее индивидуально каждому пользователю — пример успешной реализации ИКТ.

Иными словами, в качестве главного смысла современного образования необходимо рассматривать его потенциальные возможности в развитии отдельного человека, человеческих сообществ, культуры и социума в целом.

Решение этой проблемы связано с модернизацией содержания, и оптимизацией способов, технологии организации образовательного процесса.

Сегодня многие преподаватели владеют современными информационными технологиями, активно применяют их на занятиях через организацию тестирования, представления презентаций, применения электронных образовательных ресурсов нового поколения, что позволяет сделать образовательный процесс более эффективным, интересным, наглядным, современным, осуществлять личностно-ориентированный и компетентностный подход в обучении.

Формирование информационно-коммуникационной компетентности студентов нами рассматривается на примере выполнения творческих проектов. Творческий подход позволяет студенту проявить себя, а преподавателю

полноценно получить информацию о том владеет ли студент данным курсом. Такие проекты развивают творчество, самостоятельность, готовят их к профессиональной деятельности.

В настоящее время наибольшего эффекта от применения компьютеров можно достичь сопровождением чтения лекций компьютерным иллюстрационным материалом. Речь идет не только об отдельных лекционных демонстрациях сложных физических явлений, а о практически постоянном использовании динамических и статистических иллюстраций.

Литература

1. Дадашев И.Н., Дадашева З.И. Современные информационные технологии и умения будущих бакалавров./IV Ежегодная итоговая конференция профессорско-преподавательского состава Чеченского государственного университета./ Грозный 2015. С.117-122.
2. Дадашева З.И. Формирование информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях реализации компетентностного подхода / Диссертация на соискание ученой степени кандидата педагогических наук / Махачкала, 2012. - 169 с.
3. Бермус А.Г. Модернизация образования: философия, политика, культура: Научная монография / А.Г. Бермус. - М.: «Канон+», РООИ «Реабилитация». 2008. - 384 с.

References

1. Dadashev IN, Dadasheva ZI Modern information technologies and skills of future bachelors. / IV Annual final conference of the faculty of the Chechen State University. / Grozny 2015. pp. 117-122.
2. Dadasheva Z.I. Formation of information and didactic skills of future physics teachers in the context of the implementation of a competence-based approach. / Dissertation for the degree of candidate of pedagogical sciences / Makhachkala, 2012. - 169 p.
3. Bermus A.G. Modernization of education: philosophy, politics, culture: Scientific monograph / A.G. Bermus. - M.: "Canon +", ROOI "Rehabilitation". 2008. - 384 p.

Dadasheva Z.I., Dadashev R.R., Misirova L.M. MODERN EDUCATION IN THE CONDITIONS OF DEVELOPMENT OF INFORMATION TECHNOLOGIES.

In this article, we consider the formation of information and didactic skills of future physics teachers in the context of the implementation of the competence-based approach. The work shows that a special place in it should be occupied by electronic teaching aids, one of which is an electronic educational and methodological complex for the course "General Physics".

Key words: competence-based approach, electronic educational resource, electronic educational and methodological complex, model, electronic teaching aids.

Дадашева Зарема Имрановна, к.п.н., доцент кафедры «Общая физика», ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет», г. Грозный.

Dadasheva Zarema Imranovna, Ph.D., Associate Professor of the Department of General Physics, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Chechen State University", Grozny.

Дадашев Рашид Рахманович, магистр физико-математического факультета, ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет», г. Грозный.

Dadashev Rashid Rakhmanovich, Master of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Мисирова Линда Мовладиевна, магистр физико-математического факультета, ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет», г. Грозный.

Misirova Linda Movladiyevna, Master of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Рецензент: Гутько Юрий Иванович, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 378

ФОРМИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННО - ДИДАКТИЧЕСКИХ УМЕНИЙ ПЕДАГОГОВ

Дадашева З.И.

FORMATION OF INFORMATION AND DIDACTIC SKILLS OF TEACHERS

Dadasheva Z.I.

В данной статье мы рассматриваем формирование информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях реализации компетентного подхода, где средством является электронный учебно-методический комплекс по курсу «Общая физика». В настоящее время умение современного учителя применять и разрабатывать электронные образовательные ресурсы в практике обучения является составляющей его профессиональной компетентности в области решения информационно-дидактических задач.

