Павительство Амурской области
ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет»
ФГБОУ ВО «Благовещенский государственный педагогический университет»
ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра Дальневосточного отделения Российской академии наук

ФИЗИКА: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ

XVII региональная научная конференция,
посвященная 150-летию открытия периодической таблицы химических элементов Д.И.Менделеева
15 – 21 сентября 2019 г.

Благовещенск
2019

УДК 53:378
ББК 22.3
Ф50

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Плутенко А.Д., заместитель председателя Правительства Амурской области, профессор, доктор техн. наук
Лейфа А.В., врио ректора АмГУ, профессор, доктор пед. наук
Щёкина В.В., ректор БГПУ, доцент, канд. биол. наук
Иванченко С.Н., ректор ТОГУ, профессор, доктор техн. наук
Ершова Т.Б., врио директора ИМ ХНЦ ДВО РАН, доктор техн. наук

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Барбарич А.А., проректор БГПУ по научной работе, доцент, канд. биол. наук
Стукова Е.В., зав. кафедрой физики АмГУ, профессор, доктор физ.-мат. наук
Фомин Д.В., директор НОЦ АмГУ, доцент, канд. физ.-мат. наук
Барышников С.В., профессор кафедры физического и математического образования БГПУ, профессор, доктор физ.-мат. наук
Ланкин С.В., профессор кафедры физического и математического образования БГПУ, профессор, доктор физ.-мат. наук
Пячин С.А., зам. директора по научной работе ИМ ХНЦ ДВО РАН, доцент, доктор физ.-мат. наук
Римлянд В.И., зав. кафедрой физики ТОГУ, профессор, доктор техн. наук

Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XVII региональной научной конференции. – Благовещенск : Амурский гос. ун-т, Благовещенский гос. пед. ун-т, 2019. – 258 с.

В сборнике представлены материалы XVII региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», обобщающие результаты работы преподавателей и аспирантов вузов, сотрудников академических институтов по фундаментальным проблемам физики и физического образования. Материалы сборника предназначены для инженеров, научных сотрудников, докторантов, аспирантов и студентов старших курсов, занимающихся научной работой.

ISBN 978-5-93493-334-1
doi 10.2250/PFARE.2019

©Амурский государственный университет, 2019
©Благовещенский государственный педагогический университет, 2019

Секция 1

Теоретическая физика и моделирование

УДК 535.3

ОПТИЧЕСКОЕ МАГНИТНОЕ ЗЕРКАЛО НА ГРАНИЦЕ СРЕДЫ С ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ИЛИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ОТКЛИКОМ НА ВНЕШНЕЕ ПОЛЕ

Б.Б. Авербух, М.С. Пономарева
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
aviwork@rambler.ru

OPTICAL MAGNETIC MIRROR ON THE BORDER OF THE ENVIRONMENT WITH AN ELECTRIC OR ELECTROMAGNETIC RESPONSE TO THE EXTERNAL FIELD

B.B. Averbukh, M.S. Ponomareva
Pacific State University, Khabarovsk, Russia
aviwork@rambler.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.3-6

При отражении нормально падающей плоской электромагнитной волны от проводящей поверхности (металлического зеркала) электрическое поле этой волны меняет свое направление на противоположное, с направлением магнитного поля изменений не происходит. Полное (падающее плюс отраженное) тангенциальное электрическое поле на отражающей поверхности равно нулю (узел стоячей волны). В природе не существует магнитных проводников. И чтобы добиться обратного эффекта (после отражения от поверхности магнитные поля падающей и отраженной волн противоположны, а электрические по направлению совпадают) создают «искусственные магнитные поверхности», так называемое «магнитное зеркало» [1, 2]. В известных нам работах для реализации данного эффекта используют метаматериалы: рельефно-металлическая поверхность [3], металл-диэлектрической структура [1, 2, 4] и диэлектрическая поверхность [5, 6]. Оптическое магнитное зеркало рассматривается как новый эффект, демонстрирующий необычные граничные условия.

Опубликованные работы – в основном экспериментальные. В них исследуются метаматериалы с различными формами (куб, диск…) резонаторов, параметры которых определяются рабочей частотой. При теоретическом анализе среды характеризуются диэлектрической ε и магнитной μ проницаемостями или показателем преломления. Широко используются численные методы. Обычно считается, что эффект магнитного зеркала обусловлен магнитным откликом среды на падающее электромагнитное поле, хотя в работе [7] было показано, что роль магнитного дипольного и других магнитных откликов могут играть электрические резонансы более высоких порядков.

Но макроскопический подход и численные методы оставляют скрытыми многие детали физического механизма явления, которые при таком подходе не могут быть исследованы. Каково общее условие наблюдения явления? Действительно ли магнитное зеркало возможно только на границе искусственной среды? Можно ли его наблюдать на границе среды, состоящей только из электрических диполей? Почему можно наблюдать явление на границе слоя с квазинулевым показателем преломле-

ния и будет ли оно наблюдаться на границе среды с отрицательным показателем преломления? Общий ответ на эти вопросы, как и микроскопическая модель явления отсутствует. Не исследовалась также связь с законом отражения и формулами Френеля.

В данной работе на основании анализа, проведенного ранее [8] показано, что в случае плоской поверхности существование магнитного зеркала следует из формул Френеля. Получено общее микроскопическое условие реализации магнитных зеркал для случаев диэлектрических сред, скомпонованных только из электрических диполей (т.е. без магнитного отклика и без учета мультипольных моментов). Отсюда следует, что это явление может наблюдаться и на границе раздела материалов, существующих в природе. Полученное условие справедливо также для сред из электрических и магнитных диполей (т.е. с магнитным откликом). В частности, это могут быть среды с почти нулевым показателем преломления ($n \approx 0$) [2], или среды с отрицательным показателем преломления (такие эксперименты нам не известны). Кроме этого, нами рассмотрены среды, состоящие из элементов Гюйгенса. Такую модель можно рассматривать, когда рассеивающими элементами среды являются наносферы.

Рассмотрим отражение поляризованной вдоль оси x плоской электромагнитной волны

$$\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_0 \exp(i\omega_0 t - i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}), \tag{1}$$

$$\mathbf{H}_0 = E_0 \left(\cos\alpha \mathbf{e}_y - \sin\alpha \mathbf{e}_z\right) \exp(i\omega t - i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) \tag{2}$$

с частотой ω, волновым вектором $\boldsymbol{k}_0 = (0, k_{0y}, k_{0z})$ и вектором поляризации $\boldsymbol{e}_0$ от границы раздела вакуум – среда из электрических диполей. Здесь $\boldsymbol{e}_y$ и $\boldsymbol{e}_z$ – единичные векторы вдоль соответствующих осей. Среда состоит из плоскопараллельных монослоев электрических диполей, характеризующихся поляризуемостью $A_d = A_d' - iA_d''$. Поля диполей учитываются полностью. Дипольные монослои лежат в плоскостях xy, пересекающих ось z в точках $z_1, z_2, z_3 \ldots$. Расстояния между монослоями равны a и $a << \lambda$, где λ - длина волны излучения. Диполи в монослоях расположены неупорядоченно (с плотностью N_d) и не взаимодействуют между собой. Размеры диполей много меньше расстояний между диполями, а также величин a и λ.

В работе [8] показано, что отраженная от среды волна определяется следующими выражениями для электрического и магнитного полей соответственно.

$$\mathbf{E}_R(x, y, z < z_1) = -iP_d B \mathbf{e}_0 E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \tag{3}$$

$$\mathbf{H}_R(x, y, z < z_1) = iP_d B E_0 (\cos\alpha \mathbf{e}_y + \sin\alpha \mathbf{e}_z) \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \tag{4}$$

где $P_d = 2\pi N_d A_d k^2 / k_{0z}$, $k = \omega / c$, $B = \left[1 - \left(1 - iP_d\right)\exp\left(-2ik_{0z} a\right)\right]^{-1}$. Величина $(-iP_d B)$ определяет коэффициент отражения. В оптическом диапазоне длин волн ($k_{0z} a << 1$), раскладывая в ряд функцию $\exp(-2ik_{0z} a)$ и учитывая член первого порядка малости, при $|P_d| << 1$ получаем:

$$\mathbf{E}_R(x, y, z < z_1) = R_S \mathbf{e}_0 E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \tag{5}$$

$$\mathbf{H}_R(x, y, z < z_1) = R_S E_0 (\cos\alpha \mathbf{e}_y + \sin\alpha \mathbf{e}_z) \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1) \tag{6}$$

где $R_s = (k_{0z} - k_{2z}) / (k_{2z} + k_{0z})$ - коэффициент отражения Френеля. Выражения

$$k_{2z} = k_{0z} + \varphi_d / a, \quad \varphi_d = arctg\left[P_d' / (1 - P_d'')\right] \tag{7}$$

определяют z компоненту волнового вектора k_2 волны в среде и изменение фазы волны, обусловленное излучением дипольного монослоя [8]. Совокупность полей (5) и (6) определяет поперечную отраженную волну.

При нормальном падении $\alpha = 0$ и z компонента магнитного поля и в падающей и в отраженной волнах исчезает. Если $\varphi_d < 0$, то $0 < k_{2z} < k_{0z}$ и $R_s > 0$. Это соответствует условиям

$2\pi N_d A_d' k^2 / k_{0z} << 1$, $k_{0z} a << 1$ и $A_d' < 0$. Электрические поля падающей и отраженной волн параллельны друг другу. Магнитные поля этих волн направлены противоположно друг другу. Это соответствует магнитному зеркалу. При наклонном падении, как видно из соотношений (5), (6), при $0 < k_{2z} < k_{0z}$ электрические поля падающей и отраженной волн по-прежнему параллельны.

Представим k_2 в виде $k_0 n_d$ [9], где $n_d = (1 + 2\xi\cos\alpha + \xi^2)^{1/2}$ описывает реальную часть показателя преломления, а $\xi = \varphi_d / ak_0$. Условие $0 < k_{2z} < k_{0z}$ означает $0 < n_d < 1$ и в определенных областях частот может выполняться и для обычных сред.

Рассмотрим теперь среду из периодически чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев. При падении полей (1), (2) на такой метаматериал z компонента волнового вектора $\boldsymbol{K} = (0, k_{0y}, K_z)$ волны в среде дается выражением:

$$K_z = k_{0z} + (\varphi_d + \varphi_m)/2a, \tag{8}$$

где $\varphi_m = arctg\left[P_m' / (1 - P_m'')\right]$ определяет изменение фазы волны, обусловленное излучением магнитного дипольного монослоя; $P_m = 2\pi N_m A_m k^2 / k_{0z}$; N_m - плотность распределения магнитных диполей в монослое; $A_m = A_m' - iA_m''$ – поляризуемость магнитного диполя. Коэффициент отражения Френеля теперь дается выражением $R_{s1} = (k_{0z} - K_z)/(K_z + k_{0z})$. Следовательно, среда из чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев будет представлять собой магнитное зеркало при $k_{0z} > K_z$, т.е. при $(\varphi_d + \varphi_m) < 0$. В частности, при $k_{0z} = |(\varphi_d + \varphi_m)|/2a$, и $k_{0y} = 0$ из (8) следует, что показатель преломления n среды равен нулю ($n = 0$), т.к. $K_Z = K = 0$. При распространении в среде обратных волн (т.е. при $K_z < 0$) магнитное зеркало реализуется при $2ak_{0z} < |\varphi_d + \varphi_m| < 4ak_{0z}$.

Рассмотрим среду, состоящую из элементов Гюйгенса. Под элементами Гюйгенса понимаются частицы с электрической $A_d = A_d' - iA_d''$ и магнитной $A_m = A_m' - iA_m''$ поляризуемостями. При падении полей (1), (2) на материал z компонента волнового вектора $\mathbf{K}_G = (0, k_{0y}, K_{Gz})$ волны в среде будет определяться следующим образом:

$$K_{Gz} = k_{0z} + \varphi_{dm}/2a, \tag{9}$$

где $\varphi_{dm} = arctg\left[P_{dm}' / (1 - P_{dm}'')\right]$; $P_{dm} = P_d + P_m$. При выполнении условия $\varphi_{dm} < 0$ будет реализовано оптическое магнитное зеркало. Показатель преломления для такой среды равен:

$$n_{dm}^2 = 1 + 2\xi\cos\alpha + \xi^2, \tag{10}$$

где $\xi = \varphi_{dm} / ak_0$.

Рассмотрим некоторые частные случаи. При $k_{0z} < \dfrac{[\varphi_{dm}]}{a}$ имеем, что $k_{2z} < 0$. Это соответствует области существования обратных волн в среде и отрицательному преломлению. При $k_{0z} = \dfrac{[\varphi_{dm}]}{a}$ и $k_{0y} = 0$ получим, что $k_2 = 0$ и $n_{dm} = 0$.

Таким образом, магнитное зеркало возможно, если z компонента волнового вектора волны в среде меньше z компоненты волнового вектора падающей волны. Условие реализации $0 \le k_{2z} < k_{0z}$ (или $k_{0z} > K_z$, $k_{0z} > K_{Gz}$) переходит в $0 \le n_d \le 1$ (или $|n| < 1$). Если $n_d = 0$ (или $n = 0$), то $R_S = R_{S1} = 1$, что соответствует результату работы [2]. Эффект возможен в средах с только электрическим дипольным откликом на внешнее поле и значит, в частности, на границе с естественными материалами[10] в частотных областях, где $0 \le n_d \le 1$. Также нами рассмотрены условия реализации «магнитного зеркала» с использованием метаматериалов. При этом нами была смоделирована среда, состоящая из чере-

дующихся слоев электрических и магнитных диполей, а также среда, слои которой состоят из элементов Гюйгенса. В таких средах эффект возможен и в случае отрицательного преломления. Экспериментальные работы в этом случае нам не известны известны.

1. Schwanecke, A.S., Fedotov, V.A., Khardikov, V.V., Prosvirnin, S.L., Chen, Y., Zheludev, N.I. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt – 2009. V.9. – P. L1–L2.

2. Choi, S.B., Park, D.J., Byun, S.J., Kyoung, J.Jisoo, Hwang, S.W. // Adv. Optical Mater. – 2015 – V. 3. – P. 1719-1725.

3. Zhang, J., Ou, J-Y, MacDonald, K F., Zheludev, N.I. // J. Opt. – 2012. – V. 14. – P. 114002.

4. Fedonov V.A., Rogacheva A.V., Zheludev N.I., Mladyonov P.L., Prosvirnin S.L. // Applied Physics Letters. – 2006. – V.88. – P. 091119-1 – 091119-3.

5. Liu, S., Sinclair, M.B., Manony, T.S., Jun, Y.C., Campione, S., Ginn, J., Bender, D.A., Wendt, J.R., Ihlefeld, J.F., Glem, P.G., Wright, J.B., Brener, I. // Optica. – 2014. – V.1, № 4. – P.250-256.

6. Lin, L., Jiang, Z.H. Ma, D.. Liu, Z., Werner, D.H., Mayer, T.S. // Applied Physics Letters. – 2016. – V.108. – P. 171902-1 – 171902-5.

7. Liu, W. // Phys. Rev. Lett. – 2017. – V. 119. – P. 123902-1 – 123902-6.

8. Авербух, Б.Б., Авербух, И.Б. Формирование отраженной и преломленной S- поляризованных электромагнитных волн в задаче Френеля с точки зрения молекулярной оптики // Изв. вузов: Физика. – 2015. – V. 58, № 12. – С. 83-88.

9. Авербух, Б.Б., Авербух, И.Б. Формирование отраженной и преломленной s-поляризованных электромагнитных волн на плоской границе раздела вакуум-среда из электрических и магнитных диполей // Изв. вузов: Физика. – 2016. – V.59, № 5. – С. 117-122.

10. Драчев, К.А., Римлянд, В.И., Кондратьев, А.И., Старикова, В.Н. Динамика дисперсионных зависимостей акустических параметров т оптичнских свойств в процессе полимеризации // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, физическое образование: материалы X1 региональной научной конференции. – Хабаровск: Изд-во ТОГУ. 2010. – С.103-104.

УДК 535.537

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПЛОСКОЙ *S*-ПОЛЯРИЗОВАННОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В СРЕДЕ ИЗ ЭЛЕМЕНТОВ ГЮЙГЕНСА

Б.Б. Авербух, М.С. Пономарева

Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

aviwork@rambler.ru

DISTRIBUTION OF PLANE S-POLARIZED ELECTROMAGNETIC WAVE IN MEDIA OF THE ELEMENTS HUYGENS

B.B. Averbukh, M.S. Ponomareva

Pacific State University, Khabarovsk, Russia

aviwork@rambler.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.6-9

В настоящее время появилась возможность создания так называемых метаматериалов, которые обладают удивительными, непривычными для нас оптическими свойствами. В большинстве случаев это обусловлено наличием отрицательного, нулевого или единичного коэффициента преломления.

Решение задачи Френеля на границе раздела вакуум-метаматериал и анализ распространения волн в таких средах обычно основаны на уравнениях Максвелла. Однако теория Максвелла не дает

ответа на вопрос возникновения и распространения отраженной и преломленной волн. Необходим микроскопический подход.

Если размеры включений в метаматериале много меньше всех других характерных размеров задачи, то сами включения можно рассматривать как совокупность точечных электрических и магнитных диполей, а их дипольные моменты считать пропорциональными внешнему полю. Процесс распространения поля в такой среде определяется взаимодействием этих дипольных моментов с падающим полем и описывается в модели молекулярной оптики.

Это и проделано в настоящей работе, где нами рассмотрена модель метаматериала, представленная плоскопараллельными монослоями, состоящими из элементов Гюйгенса.

Под элементами понимаются Гюйгенса частицы, обладающие (в дипольном приближении) электрическими $A_d = A_d' - iA_d''$ и магнитными $A_m = A_m' - iA_m''$ поляризуемостями.

Индуцированные электрические $\boldsymbol{d}$ и магнитные $\boldsymbol{m}$ дипольные моменты взаимно перпендикулярны и пропорциональны падающему на них электрическому и магнитному полям соответственно. Такая ситуация реализуется, например, когда рассеивающими элементами среды являются наносферы [1].

Монослои лежат в плоскостях xy, пересекающих ось z в точках $z_1, z_2, z_3 \ldots$. Расстояния между соседними монослоями одинаковы и равны a, причем $a << \lambda$, где λ - длина волны излучения. Элементы одного монослоя расположены неупорядоченно с плотностью N и не взаимодействуют между собой. Поскольку внешнее поле распространяется вперед, то рассматривается рассеяние последовательными монослоями. Каждый монослой элементов находится в поле излучения всех других монослоев.

Пусть на первый монослой со стороны $z < z_1$ под углом α падает поляризованное вдоль оси x монохроматическое поле

$$\mathbf{E}_0 = E_0 \mathbf{e}_0 \exp(i\omega_0 t - i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) \qquad (1)$$

с частотой ω, волновым вектором $\boldsymbol{k}_0$ и вектором поляризации $\boldsymbol{e}_0$. Вектор $\boldsymbol{k}_0$ лежит в плоскости yz и имеет две ненулевые составляющие $\boldsymbol{k}_0 = (0, k_{0y}, k_{0z})$.

Магнитное поле падающего излучения:

$$\mathbf{H}_0 = E_0 \left(\cos\alpha \mathbf{e}_y - \sin\alpha \mathbf{e}_z \right) \exp(i\omega t - i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}), \qquad (2)$$

где $\boldsymbol{e}_x = \boldsymbol{e}_0$, $\boldsymbol{e}_y$ и $\boldsymbol{e}_z$ - единичные векторы вдоль соответствующих осей.

Индуцированные этим полем электрический и магнитный дипольные моменты элемента Гюйгенса первого монослоя излучают. Для получения полей, рассеянных этими элементами в точке наблюдения x_2, y_2, z_2 необходимо проинтегрировать поля электрического и магнитного диполей по координатам всех элементов монослоя. Излучение первого монослоя элементов Гюйгенса гасит падающую волну и формирует преломленную с -компонентой волнового вектора [2]:

$$k_{2z} = k_{0z} + \varphi_{dm} / a, \qquad (3)$$

где $\varphi_{dm} = arctg[P_{dm}' / (1 - P_{dm}'')]$, $P_{dm} = P_d + P_m = P_{dm}' - iP_{dm}''$, $P_d = P_d' - iP_d'' = 2\pi N A_d k^2 / k_{0z}$,

$P_m = P_m' - iP_m'' = 2\pi N A_m k^2 / k_{0z}$.

На второй монослой падает внешнее поле (1), (2) и поля, рассеянные первым монослоем. Элемент Гюйгенса второго монослоя “чувствует” поле с волновым вектором $\boldsymbol{k_2} = (0, k_{0y}, k_{2z})$. И так далее.

В общем случае распространяющиеся вперед поля в точках нахождения элементов монослоя с номером n равны [2]:

$$\mathbf{E_n}(x_n, y_n, z_n) = (1 - iP_{dm})^{n-1} E_0 \mathbf{e}_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z_n), \quad (4)$$

$$\mathbf{H_n}(x_n, y_n, z_n) = (1 - iP_{dm})^{n-1} (\cos\alpha \mathbf{e_y} - \sin\alpha \mathbf{e_z}) E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z, \quad (5)$$

Отраженные поля $\boldsymbol{E}_R(x, y, z < z_1)$ и $\boldsymbol{H}_R(x, y, z < z_1)$ формируется отраженными от всех монослоев волнами. При бесконечном числе монослоев:

$$\mathbf{E}_R(x, y, z < z_1) = -iP_{dm} B_1 \mathbf{e}_0 E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \quad (6)$$

$$\boldsymbol{H}_R(x, y, z < z_1) = iP_{dm} B_1 E_0 [\cos\alpha \boldsymbol{e}_y + \sin\alpha \boldsymbol{e}_z] \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \quad (7)$$

где $B_1 = [1 - (1 - iP_{dm}) \exp(-2ik_{0z} a)]^{-1}$. При $|P_d| << 1$, $|P_m| << 1$ и $k_{0z} a << 1$ выражения (6) и (7) приобретают вид:

$$\boldsymbol{E}_R(x, y, z < z_1) = R_{s1} \boldsymbol{e}_0 E_0 \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1) \quad (8)$$

$$\boldsymbol{H}_R(x, y, z < z_1) = -R_{s1} E_0 [\cos\alpha \boldsymbol{e}_y + \sin\alpha \boldsymbol{e}_z] \exp(i\omega t - ik_{0y} y + ik_{0z} z - 2ik_{0z} z_1), \quad (9)$$

где $R_{s1} = (k_{0z} - k_{2z}) / (k_{2z} + k_{0z})$, что соответствует выражению для коэффициента отражения Френеля.

Поля (8), (9) описывают поперечную отраженную волну.

В установившемся режиме поле в точке монослоя с номером n создается полями (4), (5) и полями, отраженными от последующих $(n+1,\ n+2 \ldots \infty)$ монослоев.

В результате, при $|P_d| << 1$, $|P_m| << 1$ и $k_{0z} a << 1$ получаются следующие выражения:

$$\mathbf{E}(x_n, y_n, z_n) = E_0 \mathbf{e}_0 D_{s1} \exp[i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z_1 - ik_{2z} a(n-1)], \quad (10)$$

$$\mathbf{H}(x_n, y_n, z_n) = (k_2 / k_0) D_{s1} E_0 \mathbf{e}_1 \exp[i\omega t - ik_{0y} y_n - ik_{0z} z_1 - ik_{2z} a(n-1)]., \quad (11)$$

Здесь $D_{s1} = 2k_{0z} / (k_{2z} + k_{0z})$ – коэффициент пропускания Френеля, а $\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{e}_y \cos\beta - \boldsymbol{e}_z \sin\beta$.

Представив модуль вектора $\boldsymbol{k_2} = (0, k_{0y}, k_{2z})$ в виде kn_{dm} и учтя (3), введем показатель преломления среды n_{dm}.

$$n_{dm}^2(a) = 1 + 2\xi cos\alpha + \xi^2, \quad (12)$$

где $\xi = \varphi_{dm} / ak_0$.

Если $\varphi_{dm} = 0$, то $k_{2z} = k_{0z}$ и $\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{k}_0$. В этом случае $n_{dm} = 1$ и среда не преломляет. Коэффициент отражения Френеля R_{S1} равен нулю, а коэффициент пропускания Френеля D_{S1} равен единице. Поле как бы «не замечает» среду.

Условие $\varphi_{dm} = 0$ означает, что набег фазы волны, обусловленный излучением электрических дипольных моментов элементов Гюйгенса компенсируется набегом фазы, обусловленным излучением магнитных моментов.

При малых P_d и P_m (т.е. $|P_d| << 1$ и $|P_m| << 1$) условие $\varphi_{dm} = 0$ переходит в $P_d' + P_m' = 0$ и далее в не зависящее от угла падения условие $A_d' + A_m' = 0$, связывающее между собой вещественные части поляризуемостей A_d' и A_m'. Значит либо $A_d' > 0$ и $A_m' < 0$, либо $A_d' < 0$ и $A_m' > 0$.

Возможность выполнения равенств $R_{S1} = 0$, $D_{S1} = 1$ в случае среды из последовательно чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев была рассмотрена в работе [3].

Если $\varphi_{dm} < 0$ и $k_{0z} = |\varphi_{dm}| / a$, то $k_{2z} = 0$ и $k_2 = k_{0y}$. Поскольку $k_{0z} = k_0 \cos\alpha$, то, согласно (12), $\xi = -\cos\alpha$, $n_{dm} = \sin\alpha$ и угол преломления равен $\pi / 2$. Это соответствует неоднородной волне, распространяющейся вдоль оси *y*. Увеличение угла падения приводит к полному внешнему отражению.

При $\varphi_{dm} < 0$ и $k_{0z} < |\varphi_{dm}| / a$ имеем $k_{2z} < 0$. Это соответствует области существования обратных волн в среде и отрицательному преломлению [4,5].

Излучение каждого монослоя сдвигает фазу общего поля на $\varphi_{dm} < 0$. Если этот сдвиг по величине превосходит положительный набег фазы, вызванный распространением волны вперед на периоде a структуры, то результирующий набег фазы на этом периоде отрицателен, $k_{2z} < 0$ и в среде распространяется обратная волна.

При $\varphi_{dm} < 0$, $k_{0z} = |\varphi_{dm}| / a$ и $k_{0y} = 0$ имеем, что $k_2 = 0$ и $n_{dm} = 0$. Из (14) следует, что $n_{dm} = 0$ при условии, что $1 + 2\xi\cos\alpha + \xi^2 = 0$. Для вещественных ξ равенство нулю возможно только при $\cos\alpha = 1$ (т.е. $\alpha = 0$ и $k_{0y} = 0$) и $\xi = -1$, т.е. при $\varphi_{dm} = -ak_0$. Следовательно, рассматриваемая среда может вести себя как среда с нулевым показателем преломления только при нормальном падении излучения.

Условие $\varphi_{dm} = -ak_0$ означает, что набег фазы волны, обусловленный излучением монослоя элементов Гюйгенса, компенсирует набег фазы, обусловленный распространением вперед на периоде структуры (среда представляет собой периодическую структуру с периодом a).

При малых P_d и P_m ($|P_d| << 1$ и $|P_m| << 1$) это условие переходит в $P_d' + P_m' = -ak_0$ и далее в $N(A_d' + A_m')/2a = -1$, связывающее плотность распределения диполей N, вещественные части поляризуемостей A_d' и A_m' и расстояния между монослоями a.

Из выражений (10) и (11) следует, что в этом случае:

$$\mathbf{E}(x_n, y_n, z_n) = E_0 \mathbf{e}_0 D_{s1} \exp(i\omega t - ik_0 z_1) \tag{13}$$

$$\boldsymbol{H}(x_n, y_n, z_n) = 0, \tag{14}$$

Возможность получения нулевого показателя преломления ранее была показана во многих теоретических (макроскопический подход и численное решение уравнений Максвелла) и экспериментальных работах.

Для получения соотношений между микроскопическими характеристиками среды нужен соответствующий анализ. В случае периодической среды из электрических дипольных монослоев и последовательно чередующихся электрических и магнитных дипольных монослоев он был проведен в работе [6].

Таким образом, среда из элементов Гюйгенса, расстояние между которыми много больше размеров элемента и много меньше длины волны излучения, может иметь и единичный, и нулевой показатели преломления на соответствующих частотах.

---

1. Краснок, А.Е., Максимов, И.С., Денисюк, А.И., Белов, П.А., Мирошниченко, А.Е., Симовский, К.Р., Кившарь, Ю.С. // УФН. – 2013. – Т.183, № 6. – С. 561-589.

2. Авербух, Б.Б., Авербух, И.Б. Распространение плоской s-поляризованной электромагнитной волны в слоистой среде из элементов Гюйгенса // Сб. трудов IX международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика – 2015». – СПб.: Университет ИТМО, 2015. – С.90-92.

3.Авербух, Б.Б. // Письма в ЖТФ. – 2015. – Т. 41, № 10. – С. 50-56.

4. Вендик, И.Б., Вендик, О.Г. // ЖТФ. – 2013. – Т. 83, № 1. – С. 3-28.

5. Шевченко, В.В. // УФН. – 2011. – Т. 181, №11. – С. 1172-1172.

6. Авербух, Б.Б. // Письма в ЖТФ. – 2015. – Т. 41, № 24. С. 64-69.

УДК 539.18

ПРИМЕНЕНИЕ БИБЛИОТЕК OPEN SOURCE PHYSICS И JZY3D ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО АТОМНЫМ ПРОЦЕССАМ

М.С. Алёшин, А.В. Прохоренко
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
aleshin.m.s@pnu.edu.ru

APPLICATION OF OPEN SOURCE PHYSICS AND JZY3D LIBRARIES FOR MODELING VIRTUAL LABORATORY WORKS ON ATOMIC PROCESSES

M.S. Alyoshin, A.V. Prokhorenko
Pacific State University (Khabarovsk)
aleshin.m.s@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.10-13

В настоящее время в учебном процессе все активнее применяются информационные технологии, в том числе внедряются различные интерактивные среды, позволяющие производить обучение дистанционно. Однако необходимость использования электронных средств обучения возникает также и в классическом учебном процессе. В частности, проведение опытов по многим явлениям естественнонаучного характера является практически нереализуемой задачей в условиях учебного заведения [1].

Этим обусловлена целесообразность и даже необходимость создания виртуальных лабораторных работ, способных заменить дорогостоящее оборудование или вовсе сымитировать явление, которое невозможно продемонстрировать опытно в процессе его изучения. Такими являются и процессы атомной физики, использующей квантовый подход к описанию систем, который слишком трудоемок с точки рения восприятия обучающимся и, что существенно, ненагляден [2]. В процессе реализации виртуальных лабораторных работ нетривиальным оказывается вопрос выбора инструмента для моделирования и проведения численного эксперимента. Разумным решением становится использование различных библиотек программирования, которые позволяют избежать написания «с нуля» многих численных алгоритмов. Однако, учитывая большое разнообразие библиотек, временные затраты на подбор инструментария могут оказаться сравнимыми с временем реализации самого проекта. Наиболее распространенными проблемами при этом является либо проприетарность библиотек, либо, в случае со свободно распространяемыми, отсутствие качественной документации к ним. В нашей работе демонстрируются возможности свободных библиотек Open Source Physics (OSP) и Jzy3d, написанных на языке программирования Java. Библиотека OSP обеспечена подробным руководством пользователя и учебной литературой [3], содержит большое число пакетов, среди которых пакеты для решения дифференциальных уравнений и систем, численного интегрирования (см., например, работу [4]), модули вычисления специальных функций, определения нестандартных типов данных, построения двумерных графиков. Библиотека Jzy3d предназначена для вывода в разрабатываемых приложениях научной графики, имеет большие возможности для настройки. Существенным недостатком Jzy3d является отсутствие полноценной документации [5].

Нами было произведено моделирование некоторых квантовых состояний атома водорода, результаты были представлены в виде интерактивной программной среды. Рассмотрим кратко уравнения, описывающие квантовые состояния электрона в водородоподобном атоме. Уравнение Шредингера для атома водорода имеет вид:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0, \tag{1}$$

где m – масса электрона; $\hbar$ – приведенная постоянная Планка; E – полная энергия в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ. Поскольку поле ядра является центральным, то есть полная энергия зависит только от расстояния электрона до ядра, то удобнее перейти в сферическую систему координат. В этой системе волновую функцию можно определить в виде произведения радиальной $X(r)$ и угловой $Y(\theta,\varphi)$ компонент:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = X(r)Y(\theta,\varphi), \tag{2}$$

а лапласиан имеет вид:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right). \tag{3}$$

Подставляя далее выражения (2) и (3) в уравнение (1), учитывая, что радиальная часть лапласиана с точностью до множителя r^2 совпадает с оператором квадрата момента импульса, можем выписать решения для угловой части волновой функции

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}, \tag{4}$$

где P_l^m – присоединенные полиномы Лежандра; l и m – угловое и магнитное квантовые числа соответственно. Отметим, что функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ являются комплексными. Используя теперь собственные значения оператора квадрата момента импульса, можно разрешить уравнение для радиальной части. Опуская громоздкие выкладки, напишем:

$$X_{nl}(\rho) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\cdot(n+l)!}}\cdot e^{\rho/2}\rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho), \tag{5}$$

где L_{n-l-1}^{2l+1} – присоединенные полиномы Лагерра; n – главное квантовое число, произведен переход от r к ρ в единицах боровского радиуса a.

Полиномы Лежандра P_l^m и Лагерра L_{n-l-1}^{2l+1} являются известными специальными функциями, выражения для них могут быть найдены в справочной литературе [6]. Наличие чисел l и m следует из сохранения углового момента при орбитальном движении электрона вокруг ядра. Квантовое число n возникает при записи радиальной функции через полиномы Лагерра. Число l может принимать целые значения 0, 1, …, n – 1 и определяет величину углового момента, m может принимать значения $-l$, …, $+l$ и определяет проекцию углового момента на (произвольно выбранную) ось z.

Поскольку квадрат модуля волновой функции является по смыслу функцией плотности вероятности, то для вычисления вероятности нахождения электрона в заданном диапазоне расстояний и углов можно воспользоваться выражением:

$$P = \int_{r_1}^{r_2}\int_{\theta_1}^{\theta_2}\int_{\varphi_1}^{\varphi_2}\left|\psi(r,\theta,\varphi)\right|^2 r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi. \tag{6}$$

С испо7льзованием описанных выше закономерностей нами был запрограммирован программный комплекс, состоящий из двух приложений «Радиальная вероятность» и «Угловая вероятность» (представлены на рис. 1 и рис. 2), который позволяет производить расчет и построение радиальной электронной плотности вероятности состояний, сферических гармоник для заданных квантовых чисел, вычислять вероятность нахождения электрона в заданном радиальном или угловом диапазоне.

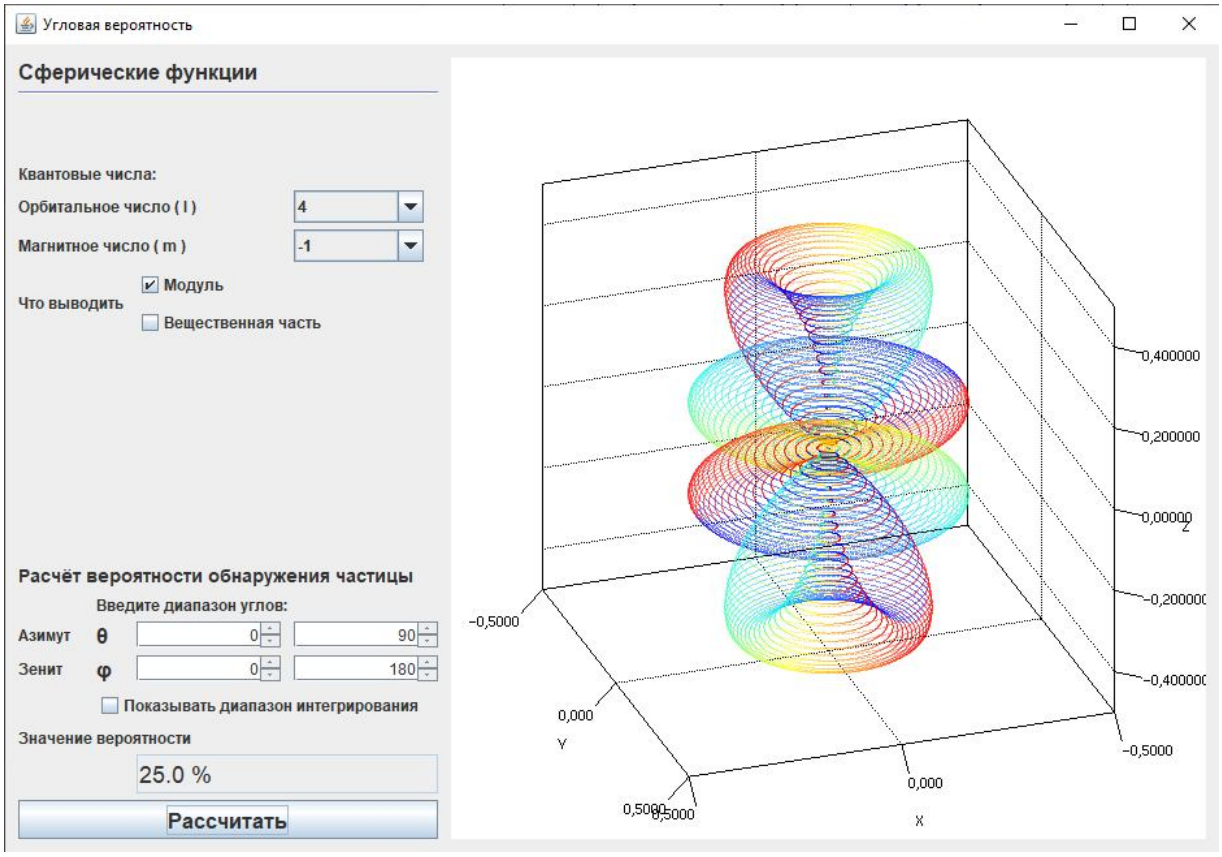


Рис. 1. Приложение «Угловая вероятность» с выводом модуля шаровой функции при $l = 4$ и $m = -1$.

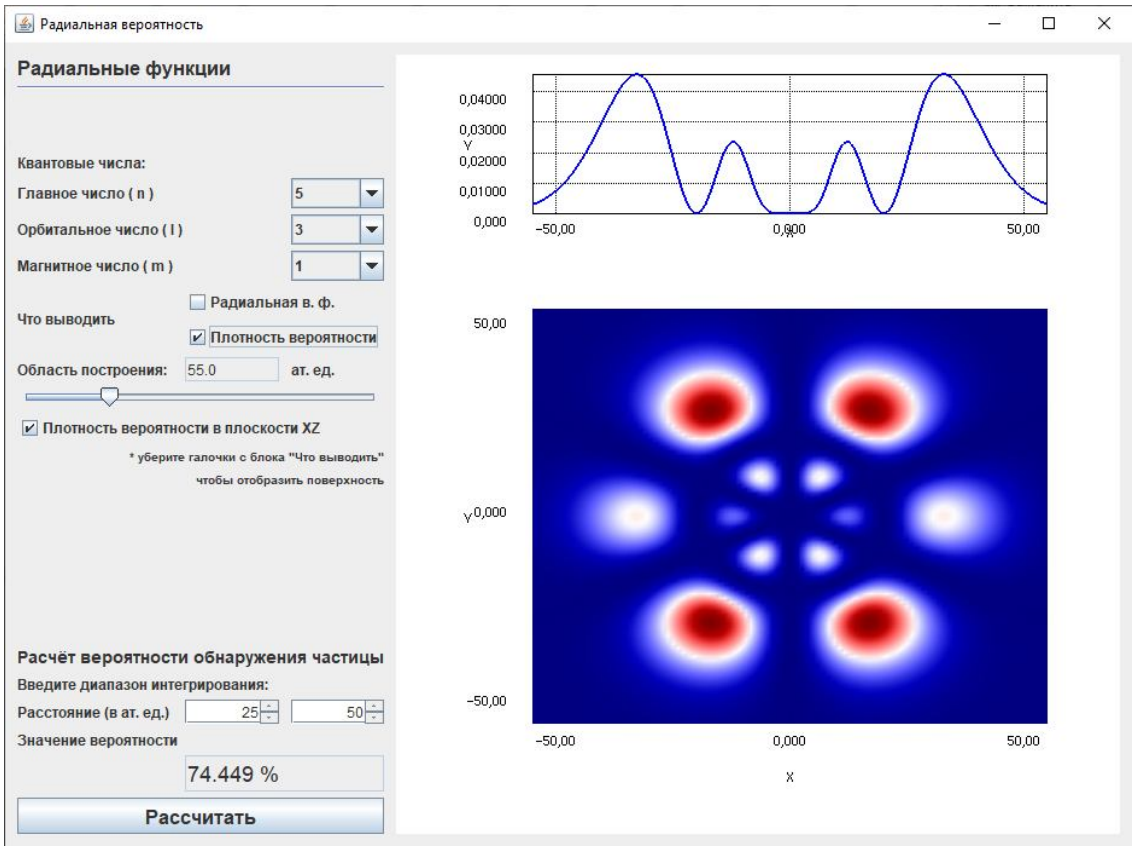


Рис. 2. Приложение «Радиальная вероятность» с выводом плотности вероятности при $n = 5$, $l = 3$ и $m = 1$.

Алгоритм работы приложений автоматически ограничивает диапазон доступных для выбора значений квантовых чисел в соответствии с описанными выше физическими ограничениями. Вывод графиков на панель приложения реализован средствами библиотеки Jzy3d. При любом изменении введенных пользователем параметров происходит автоматическое перестроение графиков функций. При программировании выражений (4) и (5) входящие в них полиномы Лежандра и Лагерра вычислялись с использованием специальных классов *Legendre* и *Laguerre* соответсвенно из пакета *numerics.specialfunctions* библиотеки OSP. Отметим, что для вычисления сферических гармоник мы использовали нестандартный тип данных *Complex* для работы с комплексными числами, реализованный также средствами библиотеки OSP. Пользователю предоставляется возможность выбора вещественной части шаровой функции или ее модуля для вывода. Изменение аргумента сферической функции в диапазоне от $-\pi$ до π показано на графике переходом цвета в синего к красному.

Численное интегрирование выражения (6) осуществлялось методом Симпсона, определенном в классе *Integral* пакета *numerics* библиотеки OSP.

Приложения позволяют рассчитать либо радиальную, либо угловую вероятность при вводе в диалоговое окно соответствующих диапазонов интегрирования. При расчете угловой вероятности реализована функция выделения диапазона интегрирования цветом. При выводе же радиальной вероятности доступна функция одновременного отображения поперечного сечения плотности вероятности, величина которой отображается цветом (синий соответствует минимальной плотности вероятности, красный – максимальной). Данные функции позволяет наглядно продемонстрировать учащемуся физический смысл волновой функции, электронных орбиталей.

Нами было продемонстрировано, что применение библиотек Open Source Physics и Jzy3d значительно упрощает процесс создания виртуальной лабораторной работы. Программные комплексы такого рода могут заменить проведение сложных лабораторных работ, позволяют студентам самостоятельно работать с математической моделью в обучающем режиме на персональном компьютере. В рамках рассмотренной задачи предложенная модель способствует наглядному представлению о квантовых состояниях атома водорода, позволяет продемонстрировать учащемуся физический смысл функции плотности вероятности. Полученный в результате моделирования программный продукт может использоваться в качестве демонстрационного материала в процессе изучения студентами теории атома водорода.

---

1. Андреев, А.И. Внедрение дефектоскопа-томографа в лабораторный практикум / А.И. Андреев, К.А. Драчёв // Материалы секционных заседаний 58-й студенческой научно-практической конференции ТОГУ: В 2 т. / отв. за вып. И.Н. Пугачев, А.В. Казарбин. – 2018. – С. 6-9.
2. Насыров, В.В. Радиальные корреляции в основном состоянии атома гелия / ЖЭТФ. – 2017. – Т. 152, № 3. – С. 435-437.
3. Christian, W. Open Source Physics: A User's Guide with Examples / W. Christian et. al. // Addison-Wesley. – 2006. – 407 p.
4. Алёшин, М.С. Моделирование процессов рассеяния с использованием библиотеки Open Source Physics / М.С. Алёшин, А.В. Прохоренко // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. Материалы XVI региональной научной конференции / под ред. А. И. Мазура. – 2018. – С. 85-88.
5. JZY3D : Open source API for 3d charts. – Режим доступа: http://www.jzy3d.org/ (дата обращения: 01.06.2019).
6. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган. – М.: Наука, 1979.

УДК 537.226.8:004.942

ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА: РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

М.С. Быковский, А.Г. Масловская
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
maslovskayaag@mail.ru

TWO-DIMENSIONAL MODEL OF ISING OF A FERROELECTRIC PHASE TRANSITION: IMPLEMENTATION BY MONTE CARLO METHOD

M.S. Bykovsky, A.G. Maslovskaya
Amur State University (Blagoveshchensk)
maslovskayaag@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.14-17

В числе микроскопических теорий сегнетоэлектричества особое место занимает подход, состоящий в использовании решеточных моделей Изинга, Гейзенберга и Поттса [1-3]. В подобных модельных представлениях за основу выбирается принцип «магнитной аналогии» – для описания сегнетоэлектрических явлений используются модели, описывающие поведение магнитных систем. В случае сегнетоэлектрических материалов решетка спинов электронов заменяется решеткой диполей с соответствующими дипольными моментами – «псевдоспинами», имеющими ограниченный набор допустимых ориентаций. Потенциальная энергия системы задается модельным гамильтонианом, а анализ поведения системы позволяет установить температурные зависимости характеристик сегнетоэлектриков вблизи фазового перехода. В плане реализации моделей традиционно рассматривают два подхода – аналитико-приближенный, представленный теорией самосогласованного поля [1-2], и численно-стохастический метод Монте-Карло, применяемый в сочетании с алгоритмом Метрополиса, которые дают процедуру определения средних величин в каноническом ансамбле [3-4]. Известно, что аналитические решения в приближении самосогласованного поля удалось построить только для одномерной и двумерной моделей Изинга (с классическим или стандартным представлением гамильтониана), поэтому прямое моделирование на основе метода Монте-Карло не теряет своей актуальности.

Рассмотрим основные аспекты анализа границ применимости решеточных моделей для исследования поведения характеристик сегнетоэлектриков в окрестности фазового перехода. Модель Изинга в своем классическом представлении с двумя возможными направлениями «псевдоспинов» может быть применена только для одноосных сегнетоэлектриков. Для многоосных сегнетоэлектриков требуется переход к трехмерной решеточной модели Гейзенберга [3]. В зависимости от типа фазового перехода (смещения или порядок – беспорядок) вид гамильтониана в моделях Изинга и Гейзенберга существенно отличается. Широко известное выражение гамильтониана модели Изинга может быть использовано для моделирования характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа порядок-беспорядок. Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения используется модифицированное представление [2]. Моделирование фазовых переходов на основе моделей Изинга, Гейзенберга, Поттса в приложении к объемным кристаллам требует трехмерной реализации для большого числа узлов (не менее 20-30 вдоль одного координатного направления), двумерная решеточная модель в большей степени применима к тонким пленкам и малым частицам в составе композитов.

Проводя анализ применимости метода Монте-Карло для моделирования микроканонического ансамбля можно отметить, что при оценке точности различают статистическую погрешность и систематическую погрешность результата. Первая обусловлена числом случайных реализаций в алгоритме Метрополиса, вторая – вызвана числом ячеек моделируемой системы, наложением периодических граничных условий и аппроксимацией термодинамических характеристик. Для верификации данных требуется проводить сопоставление результатов с оценкой предельных аналитических соотношений, полученных на основе теории Ландау (теории эффективного поля). Также можно использовать статистический подход, состоящий в проведении серии вычислительных экспериментов, обнаруживающих согласование результатов в пределах статистической погрешности. Цель настоящей работы – определить возможности двумерной стохастической модели Изинга для исследования поведения температурных характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок в окрестности фазового перехода.