Ключевые слова: Электронный образовательный ресурс, электронный учебно-методический комплекс, формирование информационно-дидактических умений, будущий учитель физики, компетентный подход, компетенции.

В конце XX в. мир вступил в новую эпоху — эпоху информационного общества, развитие которого связано с разработкой и применением информационно-коммуникационных технологий (ИКТ).

Становление информационного общества, таким образом, предполагает широкое применение ИКТ в образовании. Это определяется следующими обстоятельствами:

во-первых, внедрение ИКТ в образование существенным образом ускоряет передачу знаний и накопленного технологического и социального опыта человечества не только от поколения к поколению, но и от одного человека к другому;

во-вторых, современные ИКТ, повышая качество обучения и образования, позволяют человеку успешнее и быстрее адаптироваться к окружающей среде и происходящим социальным изменениям;

в-третьих, активное и эффективное внедрение этих технологий в образование является важным фактором создания системы образования, отвечающей требованиям информационного общества и процессу ее модернизации.

Применение компьютеров в образовании уже привело к появлению нового поколения информационных образовательных технологий, которые позволили повысить качество обучения, создать новые средства воспитательного

воздействия, более эффективно взаимодействовать с вычислительной техникой и педагогам, и обучаемым. По мнению специалистов, новые информационные образовательные технологии на основе компьютерных средств позволяют повысить эффективность занятий на 20—30 %. Внедрение компьютера в сферу образования стало началом революционного преобразования традиционных методов и технологий обучения и всей отрасли образования. Важную роль на этом этапе играли коммуникационные технологии: телефонные средства связи, телевидение, космические коммуникации, которые в основном применялись при управлении процессом обучения и системах дополнительного обучения.

Появление Интернета — глобальной компьютерной сети с ее практически неограниченными возможностями сбора и хранения информации, передачи ее индивидуально каждому пользователю — пример успешной реализации ИКТ.

Новый импульс информатизации образования дает развитие информационных телекоммуникационных сетей.

Мы считаем, что для разработки и эффективной реализации процесса формирования информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях компетентного подхода должна основываться на двух гипотезах:

1) системообразующим фактором процесса формирования информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях компетентного подхода является способность моделировать объекты, позволяющий индивидуализации личностно-профессионального и информационного совершенствования их;

2) эффективность процесса формирования информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях компетентного подхода будет определяться соблюдением следующих требований:

- соответствием релевантной ей педагогической реальности;
- последовательной реализаций

организационно-деятельностных этапов;

- практичностью (возможностью применения в рамках реального учебно-воспитательного процесса);

- наличием средств контроля и оценки.

Отличительные для конца XX – начала XXI века изменения в характере образования – направленности, целях, содержании – все более явно ориентируют его на «свободное развитие человека», на творческую инициативу, самостоятельность обучаемых, конкурентоспособность, мобильность будущих специалистов.

Подготовка учителей физики представляет собой сложный и длительный процесс становления профессиональной культуры, компетенций обуславливающий в дальнейшем соответствующее качество образования школьников. Компетенции будущего учителя физики проявляются при решении им профессиональных задач в процессе получения образования [1].

Реализация компетентностного подхода в образовании требует принципиального изменения позиции учителя, преподавателя, в том числе и физики. Его главной задачей становится мотивация учащихся на проявление инициативы и самостоятельности, организация самостоятельной деятельности учащихся, в которой каждый (в том числе и сам педагог) мог бы реализовать свои способности и интересы [2].

Учитель физики, не имеющий должной фундаментальной подготовки, теряет ориентировку в изменяющихся условиях, оказывается не подготовленным к преподаванию новых разделов, затрудняется в выделении смысловых инвариантных частей, которые должны подвергаться в процессе обучения смысловой вариативности.

Глубокое знание своего предмета важно и с педагогической точки зрения. Справедливо отметить, что учитель, не владеющий основательными знаниями своего предмета, не пользуется авторитетом среди учащихся, не может обеспечить единство обучения и воспитания, какой бы современной методикой он ни пользовался [3].

Дидактическая подготовка педагога выступает составной частью процесса профессионального становления специалиста. Совершенствование дидактической подготовки, соответственно и формирования дидактических умений, рассматривается как одно из решающих условий научно обоснованного построения учебно-воспитательного процесса, повышения производительности педагогического труда [4].