Рассмотрим d-мерную решетку, содержащую $N=L^d$ узлов, где L – характерный размер решетки. Каждому узлу решетки поставлен в соответствие «псевдоспин» s_i, отвечающий за направление дипольного момента ячейки решетки **p**. «Псевдоспин» s_i может принимать значение s_i =+1, если он сонаправлен с осью OZ и значение s_i = –1, если направлен противоположно. Любая конфигурация задается набором переменных s_1, s_2, …s_n для всех узлов решетки. Основной гамильтониан модели запишем в следующем виде:

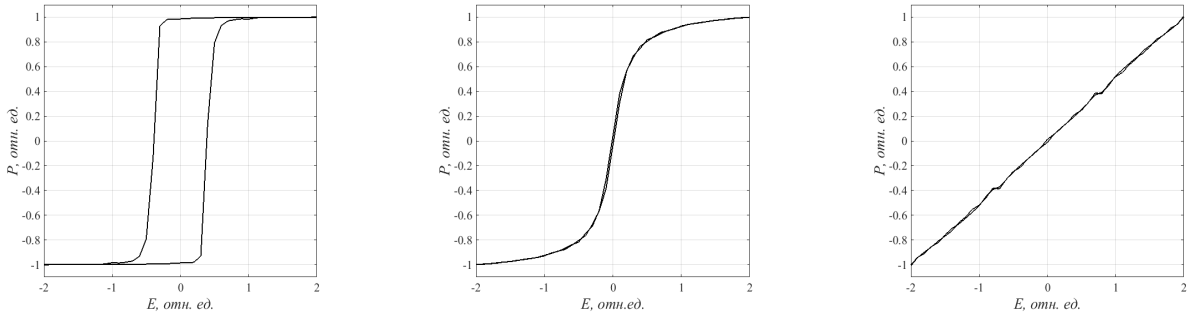
$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i E|p_i|s_i \,, \qquad (1)$$

где H – потенциальная энергия системы, Дж; s_i – текущее направление «псевдоспина»; J_{ij} – константа связи (аналог потенциала взаимодействия спинов); E – напряженность внешнего электрического поля в месте расположения «псевдоспина» (аналог индукции магнитного поля), В/м; $|p_i|$ – абсолютная величина дипольного момента ячейки, Кл·м (при условии, что полярная ось совпадает с кристаллографической осью, иначе учет направления потребует задания $|p_i|\cos\alpha$).

Переменные модели и величины, подлежащие определению: конфигурация «псевдоспинов» s_i; энергия системы H; поляризация системы $P = \sum_i p_i \Big/ \Delta V$, Кл/м^2, или в нормированном виде $P = \sum_i s_i$; теплоемкость системы $C = \frac{1}{k_T T^2}\left(\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2\right)$, Дж/К; диэлектрическая восприимчивость $\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 \Delta V k_T T}\left(\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2\right)$, рассчитанные с использованием средних по ансамблю значений энергии $\langle H \rangle$ и поляризации $\langle P \rangle$; T – температура; k_T – постоянная Больцмана. Задача решается методом статистических испытаний при помощи алгоритма Метрополиса, который включает следующие основные шаги: 1) сформировать начальную конфигурацию системы; 2) провести пробное случайное изменение конфигурации; 3) вычислить изменение энергии системы ΔH; 4) если $\Delta H \le 0$, тогда принять новую конфигурацию системы и перейти к пункту 8; 5) если $\Delta H \ge 0$, то вычислить «вероятность перехода» $H = \exp\left(-\Delta H \big/ \left(k_T T\right)\right)$; 6) сгенерировать равномерно распределенное случайное число $r \in (0,1)$; 7) если $r \le W$, принять новую конфигурацию, иначе сохранить предыдущую конфигурацию; 8) определить значения требуемых физических величин; 9) повторить пункты 2-8 для получения достаточного количества конфигураций; 10) вычислить средние по статистически независимым друг от друга конфигурациям. Модель реализована в ППП Matlab с использованием базовой версии программы [4]. Моделирование проводилось с учетом нормировки параметров (в модели Изинга традиционно используют безразмерное соотношение $J/(k_T T)$). В качестве входных параметров требуется инициализиро-

вать: число узлов решетки N, константу J, величину внешнего электрического поля E, температуру системы T (или массив значений температур) и количество испытаний M для реализации метода Монте-Карло (в алгоритме Метрополиса).

Вычислительный эксперимент 1 «Моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса». Состояние, при котором все домены будут характеризоваться одинаковым направлением вектора спонтанной поляризации, является энергетически выгодным. Поэтому первоначальная конфигурация рассматривалась при s_i=+1 или s_i=–1 для всех узлов решетки. Возможные конфигурации системы определяются заданием значений всех переменных s_i, число которых составляет 2^N, а вклад любой из конфигураций определяется функцией распределения для канонического ансамбля. Параметры модели: M=2000; L=16; поле E изменяется в диапазоне [-2,2] отн. ед. Переменные модели и величины, подлежащие определению: зависимость суммарной поляризации системы P как функции изменяющегося поля при различных значениях температуры. На рис. 1 приведены результаты компьютерного моделирования поляризации в окрестности температуры фазового перехода (2.3 отн. ед.).



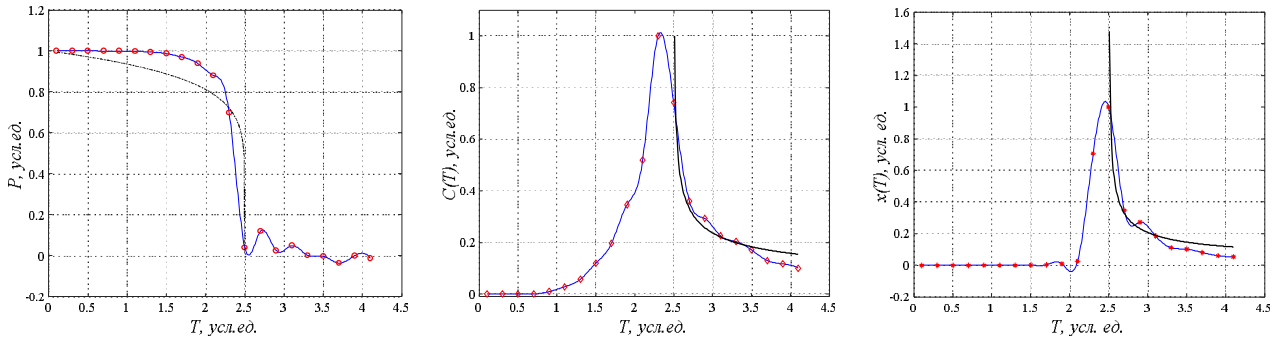
а *б* *в*

Рис. 1. Сегнетоэлектрический гистерезис – зависимость поляризации от поля при: *а* – T=1.5 отн. ед., *б* – T=3 отн. ед., *в* – T=10 отн. ед.

При температуре, меньшей T_C, наблюдается гистерезисная зависимость поляризации от внешнего поля; при температурах, больших температуры Кюри, зависимость P от E соответствует параэлектрической фазе (объект «теряет» свои сегнетоэлектрические свойств и становится линейным пироэлектриком).

Вычислительный эксперимент 2 «Оценка критических индексов». Фазовые переходы в сегнетоэлектриках также, как и в ферромагнетиках, удобно описывать с помощью группы показателей – так называемых критических индексов [5]. В термодинамике и молекулярной теории поля вводятся следующие аналитические выражения, соответствующие критическим индексам: для температурной зависимости поляризации $P(T)$ ниже температуры Кюри: $P(T) \propto (1 - T/T_C)^{\beta}$, для температурной зависимости теплоемкости $C(T)$ и диэлектрической восприимчивости $\chi(T)$ выше температуры Кюри: $C(T) \propto \left((T - T_C)/T_C\right)^{-\alpha}$, $\chi(T) \propto \left((T - T_C)/T_C\right)^{-\gamma}$, где T_C – температура Кюри. Проведем оценку характерных критических индексов для численной реализации модели Изинга. Инициализируем параметры модели: число случайных испытаний – M=1000; температура T меняется в диапазоне [0.1 4.1]; напряженность электрического поля E отсутствует. Переменные модели и величины, подлежащие определению: поляризация системы P, теплоемкость $C(T)$, диэлектрическая восприимчивость $\chi(T)$.

На рис. 2 представлен результат стохастического моделирования методом Монте-Карло зависимости поляризации, теплоемкости и диэлектрической восприимчивости от температуры в сравнении с графической визуализацией на основе аналитических соотношений. Приближение проведено методом наименьших квадратов. Численные значение критических индексов представлены в табл. 1.



а *б* *в*

Рис. 2. Температурные зависимости поляризации, теплоемкости и диэлектрической восприимчивости (маркированные кривые) в сравнении с аналитическими зависимостями соответственно – *а*, *б, в*

Таблица 1

Значения критических индексов

Обозначение индекса	Теоретическая оценка	Асимптотические оценки для модели Изинга		Результат вычислительного эксперимента	Экспериментальные оценки [6-7]
		Двумерная модель Изинга	Трехмерная модель Изинга		
α	0	0	0.125	0.48-0.50	*
β	0.5	0.125	0.31	0.15-0.2	ТГС 0.27±0.02 при T<48°C 0.51±0.02 – вблизи T_C=48.95°C
					ДТГС 0.26±0.02 при T<57°C 0.50±0.02 вблизи T_C=58.95°C
					SBN: Ce 0.126-0.232±0.01
γ	1	1.75	1.25	0.71-0.78	0.9-1.4

*Примечание. В одних сегнетоэлектриках теплоемкость испытывает конечный скачок при $T=T_C$ (кубические кристаллы), в других (для одноосных сегнетоэлектриков) – ведет себя как $\ln(T-T_C)$ [5]

Вблизи температуры Кюри зависимость поляризации от температуры в наибольшей степени (по данным экспериментов [6] для кристаллов ТГС и ДТГС, SBN) соответствует теоретической оценке, полученной на основе теории самосогласованного поля, при отдалении от температуры фазового перехода – эксперимент имеет большее согласование с результатами, полученными на основе модели Изинга.

Таким образом, реализованная двумерная модель Изинга позволяет проводить исследование поведения характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок в окрестности температуры фазового перехода. Для уточнения результата требуется переход к трехмерному представлению модели Изинга и к увеличению числа ячеек моделируемой системы. Для модельного представления характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения требуется модификация представления гамильтонинана, для многоосных кристаллов – переход к концепции модели Гейзенберга.

1. Wang, C.L. Size effects of ferroelectric particles described by the transverse Ising model / C.L. Wang, Y. Xin, X.S. Wang, W.L. Zhong // Phys. Rev. – 2000. – V. 62, № 17. – P. 11423-11427.

2. Sa Barreto, F.C. Ferroelectric Phase Transitions and the Ising Model // Braz. J. of Phys.. – 2000. – V. 30, № 4. – P. 778-782.

3. Srinoi, S. Investigation of temperature-driven ferroelectric phase-transition via modified Heisenberg model: the Monte-Carlo simulation / S. Srinoi, Y. Laosiritaworn // Advanced Material Research. – 2013. – V. 813. – P. 315-318.

4. Детченков, И.Л. Применение метода Монте-Карло в задачах моделирования фазовых переходов / И.Л. Детченков, М.И. Рвачева, А.Г. Масловская // Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки». – Благовещенск: АмГУ, 2015. – Вып. 71. – С. 33-38.

5. Струков, Б.А. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах / Б.А. Струков, А.П. Леванюк. – М: Наука, 1995. – 304 с.

6. Blinc, R. Critical behavior of ferroelectric TGS and deuterated TGS / R. Blinc, M. Burgar, A. Levstik // Solid State Comm.. – 1970. – V. 8. – P. 317-321.

УДК 535.012.21: 004.942

ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ РАБОТЫ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННО-ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ФИЛЬТРОВ

Л.И. Горбунов, А.В. Попова, В.В. Криштоп
Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
paveinp@mail.ru

APPENDIX FOR MODELING THE RESULTS OF WORK OF INTERFERENCE-POLARIZATION FILTERS

L.I. Gorbunov, A.V. Popova, V.V. Krishtop
Far Eastern State Transport University (Khabarovsk)
paveinp@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.18-21

Многие явления нелинейной оптики весьма интересны и перспективны для применения в развивающейся технике, проведения научных исследований и экспериментов. Тем не менее существует множество нюансов, таких как хрупкость анизотропных кристаллов или проблемы юстировки, осложняющих реальное проведение лабораторных опытов. Для демонстраций, изучения и исследований сложно доступных объектов возможно использовать специализированное программное обеспечение, позволяющее создавать и развивать современные методы решения научных заданий. Создание эффективных методов и алгоритмов решения задач позволяет углубиться в изучении конкретной научной отрасли и даёт возможность получать ответы на поставленные учёными вопросы [1, 2]. Современные языки программирования делают возможным написание программ, имеющих самый различный функционал. При наличии определённых навыков возможно реализовать практически любую идею, ограничение составляют лишь недостаток опыта и знаний, а также вычислительная мощность ЭВМ, запускающая программу.

В первую очередь, для разработки программы, необходимо определиться с языком программирования и средой, в которой будет проходить разработка. При выполнении практической части выпускной квалификационной работы использовался язык C++ и Qt – кроссплатформенный фреймворк для разработки программного обеспечения на языке программирования C++. Qt позволяет запускать написанное с его помощью программное обеспечение в большинстве современных операционных систем путём простой компиляции программы для каждой системы без изменения исходного кода. Включает в себя все основные классы, которые могут потребоваться при разработке прикладного программного обеспечения, начиная от элементов графического интерфейса и заканчивая классами для работы с сетью, базами данных и XML. Является полностью объектно-ориентированным, расширяемым и поддерживающим технику компонентного программирования.

Для выполнения поставленной задачи – реализации компьютерной модели интерференционно-поляризационных фильтров достаточно использовать компонент Qt Creator. Его возможности позволяют создать форму – пользовательский интерфейс, интерпретировать математический аппарат в программный код, а также вывести результаты вычислений в интересующей пользователя форме – в нашем случае с помощью графика. Интерфейс Qt Creator с процессом создания формы приложения представлен на рис. 1.

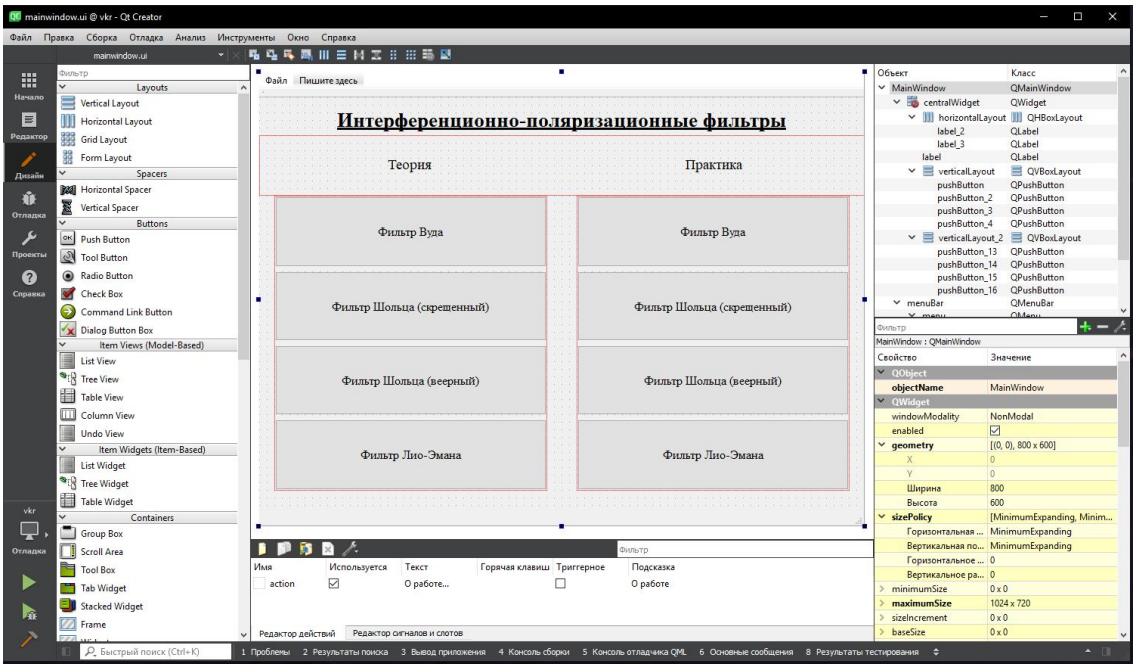


Рис. 1. Qt Creator. Создание приложения.

В левой части приложения находится список выбора компонентов, которые возможно поместить на форму. Каждый из компонентов представляет собой элемент, с которым возможно каким-либо образом взаимодействовать, либо этот элемент содержит в себе различную информацию (например, label – текстовый объект), либо этот элемент позволяет располагать другие элементы на форме в определённом порядке. В центральной части приложения отображается сама форма. Изначально окно формы создаётся пустым, пользователю самому необходимо добавлять на него элементы. В правой части приложения сверху находится дерево всех объектов на форме, при выделении объекта на форме этот же объект выделяется в списке-дереве и наоборот, при выделении элемента в дереве, он выделяется на форме. Снизу находится список свойств выделенного объекта. Среди таких свойств, например, размер и положение объекта, шрифт и цвет текста (при его наличии) и др. Пользователь может менять свойства всех объектов на форме на свое усмотрение.

После создания формы и нанесения всех необходимых элементов, необходимо обозначить поведение этих элементов. Для этого необходимо воспользоваться системой сигналов и слотов, позволяющих описать действие элемента при определенном воздействии на него. Для того, чтобы запрограммировать реакцию элемента на воздействие, необходимо найти данный элемент на форме, вызвать контекстное меню щелчком правой кнопки мыши и выбрать пункт «Перейти к слоту…». После проделанных действий откроется окно перехода к слоту, в котором необходимо выбрать сигнал, на который будет реагировать элемент. В данном случае, выбор слота происходит для элемента-кнопки, сигнал clicked() будет отвечать за действия, выполняемой программой при нажатии этой кнопки.

После выбора необходимого сигнала и нажатия кнопки «ОК», программа переносит пользователя в окно работы с исходным файлом с расширением «.cpp». Конкретно в этих файлах происходит написание программного кода, описание всех действий, которые будут происходить в программе. Например для того, чтобы кнопка при нажатии переводила текст, написанный в label-элементе, необходимо перейти к ранее упомянутым слотам, выбрать сигнал Clicked() и написать программный код. В нашем случае, при нажатии на кнопку «Перевод (русский)» будет отображен русский текст, а при нажатии на кнопку «Translate (English)» - английский. Для выполнения этого достаточно воспользоваться одной функцией:

```
void LtotTheory::on_pushButton_clicked()
{
  ui->label->setText("Русский текст");}
```

Здесь LtotTheory обозначает название окна формы, on_pushButton_clicked() – сигнал нажатия на кнопку, означающий то, что после нажатия на кнопку будет выполнен код, описанный в квадратных скобках далее. Ui обозначает обращение к пользовательскому интерфейсу, label – элемент, в котором находится изменяемый текст, функция setText помещает в label элемент текст, который функция принимает в качестве аргумента в круглых скобках.

Таким образом, разрабатывая пользовательский интерфейс путем создания формы и написания программного кода, отвечающего за логику элементов интерфейса, возможно создавать различные программы, обладающие самым разнообразным функционалом. Функционал программ возможно расширять с использованием дополнительных библиотек, обладающих различными функциями, способными значительно упростить разработку приложения и усовершенствовать его возможности.

Разработанное приложение состоит из основного файла проекта, в котором описана версия используемой среды разработки, перечислены подключаемые классы, где класс – это элемент ПО, описывающий абстрактный тип данных и его частичную или полную реализацию [3]. Другие абстрактные типы данных – метаклассы, интерфейсы, структуры, перечисления, – характеризуются какими-то своими, другими особенностями. Наряду с понятием «объекта» класс является ключевым понятием в ООП. Суть отличия классов от других абстрактных типов данных состоит в том, что при задании типа данных класс определяет одновременно как интерфейс, так и реализацию для всех своих экземпляров, а вызов метода-конструктора обязателен. Само приложение состоит из множества классов – под каждый из фильтров решено использовать собственный класс с заголовочными файлами, исходными файлами и файлами формы.

Таким образом, основное окно программы определено классом main-window и обладает заголовочным файлом mainwindow.h, в котором, согласно принципам объектно-ориентированного программирования, подключаются остальные классы для их совместного использования, и объявления функций, исходным файлом в котором описываются действия объявленных функций, и файлом формы, в котором происходит создание интерфейса, рассмотренное ранее. Соответственно, таким же наборов файлов обладает каждый из классов, посвященный фильтрам. При этом, так как предполагается, что каждый из фильтров будет обладать уникальным описанием (теория) и ему будет посвящен собственный функционал (практика), решено создать для каждого фильтра класс практики и теории. При наличии четырех имеющихся фильтров вместе с классом главного окна получается 9 классов.

Наглядность программного приложения можно продемонстрировать на примере экспериментов с первым интерференционно-поляризационным фильтром, представленным на рис. 2.

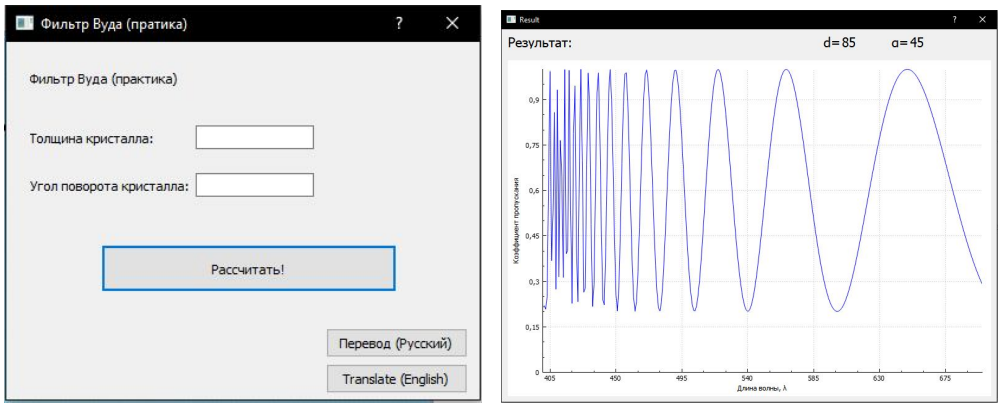


Рис. 2. Исследование фильтра Вуда:
а) – схема экспериментальной установки; б) – фотография полученного излучения;
в) – спектр, измеренный спектрографом.

Фильтр Вуда представляет собой последовательное расположений поляризатора, анизотропного кристалла (ниобат лития, толщиной 85 мкм) и анализатора. Монохроматическое излучение ге-

лий-неонового лазера направляется перпендикулярно плоскости, в которой лежит оптическая ось кристалла *Z*. Плоскости пропускания поляризатора П1 и поляризатора П2 расположены под углом α и β к оптической оси кристалла *Z*. Спектр прошедшего через систему излучения зависит от значения величин углов α и β и может быть периодическим, сплошным или на фоне сплошного спектра периодическим (комбинированным) [4]. Эксперимент был поставлен таким образом, что сколлимированный пучок немонохроматического излучения от лампы накаливания проходил через поляризатор, расположенный под углом 45° к оптической оси кристалла. Излучение проходило через второй поляризатор, попадало в монохроматор и фотографировалось через окуляр монохроматора. Изменяя положение поляризатора и анализатора можно управлять спектром пропускания системы в достаточно широких пределах. На характеристики прошедшего излучения весьма ощутимое воздействие оказывает также толщина анизотропного кристалла.

Поскольку изменять исходные параметры интерференционно-поляризационного фильтра в реальном опыте весьма затруднительно, для предварительного практического изучения данной темы предлагается использовать созданное программное обеспечение.

Окно моделирования и результат пропускания излучения фильтра Вуда показаны на рис. 3.

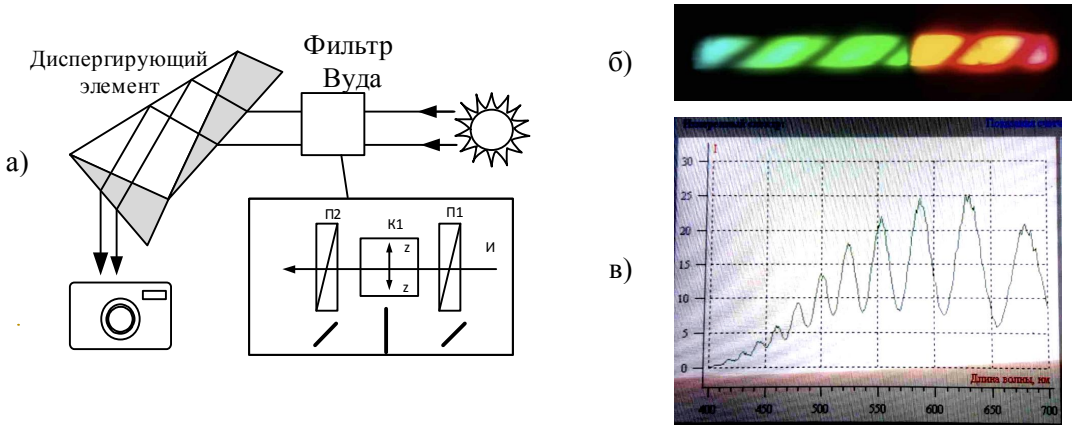


Рис. 3. Окно моделирования и результат пропускания излучения фильтра Вуда.

Отличие в экспериментальном и расчетном спектрах объясняется тем, что на данном этапе разработке программы в классе источников излучения пока описан только широкополосный равномерный излучатель с постоянной мощностью. Тем не менее в оранжево-красной области спектров наблюдается характерное совпадение результатов эксперимента и компьютерной модели.

В будущем планируется модификация и расширение функционала программы путем добавления возможности создавать пользователю собственные опыты с анизотропными кристаллами, анализаторами и поляризаторами. Таким образом, пользователь станет способным создавать собственные разновидности фильтров, проводить их модификации, которые, либо помогут в исследовании такой научной области как нелинейная оптика, либо станут использоваться в образовательных целях для изучения изменения спектров прохождения оптического излучения.

1. Беспрозванных, В.Г. Нелинейная оптика: учеб. пособие / В.Г. Беспрозванных, В.П. Первадчук. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – 200 с.

2. Попова, А.В., Гончарова, П.С., Криштоп, В.В. Развитие интерференционных поляризационных светофильтров // Современные проблемы физики и технологий: тезисы докладов VI Международной молодежной научной школы-конференции, посвященной 75-летию НИЯУ МИФИ и 95-летию академика Н.Г. Басова. – 2017. – С. 287-288.

3. Лафоре, Р. Обьектно-ориентированное программирование в С++. –Изд. 4-е. – СПб.: Питер СПб., 2018. – 928 с.

4. Попова, А.В., Гончарова, П.С., Криштоп, В.В. Интерференционные поляризационные светофильтры в спектральных системах // Научно-техническое и экономическое сотрудничество стран АТР в XXI веке. – 2017. – Т. 2. – С. 319-324.

УДК 534.213, 519.688

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ РАСЧЕТА АКУСТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

К.А. Драчёв, Б.М. Молоканов, В.И. Римлянд
Тихоокенский государственный университет (г. Хабаровск)
kirill@pnu.edu.ru

APPLICATION OF THE FINITE ELEMENT METHOD FOR CALCULATION OF ACOUSTIC FIELDS

K.A. Drachev, B.M. Molokanov, V.I. Rimland
Pacific State University (Khabarovsk)
kirill@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.22-25

В настоящее время метод конечных элементов (Finite Element Method, FEM) является распространенным инструментом для решения теоретических и практических задач акустики и физики твердого тела. В методе FEM вычисления производятся по всему объему расчётной модели, при этом вся область представляется как сетка, состоящая из элементов конечных размеров. Размер элементов можно менять, уменьшая его вблизи интересующей области, и увеличивая – для снижения затрат процессорного времени. В каждом из таких элементов произвольно выбирается вид аппроксимирующей функции, которая строится на множестве кусочно-непрерывных функций, определенных на конечном числе подобластей. На каждом из элементов неизвестная функция аппроксимируется пробной функцией в виде полинома первой или второй степени, удовлетворяющие граничным условиям непрерывности, налагаемыми решаемой задачей [1, 2].

Рассматриваемая в данной работе численная модель, основанная на методе конечных элементов и волновых уравнениях, предложена для исследования распространения акустических волн в полимерных композиционных материалах на основе эпоксидиановой смолы. Исходя из законов сохранения энергии, импульса, уравнения состояния деформируемой среды и приближения малой амплитуды, линейное уравнение звукового поля в упругой твердой среде можно записать в виде [3]

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{ijkl} u_k + F_i , \qquad (1)$$

где ρ – плотность среды, u – поле смещения частиц среды, C_{ijkl} – тензор упругости, F_i – внешняя сила.

Данное уравнение является уравнением активной акустической волны (уравнением Гельмгольца). Обычно в численных расчетах рассматривается распространение акустических волн в полубесконечном пространстве, и поэтому внешняя сила отсутствует. Поскольку характеристики распространения звукового поля варьируются в разных средах, перейдем к уравнению звукового поля в однородной и изотропной среде. Вводя постоянные Ламе в изотропную твердую среду, уравнение звукового поля можно переписать в виде

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \nabla div \vec{u} + \mu \nabla^2 \vec{u} , \qquad (2)$$

где λ, μ – постоянные Ламе. В нашем случае они были выбраны следующими: эпоксидная смола (λ=2,89 ГПа, μ=1,728 ГПа, ρ=1200 кг/м^3), углеволокно (λ=31,28 ГПа, μ=23,96 ГПа, ρ=2200 кг/м^3). При

разложении уравнения Гельмгольца вектор смещения выражается в виде градиента скаляра и вихревой составляющей вектора смещения среды. Основываясь на стандартной процедуре метода конечных элементов, вычислительная область делится на несколько элементов и узлов. Для возбуждения акустической волны в модели используется виртуальный точечный источник.

Геометрическое представление расчетной области (эквивалентные размеры составляют 5×1 см) модели образца композиционного материала, армированного слоями углеткани, представлено на рис. 1. Эффективная толщина каждого слоя выбиралась равной 0,125 мм. Виртуальные излучатель и приемник располагались на противоположных гранях (рис. 1).

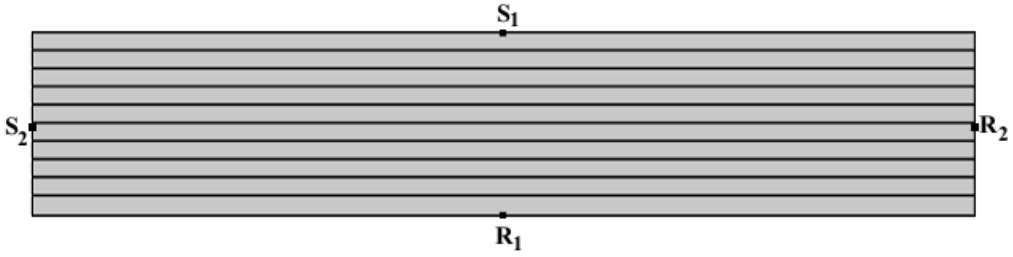


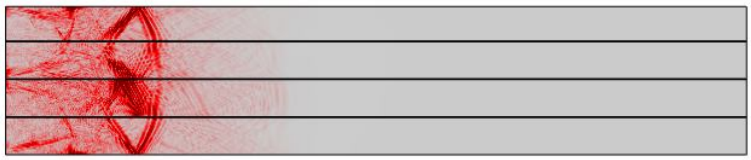
Рис. 1. Расположение источника S и приемника R акустических сигналов на примере модели композиционного материала

При t = 0 формировался прямоугольный импульс силы, воздействующей на поверхность образца с длительностью 1 мкс с силой 10 Н. В зависимости от выбранного направления распространения волны относительно слоев армирования выбиралась одна из двух пар «излучатель-приемник» (вдоль волокон использовалась пара S_1-R_1, поперек – пара S_2-R_2). Также в модели не учитываются некоторые факторы, возникающие на границе раздела «матрица-волокна». Данная граница обычно представляет собой область скачкообразного изменения состава, кристаллической и молекулярной структуры и других параметров материалов. Характеристики границы раздела специфичны для каждой пары «матрица-волокно» и определяются множеством факторов (поверхностная шероховатость волокна, адгезионными связями, межфазные взаимодействия и т.д.). Граничные условия на границах областей определяется условиями свободной границы. В связи с этим в модели используется понятие эффективная толщина углеткани величина, которой меньше реально существующих образцов углеткани. Пространство разбивается так чтобы узлы попадали на границу раздела. Сетка строится равномерно таким образом, чтобы размер одного элемента был не более 0,2 мм. Такое разбиение сетки позволяет корректно отобразить распространение акустического поля, а также снизить общую погрешность.

Результатом расчета являются двумерные изображения распространения акустического поля, полученные через дискретные промежутки времени (рис. 2, 3). Фактически данные изображения представляют собой поперечные сечения трехмерной акустической картины, так как ее отображение в трехмерном виде крайне затруднено и требует больших вычислительных мощностей.

Амплитуда ультразвуковой волны отражается интенсивностью красного цвета. Серый цвет представляет значение низкой амплитуды, близкое к нулю. Волны, которые генерируются от источника состоят из поперечной волны, продольной волны, головной волны и волны Рэлея. Особенно хорошо это видно на моделях с малым количеством слоев армирования. На рисунках 2 и 3 видно, что скорость продольных волн при их распространении вдоль слоев армирования возрастает с увеличением количества слоев армирования быстрее в сравнении со случаем распространения волн поперек слоев. Скорость продольных и поперечных волн в образцах армированного композиционного материала составила в случае распространения волны представлена в таблице.

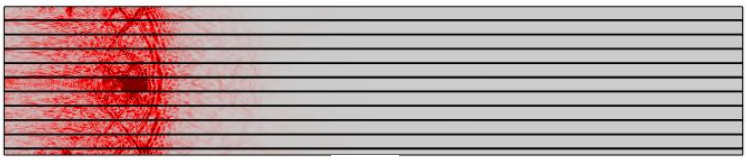
Использование приемника в модели полимерного композиционного материла позволило нам получить также виртуальные осциллограммы акустических сигналов (рис. 4).



а)

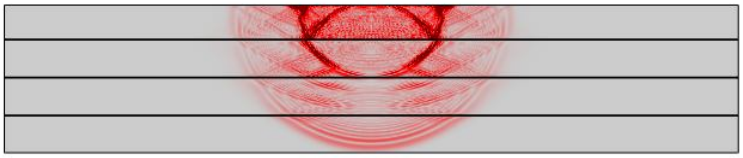


б)

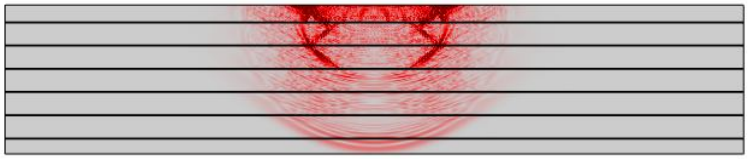


в)

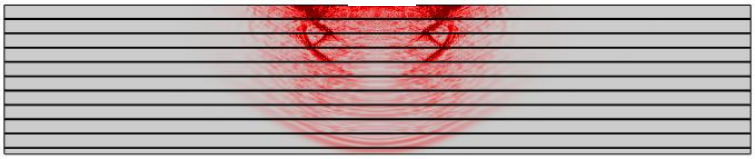
Рис. 2. Распространение акустических волн поперек слоев армирования через 10 мкс после начала работы расчета модели с армированием: а) 3 слоя; б) 6 слоев; в) 10 слоев.



а)



б)



в)

Рис. 3. Распространение акустических волн вдоль слоев армирования через 10 мкс после начала работы расчета модели с армированием: а) 3 слоя; б) 6 слоев; в) 10 слоев.

Значения скорости распространения волн

Количество слоёв армирования	Скорость звука поперек слоев армирования, м/с		Скорость звука вдоль слоев армирования, м/с	
	Продольная волна	Поперечная волна	Продольная волна	Поперечная волна
3	1935	1294	1953	1315
6	2062	1360	2174	1388
10	2128	1397	2223	1438

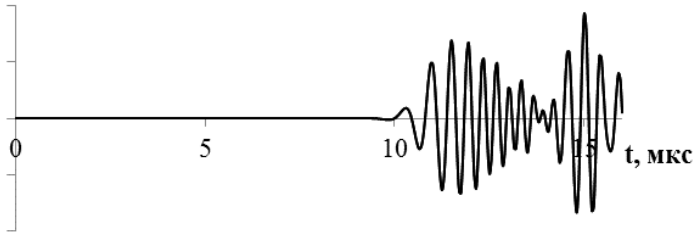


Рис. 4. Виртуальная осциллограмма акустического сигнала от модели приемника.

Полученные осциллограммы позволяют провести более детальный анализ акустических свойств модели, а также рассчитать такие акустические параметры как скорость распространения волны, коэффициент затухания. Скорость акустических волн определялась на основе измерения времени прохождения ультразвукового импульса от излучателя до приемника по двум направлениям: вдоль слоев армирования и поперек слоев армирования.

Результаты, полученные методом конечных элементов, в целом подтверждают полученные ранее результаты расчета методом конечных разностей во временной области в работах [4-5]. Однако методом конечных разностей получены более детальные изображения акустических полей. Применение данного метода также подтвердило общий вид зависимости скорости акустических волн от направления распространения волн внутри композиционного материала. Отметим, что моделирование волновых процессов методом конечных элементов не позволяет полностью учитывать все особенности распространения волн в твердом теле. В данной работе расчет математической модели распространения акустических волн в твердом теле является упрощенным, в нем необходимо учесть дополнительные тензоры напряжений и анизотропию распространения упругих волн в разных направлениях. Для этого потребуются более мощные вычислительные и временные ресурсы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00295\19.

1. Zhuming, Bi. Finite Element Analysis Applications: A Systematic and Practical Approach // Academic Press. – 2018. – 504 p.

2. Zhou., DeXin. Modeling Study of a Linear Ultrasonic Phased Array Transducer / DeXin Zhou, XueQian Tang, XiangLin Zhan // Applied Mechanics and Materials. – 2013. – V. 441. – P. 470-475.

3. Taflove, A. Computational Electrodynamics: The Finite Difference Time Domain Method / A. Taflove, S.C. Hagness // Artech House Publications. – Norwood, 2000.

4. Бархатов, В.А. Решение волновых уравнений методом конечных разностей во временной области. Двумерная задача. Основные соотношения // Дефектоскопия. – 2007. – № 9. – С. 54-71.

5. Драчёв, К.А. Применение метода конечных разностей во временной области для моделирования распространения ультразвука / К.А. Драчёв, В.И. Римлянд // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2018. – №1(48). – С. 15-22.

6. Алёшин, М.С. Моделирование процессов рассеяния с использованием библиотеки Open Source Physics / М.С. Алёшин, А.В. Прохоренко // Материалы XVI региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование». – 2018. – С. 85-88.

УДК 517.958

СВОЙСТВО ПОЗИТИВНОСТИ ОПЕРАТОРА ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ

В.И. Жукова[1], Е.А. Жуков[2]

[1]Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

[2]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

v-i-zhukova@yandex.ru

POSITIVE PROPERTY OF THE NEUTRON TRANSFER OPERATOR

V.I. Zhukova[1], E.A. Zhukov[2]

[1]Far Eastern State Transport University, Khabarovsk

[2]Pacific State University, Khabarovsk

v-i-zhukova@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.26-29

Настоящая работа посвящена изучению корректной разрешимости задачи Коши для уравнения переноса нейтронов в неограниченном объеме R_2 на основе теории полугрупп. В операторной форме эта задача имеет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}u(\mathrm{t})}{\mathrm{dt}} = \Lambda u(\mathrm{t}), \quad \mathrm{t} > 0; \\ u(0) = u_0,\ u_0 = D(\Lambda); \end{cases} \tag{1}$$

$$\Lambda = -A + K; \tag{2}$$

$$Au(x,y,\varpi,t) = \omega_1 \frac{\partial u}{\partial x} + \omega_2 \frac{\partial u}{\partial y} + \sigma u; \tag{3}$$

$$Ku(x,y,\varpi,t) = \frac{\sigma_S}{4\pi} \iint\limits_{\Omega} q\left(\varpi,\bar{\theta}\right) u\left(x,y,\bar{\theta},t\right) d\bar{\theta}. \tag{4}$$

Здесь $u(x,y,\varpi,t)$ – функция распределения нейтронов в пространстве R_2, $(x,y) \in \mathrm{R}_2$; в направлении $\varpi = \{\omega_1,\omega_2\}, \varpi = \varpi(u,v) \Rightarrow \ \omega_1 = \omega_1(u,v), \omega_2 = \omega_2(u,v)$, где ω_1, ω_2 – направляющие косинусы вектора ϖ; $(u,v) \in \Omega$, Ω – единичный круг направлений движения нейтронов; $\dfrac{1}{4\pi} q\left(\varpi,\bar{\theta}\right)$ – индикатриса рассеяния, причем $\dfrac{1}{4\pi} \iint\limits_{\Omega} q\left(\varpi,\bar{\theta}\right) d\bar{\theta} = 1$; $\sigma > 0$, $\sigma_S > 0$ – константы, $D(\Lambda)$ – область определения оператора Λ. Оператор A (3) называется оператором переноса нейтронов.

Спектральные свойства оператора переноса нейтронов изучаются в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ – равномерно непрерывных и ограниченных на R_2 функций со значениями в пространстве $C(\Omega)$ – непрерывных на Ω функций. Для $\Phi(x,y,\varpi) \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ норма определяется формулой

$$\left\|\Phi(x,y,\varpi)\right\|_{C(\mathrm{R}_2;C(\Omega))} = \max_{\varpi}\left(\sup_{(x,y)} \left|\Phi(x,y,\varpi)\right| \right). \tag{5}$$

Изучение спектральных свойств оператора переноса нейтронов начинается с работ [1-3]. В этих работах исследовались свойства оператора переноса в пространстве суммируемых функций с

любой степенью в ограниченной области. Было установлено, что непрерывный спектр лежит в области $\mathrm{Re}\lambda < -\sigma$, а точечный спектр имеет конечное множество простых и действительных чисел в области $\mathrm{Re}\lambda < -\sigma$. Изучение спектра оператора переноса в неограниченной области R проводилось в работах [4-5]. В этом случае установлено, что непрерывный спектр оператора переноса заполняет всю вещественную ось, а точечный спектр состоит из конечного множества собственных значений, лежащих на мнимой оси (σ=0). В настоящей работе, для неограниченного объема $\mathrm{R_n}$ ($n \geq 2$) установлено, что точечный спектр сплошь заполняет прямые $|\mathrm{Re}\lambda| = \sigma$, параллельные мнимой оси и каждая его точка имеет континуальную кратность.

Исследование корректной разрешимости задачи (1) - (4) основывается на теореме Хилле – Иосида и теореме о возмущении полугрупп класса (C_0) [6-7].

Определение 1. Оператор T является производящим оператором сильно непрерывной полугруппы операторов класса (C_0) в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$, если

$$\left\| (\lambda \mathrm{I} - T)^{-1} \right\|_{C(\mathrm{R}_2; C(\Omega)) \to C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))} \leq \frac{1}{\mathrm{Re}\lambda - \alpha}, \mathrm{Re}\lambda > \alpha. \tag{6}$$

Такой оператор называется позитивным.

Замечание 1. Если оператор является производящим оператором сильно непрерывной полугруппы (группы) операторов класса (C_0) в некотором пространстве, то он замкнутый в этом пространстве [6].

Замечание 2. Согласно теореме Хилле – Иосида, задача (1) – (4) корректно разрешима в указанном пространстве, если оператор Λ (2) является позитивным.

Замечание 3. Так как оператор K (4) ограниченный в указанном пространстве, то по теореме о возмущении полугрупп класса (C_0) оператор Λ (2) будет позитивным, если этим свойством обладает неограниченный в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ оператор переноса A (3).

Определение 2. В область определения $D(A)$ оператора A (3) входят функции $u(x, y, \varpi) \in D(A)$ такие, что $u(x, y, \varpi) \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$, $\frac{\partial u}{\partial x} \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$, $\frac{\partial u}{\partial y} \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Оператор A (3) незамкнутый в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ [8]. Поэтому, для исследования спектральных свойств оператора A (3) в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ построим его замыкание. Сначала зададим параметрически произвольное направление в R_2

$$\begin{cases} x_1 = x + \omega_1 l, \\ y_1 = y + \omega_2 l, \\ -\infty < l < \infty. \end{cases} \tag{7}$$

Определение 3. Производной функции $\Phi(x, y, \varpi)$ по направлению (7) называется предел, если он существует, вида

$$\frac{d\Phi(x, y, \varpi)}{dl} = \lim_{h \to 0} \frac{\Phi(x + \omega_1 h, y + \omega_2 h, \varpi) - \Phi(x, y, \varpi)}{h}.$$

Определение 4. Оператором $\overline{A}$ называется оператор вида

$$\overline{A}\,\Phi(x, y, \varpi) = \frac{d\Phi(x, y, \varpi)}{dl} + \sigma\Phi(x, y, \varpi). \tag{8}$$

Область определения $D(\overline{A})$ включает функции $\Phi(x, y, \varpi) \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ такие, что $\frac{d\Phi(x, y, \varpi)}{dl} \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Для случая $\sigma \neq 0$ по аналогии с [8], где $\sigma = 0$ доказаны следующие утверждения.

Теорема 1. Оператор $\overline{A}$ замкнутый в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Теорема 2. $D(A) \subset D(\overline{A})$ и для $\Phi(x,y,\varpi) \in D(A) \Rightarrow \overline{A}\Phi(x,y,\varpi) = A\Phi(x,y,\varpi)$.

Теорема 3. Оператор $\overline{A}$ (8) есть замыкание оператора A (3) в пространстве функций $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Для исследования спектральных свойств оператора $\overline{A}$ (8) определим его резольвенту: $R(\lambda; \overline{A}) = (\lambda \mathrm{I} - \overline{A})^{-1}$. Решая резольвентное уравнение $\lambda\Phi - \frac{d\Phi}{dl} - \sigma\Phi = f$, получим

$$R(\lambda; \overline{A}) f(x,y,\varpi) = \begin{cases} \int\limits_0^{\infty} e^{-(\lambda-\sigma)s} f(x+\omega_1 s, y+\omega_2 s, \varpi) ds, & \mathrm{Re}\,\lambda > \sigma; \\ -\int\limits_{-\infty}^{0} e^{-(\lambda+\sigma)s} f(x+\omega_1 s, y+\omega_2 s, \varpi) ds, & \mathrm{Re}\,\lambda < -\sigma. \end{cases} \tag{9}$$

Здесь $\Phi(x,y,\varpi) \in D(\overline{A}), \quad f(x,y,\varpi) \in C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Теорема 4. Для резольвенты (9) оператора $\overline{A}$ (8) в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ справедлива оценка

$$\left\| R(\lambda; \overline{A}) \right\|_{C(\mathrm{R}_2; C(\Omega)) \to C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))} \leq \frac{1}{|\mathrm{Re}\,\lambda| - \sigma}, \quad |\mathrm{Re}\,\lambda| > \sigma. \tag{10}$$

Доказательство. Докажем для случая $\mathrm{Re}\lambda > \sigma$. Из формул (5) и (9) получим

$$\left\| \left(\lambda \mathrm{I} - \overline{A} \right)^{-1} f(x,y,\varpi) \right\|_{C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))} = \max_{\varpi} \left(\sup_{(x,y)} \left| \int_0^{\infty} e^{-(\lambda-\sigma)s} f(x+\omega_1 s, y+\omega_2 s, \varpi) ds \right| \right) \leq$$

$$\leq \max_{\varpi} \left(\sup_{(x,y)} |f(x,y,\varpi)| \right) \int_0^{\infty} e^{-s(\mathrm{Re}\lambda - \sigma)} ds = \frac{1}{\mathrm{Re}\,\lambda - \sigma} \left\| f(x,y,\varpi) \right\|_{C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))}.$$

Отсюда следует, что $\left\| R(\lambda; \overline{A}) \right\|_{C(\mathrm{R}_2; C(\Omega)) \to C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))} \leq \frac{1}{\mathrm{Re}\,\lambda - \sigma}, \quad \mathrm{Re}\,\lambda > \sigma.$

Аналогично доказывается для $\mathrm{Re}\lambda < -\sigma$.