Особое значение в формировании информационно-дидактических умений имеет усвоение человеком знаний о том, каким образом надо действовать в определенных условиях. Такого рода знания необходимы для овладения эффективными приемами как практических, так и умственных действий.

К.К. Платонов [5] подчеркивает, что

формирование дидактических умений будет более продуктивным только в том случае, если в работе со студентами не ограничиваться лишь показом хороших уроков или демонстраций элементов передового педагогического опыта, а включать их в активную и разнообразную деятельность, связанную с их будущей профессиональной деятельностью.

Такой подход соответствует не только структуре учебно-познавательной деятельности, но и согласуется с требованием общей теории управления максимально учитывать природу процесса, в нашем случае – природу дидактического процесса усвоения знаний, который, как известно, состоит из таких основных элементов, как постановка перед учащимися и осознание ими цели усвоения; создание необходимых стимулов к усвоению; восприятие учащимися в различных формах.

Все перечисленные умения направлены на выполнение информационно-дидактических задач будущего учителя физики, в процессе становления профессиональной компетентности.

Литература

1. Иванов Д.А. О ключевых компетенциях и компетентностном подходе в образовании / Д.А. Иванов // Школьные технологии. -2007.-№5.-С.51-61.
2. Бермус А.Г. Модернизация образования: философия, политика, культура: Научная монография / А.Г. Бермус. - М.: «Канон+», РООИ «Реабилитация», 2008. - 257 с.
3. Забродин Д. М. Совершенствование научной подготовки будущих учителей / Д.М. Забродин // Сов. педагогика. - 1980.№10.- С. 109-116с.
4. Подымова Л. С. Дидактическая подготовка учителя начальных классов в системе высшего педагогического образования: дис. ... канд. пед. наук. М., 1983. 183 с.
5. Платонов К.К. О знаниях, навыках, умениях / К.К.Платонов // Сов. Педагогика. - 1963. - №11. - С.98.

References

1. Ivanov D.A. On key competences and competence-based approach in education / D.A. Ivanov // School technologies. -2007.-№5.-C.51-61.
2. Bermus A.G. Modernization of education: philosophy, politics, culture: Scientific monograph / A.G. Bermus. - M.: "Canon +", ROOI "Rehabilitation", 2008. - 257 p.
3. Zabrodin D. M. Improving the scientific training of future teachers / D.M. Zabrodin // Sov. pedagogy. - 1980.№10.- S. 109-116s.
4. Podymova LS Didactic training of primary school teachers in the system of higher pedagogical education: dis. ... Cand. ped. sciences. M., 1983.183 p.
5. Platonov K.K. About knowledge, skills, abilities / K.K. Platonov // Sov. Pedagogy. - 1963. - No. 11. - P.98.

Dadasheva Z.I.

FORMATION OF INFORMATION AND DIDACTIC SKILLS OF TEACHERS.

In this article, we consider the formation of information and didactic skills of future physics teachers in the context of

the implementation of the competence approach, where the means is an electronic educational and methodological complex for the course "General Physics". At present, the ability of a modern teacher to apply and develop electronic educational resources in teaching practice is a component of his professional competence in the field of solving information and didactic problems.

Key words: *Electronic educational resource, electronic educational and methodological complex, formation of information and didactic skills, future physics teacher, competence-based approach, competencies.*

Дадашева Зарема Имрановна, к.п.н., доцент
кафедры «Общая физика», ФГБОУ ВО «Чеченский

государственный университет», г. Грозный.

Dadasheva Zarema Imranovna, Ph.D., Associate
Professor of the Department of General Physics, Federal State
Budgetary Educational Institution of Higher Education
"Chechen State University", Grozny.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н.,
проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный
университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

УДК 378

ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ КОМПЕТЕНТНОСТЬ УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ**Дадашева З.И., Дадашев С.И.****PROFESSIONAL COMPETENCE OF A PHYSICS TEACHER****Dadasheva Z.I., Dadashev S.I.**

В данной статье мы рассматриваем формирование информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях реализации компетентностного подхода. В работе показано, что особое место в ней должны занимать электронные средства обучения.

Ключевые слова: компетентностный подход, электронный образовательный ресурс, электронный учебно-методический комплекс, модель, электронные средства обучения.

Развитие современного информационного общества связано с разработкой и применением информационно-коммуникационных технологий.