Следствие 1. Из теоремы 4 и формулы (6), (10) следует, что оператор $\overline{A}$ (8) является производящим оператором сильно непрерывной группы операторов класса (C_0), т.е. является позитивным оператором в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Следствие 2. Все точки $\lambda : |\mathrm{Re}\,\lambda| > \sigma$ являются регулярными точками оператора $\overline{A}$ (8).

Следствие 3. Из замечания 2, замечания 3, теоремы 3, следствия 1 следует корректная разрешимость задачи Коши для уравнения переноса нейтронов (1) – (4) в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$.

Теорема 5. Точечный спектр оператора $\overline{A}$ (8) в пространстве $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ сплошь заполняет прямые $|\mathrm{Re}\,\lambda| = \sigma$ параллельные мнимой оси и каждая точка имеет континуальную кратность.

Доказательство. Точечный спектр состоит из собственных значений оператора $\overline{A}$ (8), т.е. это такие значения λ при которых уравнение

$$\lambda\Phi - \frac{d\Phi}{dl} - \sigma\Phi = 0 \tag{11}$$

имеет в $C(\mathrm{R}_2; C(\Omega))$ ненулевые решения. Доказательство проведем для случая $\mathrm{Re}\lambda = \sigma$. Покажем, что $\lambda = \sigma + i\beta, \beta \in R$ являются собственными значениями оператора $\overline{A}$ (8). Докажем, что ненулевое решение уравнения (11) имеет вид

$$\Phi(x,y,\varpi)=\exp\left((\lambda-\sigma)\left(\alpha\frac{x}{\omega_1}+(1-\alpha)\frac{y}{\omega_2}\right)\right),\quad 0\le\alpha\le 1;\ \alpha\in R. \tag{12}$$

Найдем

$$\frac{d\Phi(x,y,\varpi)}{dl}=\omega_1(\lambda-\sigma)\alpha\frac{1}{\omega_1}\exp\left((\lambda-\sigma)\left(\alpha\frac{x}{\omega_1}+(1-\alpha)\frac{y}{\omega_2}\right)\right)+\omega_2(\lambda-\sigma)\times$$
$$\times(1-\alpha)\frac{1}{\omega_2}\exp\left((\lambda-\sigma)\left(\alpha\frac{x}{\omega_1}+(1-\alpha)\frac{y}{\omega_2}\right)\right)=(\lambda-\sigma)\exp\left((\lambda-\sigma)\left(\alpha\frac{x}{\omega_1}+(1-\alpha)\frac{y}{\omega_2}\right)\right). \tag{13}$$

Здесь ω_1,ω_2 – направляющие косинусы направления l, при $\lambda=\sigma+i\beta,\beta\in R$ имеем:

$\Phi(x,y,\varpi)\in C(\mathrm{R}_2;C(\Omega));\ \frac{\partial\Phi(x,y,\varpi)}{\partial x}\in C(\mathrm{R}_2;C(\Omega));\ \frac{\partial\Phi(x,y,\varpi)}{\partial y}\in C(\mathrm{R}_2;C(\Omega))$, тогда

$\frac{d\Phi(x,y,\varpi)}{dl}=\omega_1\frac{\partial\Phi(x,y,\varpi)}{\partial x}+\omega_2\frac{\partial\Phi(x,y,\varpi)}{\partial y}$ и $\frac{d\Phi(x,y,\varpi)}{dl}\in C(\mathrm{R}_2;C(\Omega))$.

Подставим (12), (13) в уравнение (11), получим верное тождество. Следовательно, при $\mathrm{Re}\lambda=\sigma$ функции (12) определяют ненулевые решения уравнения (11) в указанном пространстве. Тогда $\mathrm{Re}\lambda=\sigma$ – точечный спектр оператора $\overline{A}$ (8).

Покажем, что при различных α соответствующие им решения (12) будут линейно независимые. Возьмем $\alpha_1\ne\alpha_2$ и составим линейную комбинацию:

$$c_1\Phi(x,y,\varpi,\alpha_1)+c_2\Phi(x,y,\varpi,\alpha_2)=0,\quad c_1,c_2\in R. \tag{14}$$

Если линейная комбинация (14) равна нулю когда $c_1=0,c_2=0$, то функции $\Phi(x,y,\varpi,\alpha_1),\Phi(x,y,\varpi,\alpha_2)$ – линейно независимые. Предположим обратное, например, $c_1\ne 0$. Тогда $c_2=-c_1\frac{\Phi(x,y,\varpi,\alpha_1)}{\Phi(x,y,\varpi,\alpha_2)}$ и следовательно, $c_2(x,y)\notin R$ Следовательно, $c_1=0$, тогда из линейной комбинации (14) видно, что и $c_2=0$, так как $\Phi(x,y,\varpi,\alpha_2)\ne 0$. Следовательно, кратность каждого собственного значения (каждой точки точечного спектра) не меньше континуальной так как α имеет мощность континуума.

1. Lehner, J., Wing G. On the spectrum of an unsymmetric operator arising in the transport theory of neutrons // Comm. Pure Appl. Math. – 1955. – V. 8. – P. 217-234.

2. Lehner, J., Wing, G. Solution of the linearized Boltzmann eguation for the slab geometry // Duke Math. J. – 1956. – V. 23. – P. 125-142.

3. Винг, Дж. М. Кинетическая теория и спектральные проблемы // Теория ядерных реакторов / под ред. Г. Биркхофа, Э. Вигнера. – М., 1963. – С. 160.

4. Lehner, J. The spectrum of neutron transport operator for the infinite slab // J. Math. Mech. – 1962. – V. 11, № 2. – P. 173-181.

5. Куперин, Ю.А., Набоко, С.Н., Романов, Р.В. Спектральный анализ односкоростного оператора переноса и функциональная модель // Функциональный анализ и его приложения. – 1999. – Т. 33. – Вып. 3. – С. 47-58.

6. Хилле, Э., Филлипс, Р. Функциональный анализ и полугруппы. – М.: ИЛ, 1962. – 829 с.

7. Иосида, К. Функциональный анализ. – М.: Мир, 1967. – 624 с.

8. Zhukova, V.I., Gamolja, L.N. Stuby of spectral properties of a translation operator // Far Eastern Mathematical Journal. – 2004. – V. 5, № 1. – P. 158-164.

УДК 538.91, 537.61

МОДЕЛИРОВАНИЕ СКИРМИОННЫХ СТРУКТУР В РАМКАХ КЛАССИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

В.Ю. Капитан[1,2], Е.В. Васильев[1,2]
[1]Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток)
[2]Институт прикладной математики ДВО РАН (г. Владивосток)
kapitan.vyu@dvfu.ru

MODELING OF SKYRMION STRUCTURES WITHIN THE FRAMEWORK OF THE CLASSICAL HEISENBERG MODEL

V.Yu. Capitan[1,2], E.V. Vasiliev[1,2]
[1]Far Eastern Federal University (Vladivostok)
[2]Institute of Applied Mathematics FEB RAS (Vladivostok)
kapitan.vyu@dvfu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.30-32

В физике конденсированных сред усиливается влияние компьютерного моделирования, что позволяет использовать новые методы для изучения сложных наносистем и способствует открытию новых явлений и материалов. В работе представлены результаты численного моделирования термодинамики для массива классических спинов Гейзенберга, размещенных на двумерной квадратной решетке. Используя метод Метрополиса, было изучено температурное поведение системы с учетом прямого обмена и взаимодействия Дзялошинского-Мории (DMI) в сравнении с классической системой Гейзенберга. В работе показано, как взаимодействие DMI изменяет температурное поведение намагниченности и оставляет практически неизменными энергию и теплоемкость.

Мы использовали решеточный гамильтониан, состоящий из обменного гамильтониана Гейзенберга (H_J), гамильтониана DMI-взаимодействия (H_D) и внешнего магнитного поля (H_Z) приложенного вдоль оси z, см. Формулы (1-4).

$$H = H_J + H_{DMI} + H_Z, \tag{1}$$

$$H_J = -J\sum_r S_r \cdot \left(S_{r+\hat{x}} + S_{r+\hat{y}} + S_{r+\hat{z}}\right), \tag{2}$$

$$H_{DMI} = -D\sum_r \left(S_r \times S_{r+\hat{x}} \cdot \hat{x} + S_r \times S_{r+\hat{y}} \cdot \hat{y} + S_r \times S_{r+\hat{z}} \cdot \hat{z}\right), \tag{3}$$

$$H_Z = B_{\hat{z}}\sum_r S_r, \tag{4}$$

Первым этапом исследования было изучение двумерной решетки с четырьмя ближайшими соседями только с прямым обменом (D = 0). Затем, изучение системы с DMI взаимодействием (D = 1) и сравнение полученных результатов. Размер системы составлял N = 8 × 8, внешнее магнитное поле отсутствовало (B = 0). Данные были рассчитаны алгоритмом Метрополиса, модифицированным для параллельных вычислений, с помощью программы, написанной на языке C ++ [1].

На рис. 1 показана температурная зависимость средней намагниченности на спин.

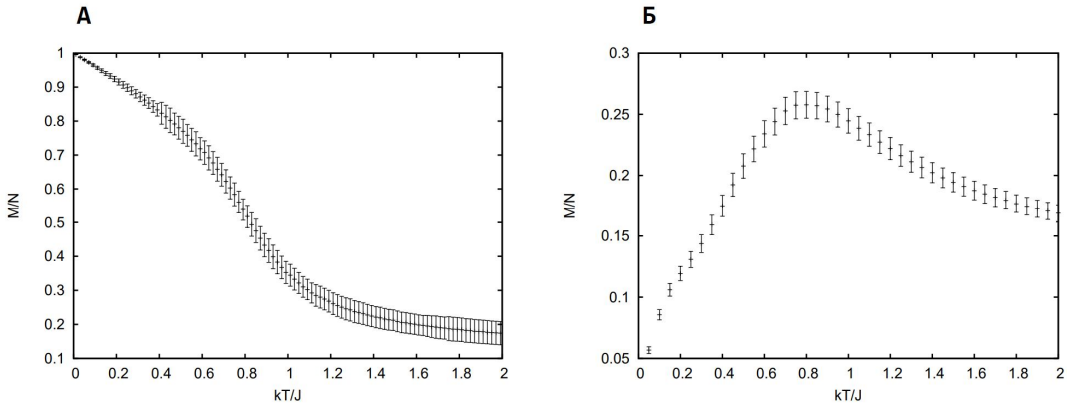


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности в системе:
А) с прямым обменом; Б) с учетом DMI взаимодействия.

В основном состоянии все спины выровнены друг относительно друга. Система имеет максимально возможную намагниченность. В системе с DMI взаимодействием общая намагниченность стремится к 0, так как спинам выгодно находиться перпендикулярно друг другу.

В отличие от простого обмена Гейзенберга, который коллинеарно выравнивает соседние спины, обмен DMI сводит энергию к минимуму, выравнивая спины перпендикулярно друг другу вдоль радиуса-вектора. На рис. 2 показаны одни из конфигураций основных состояний, которые появляются при низкотемпературном отборе проб. В классической спиновой модели Гейзенберга при отсутствии DMI взаимодействия и внешнего магнитного поля, спины выровнены параллельно относительно друг друга. В системе с DMI взаимодействием при низких температурах, в отсутствии внешнего магнитного поля, основное состояние подчиняется правилу, когда вся выборка делится на вертикальные или горизонтальные линии, а спины сонаправлены по линии. Стоит отметить, что спины в соседних линиях имеют угол $\approx \pi/2$, и каждая 8-я линия имеет одинаковое направление. Это поведение обусловлено наличием члена DMI в уравнении.

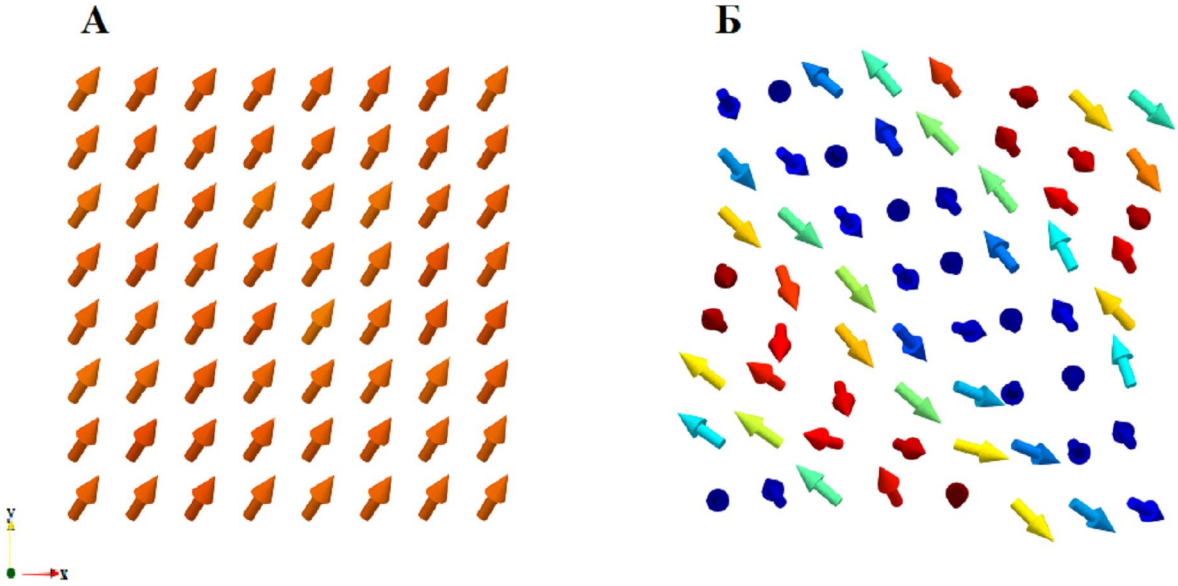


Рис. 2. Основные состояния спиновой модели Гейзенберга на квадратной решетке:
А – с прямым обменом; Б – с учетом взаимодействия DMI. Цвет представляет функцию координаты z между -1 (синий) и +1 (красный).

Следующим этапом было изучение системы с DMI взаимодействием под действием внешнего магнитного поля. Такое сочетание способствует формированию стабильных скирмионных структур. Скирмионы предложены в качестве элементов для создания перспективных носителей информации,

работающих на новых принципах – энергонезависимой памяти и магнитной логики, благодаря своей топологической природе, наноразмерам и чрезвычайно низкому электрическому току, необходимому для движения скирмионов [2-4].

Для моделирования скирмионных структур в систему с DMI взаимодействием (D = 1) добавили внешнее магнитное поле (B = 0.5), приложенное вдоль оси z. В результате чего в рассматриваемой системе зарождаются скирмионы, что совпадает с результатами [5].

Среди нескольких типов двумерных моделей скирмионов два наиболее значимых – скирмион неелевого типа и скирмион блоховского типа (см. рис. 3). В скирмионе блоховского типа спиновые проекции в диагональном разрезе образуют полный поворот, как в блоховской доменной стенке. Напротив, в скирмионе типа Нееля проекции спинов делают «сальто» по диагонали.

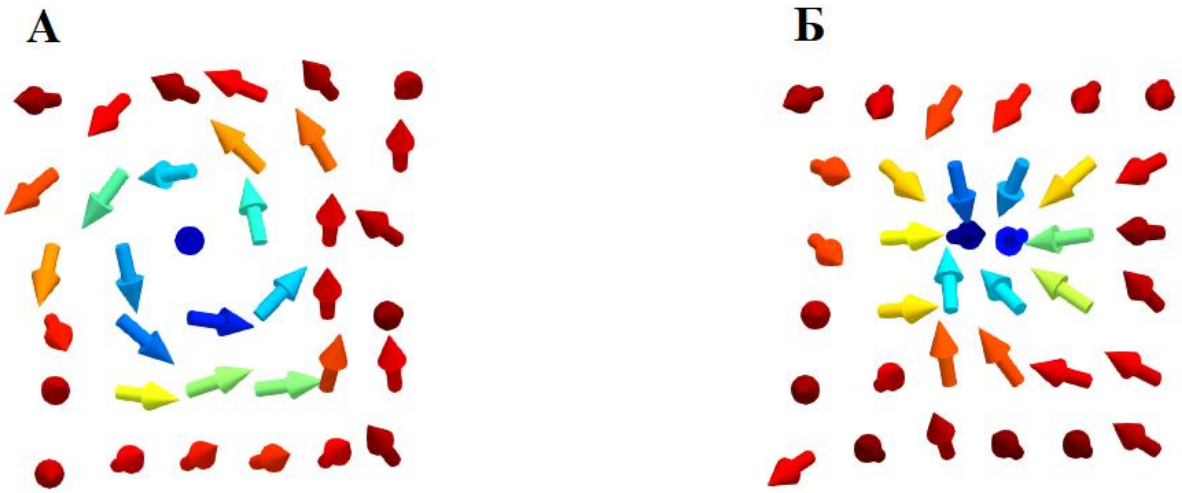


Рис. 3. Структура магнитного скирмиона: А – скирмион Блоха; Б – скирмион Нееля.

В скирмионе Блоха намагниченность перпендикулярна радиусам, направленным наружу от центра скирмионов. В скирмионе Нееля намагниченность направлена радиально внутрь к центру скирмиона.

В рамках классической модели Гейзенберга решеточные спиновые системы с прямым коротокодействующим взаимодействием и взаимодействием Дзялошинского-Мории были исследованы методом Монте-Карло (алгоритм Метрополиса). Изучены термодинамические характеристики системы. Рассмотрено и визуализировано поведение системы спинов в постоянном внешнем магнитном поле. Получены скирмионные структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Министерства науки и высшего образования РФ № 3.7383.2017/8.9.

1. Kapitan, V.Y. et al. Thermodynamic Properties of Heisenberg Spin Systems // Key Engineering Materials. – Trans Tech Publications Ltd. – 2019. – T. 806. – C. 142-154.

2. Roessler, U.K., Bogdanov, A.N., Pfleiderer, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals // Nature. – 2006. – T. 442, № 7104. – C. 797-801.

3. Fert, A., Cros, V., Sampaio, J. Skyrmions on the track //Nature nanotechnology. – 2013. – T. 8, № 3. – C. 152-156.

4. Wiesendanger, R. Nanoscale magnetic skyrmions in metallic films and multilayers: a new twist for spintronics // Nature Reviews Materials. – 2016. – T. 1, № 7. – C. 16044.

5. Iakovlev, I.A., Sotnikov, O.M., Mazurenko, V.V. Supervised learning approach for recognizing magnetic skyrmion phases // Physical Review B. – 2018. – T. 98, № 17. – C. 174411.

УДК 530.1

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОБЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОНАМИ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

И.Б. Копылова, К.О. Гавриленко
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
kopylovaib@list.ru

DEVELOPMENT OF A MODEL FOR DETERMINING DIELECTRIC PARAMETERS OF ELECTRONED TRIGLICINSULFATE CRYSTALS.

I.B. Kopylova, K.O. Gavrilenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
kopylovaib@list.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.33-36

Необходимым условием практического использования сегнетоэлектриков является создание униполярного состояния доменной структуры, стабильной к внешним воздействиям. Одним из действенных способов сформировать униполярное состояние кристалла является радиационное облучение кристалла. В этом случае, появление униполярности связано с возникновением определенных дефектов в кристалле, приводящих к образованию внутренних смещающих полей и существенно изменяют диэлектрические характеристики образцов, такие как диэлектрическая проницаемость. Составлена математическая модель кристалла, позволяющая рассчитать диэлектрическую проницаемость облученного слоя кристалла. Было показано, что диэлектрическая проницаемость облученного слоя линейно возрастает, с ростом переключаемого заряда.

Методика эксперимента

Образцы для исследования изготавливались из крупных кристаллов путем скалывания пластин нужной толщины вдоль кристаллографических осей и последующей полировкой во влажной среде (мокрой шелковой тканью). По достижении образцами нужной формы и размеров, они помещались в вакуумный универсальный пост ВУП-5 для нанесения серебряных электродов. Затем были измерены линейные размеры исследуемых образцов. Площадь кристалла была измерена с помощью миллиметровой бумаги, а толщина – с помощью толщиномера, а так же была проведена оценка толщины напыленных на кристалл электродов.

Для устранения возможных зарядовых эффектов образцы формовались в переменном электрическом поле в течение 15 минут, затем кристалл помещался в постоянное электрическое поле и поляризовался для создания монодоменного состояния.

Заполяризованный кристалл помещался в растровый электронный микроскоп (РЭМ) таким образом, чтобы положительно заряженная поверхность образца была направлена навстречу электронному лучу. В этом случае часть электронов свободно проникает в образец на некоторую глубину. Облучение проводилось в режиме короткого замыкания при ускоряющем напряжении 30 кВ, то есть энергия падающих электронов составляла 30 кэВ [1].

Теоретическая модель

В результате облучения происходит переполяризация образца и получается устойчивая униполярная структура, состоящая из двух слоев: облученного и необлученного. Толщина облученного слоя может быть оценена по соотношению:

$$l = \frac{0,0027\rho^{0,67}VD^{1.67}}{Z^{0.889}} \quad (1)$$

где l – глубина проникновения; ρ- плотность материала; Z – зарядовое число; V – объем исследуемого образца; D – доза облучения.

Двухслойная структура может быть представлена как система из двух параллельно соединенных плоских конденсатора, емкость которого представляет собой сумму емкостей двух слоев рассматриваемого кристалла.

Плоский конденсатор представляет собой две плоские металлические пластины, с помещенным между ними диэлектриком. В качестве диэлектрика выступают облученный и необлученный слои материала, напыленные электроды являются одной из пластин для каждого слоя. Поэтому, для дальнейших рассуждений следует учитывать условия на границе раздела двух сред: проводник-диэлектрик, диэлектрик-диэлектрик. Согласно классической теории электродинамики, если к заряженному участку поверхности проводника прилегает однородный диэлектрик, то на границе появляются связанные заряды некоторой плотности. Поскольку на границе раздела проводник-диэлектрик тангенциальная составляющая электрического поля не испытывает скачка, то в граничных условиях будет рассматриваться только нормальная составляющая [2]. Учитывая что, что на границе присутствуют как сторонние, так и связанные заряды, то можно прийти к следующим выражениям:

$$E_n = \frac{\sigma + \sigma'}{\varepsilon} \quad (2)$$

$$E_n = \frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0} \quad (3)$$

где E_n – нормальная составляющая внешнего электрического поля; ε – диэлектрическая проницаемость материала; ε_0 – диэлектрическая постоянная; σ – накопленный заряд.

Схема исследуемого образца представлена на рис. 1.

Рис. 1. Схема подключения образца.

Также принято во внимание влияние электродов, напыленных на кристалл, так как электрические поля, образованные в электродах, стремятся уменьшить поле деполяризации в кристалле [3].. Толщину напыленных электродов можно рассчитать по формуле:

$$s = \frac{UIt}{\rho Sc}, \quad (4)$$

где U – подаваемое напряжение, I – сила тока, t – время напыления, ρ – плотность серебра, S – площадь поверхности кристалла, c – коэффициент испарения вещества.