Реализация компетентностного подхода в образовании требует принципиального изменения позиции учителя, преподавателя, в том числе и физики. Овладение ключевыми профессиональными компетенциями является архиважной задачей современной педагогической теории и практики. По словам Д.А. Иванова, педагог «создает условия, «развивающую среду», в которой становится возможным выработка каждым учащимся на уровне развития его интеллектуальных и прочих способностей определенных компетенций, в процессе реализации им своих интересов и желаний, в процессе приложения усилий, взятия на себя ответственности и осуществления действий в направлении поставленных целей» [1].

Подготовка будущих преподавателей физики представляет собой сложный и длительный процесс становления профессиональной культуры, компетенций обуславливающий в дальнейшем соответствующее качество образования.

Выбирая стратегию преподавания разделов курса общей физики, методы и формы, направленные на формирование профессиональной компетентности студентов, мы исходим из того, что основной задачей курса является:

- выработка в большей степени определенного физического стиля мышления;
- развитие профессиональной направленности;
- формирование знаний, умений, навыков;
- научение непрерывно развивающимся корпоративным способам целостной педагогической деятельности;
- развитие личностных качеств.

В модели профессиональной компетентности учителя физики [2] все составляющие не просто суммируются, но находятся во взаимосвязи (рис.1).

Не обладая знаниями и умениями в области психолого-педагогической компетентности, учитель не сможет сконструировать и организовать учебный процесс, направленный на развитие каждого учащегося, не сможет осуществить дифференциацию обучения, оценить уровень собственной деятельности.

Важнейшей задачей учителя является моделирование, проектирование и конструирование учебного процесса для любого сочетания начальных условий педагогической ситуации.

Одним из важных компонентов модернизации высшей школы является информатизация образования, подготовка будущих специалистов к использованию информационных и коммуникационных технологий, в частности электронных образовательных технологий, в своей профессиональной деятельности.

Нужно приложить не мало усилий, чтобы подготовить учащихся к жизни и работе в условиях массового применения информационных и коммуникационных технологий, в том числе Интернета.

Другое ключевое условие — создание эффективной системы информационной подготовки педагога для работы в образовательных учреждениях различного уровня и типа. Как показывают последние исследования, выпускники не только российских образовательных учреждений, но и образовательных учреждений всех высокоразвитых стран отстают в освоении ИКТ, необходимых и для эффективной деятельности в экономике, основанной на знаниях, и для активного участия в жизни информационного общества.

Развитие информационного общества, предполагает широкое применение информационно-коммуникационных технологий в образовании.

То есть, педагог из функционера должен превращаться в менеджера учебного процесса, где последний «начинает осознаваться в качестве двух взаимосвязанных деятельности — преподавательской (педагогической) и ученической (учебной)...» [3].

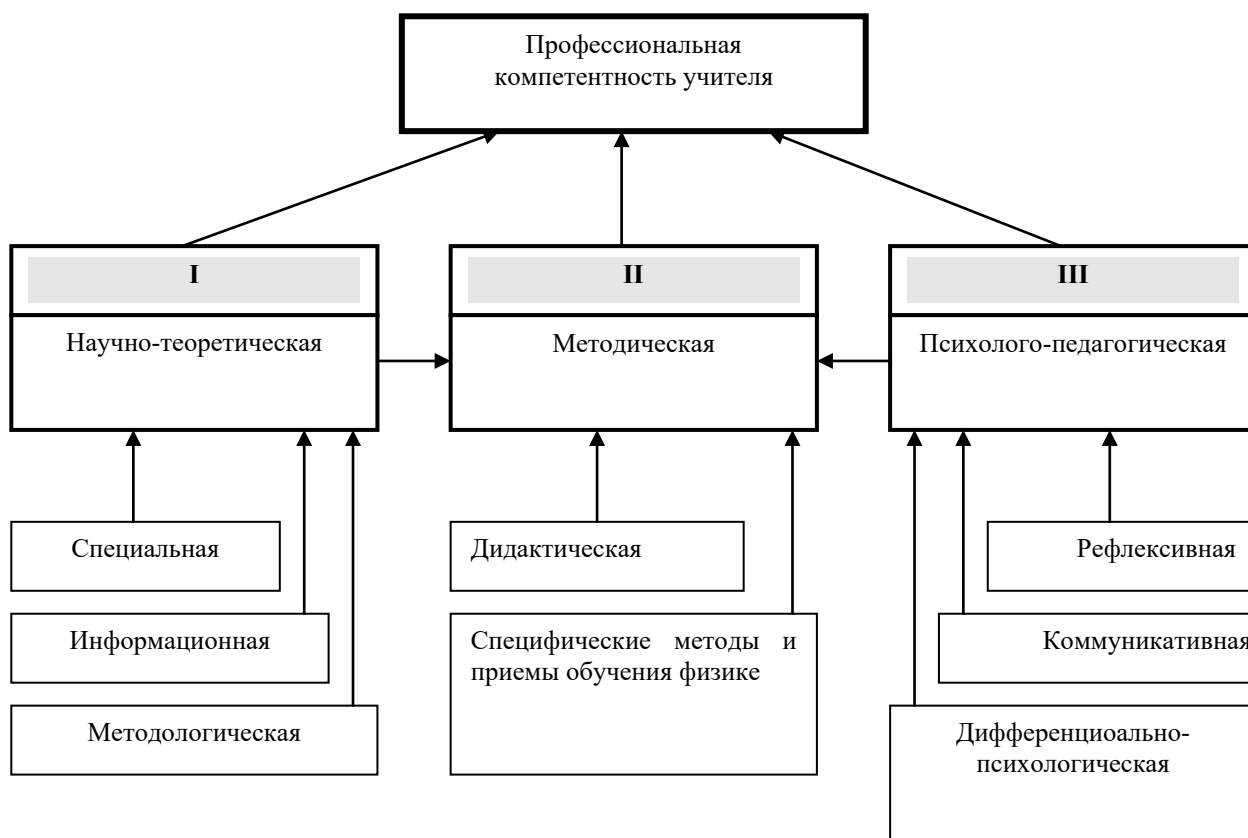


Рис. 1. Модель профессиональной компетентности учителя физики (И.В. Гребенев, О.В. Лебедева)

Так, по мнению В.А. Сластенина, И.Ф. Исаева, А.И. Мищенко и Е.Н. Шиянова, профессиональная компетентность педагога выражает «единство его теоретической и практической готовности к осуществлению педагогической деятельности», при этом основу структуры компетентности учителя составляют многочисленные педагогические умения, характеризующие эту готовность [4].

Новым этапом глобальной технологизации передовых стран стало появление ИКТ — современных телекоммуникационных сетей и их конвергенция с информационными технологиями, что явилось основой для создания инфосферы: объединение компьютерных систем и глобальных телекоммуникационных сетей сделало возможным создание и развитие планетарной инфраструктуры, связывающей все человечество.

Появление Интернета — глобальной компьютерной сети с ее практически неограниченными возможностями сбора и хранения информации, передачи ее индивидуально каждому пользователю — пример успешной реализации ИКТ. В этих условиях изменилось содержание функций и соответственно педагогических умений современного педагога, характеризующих его профессиональную компетентность. Уверенно себя может чувствовать только педагог, овладевший такими новыми средствами интеллектуальной деятельности, как ИКТ.

Основной целью образования на сегодняшний

день является, процесс формирования способности к активной деятельности, к труду во всех его формах, в том числе к творческому, профессиональному труду. Эти изменения в образовании вновь актуализировали проблемы профессиональной подготовки будущих специалистов. Сторонники компетентностной модели считают, что основным недостатком традиционного образования является авторитарность системы, в основе которой лежит педагогика требований, отсутствие практического результата, значимого вне системы образования, а также недостаток интереса к учению. Традиционное образование ориентировано, прежде всего, на усвоение человеком определенных, заранее выбранных образцов (знаний, умений, форм поведения, идеологических установок и т.д.). В таких условиях довольно сложно проявиться индивидуальности человека, его самореализация, творчество предполагают выход за пределы заданных образцов, сформировавшихся стереотипов. Человек выступает в роли объекта, а отнюдь не субъекта образования [5].

Интерес ученых к этой проблеме не ослабевает, что свидетельствует об особой значимости и актуальности и ее решения на современном этапе модернизации и развития системы непрерывного образования. Повышение качества образования является одной из актуальных проблем не только для России, но и для всего мирового сообщества. Решение этой проблемы связано с модернизацией

содержания, и оптимизацией способов, технологии организации образовательного процесса.