Решая однородное уравнение Пуассона, было получено:

$$E_1'' = \frac{4\pi q \sin(L\frac{1}{\sqrt{\beta}l})}{\varepsilon_e \sin(L\frac{s_1}{\sqrt{\beta}L})} \quad (5)$$

$$E_2'' = \frac{4\pi q \sin(L\frac{1}{\sqrt{\beta}l})}{\varepsilon_e \sin(L\frac{s_2}{\sqrt{\beta}L})} \quad (6)$$

Таким образом, электрические поля в облученном и необлученном слоях можно рассчитать по формулам:

$$E_1 = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0 S}\frac{L}{L+l} + \frac{4\pi q \sin(L\frac{1}{\sqrt{\beta}l})}{\varepsilon_e \sin(L\frac{s_1}{\sqrt{\beta}L})}, \quad (7)$$

$$E_2 = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0 S}\frac{l}{L+l} + \frac{4\pi q \sin(L\frac{1}{\sqrt{\beta}l})}{\varepsilon_e \sin(L\frac{s_2}{\sqrt{\beta}L})}, \quad (8)$$

где β – электрическая постоянная серебра (β =2,5); s_1 – площадь верхнего электрода; s_2 – площадь нижнего электрода; L – толщина образца; l – толщина облученного слоя образца;

Приняв во внимание выше описанные рассуждения, путем математических преобразований было получено соотношение, которое позволяет рассчитать диэлектрическую проницаемость облученного слоя кристалла ТГС:

$$\varepsilon_1 = \rho SDC\varepsilon_0\varepsilon_2\left(\frac{q(\varepsilon_2 - \varepsilon_0 SL)\sin(\frac{s}{4\sqrt{\beta}me\bar{n}_0})}{ql\sin(\frac{s}{4\sqrt{\beta}me\bar{n}_0}) + 4\varepsilon_0\varepsilon_2\sin(\frac{1}{4\sqrt{\beta}me\bar{n}_0})}\right)^{-1} \quad (9)$$

Результаты эксперимента

Образцы ТГС облучались электронами в растровом электронном микроскопе (РЭМ) при ускоряющем напряжении 30 кВ и токе зонда 10^{-9} А. Облучение образцов проводилось различное время и, как видно из соотношения (9), с различной дозой облучения. За время облучения в кристалле накапливается заряд, который приводит к переполяризации необлученной части кристалла. Нелинейная зависимость заряда, накапливаемого в слое, от дозы облучения говорит о сложном механизме взаимодействия электронов с кристаллом. Зависимость количества накопленного заряда от времени показана на рис. 2. Также эта зависимость аппроксимирована функцией $q=Kt^{1.5}$.

Как видно из соотношения (9), диэлектрическая проницаемость облученного слоя исследуемого кристалла зависит от количества заряда, накопленного в подповерхностном слое материала. Другими словами, диэлектрическая проницаемость изменяет свое значение в зависимости от накопленного заряда. Зависимость диэлектрической проницаемости от накопленного заряда представлена на рис. 3.

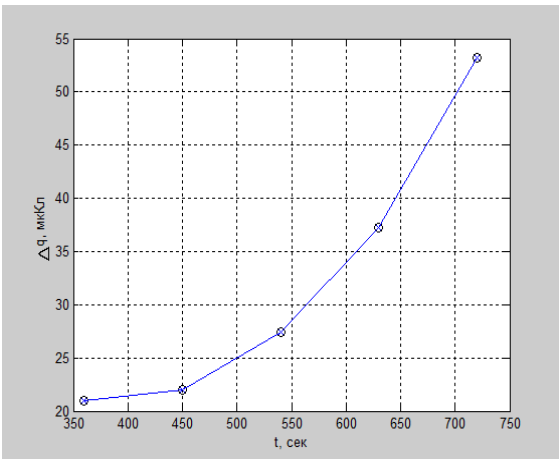


Рис. 2. График зависимости накапливаемого заряда от времени.

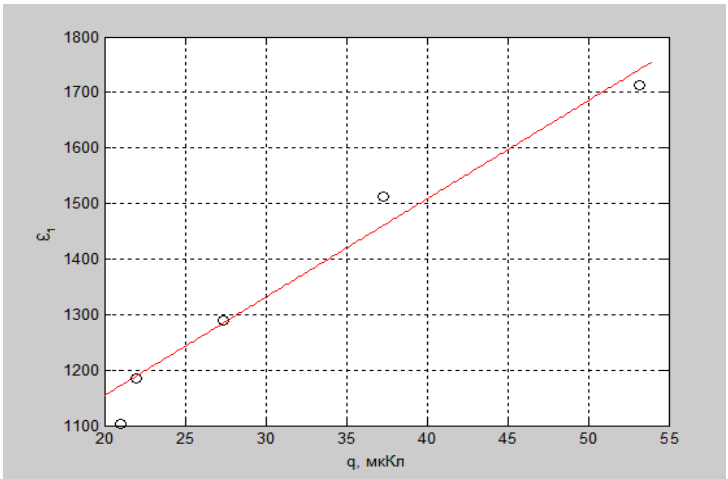


Рис. 3. График зависимости диэлектрической проницаемости от заряда.

Из графика видно, что зависимость диэлектрической проницаемости от заряда аппроксимируется прямой с погрешностью 3,84%. При возрастании заряда в подповерхностном слое линейно возрастает диэлектрическая проницаемость облученного слоя ТГС.

Исходя из вышесказанного, диэлектрическая проницаемость увеличивается с ростом количества накопленного заряда, так же диэлектрическая проницаемость растет с увеличением времени облучения. Таким образом, продолжительность облучения кристалла вносит свой вклад в изменение диэлектрических свойств кристалла.

Данная теоретическая модель позволяет рассчитать диэлектрическую проницаемость не только кристалла ТГС, но и другого сегнетоэлектрика. Для этого достаточно владеть информацией о его физических свойствах, таких как плотность, его линейные размеры, его диэлектрическая проницаемость. Так же, в пределах данной модели, теоретически возможным стало исследование диэлектрической проницаемости облученного слоя в зависимости от параметров облучения, таких как доза облучения, время облучения и переключаемый заряд.

1. Копылова, И.Б. Инжекция электронного зонда растрового электронного микроскопа в монокристаллы триглицинсульфата: Дис. …канд. физ.-мат. наук. – Благовещенск, 1996. – 113 с.

2. Плаксицкий, А.Б. Электронная эмиссия из кристаллов ТГС с радиационными дефектами. – Воронеж: Воронежский гос. ун-т, 2001.

3. Кузнецов, Д.К. Влияние облучения на доменную структуру и переключение поляризации в сегнетоэлектриках: Автореф. дис. …канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2006. – 24 с.

УДК 535.36, 535.34, 519.8

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ЭПИДЕРМИСА В ПРИСУТСТВИИ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

И.В. Красников, А.Ю. Сетейкин

Амурский государственный университет (г. Благовещенск)

ivkrasnikov@gmail.com

SIMULATION OF THE TEMPERATURE FIELD OF THE EPIDERMIS IN THE PRESENCE OF GOLD NANOPARTICLES

I.V. Krasnikov, A.Yu. Seteykin

Amur State University (Blagoveshchensk)

ivkrasnikov@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.36-38

Термическая терапия продемонстрировала свой потенциал в качестве эффективного инструмента для лечения различных опухолей, имеющих низкую термотолерантность по сравнению с раковыми тканями, из-за плохого кровоснабжения раковых клеток. Существующие процедуры на основе гипертермии, включая микроволновое и радиочастотное нагревание, используют повышение температуры (в диапазоне от 42 до 47°C) для повреждения злокачественных образований.

Фототермическая терапия – это подход в терапии рака, при котором тепло направляется в опухоль с использованием оптического излучения. В этой процедуре эндогенный или экзогенный хромофор возбуждается лазерным излучением, что приводит к переизлучению тепловой энергии. Последние

разработки в области нанотехнологий позволили получить класс металлических плазмонных наночастиц с сильным ближним инфракрасным (NIR) поглощением. Было показано, что фототермическая терапия с участием плазмонных наночастиц убивает раковые клетки in vitro с помощью таких процессов, как денатурация белка и разрушение клеточной мембраны, и уменьшает размер опухоли in vivo. Плазмонные наночастицы, в основном используемые в фототермической терапии, представляют собой наночастицы золота (ЗНЧ), в том числе наносферы, нанооболочки, наностержни и наноклетки.

ЗНЧ обеспечивают желательные оптические свойства для фототермической терапии. Золото при изготовлении на наноуровне демонстрирует усиленный поверхностный плазмонный резонанс (SPR). Поверхностные плазмоны – это электронные колебания на поверхности частиц, которые резонируют на плазмонно-резонансной частоте. Частота SPR сильно зависит от геометрии ЗНЧ и может быть настроена в широком диапазоне от видимого до NIR электромагнитного спектра. Оптическое окно ткани находится в NIR, при котором происходит минимальное поглощение эндогенных молекул (гемоглобина, меланина, воды) и наибольшая глубина проникновения лазерного излучения. В результате максимум поглощения многих золотых нанооболочек и наностержней настраивается на NIR.

В качестве модельной области был взят цилиндр с высотой и радиусом основания 0,1 мм. В предположении угловой симметрии расчетная площадь представляет собой квадрат со стороной 0,1 мм. Предполагается, что область модели является участком эпидермиса, подвергающегося воздействию импульсного лазерного излучения с длиной волны 1064 нм и 1200 нм. Граница – это поверхность кожи. В центре области на глубине 2 мкм расположена золотая наночастица с радиусом 20 нм. Оптические (для длины волны 1064 нм и 1200 нм) и тепловые характеристики эпидермиса взяты из [1, 2].

Мы предполагаем, что область модели подвергается воздействию коллимированного импульсного лазерного излучения. На основании [2] средняя интенсивность излучения была аппроксимирована следующей функцией:

$$I(r,z,t)=\frac{1}{2}I_0\exp\left(-4\ln 2\left(\frac{t-z/c}{t_p}-1.5\right)-2(r/v)^2-\mu z\right), \qquad (1)$$

где $I_0=\dfrac{P}{0.46\pi v^2 f t_p}$ – интенсивность излучения лазерного пучка; P – мощность источника; v – радиус пучка; f – частота последовательности импульсов; t_p – длительность импульса пучка; c – скорость света в среде; μ коэффициент экстинкции среды.

На рис. 1а показано распределение температуры в модельной области после 1200 импульсов (1,2 сек.) γ = 5, λ = 1064 нм. Динамика нагрева тканей при лазерном облучении показана на рис. 1б.

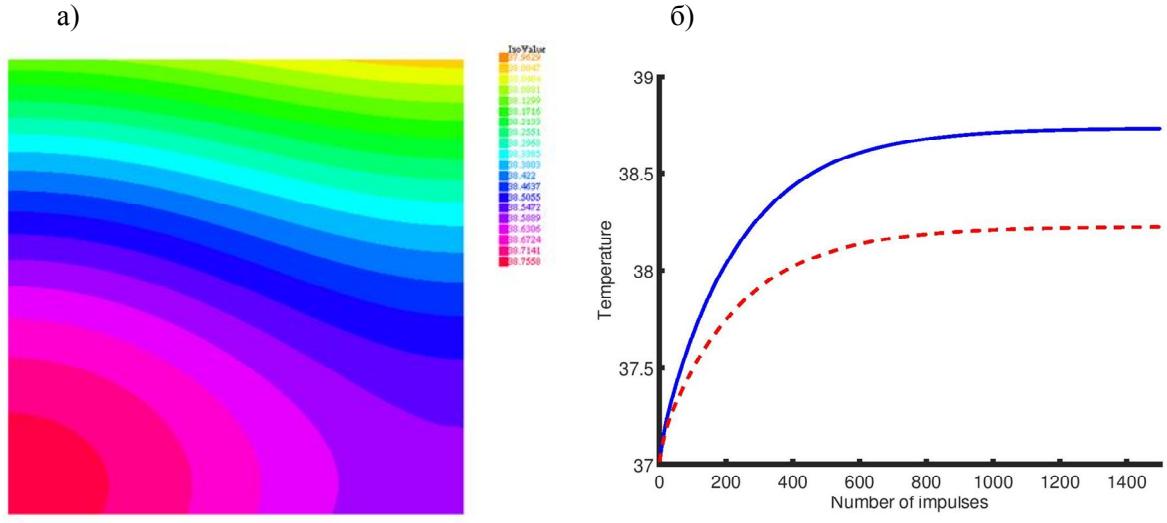


Рис. 1. а) – распределение температуры после 1.2 сек. при γ = 5, λ = 1064 нм;
б) – динамика температуры в точке γ = 5, λ = 1064 нм.

Здесь были взяты точки со следующими координатами: (0, 0.01), (0, 0.09). Несмотря на то, что для излучения с длиной волны 1200 нм поглощенная энергия излучения наночастицей меньше, чем для длины волны 1064 нм, уровень температуры в среде для длины волны излучения 1200 нм выше. Это связано с высоким коэффициентом поглощения эпидермиса на длине волны 1200 нм.

1. Krasnikov, I., Popov, A., Seteikin, A., Myllylä, R. Influence of titanium dioxide nanoparticles on skin surface temperature at sunlight irradiation // Biomed. Optics Express. – 2011. – V. 12. – P.3278–3283.

2. Jiao, J., Guo, Z. Thermal interaction of short-pulsed laser focused beams with skin tissues // Phys. Med. Biol. – 2009. –V. 54(13). –P.4225-4241.

3. Yakunin, A.N., Avetisyan, Y.A., Tuchin, V.V. Quantification of laser local hyperthermia induced by gold plasmonic nanoparticles // J. Biomed. Optics. – 2015. –V. 20(5). –P.051030.

4. Золотарев, В.М., Морозов, В.Н., Смирнов, Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред: справочник. – Л.: Химия, 1984.

5. Van de Hulst, H.C. Light Scattering by Small Particles // Dover Publications. – New York, 1981.

6. Hecht, F. New development in FreeFem++ // J. Numer. Math. – 2012. – V. 20(3-4). – P.251–265.

УДК 535.2

СВЕТОИНДУЦИРОВАННАЯ ДИНАМИКА КОНЦЕНТРАЦИИ НАНОЧАСТИЦ В НАНОЖИДКОСТИ (НЕЛИНЕЙНЫЙ ПОДХОД)

А.И. Ливашвили, В.В. Криштоп, М.И. Якунина

Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

(livbru@mail.ru)

LIGHT-INDUCED DYNAMICS OF CONCENTRATION OF NANOPARTICLES IN NANO-LIQUID (NONLINEAR APPROACH)

A.I. Livashvili, V.V. Krishtop, M.I. Yakunin

Far Eastern State Transport University, Khabarovsk

livbru@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.38-41

Стремительный прогресс в области нанотехнологий предоставил исследователям широкий арсенал новых материалов с уникальными оптическими и физико-химическими свойствами для применений в биологии и медицине [1-2]. К числу таких материалов относят коллоидные суспензии или, как сейчас их принято называть, наножидкости (при исследовании оптических свойств наножидкости принимается, что длина световой волны, которой ее облучают, много больше размеров частиц), широко применяются в различных сферах нанотехнологии.

Несмотря на большое число публикаций по этой проблематике [3-5], многие вопросы, связанные с процессами переноса в наножидкостях, остаются невыясненными.

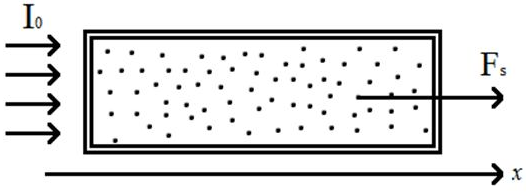


Рис. 1. Геометрия задачи.

Целью нашей работы является теоретическое исследование динамики концентрации наночастиц в жидкофазной среде, подвергаемой лазерному облучению постоянной интенсивности с учетом зависимости коэффициентов поглощения излучения, теплопроводности и вязкости среды от концентрации наночастиц (рис. 1).

Запишем систему балансных уравнений теплопроводности и переноса массы (наночастиц) [3]:

$$C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = div(\lambda(C)\overrightarrow{gradT}) + \alpha(C) I_0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = div(D\overrightarrow{gradC}) + D_T div(C(1-C)\overrightarrow{gradT}) - \overrightarrow{V} \cdot \overrightarrow{gradC}, \quad (2)$$

где T – температура среды; C – объемная концентрация среды; $\lambda(C)$ – коэффициент теплопроводности среды; $\alpha(C)$ – коэффициент поглощения световой волны; I_0 – интенсивность падающего излучения; D – коэффициент диффузии наночастиц; D_T – коэффициент термодиффузии; V – скорость концентрационной конвекции; C_p, ρ – теплофизические постоянные: теплоемкость и плотность среды соответственно.

Будем рассматривать одномерный случай, пренебрегая, ввиду его малости, эффектом Дюфура. Мы также не учитываем потоки, вызванные электрострикцией наночастиц. Динамику наночастиц будем изучать на фоне стационарной температуры среды – $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$. Нас также будут интересовать процессы с $C << 1$. Это неравенство гарантирует нам отсутствие процессов коагуляции (слипания) наночастиц.

Согласно теоретическим и экспериментальным работам [6-7], концентрационную зависимость коэффициента теплопроводности среды при малых концентрациях можно считать линейной:

$$\lambda(C) = \lambda_0(1 + pC), \quad (3)$$

где λ_0 – значение коэффициента теплопроводности несущей жидкости (без наночастиц), параметр p – линейный коэффициент. Концентрационную зависимость коэффициента поглощения света примем в виде $\alpha = \beta C$ (β – коэффициент пропорциональности).

Учитывая стационарный температурный режим, равенство (3) и малую концентрацию, из уравнения теплопроводности получим:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = -\frac{\beta C}{\lambda_0(1+pC)} I_0 \approx -\frac{\beta C}{\lambda_0}(1 - pC). \quad (pC < 1) \quad (4)$$

Используя приближение (4), уравнение для концентрации (2) можно записать в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{D_T \beta I_0}{\lambda_0}(1 - pC)C^2 - V\frac{\partial C}{\partial x} \quad (5)$$

Представим конвективную скорость в виде

$$V(C) = \frac{\eta(C)}{p(C)l}, \quad (6)$$

где $\eta(C)$ – коэффициент динамической вязкости наножидкости; $p(C)$ – ее плотность; l – характерная длина для системы, значение которой определится позже.

Зависимость коэффициента вязкости от концентрации будем считать линейной [8]:

$$\eta(C) = \eta_0(1 + \gamma C). \quad (7)$$

Здесь η_0 – значение коэффициента вязкости базовой жидкости без наночастиц.

Подобная зависимость была получена теоретически и подтверждена экспериментально в работах [5-6]. Что касается зависимости $p(C)$, то здесь также допустима линейная зависимость от концентрации (приближение Буссинеска):

$$\rho = \rho_0(1 + \chi C) \quad (8)$$

С учетом этого замечания, используя равенства (7) и (8), выражение для скорости (6) можно представить в виде:

$$V(C)=\frac{\eta_0(1+\gamma C)}{\rho_0(1+\chi C)}\approx\frac{\eta_0}{\rho_0}(1+\gamma C) \tag{9}$$

В результате диффузионное уравнение (5) запишется следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-\frac{\eta_0}{l\rho_0}(1+\gamma C)\frac{\partial C}{\partial x}-\frac{D_T\beta I_0}{\lambda_0}C^2(1-pC) \tag{10}$$

Введем безразмерные переменные и проведем параметризацию уравнения (10). В результате получим:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau}=\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-\delta\gamma C\frac{\partial C}{\partial y}-C^2(1-pC)-\delta\frac{\partial C}{\partial y} \tag{11}$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$\tau=\frac{S_T D\beta I_0}{\lambda_0}t,\quad y=\frac{1}{\sqrt{b}}x,\quad b=\frac{\lambda_0}{S_T D\beta I_0},\quad \sqrt{b}=l,\quad \delta=\frac{\eta_0}{\rho_0 D} \tag{12}$$

Уравнение (11) можно отнести к уравнению типа Бюргерса-Хаксли. Одно из частных решений будем искать в виде преобразования Коула–Хопфа:

$$C(y,\tau)=\frac{W_y'}{W}\cdot\mu,\quad W=W(y,\tau), \tag{13}$$

где μ – параметр, который можно определить в дальнейшем символ $'$ – производной.

Подстановка равенства (13) в уравнение с последующим приравниванием коэффициентов при обратных степенях функции $W(y,\tau)$ приводит к системе уравнений

$$W_{y\tau}''=W_{yyy}'''-\delta W_{yy}'' \tag{14}$$

$$W_\tau'=3W_{yy}''+\delta y\mu W_{yy}''+(\mu-\delta)W_y' \tag{15}$$

$$p\mu^2+\delta\gamma\mu+2=0 \tag{16}$$

Из последнего уравнения системы можно найти параметр μ:

$$\mu_{1,2}=\frac{1}{2p}(-\delta\gamma\pm\sqrt{\delta^2\gamma^2-8p}). \tag{17}$$

Оценки этих величин дают: $\delta\approx10^5.\gamma, p\approx1\div1{,}5$. Исходя из этих оценок, можно получить: $\mu_1=-2/\delta\gamma, \mu_2=-\delta\gamma/p$.

Далее, решая систему уравнений (14) –(17), находим функцию $W(y,\tau)$ и используя равенство (14), получим два частных решения уравнения (10):

$$C_1(y,\tau,\mu_1)=\frac{2}{\delta\gamma}\frac{1+2c_3\exp(-(\delta\gamma-y))}{(\delta\gamma-y)+c_2-c_3\exp(-(\delta\gamma-y))} \tag{18}$$

$$C_2(y,\tau,\mu_2)=\frac{\delta\gamma}{p}\frac{1+1/p\,c_3\exp(-1/p\,(\delta\gamma-y))}{(\delta(\frac{\gamma}{p}-1)\tau-y)+c_2-c_3\exp(-1/p\,(\delta\gamma-y))} \tag{19}$$

Видно, что решение (18), график которого представлен на рис. 2, является функцией переменной бегущей волны: $z=(\delta\tau-y)$.

На графике решение представлено в виде солитоноподобных импульсов, движущихся вправо (по мере роста временной переменной).

Из графика решения (19) (рис. 3) видно, что оно также представляется в виде концентрационных волн, но не являющимися уединенными.

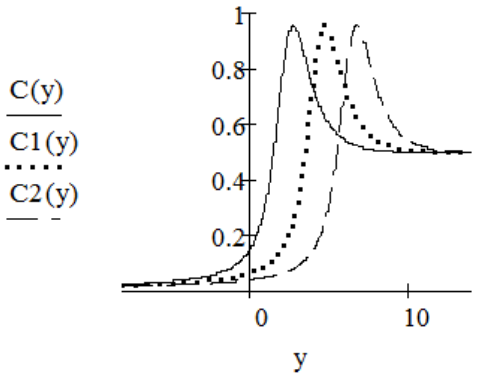


Рис. 2. Графическое изображение решения (18).

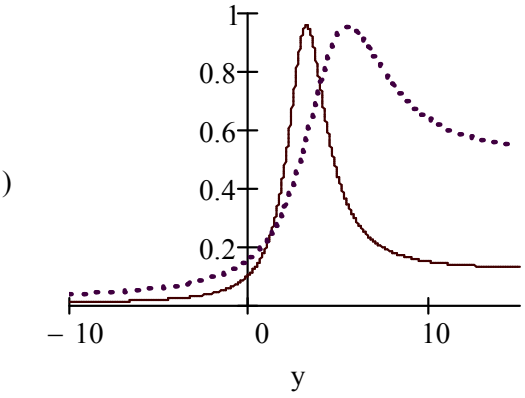


Рис. 3. Профили решения (19).

Скорость перемещения фронта волны решения (19) можно определить, используя равенства (12).

В результате получим:

$$v = \frac{\eta_0}{\rho_0 \sqrt{b}}.$$

Из полученного равенства видно, что скорость зависит от термодинамических, гидродинамических и оптических характеристик системы: наножидкость + излучение.

1. Сироткина, А.Л., Федорович, Е.Д., Сергеев, В.В. Перспективы использования наножидкостей в системах отвода тепла в запроектных авариях, с плавлением активной зоны // Глобальная ядерная безопасность. – 2017. – № 2. – С.81-88.

2. Рудяк, В.Я. Современные проблемы микро- и нанофлюидики / В.Я. Рудяк, А.В. Минаков. –Новосибирск: Наука, 2016. – 296 с.

3. Livashvili, A. I., Krishtop, V.V., Karpets, Y.M., Bryuhanova, T.N., Kireeva, N.M. Laser beam–induced bistability of concentration in nanofluids // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V 737(1). – P. 012011.

4. Livashvili, A.I, Krishtop, V,V. Vinogradova P.V., Kostina, G.V., Bryukhanova, T.N. Dynamics of nanoparticle concentration in nanofluids under laser light field A I 1, IOP Conf. Series // Journal of Physics: Conf. – 2017. – Series 936. – 012079 Article ID.

5. Гроот, С. Де, Мазур, П. Динамика необратимых процессов. – М.: Мир, 1968. – 456 с.

6. Рудяк, В.Я., Краснолуцкий, С.Л. Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики // Журнал технической физики. – 2015. – Т. 85, № 6. – С.9-16.

7. Rudyak, V.Y, Belkin, A.A, Tomilina, E.A. On the thermal conductivity of nanofluids //Tech. Phys. Lett. – 2010. – 36 660-2.

УДК 535.2

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОФАЗНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ КОНВЕКЦИИ И СИЛ СВЕТОВОГО ДАВЛЕНИЯ

А.И. Ливашвили,[1] Г.В. Костина[1], Т.Н. Брюханова[2], И.С. Манжула[1]
[1]Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
[2]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
livbru@mail.ru

NONLINEAR DYNAMICS OF NANOPARTICLES IN A LIQUID PHASE MEDIUM WITH ACCOUNT FOR CONCENTRATION CONVECTION AND LIGHT PRESSURE FORCES

A.I. Livashvili[1] ,G.V. Kostina[1], T.N. Bruchanova[2], I.S. Manzhula[1]
[1]Far Eastern State University of Railway Transport (Khabarovsk)
[2]Pacific State University (Khabarovsk)
livbru@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.42-44

Коллоидные суспензии (наножидкости) характеризуются и особыми свойствами переноса. В отличие от крупных дисперсных частиц, наночастицы практически не седиментируют, они не подвергают эрозии каналы, по которым движутся. В частности, их успешно используют для доставки лекарственных препаратов (оптические пинцеты) [1-3].

Несмотря на достаточно большое число публикаций и накопленный фактический материал как экспериментальный, так и теоретический, здесь все еще отсутствуют систематические данные, а результаты экспериментов часто противоречивы. Достаточно трудно определить, как будут меняться свойства переноса наножидкостей при варьировании того или иного параметра системы: материала наночастиц, их формы, размеров, объемной концентрации и т.п., предсказывать их свойства. Это, в свою очередь, требует понимания механизмов переноса и физического смысла наблюдаемых эффектов.

Наша цель – изучение динамики концентрации наночастиц в наножидкости, которая подвергается воздействию светового поля с равномерным профилем интенсивности. При этом мы учитываем концентрационный конвективный потоки и поток, обусловленный действием силы светового давления F_S, определяемом выражением

$$F_S = \frac{8}{3}\pi\left(\frac{2\pi a_0}{\lambda}\right)^4 a_0^2 \frac{\sqrt{\varepsilon_0}}{c_0}\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon_0+2\varepsilon}\right)^2 I_0, \qquad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость частицы; ε_0 – диэлектрическая проницаемость среды; a_0 – размер наночастицы; λ – длина световой волны; I_0 – интенсивность; c_0 – скорость света в вакууме. Заметим, что эта сила направлена вдоль распространения волны.

Запишем балансное уравнение, описывающее нестационарный перенос частиц в наножидкости:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V(C)\frac{\partial C}{\partial x} - U(C)\frac{\partial C}{\partial x} \qquad (2)$$

В уравнении (2) приняты следующие обозначения: D – коэффициент диффузии наночастиц; $V(C)$ – скорость концентрационной конвекции, которую принимаем равной $V=\frac{\nu(C)}{l}$, где $\nu(C)$ – кинематическая вязкость; l – характерное расстояние.

Так как $\nu(C)=\frac{\eta(C)}{\rho(C)}$, $\nu(C)=\frac{\eta(C)}{\rho(C)}$, то можем записать $V=\frac{\eta(C)}{\upsilon(C)}$. В ряде экспериментальных и теоретических работ показано [3-4], что вязкость пропорциональна концентрации коллоидной суспензии. В дальнейшем мы примем, что $\eta(C)=\eta_0(1+pC)$, где $\rho>0$. Зависимость от плотности будем считать несущественной: $\rho(C)\approx\rho_0$.

Далее:

$U(C)=\mu\cdot F_S$,

где $\mu=\frac{1}{6\pi\eta(c)a_0}$ – подвижность частицы; a_0 – размер частицы.

С учетом последних равенств уравнение (2) можно записать в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-\frac{\eta(C)}{l_\rho}\frac{\partial C}{\partial x}-\frac{F_S}{6\pi\eta(C)a_0^2}\frac{\partial C}{\partial x} \tag{3}$$

Используем линейное приближение для зависимости:

$$\frac{1}{\eta(C)}\approx\eta_0(1-pC) \tag{4}$$

Переходя к безразмерным переменным и параметризуя уравнение (3), получим:

$$\frac{\partial C}{\partial\tau}=\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-\frac{\eta_0\sqrt{b}}{\rho_0 l D}\frac{\partial C}{\partial y}-\frac{\eta_0\sqrt{b}}{\rho_0 l D}pC\frac{\partial C}{\partial y}-\frac{a_0}{\sqrt{b}}\frac{\partial C}{\partial y}+\frac{a_0}{\sqrt{b}}pC\frac{\partial C}{\partial y}, \tag{5}$$

где $\tau=\frac{F_S}{6\pi\eta_0 a_0^2}t; b=\frac{6\pi\eta_0 a_0^2 D}{F_S};\ y=\frac{1}{\sqrt{b}}x.$

После дальнейшей параметризации изучаемое уравнение примет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial\tau}=\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-m\frac{\partial C}{\partial y}+nC\frac{\partial C}{\partial y}, \tag{6}$$

где $m=\sigma+\delta,\quad n=(\sigma-\delta)p,\quad \sigma=\frac{\eta_0\sqrt{b}}{\rho_0 l D},\quad \delta=\frac{a_0}{\sqrt{b}}.$ (7)

Видно, что полученное уравнение является, в некотором смысле, обобщением уравнения Бюргерса.

Так как уравнение (6) автономное, то введём переменную бегущей волны $z=ky-\lambda\tau$. Тогда будем иметь: $C(y,\tau)=W(z)$, а уравнение (6) приобретает вид

$$k^2\frac{\partial^2 W}{\partial z^2}+(\lambda-mk)\frac{\partial W}{\partial z}+nkW\frac{\partial W}{\partial z}=0 \tag{8}$$

Уравнение (8), по сути, представляет собой редукцию уравнения (7), называемое в научной литературе уравнение Льенара [5], в котором роль независимой переменной выполняет переменная бегущей волны z.

Применим к нему преобразование Коула–Хопфа:

$$W(z)=\mu\frac{U_z^{/}(z)}{U(z)} \tag{9}$$

Эта подстановка приводит к системе уравнений относительно неизвестной функции $U(z)$

$$\left(2k^2-nk\mu\right)U_z^{/3}=0.\ \ k^2U_{zzz}^{///}+(\lambda-mk)U_{zz}^{//}=0, \tag{10}$$

$$(3k^2 - n\,k\,\mu)U''_{zz} + (\lambda - m\,k)U'_z = 0, \tag{11}$$

$$(2k^2 - n\,k\,\mu)\cdot U'^{3}_{z} = 0. \tag{12}$$

Из последнего уравнения следует выражение для параметра μ:

$$\mu = \frac{2k}{n} \tag{13}$$

Решение системы (10) – (12) можно представить следующим образом:

$$U(z) = C_2\, e^{-\varpi^2 z} + \frac{C_1}{k^2}, \tag{14}$$

где $\varpi^2 = \dfrac{\lambda - mk}{k^2}$.

Используя равенство (9), точное решение уравнения (8) можно записать в виде

$$W(z) = C(z) = \frac{2(mk - \lambda)k}{n} \cdot \frac{1}{C_1 + e^{-\frac{\lambda - mk}{k^2}\cdot z}}. \tag{15}$$

На рис. 1 представлены графики решения (15) при различных значениях параметров. Показано, что профили полученных решений, описывая стационарную волну в форме одиночного перепада перемещаются вправо по мере возрастания времени вдоль оси OZ.

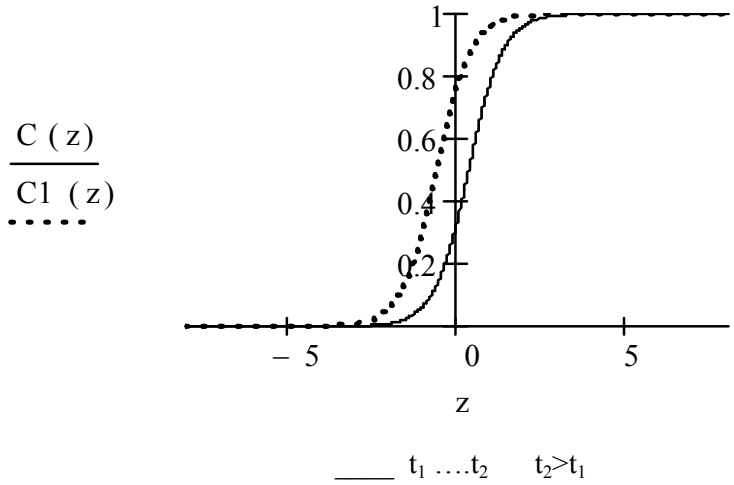


Рис. 1. Профили решений уравнения (8), при различных значениях параметров.

Проанализировать вклад потока концентрационной конвекции можно по уравнению (8).

Исходя из оценок параметров: $\sigma \approx 10^5$, $\delta \approx 10^{-7}$, заключаем, что между параметрами *m* и *n* имеет место неравенство $m \le n$. Таким образом, конвекционный вклад может быть существенен.

1. Рудяк, В.Я. Современные проблемы микро– и нанофлюидики / В.Я.Рудяк, А.В.Минаков. – Новосибирск: Наука, 2016. – 296 с.

2. Сироткина, А.Л., Федорович, Е.Д., Сергеев В.В. Перспективы использования наножидкостей в системах отвода тепла // Глобальная ядерная безопасность. – 2017. – № 2. – С. 81-88.

3. El-Ganainy ,E., Christodoulides, D.N., Rotschild, C., Segev, M. Soliton dynamics and self–induced transparency in nonlinear nanosuspensions // Optics Express. – 2007. – V. 15(16). – P. 12207-1218.

4. Рудяк, В.Я., Краснолуцкий, С.Л. Моделирование коэффициента вязкости наножидкости методом молекулярной динамики // Журнал техн. физики. – 2015. – Т. 85, № 6. –С. 9-16.4.

5. Venerus, D., Buongiorno, J., Christianson, R. et al. (33 more authors). Viscosity measurements on colloidal dispersions (nanofluids) for heat transfer applications // Applied Rheology. – 2010. – Vol. FED.

6. Синельщиков, Д.И., Кудряшов, Н.А. Об интегрируемых неавтономных уравнениях типа Льенара // ТМФ. – 2018. – Т. 196, № 2. – С. 328-340.

УДК 539.14

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ СДВИГОВ ФАЗ В *J*-МАТРИЧНОМ ФОРМАЛИЗМЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Е.А. Мазур, А.И. Мазур
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
mazur@khb.ru

PARAMETRIZATION OF PHASE SHIFTS IN THE J-MATRIX FORMALISM OF THE INVERSE SCATTERING PROBLEM

E.A. Mazur, A.I. Mazur
Pacific State University (Khabarovsk)
mazur@khb.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.45-48

Одним из эффективных методов исследования резонансных состояний является предложенный недавно метод SS-HORSE [1-4], в основе которого лежит хорошо развитый формализм метода *J*-матрицы [5]. Для задач ядерной физики практический интерес представляет осцилляторный базис, который используется в различных вариантах модели оболочек. Метод *J*-матрицы с осцилляторным базисом (в литературе его называют также HORSE – *Harmonic Oscillator Representation of the Scattering Equations* [6]) позволяет расширить круг задач стандартной модели оболочек и рассматривать с единых позиций связанные состояния, резонансы и состояния рассеяния.

В методе SS-HORSE анализ резонансов и состояний рассеяния проводится на основе конечного набора экспериментальных фаз рассеяния. Для нас более важным является тот факт, что метод SS-HORSE позволяет извлечь этот необходимый набор сдвигов фаз из результатов расчетов в модели оболочек. Таким образом, метод SS-HORSE можно считать обобщением модели оболочек на задачи непрерывного спектра.

Важным аспектом метода SS-HORSE является параметризация исходного дискретного набора фаз рассеяния. Нами были исследованы разные варианты параметризации: основанные на полюсном разложении *S*-матрицы [1] (*S*-параметризация) и аналитических свойствах амплитуды рассеяния [2, 3] (*A*-параметризация). Важным требованием оказалось обеспечение корректного с точки зрения квантовой теории рассеяния поведения сдвигов фаз в низкоэнергетической области. В частности, привычные формулы Брейта-Вигнера, хорошо описывающие сдвиги фаз в резонансной области, не удовлетворяют этому требованию и не могут использоваться для параметризации фаз в SS-HORSE.

Одним из подходящих способов, удовлетворяющих всем требованиям метода SS-HORSE, является разработанная нами *J*-матричная параметризация фаз рассеяния [7,8], апробированная на задачах рассеяния ^{14}N нуклонов с использованием в качестве входной информации экспериментальные данные. В данной работе мы развиваем формализм, адаптированный к методу SS-HORSE-NCSM [4], в котором резонансные характеристики и фазы рассеяния получаются на основе расчетов *ab initio* в модели оболочек без инертного кора (NCSM, *No-Core Shell Model*) с реалистическими *NN*-потенциалами, выполненных в больших модельных пространствах.

Радиальная волновая функция $u_l(E,r)$ в HORSE [6] представлена в виде разложения в бесконечный ряд по осцилляторным базисным функциям R_{nl}:

$$u_l(E,r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl}(E) R_{nl}(r). \tag{1}$$

Волновые функции в осцилляторном представлении $u_l(E)$ удовлетворяют системе алгебраических уравнений

$$\sum_{n'=0}^{\infty} \left(H^l_{nn'} - \delta_{nn'} E \right) a_{n'l}(E) = 0, \tag{2}$$

где матричные элементы гамильтониана $H^l_{nn'} = T^l_{nn'} + V^l_{nn'}$.

Ненулевые элементы трехдиагональной матрицы кинетической энергии

$$T^l_{nn} = \frac{\hbar\Omega}{2}\left(2n + l + 3/2\right),\ T^l_{n+1,n} = T^l_{n,n+1} = -\frac{\hbar\Omega}{2}\sqrt{(n+1)\left(2n + l + 3/2\right)} \tag{3}$$

линейно растут с увеличением n, тогда как элементы матрицы потенциальной энергии $V^l_{nn'}$ убывают с ростом n и n'. Этот факт дает возможность в J-матричном формализме представить потенциал взаимодействия матрицей конечного ранга N+1. Обрезание матрицы потенциальной энергии является единственным приближением HORSE. Матрица кинетической энергии не обрезается; волновые функции являются собственными векторами матрицы гамильтониана, которая является суммой обрезанной матрицы потенциальной энергии и бесконечной трехдиагональной матрицы кинетической энергии.

Таким образом, в методе J-матрицы пространство осцилляторных функций разбивается на внутреннее $n \le N$, в котором учитывается взаимодействие, и внешнее (асимптотическое) $n > N$, соответствующее движению свободной частицы. Граница N совпадает с числом осцилляторных квантов последней базисной функции внутренней области $R_{Nl}(r)$, (N+1) – размеры матрицы потенциала.

Волновая функция в осцилляторном представлении $a^{as}_{nl}(E)$ в асимптотической области подчиняется трехчленному рекуррентному соотношению (ТРС):

$$T^l_{n,n-1} a^{as}_{n-1,l}(E) + \left(T^l_{nn} - E\right) a^{as}_{nl}(E) + T^l_{n,n+1} a^{as}_{n+1,l}(E) = 0. \tag{4}$$

Уравнение (4) имеет два линейно независимых решения: регулярное $S_{nl}(E)$ и нерегулярное $C_{nl}(E)$, аналитические выражения которых известны (см., например, [6]). Для расчета сдвигов фаз асимптотические решения удобно представить в виде стоячей волны:

$$a^{as}_{nl}(E) = \cos\delta_l S_{nl}(E) + \sin\delta_l C_{nl}(E). \tag{5}$$

Во внутренней области $n \le N$ решения $a_{nl}(E)$ имеют вид:

$$a_{nl}(E) = G_{nN} a^{as}_{N+1,l}(E), \tag{6}$$

где элементы матрицы

$$G_{nn'} = -\sum_{\lambda=0}^{N} \frac{\langle n|\lambda\rangle\langle\lambda|n'\rangle}{E_\lambda - E} \tag{7}$$

строятся из собственных значений E_λ и собственных векторов $\langle n|\lambda\rangle$ обрезанной матрицы гамильтониана и содержат всю информацию о взаимодействии.

На границе N функции в осцилляторном пространстве удовлетворяют условию сшивки

$$a_{Nl}(E) = a^{as}_{Nl}(E), \tag{8}$$

из которого можно получить выражения для сдвигов фаз:

$$\tan\delta_l = -\frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} T^l_{NN+1} S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} T^l_{NN+1} C_{N+1,l}(E)}. \tag{9}$$

Таким образом, задача рассеяния на потенциале (7) является точно решаемой и позволяет точно рассчитать сдвиги фаз и другие наблюдаемые в непрерывном спектре.

Как видно из выражения (9), только один матричный элемент $G_{NN}(E)$ отвечает за сдвиги фаз. Именно этот факт лежит в основе восстановления потенциала взаимодействия по данным рассеяния. В *J*-матричном формализме обратной задачи рассеяния [9] восстановление потенциала реализуется в два этапа. Сначала по данным рассеяния производится *J*-матричная параметризация сдвигов фаз δ_l, и только затем восстанавливается трехдиагональная матрица гамильтониана. С точки зрения исследования резонансных характеристик нас интересует только первый этап.

Из формул (7) и (9) видно, что для параметризации сдвигов фаз достаточно по данным рассеяния восстановить собственные значения E_λ и последние компоненты собственных векторов $\langle n|\lambda\rangle$ обрезанной матрицы гамильтониана (значения N и $\hbar\Omega$ фиксируются заранее). По набору значений сдвигов фаз δ_l в интервале энергий $E_{min} \le E \le E_{max}$ из трансцендентного уравнения [9]

$$a_{N+1,l}(E) = 0 \qquad (10)$$

можно получить собственные энергии E_λ ($\lambda = 0, 1, \ldots, N$). В (10) функции $a_{N+1,l}(E)$ задаются уравнением (5); уравнение (10) имеет ровно N+1 решение. Последняя компонента $\langle N|\lambda\rangle$ собственного вектора находится как

$$\left|\langle N|\lambda\rangle\right|^2 = \frac{a_{Nl}(E_\lambda)}{\alpha_l^\lambda T^l_{N,N+1}}, \text{ где } \alpha_l^\lambda = \left.\frac{da_{N+1,l}(E_\lambda)}{dE}\right|_{E=E_\lambda}. \qquad (11)$$

Уравнение (10) гарантирует точное воспроизведение сдвигов фаз при энергиях $E = E_\lambda$, а соотношения (11) – фиксируют производные сдвига фаз $d\delta_l / dE$ при этих же энергиях $E = E_\lambda$.

Найденные значения E_λ и $\langle N|\lambda\rangle$ ($\lambda = 0, 1, \ldots, N$) зависят от $\hbar\Omega$ и N. Выбор бóльших значений N и/или $\hbar\Omega$ подразумевает бóльший интервал энергий, в котором параметризация (9) корректно воспроизводит сдвиги фаз.

Обычно набор $\langle N|\lambda\rangle$ ($\lambda = 0, 1, \ldots, N$) не удовлетворяет условию полноты $\sum_{\lambda=0}^{N}\left|\langle N|\lambda\rangle\right|^2 = 1$, которое гарантирует эрмитовость гамильтониана. Чтобы исправить ситуацию необходимо изменить компоненту $\langle N|\lambda = N\rangle$. Энергия $E_{\lambda\,=\,N}$ обычно больше, чем максимальная энергия интересующего интервала E_{max} в котором находятся известные значения сдвигов фаз. Поэтому изменение компоненты $\langle N|N\rangle$ не портит описание сдвига фаз в требуемом интервале энергий ниже E_{max}. После изменения $\langle N|N\rangle$ для улучшения описания сдвигов фаз в *J*-матричном формализме обратной задачи рассеяния корректируется и значение собственной энергии E_N [9].

Найденные собственные значения E_λ и компоненты собственных векторов $\langle N|\lambda\rangle$ позволяют полностью определить функцию $G_{NN}(E)$, и, следовательно, рассчитать сдвиги фаз при любой энергии относительного движения по формуле (9). Важно, что подобная параметризация автоматически обеспечивает корректное поведение фаз рассеяния $\delta_l \sim E^{l+1/2}$ в низкоэнергетической области.

В качестве набора входных фаз можно использовать как экспериментальные данные ([7, 8]), так и результаты, полученные методом SS-HORSE на основе расчетов в современных вариантах модели оболочек, таких как модель оболочек без инертного кора NCSM [10,11] – как это делалось в работах с *S*- [1] и *A*- [2,3] вариантами параметризации фаз рассеяния. Более того, *J*-матричная параметризация в определенном удобнее, так как в ней используется все тот же осцилляторный базис. Вопросы отбора входных данных из расчетов NCSM, на основе которых производится параметризация, подробно рассмотрены в работах [1-4].Отметим, что в отличие от *S*- и *A*- вариантов параметризации, в случае *J*-матричной параметризации нет необходимости использовать дополнительные методы для расчета резонансных характеристик. Положения полюсов *S*-матрицы могут быть определены в рам-

ках HORSE путем решения простого алгебраического уравнения, так как формула расчета *S*-матрицы полностью аналогична (9). Детально вопрос расчета полюсов *S*-матрицы рассмотрен в работе [4].

Таким образом, представленная *J*-матричная параметризация фаз рассеяния автоматически обеспечивает корректное поведение фаз рассеяния в низкоэнергетической области и удобна для анализа резонансных состояний и нерезонансного рассеяния на основе расчетов в современных вариантах модели оболочек, таких как NCSM.

1. Mazur, I.A. Description of Resonant States in the Shell Model / I.A. Mazur, A.M. Shirokov, A.I. Mazur, J.P. Vary // Phys. Part. Nucl. – 2017. – V. 48. – P. 84-89.

2. Blokhintsev, L.D. SS-HORSE Method for Studying Resonances / L.D. Blokhintsev, A.I. Mazur, I. A.Mazur, D. A. Savin, A.M. Shirokov // Physics of Atomic Nuclei. – 2017. – V. 80. – P. 226-236.

3. Blokhintsev, L.D. SS-HORSE Method for Studying Resonances: Charged Particle Scattering / L.D. Blokhintsev, A.I. Mazur, I.A. Mazur, D.A. Savin, A. M. Shirokov // Physics of Atomic Nuclei. – 2017. – V. 80. – P. 1093-1105.

4. Shirokov, A.M. Nucleon-*u* scattering and resonances in ^{5}He and ^{5}Li with JISP16 and Daejeon16 NN interactions / A.M. Shirokov, A.I. Mazur, I.A. Mazur, E.A. Mazur, I.J. Shin, Y. Kim, L.D. Blokhintsev, J.P. Vary // Phys. Rev. C – 2018. – V. 98. – P. 044624 (13 p).

5. Yamani, H.A. *J*-matrix method: Extensions to arbitrary angular momentum and to Coulomb scattering / H.A. Yamani. L. Fishman // J. Math. Phys. – 1975. – V. 16. – P. 410-420.

6. Bang, J.M. P-Matrix and J-Matrix Approaches: Coulomb Asymptotics in the Harmonic Oscillator Representation of Scattering Theory / J.M. Bang, A.I. Mazur, A.M. Shirokov, Yu.F. Smirnov, S.A. Zaytsev // Ann. Phys. (NY). – 2000. – V. 280. – P. 299-335.

7. Shirokov, A.M. Inverse scattering J-matrix approach to nucleon-nucleus scattering and the shell model / A.M. Shirokov, A.I. Mazur, J.P. Vary, E.A. Mazur // Phys. Rev. C. – 2009. – V. 79. – P. 014610 (20 p).

8. Shirokov, A.M. No-Core Shell Model and Continuum Spectrum States of Light Nuclei / A.M. Shirokov, A.I. Mazur, E.A. Mazur, J.P. Vary // Applied Mathematics & Information Sciences. – 2009. – V. 3(3). – P. 245-27.