Таким образом, проведенное нами исследование сущности компетентностного подхода, его роли и места в иерархии существующих подходов позволяет сделать вывод об актуальности и необходимости его использования при определении требований к уровню формирования информационно-дидактических умений будущего учителя физики на современном этапе развития общества и образования.

Л и т е р а т у р а

1. Иванов Д.А. О ключевых компетенциях и компетентностном подходе в образовании / Д.А. Иванов // Школьные технологии. - 2007. - №5. - С.51-61.
2. Забродин Д. М. Совершенствование научной подготовки будущих учителей / Д.М. Забродин // Сов. педагогика. - 1980. - №10. - С. 109-116.
3. Бермус А.Г. Модернизация образования: философия, политика, культура: Научная монография / А.Г. Бермус. - М.: «Канон+», РООИ «Реабилитация», 2008. - 243 с.
4. Педагогика: Учебное пособие для студентов педагогических учебных заведений / В.А.Сластенин, И.Ф. Исаев, А.И. Мищенко, Е.Н. Шиянов. — М.: Школа-Пресс, 1997. — 512 с.
5. Дадашева З.И. Формирование информационно-дидактических умений будущих учителей физики в условиях реализации компетентностного подхода / Диссертация на соискание ученой степени кандидата педагогических наук / Махачкала, 2012. - 156 с.

R e f e r e n c e s

1. Ivanov D.A. Key competencies and competence-based approach in education / D.A. Ivanov // School technologies. - 2007.-№5.-С.51-61.
2. Zabrodin D. M. Improving the scientific training of future teachers / D.M. Zabrodin // Sov. pedagogy. - 1980.№10.- S. 109-116s.
3. Bermus A.G. Modernization of education: philosophy, politics, culture: Scientific monograph / A.G. Bermus. - M. : "Canon +", ROOI "Rehabilitation", 2008. - 243 p.

4. Pedagogy: A textbook for students of pedagogical educational institutions / V.A. Slastenin, I.F. Isaev and A.I. Mishchenko, E.N. Shiyanov. - M. : School-Press, 1997. - 512 p.

5. Dadasheva Z.I. Formation of information and didactic skills of future physics teachers in the context of the implementation of a competence-based approach. / Dissertation for the degree of candidate of pedagogical sciences / Makhachkala, 2012.-156 p.

Dadasheva Z.I., Dadashev S.I.

PROFESSIONAL COMPETENCE OF A PHYSICS TEACHER

In this article, we consider the formation of information and didactic skills of future physics teachers in the context of the implementation of the competence-based approach. The work shows that a special place in it should be occupied by electronic teaching aids.

Key words: competence-based approach, electronic educational resource, electronic educational and methodological complex, model, electronic teaching aids.

Дадашева Зарема Имрановна, к.п.н., доцент кафедры «Общая физика», ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет», г. Грозный.

Dadasheva Zarema Imranovna, Ph.D., Associate Professor of the Department of General Physics, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Chechen State University", Grozny.

Дадашев Саламу Изюмхаджиевич, магистр физико-математического факультета, ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет», г. Грозный.

Dadashev Salamu Izyumkhadzhiyevich, Master of Physics and Mathematics, Chechen State University, Grozny.

Рецензент: Корсунов Константин Анатольевич, д.т.н., проф. ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».

Статья подана 19.04.2021 года

ТРЕБОВАНИЯ

к оформлению статей для публикации в
«ВЕСТНИК: научный журнал»
ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля»

ПУБЛИКАЦИЯ СТАТЕЙ

1. Документы и материалы собираются на кафедрах (факультетах/институтах), ответственных за сборник, затем передаются в издательство университета.
2. К публикации принимаются статьи, материалы которых соответствуют научному направлению сборника.
3. Статьи, не соответствующие научному направлению журнала или Требованиям к оформлению статей, редакцией не принимаются.
4. Для принятия решения о публикации статьи в журнале необходимо предоставить:

АВТОРЫ, которые не являются сотрудниками университета:

1. Рецензия (подписанная проф. или чл.ред.кол)
2. Сопроводительное письмо (с указанием, что статья ранее нигде не публиковалась) от организации, где работают авторы, и сведения об авторах статьи, рецензию (подписанная отделом кадров университета).
3. Заявка автора(ов)
4. Анкета автора(ов)
5. Проверка на антиплагиат (распечатка)
<https://xn----7sbbaar5acc1ard1a0beh.xn--p1ai/spravka-antiplagiat>
<https://text.ru/antiplagiat>
<https://content-watch.ru/text/>
<https://advego.com/antiplagiat/>

ДЛЯ СОТРУДНИКОВ УНИВЕРСИТЕТА:

1. Рецензия (подписанная проф. или чл.ред.кол)
2. Заявка автора(ов)
3. Анкета автора(ов)
4. Проверка на антиплагиат (распечатка)
<https://xn----7sbbaar5acc1ard1a0beh.xn--p1ai/spravka-antiplagiat>
<https://text.ru/antiplagiat>
<https://content-watch.ru/text/>
<https://advego.com/antiplagiat/>

– электронный вариант статьи (первая фамилия автора статьи):

Название файла статьи: <фамилия автора_город> например – Петров_Луганск.doc.

Название английского файла Petrov_Lugansk.doc.

Статья сохраняется в форматах *.doc, *.docx, *.rtf.

– рецензия *.doc, *.docx.

Внимание! Убедительная просьба, проверить получение редакцией материалов.

Внимание! Редакция оставляет за собой право возвращать статьи авторам на доработку в следующих случаях: правка ошибок после вычитки, статья небрежно оформлена и не соответствует требованиям редакции.

ДЛЯ ВЫЧИТКИ текст статьи распечатывают в соответствии требованиями:

- формат А4 (поля по 20 мм с каждой стороны);
- шрифт Times New Roman,
- размер –14 пт,
- межстрочное расстояние – 1,5 строки.
- четкая печать на лазерном или струйном принтере.

Статьи подаются в одном экземпляре, напечатанные на лазерном (струйном) принтере, с подписями всех авторов, **e-mail: izdat.lguv.dal@gmail.com**, а также предоставляются данные на английском языке (авторы статьи, заглавие статьи; наименование организации, ведомства, должность, электронный адрес автора); аннотация; ключевые слова; список литературы латиницей).

СТРУКТУРА СТАТЬИ

УДК

НАЗВАНИЕ СТАТЬИ (на языке текста)**Фамилии, инициалы авторов (на языке текста статьи)****НАЗВАНИЕ СТАТЬИ (на английском языке)****Фамилии, инициалы авторов (на английском языке)***Аннотация на языке статьи***Ключевые слова:**

Основной текст статьи, включающий следующие разделы:

Введение**Изложение основного материала****Результаты исследований****Выводы****Л и т е р а т у р а н а я з ы к е т е к с т а с т а т ь и****References латиницей****Фамилии, имя, отчество (ПОЛНОСТЬЮ), название статьи (на английском языке)***Аннотация (на английском языке)**Ключевые слова (на английском языке)***Сведения об авторах (на русском и английском языке), e-mail: (каждого автора)****Рецензент***Статья подана***ПРИМЕЧАНИЕ:****1. Место работы писать ПОЛНОСТЬЮ для сотрудников****ГОУ ВО ЛНР «Луганский государственный университет имени Владимира Даля».****State Educational Establishment of Higher Training of the Lugansk People's Republic "Lugansk Vladimir Dahl State University".****2. E-mail ОБЯЗАТЕЛЬНО** (если свою автор не указывает, то почту кафедры).**3. В сведениях об авторах статьи ФИО. указывать ПОЛНОСТЬЮ (на русском и английском языках).****4. Рецензент ФИО** полностью ТОЛЬКО профессор или член ред. коллегии сборника (полное название место работы рецензента).**5. Распечатка на антиплагиат.**

ВЕСТНИК: НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»
№ 5 (47) 2021

Технический редактор

Коломиец-Кириллова Е.А.

Оригинал-макет

Барабаш Я.Е.

Подписано к печати 5.06.2021
Формат 70x108 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Times
Условных печатных стр. 22,12. Тираж 100 экз. Изд. № 01221.

ИЗДАТЕЛЬСТВО
Луганского государственного университета
имени Владимира Даля

Свидетельство о регистрации серия МИ-СГР ИД 000003 от 20.11.2015 г.

Адрес издательства: 91034, г. Луганск, кв. Молодежный, 20,а.

Тел.: (072) 138-34-80

E-mail: izdat.lguv.dal@gmail.com

http: <http://izdat.dahluniver.ru/>