9. Shirokov, A.M. Nucleon-nucleon interaction in the J-matrix inverse scattering approach and few-nucleon systems / A.M. Shirokov, A.I. Mazur, S.A. Zaytsev, J.P. Vary T.A. Weber // Phys. Rev. C. – 2004. – V. 70. – P. 044005 (24p).

10. Zheng, D.C. Large-space shell-model calculations for light nuclei / D.C. Zheng, J.P. Vary, B.R. Barrett // Phys. Rev. C. – 1994. – V. 50. – P. 2841-2851.

11. Zheng, D.C. Large-basis shell model studies of light nuclei with a multivalued *G*-matrix effective interaction / D.C. Zheng, B.R. Barrett, J.P. Vary, W.C. Haxton, C.L. Song // Phys. Rev. C. – 1995 – V. 52. – P. 2488-2498.

УДК 539.14

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ АЛЬФА-ЧАСТИЦ

И.А. Мазур, М.С. Трусенко

Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

mazuri@mail.ru

ELASTIC SCATTERING OF ALPHA PARTICLES

I.A. Mazur, M.S. Trusenko

Pacific State University (Khabarovsk)

mazuri@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.48-52

В исследовании свойств атомных ядер и элементарных частиц огромную роль играет исследование процессов рассеяния [1, 2]. Фактически только рассеяние позволяет напрямую исследовать

взаимодействие частиц и их структуру. Одним из видов рассеяния является упругое рассеяние, в котором частицы не претерпевают структурного изменения, а результатом является лишь отклонение от первоначального движения.

В данной работе рассматривается взаимодействие альфа-частиц, ядер атомов гелия ^{4}He. Их рассеяние при определенных значениях энергии относительного движения порождает нестабильное ядро ^{8}Be, которое за достаточно длительное время (по мерках характерного времени для сильного ядерного взаимодействия) распадается вновь на альфа-частицы. Такой процесс является альфа-распадом, причем ^{8}Be – самое легкое ядро, способное испытывать альфа-распад. Данный процесс хорошо изучен экспериментально, однако теоретическое исследование и обоснование наблюдаемых характеристик не закончено до сих пор. В данной работе мы рассмотрим упругое рассеяние альфа-частиц с использованием феноменологического потенциала взаимодействия альфа-частиц.

Известно, что задача двух тел, взаимодействие которых задается потенциалом $V(r)$, может быть сведена к задаче одного тела с массой $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ ($m_{1,2}$ – массы тел), находящегося в том же потенциале. В задаче рассеяния в таком случае мы имеем набегающую волну, которая рассеивается на некотором потенциале. Рассеяние можно охарактеризовать набором сдвигов фаз δ_l исходной волны в каждой парциальной волне с орбитальным моментом l.

Сдвиги фаз рассеяния (или для краткости – фазы рассеяния) можно найти при решении радиального уравнения Шредингера [2]

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu^2} - V(r)\right)u_l = 0, \tag{1}$$

где $u_l(r)$ – радиальная часть волновой функции в парциальной волне с моментом l, E – кинетическая энергия относительного движения, r – расстояние между рассеивающимися частицами.

Вид решения существенно зависит от вида потенциала взаимодействия. В нашем случае мы будем использовать феноменологическое взаимодействие. Во-первых примем во внимание тот факт, что взаимодействие альфа-частиц имеет две различные по своей природе составляющие: ядерное $V_{nucl}(r)$ и кулоновское $V_{Coul}(r)$ взаимодействие, то есть

$$V(r) = V_{nucl}(r) + V_{Coul}(r). \tag{2}$$

Ядерные силы являются силами притяжения. Другое их свойство – они короткодействующие, то есть на расстояниях больше, чем некоторое характерное значение R_{nucl}, потенциал V_{nucl} пренебрежимо мал. Значение R_{nucl} можно взять примерно 3 фм. В работе мы будем использовать следующий потенциал ядерного взаимодействия [3]

$$V_{nucl}(r) = V_r e^{-\mu_r^2 r^2} - V_a e^{-\mu_a^2 r^2}. \tag{3}$$

Такой потенциал состоит из двух потенциалов гауссового типа, первый является отталкивающим, второй – притягивающим. Наличие ядерного отталкивания объясняется принципом Паули: фермионы, из которых состоят альфа-частицы, не могут находиться в одном квантовом состоянии и, следовательно на малых расстояниях должны отталкиваться. Параметры V_r и V_a характеризуют величины отталивающиего и притягивающего потенциалов, а μ_r и μ_a – радиус их действия.

Электростатические силы в данном случае, очевидно, являются силами отталкивания. В качестве потенциала взаимодействия будем использовать кулоновский потенциал точечных заряженных частиц [2]

$$V_{Coul}(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r, \tag{4}$$

где $Z_1 = Z_2 = 2$ – зарядовые числа рассеивающихся частиц; e – элементарный заряд. Взаимодействие вида (4) является дальнодействующим в терминах теории рассеяния.

Решить аналитически уравнение (1) для произвольного потенциала невозможно, однако существуют различные методы численного решения.

Как правило, такие методы вследствие того, что рассматриваемая область является неограниченной, предполагают разделение на внутреннюю и асимптотическую части. Мы произведем такое разделение в координатном пространстве, причем во внутренней части мы оставим полное взаимодействие (включающее ядерное и кулоновское взаимодействие), в то время как в асимптотической части мы учтем лишь кулоновское взаимодействие. В силу его дальнодействующего характера пренебрегать им на асимптотике некорректно. Граница внутренней и асимптотической части лежит на расстоянии $r = R_{nucl}$, которое по сути является параметром метода.

В первую очередь рассмотрим решение в асимптотической области. В этом случае уравнение Шредингера (1) принимает вид

$$\frac{d^2u_l^{as}}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu^2}-\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right)u_l^{as}=0, \tag{5}$$

где u_l^{as} – асимптотическая радиальная часть волновой функции. Точное решение такого уравнения известно, и с точностью до нормировочного множителя имеет вид

$$u_l^{as}(r)=\cos\delta_l F_l(\eta,kr)+\sin\delta_l G_l(\eta,kr), \tag{6}$$

где F_l и G_l – волновые функции Кулона [4]; $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$ – волновой вектор; $\eta = Z_1Z_2e^2\mu/(\hbar^2k)$ – параметр Зоммерфельда; δ_l – фаза рассеяния.

Во внутренней области мы будем использовать метод Нумерова [5]. Преимущественной особенностью этого метода является более высокий порядок точности по сравнению с обычными сеточными методами решения дифференциальных уравнений второго порядка. Остаточный член в таком методе оценивается как $O(h^4)$, где h – шаг равномерной сетки.

Наиболее просто решаются линейные уравнения типа Шредингера

$$d^2u_l/dr^2-g_l(r)u_l=0, \tag{7}$$

где в нашем случае функция $g_l(r)=\left(E-\hbar^2l(l+1)/2\mu^2-V(r)\right)2\mu/\hbar^2$. Наложим сетку на отрезок $0\le r\le R_{nucl}$ с некоторым шагом h. Согласно схеме метода Нумерова для соседних трех узлов мы имеем следующее выражение

$$u_{n+1}\left(12+h^2g_{n+1}\right)-2u_n\left(12-5h^2g_n\right)+u_{n-1}\left(12+h^2g_{n-1}\right)=O\left(h^6\right). \tag{8}$$

Здесь u_i и g_i – значения функций $u_l(r)$ и g_l(r) в i-м узле.

Для задачи рассеяния возможно построить явную схему нахождения значений u_i. В силу непрерывности полной волновой функции значение u при $r = 0$ должно обращаться в нуль, таким образом $u_0 = 0$. Далее отметим, что уравнение (7) – однородное, поэтому любое его решение определено с точностью до нормировочного множителя. Для нашей цели (поиска фаз рассеяния) общая нормировка не важна, поэтому в следующем узле значение функции можно положить например $u_1 = 1$. Формула (8) позволяет легко последовательно находить значения u_2, u_3 и так далее.

После нахождения волновой функции во внутренней области необходимо по непрерывности сшить полученное решение с асимптотическим решением (6). В последнем узле с номером N волновая функция должна иметь асимптотическое поведение (6). Также необходимо сшивать значение производной, а это требование можно заменить на более простое: функция u в следующем узле (расширим сетку на один шаг в асимптотическую часть) так же должна иметь асимптотическое поведение (6). Из таких соображений легко получить выражение для фазы рассеяния:

$$\tan\delta_l=-\frac{u_{N+1}F_l(\eta,kr_N)-u_NF_l(\eta,kr_{N+1})}{u_{N+1}G_l(\eta,kr_N)-u_NG_l(\eta,kr_{N+1})}. \tag{9}$$

Также для получения фаз рассеяния мы будем использовать метод HORSE (англ. Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations – осцилляторное представление уравнении теории рассеяния) [6]. Это метод хорошо себя зарекомендовал в различных задачах ядерной физики.

В этом подходе парциальные волновые функции $u_l(r)$ разлагаются в бесконечный ряд по функциям гармонического осциллятора

$$u_l(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl}(E) R_{nl}(r). \tag{10}$$

Осцилляторные функции $R_{nl}(r)$ характеризуются параметром $\hbar\Omega$, расстоянием между уровнями энергии. $a_{nl}(E)$ – волновые функции в осцилляторном представлении.

В первую очередь рассмотрим рассеяние с короткодействующим взаимодействием

$$V^{Sh}(r) = \begin{cases} V(r) & r \le R_{nucl}, \\ 0 & r > R_{nucl}. \end{cases} \tag{11}$$

Если матрицу такого потенциала в осцилляторном базисе обрезать до некоторого конечного размера $N+1$, то фазы рассеяния δ_l^{Sh} можно найти точно по формуле

$$\operatorname{tan}\delta_l^{Sh} = -\frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} C_{N+1,l}(E)}. \tag{12}$$

В формуле (12) N – параметр метода HORSE, а функции $S_{nl}(E)$ и $C_{nl}(E)$ имеют смысл осцилляторных решений свободного движения, аналитический вид которых известен [6],

$$G_{nn'} = -\sum_{\lambda=0}^{N} \frac{\gamma^*_{\lambda n}\gamma_{\lambda n'}}{E_\lambda - E} T^l_{n',n'+1}, \tag{13}$$

$T^l_{n',n'+1}$ – матричные элементы кинетической энергии, $\gamma_{\lambda n}$, E_λ – собственные векторы и энергии задачи

$$\sum_{n'=0}^{N} \left(H^l_{nn'} - \delta_{nn'} E \right) a_{n'l}(E) = 0, \tag{14}$$

$H^l_{nn'}$ – матричные элементы гамильтониана в осцилляторном базисе.

В области $r \le R_{nucl}$ волновые функции непрерывного спектра, отвечающие потенциалам $V^{Sh}(r)$ и $V(r) = V_{nucl}(r) + V_{Coul}(\mathrm{r})$ отличаются только нормировочным множителем. Однако асимптотики этих функций разные. В случае короткодействующего потенциала $V^{Sh}(r)$ асимптотика может быть представлена стоячей волной

$$u = \cos\delta_l^{Sh}(E)\, j_l(kr) - \sin\delta_l^{Sh}(E) n_l(kr), \tag{15}$$

где $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$ – функции Рикатти-Бесселя и Рикатти-Неймана, тогда как в случае рассеяния на полном потенциале $V(r)$ асимптотика стоячей волны имеет вид (6). Из условия сшивки решений (6) и (15) на границе R_{nucl}, можно получить формулу расчета сдвига фаз:

$$\operatorname{tan}\delta_l = \frac{W_{R_{nucl}}(j_l, F_l) - \operatorname{tan}\delta_l^{Sh} W_{R_{nucl}}(n_l, F_l)}{W_{R_{nucl}}(j_l, G_l) - \operatorname{tan}\delta_l^{Sh} W_{R_{nucl}}(n_l, G_l)}, \tag{16}$$

где $W_{R_{nucl}}(f, g)$ – вронскиан функций f и g, взятый в точке $r = R_{nucl}$.

В рамках работы были получены фазы рассеяния упругого αα рассеяния для s- и d-волны двумя ранее представленными методами. Для s-волны, параметры взаимодействия (3) составляют V_r = 1050 МэВ, V_a = 150 МэВ, μ_r = 0,8 фм$^{-1}$ и μ_a = 0,5 фм$^{-1}$ мы получаем зависимость фазового сдвига δ_l от энергии в лабораторной системе на рис. 1 слева. Для d-волны взяты те же значения параметров V_a, μ_r, μ_a, а V_r составляет 640 МэВ. Полученные фазы приведены на рис. 1 справа.

На обоих графиках также приведены фазы, полученные на основе экспериментальных данных [7] (обозначены розовыми кружками). Видно, что рассчитанные значения согласуются с ним, таким образом потенциал (3) адекватно описывает рассеяние альфа-частиц.

На графиках также представлены фазы, полученные в методе HORSE. В силу того, что потенциал имеет очень большой по величине отталкивающий кор, параметры метода HORSE оказались нестандартными и появилась необходимость исследовать систему на сходимость (параметр N) и устойчивость (параметр $\hbar\Omega$).

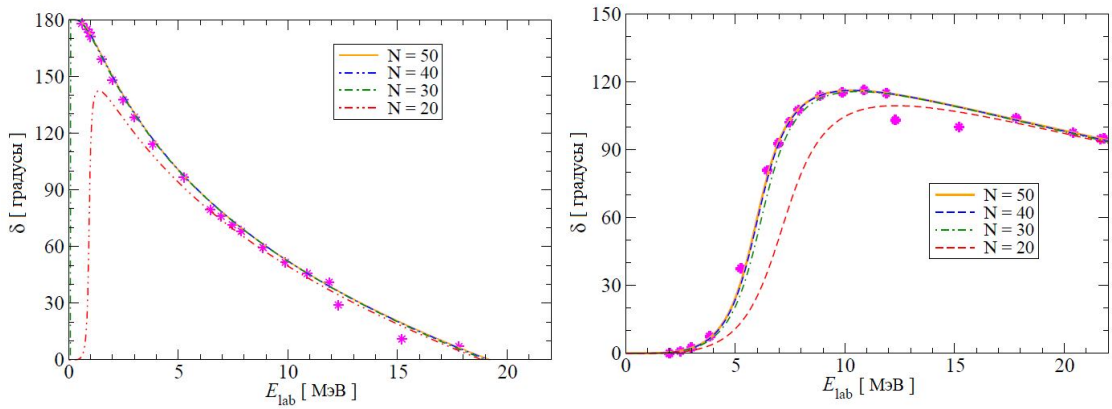


Рис. 1. Зависимость фаз s-волны (слева) и d-волны (справа) от энергии в лабораторной системе.

На рис. 1 представлено исследование сходимости по N (то есть относительно размеров матрицы потенциала) результатов расчетов сдвигов фаз в методе HORSE с $\hbar\Omega$ = 100 МэВ в случае s- и d-волнового рассеяния. Из рисунка видно, что при N = 20 сдвиги фаз в модельной задаче рассеяния в зависимости от энергии в системе центра масс описываются плохо. С ростом N точность описания возрастает: при N = 30 фазы воспроизводятся достаточно точно во всем интервале энергий за исключением энергии вблизи 0.

Результаты расчетов с N = 40 и N = 50 на рисунке неразличимы и хорошо воспроизводят экспериментальные фазы рассеяния. Таким образом, можно утверждать, что сходимость результатов в этой задаче достигается с N = 40.

---

1. Капитонов, И.М. Введение в физику ядра и частиц: учебное пособие. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 384 с.

2. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. – Т.III: Квантовая механика (нерелятивистская теория). – Изд. 4-е, испр. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. – М.: Наука, 1989.– 768 с.

3. Ali, S. Phenomenological α-α potentials / S. Ali, A.R. Bodmer // Nucl. Phys. – 1966. – V. 80. – P. 99–112.

4. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. / М. Абрамовиц, И. М. Стиган (ред.). – М.: Наука, 1979. – 832 с. – Пер. с англ.

5. Numerov, B. Note on the numerical integration of d^2x/dt^2 = f(x, t) // Astron. Nachr. – 1927. – V. 230. – P. 359-364.

6. Bang, J. M. P-Matrix and J-Matrix approaches: Coulomb asymptotics in the harmonic oscillator representation of scattering theory / J.M. Bang, A.I. Mazur, A.M. Shirokov, Yu.F. Smirnov, S.A. Zaytsev // Ann. Phys. (NY). – 2000. – V. 280. – P. 299-335.

7. Afzal, S.A. Systematic survey of the α-α interaction / S.A. Afzal, A.A. Z. Ahmad, S. Ali // Rev. Mod. Phys. – 1969. – V. 41. – P. 247-273.

УДК 537.226.8:51.73

ПРИЛОЖЕНИЕ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ИСЧИСЛЕНИЯ К ЗАДАЧАМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Л.И. Мороз, А.Г. Масловская
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
maslovskayaag@mail.ru

APPENDIX FRACTIONAL-DIFFERENTIAL CALCULATION TO PROBLEMS OF MODELING PROCESSES OF SWITCHING POLARIZATION OF FERROELECTRIC MATERIALS

L.I. Moroz, A.G. Maslovskaya
Amur State University (Blagoveshchensk)
maslovskayaag@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.53-56

В настоящее время развитие фрактально-синергетического подхода в физике конденсированного состояния представлено различными концепциями, составляющими теоретический базис подобных исследований: теория самоорганизации и хаоса (включая анализ устойчивости) динамических систем (например, ансамблей дефектов); фрактальный анализ самоподобных структур и динамических данных, заданных временными рядами; стохастический, перколяционный и клеточно-автоматный подходы для дискретно-имитационного моделирования поверхностных явлений, кластерных структур и процессов агрегации, явлений роста, процессов протекания в пористых средах и др. В числе важнейших объектов подобного подхода могут быть рассмотрены сегнетоэлектрики, которые, представляя класс перспективных и востребованных в практическом плане диэлектрических материалов, обладают интересными фрактальными свойствами. Как было показано рядом независимых авторов, доменные конфигурации сегнетоэлектрических систем имеют фрактальное строение [1-6]. Для растровых изображений визуализированных доменных структур типичных сегнетоэлектриков рассчитаны фрактальные размерности и даже установлены признаки мультифрактальности [6]. Динамика перестройки доменов в процессе переключения поляризации и диэлектрические отклики также обнаруживают признаки самоподобия [3-6], а методы фрактального анализа временных рядов позволяют установить характер шумовой компоненты тока переключения [7]. Перечисленные сведения в математическом плане можно отнести к апостериорному анализу временных рядов и растровых изображений.

В числе модельных представлений, позволяющих прогнозировать кинетику переключения поляризации сегнетоэлектриков с учетом фрактальности строения доменов и присутствия эффекта памяти в таких материалах, можно выделить модели фрактально-степенного роста [8-9] и модели, основанные на использовании аппарата дробного дифференцирования [10-11]. Целью данной работы является развитие дробно-дифференциального подхода для задач исследования формирования динамических откликов сегнетоэлектрических материалов. В работе, в общей системе знаний, сформированной в данном научном направлении, представлена серия авторских динамических моделей, формализованных с помощью дробно-дифференциального приближения и предназначенных для исследования процессов переключения поляризации в сегнетоэлектриках.

В работе [10] предложен подход к описанию тока переключения поляризации в сегнетоэлектриках, состоящий в модификации модели Колмогорова – Аврами с использованием производной по времени дробного порядка:

$$\overline{I}(\xi)=\frac{2P_S S}{t_0}\frac{d^{\alpha}V(\xi)}{d\xi^{\alpha}}, \qquad (1)$$

где $\xi=t/t_0$ – безразмерное время; t_0 – время переключения, с; α – динамическая фрактальная размерность, $\alpha\in(0,1]$; $2P_S\cdot S\cdot V(\xi)$ – заряд переключения, Кл; P_S – спонтанная поляризация образца, Кл/м^2; S – площадь электрода образца, м^2; V – доля переключенного объема к полному объему образца.

Построение аналитического решения модельной задачи возможно с использованием следующей аппроксимации для $V(\xi)$: $V(\xi)=1-\exp(-\xi)$ и аналитического вычисления производной дробного порядка с помощью функции Куммера. Если для аппроксимации $V(\xi)$ использовать другое известное соотношение $V(\xi)=1-\exp(-\xi^n)$, где параметр n определяет параметр (размерность) доменного роста, то аналитическое решение может быть затруднено. В этом случае вычислить дробную производную можно на основе численного приближения. С этой целью традиционно используют либо определение производной дробного порядка Капуто, либо формулу Грюнвальда – Летникова – дискретный аналог определения Римана – Лиувилля [12].

В серии авторских работ (например в [11]) предложен гибридный фрактально-стохастический подход к моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков как самоподобных физических систем с памятью. Поляризационный ток $I(t)$ вводится с использованием подхода модели Колмогорова – Аврами:

$$I(t)=\frac{2P_S S}{L}\frac{dx}{dt}, \quad v=\frac{dx}{dt}=v_{\infty}\exp\left(-\frac{\delta}{E_2}\right), \qquad (2)$$

где $S=2yd$ – площадь электрода, м^2; L – толщина кристалла, м; v_{∞} – максимальная скорость, м/с; δ – поле активации, В/м.

Основу физико-математической модели представляет начальная задача для дифференциального уравнения дробного порядка, определяющая динамику доменной границы:

$$\frac{d^{\alpha}s}{dw^{\alpha}}=\exp\left(-\frac{\tau_2}{\tau_1 w+\frac{\tau_3}{2l}\left(1+\cos^2\varphi\right)\frac{Ls}{2}}\right), \quad s(w_0)=0, \qquad (3)$$

где $s=x/L$ – безразмерное расстояние, $0\le s(w)\le 2(1-l/L)$; $w=t/\tau_1$ – безразмерное время, $w\in[t_0/\tau_1, T/\tau_1]$; α – динамическая фрактальная размерность; $\cos^2\varphi=y^2/(x^2+y^2)$; $\tau_1=L/v_{\infty}$ – характерное время пробега толщины кристалла стенкой со скоростью v_{∞}; $\tau_2=(\delta\varepsilon\varepsilon_0 L)/(jl)$ – время накопления заряда, создающего поле $E_2=\delta$ при плотности тока j; ε – диэлектрическая проницаемость образца; $\tau_3=2P_S/j$ – время, в течение которого ток j инициирует появление зарядов с поверхностной плотностью $\sigma=2P_S$.

Вычислительные алгоритмы решения дробно-дифференциальной задачи построены с использованием формулы Грюнвальда – Летникова, формулы Капуто и предиктор-корректорных схем в концепции метода Адамса – Башфорта – Моултона [12]. Показано, что модельное представление тока переключения поляризации на основе фрактально-стохастической модели воспроизводит основные особенности экспериментальных импульсов токов переключения в режиме токов электронно-стимулированной поляризации. Фрактальность и эффект долговременной памяти в данном случае выражаются увеличением скорости и изменением характера движения доменной стенки, начиная с некоторого момента времени (~8 с), необходимого для накопления стартового заряда, создающего в необлученной части кристалла коэрцитивное поле.

В работе [13] с использованием дробно-дифференциальных операторов по времени и связи между напряженностью внешнего поля и поляризацией, определенной на основе термодинамических соотношений, вводится фрактальная модель гистерезисной зависимости поляризации. Причем, как показано автором, возможность варьирования порядка дробного дифференцирования позволяет осуществлять «гибкую настройку» фрактальной модели, результаты которой имеют качественное и количественное согласование с данными эксперимента. Развивая данный подход [13], можно ввести в рассмотрение фрактальную модель процесса переключения сегнетоэлектриков в рамках термодинамического формализма Ландау – Гинзбурга – Девоншира. В основе модели лежит дробно-дифференциальное уравнение, представляющее собой модификацию нестационарного уравнения Ландау – Халатникова:

$$\frac{\xi}{t^*}\frac{d^\sigma P}{d\tau^\sigma} = -\alpha P - \beta P^3 - \gamma P^5 + E, \quad P(\tau_0) = P^0, \tag{4}$$

где P – поляризация, Кл/м^2; E – напряженность поля, В/м; σ – динамическая фрактальная размерность, $\sigma \in (0,1]$; α, β, γ, ξ – феноменологические параметры; $\tau = t/t^*$ – безразмерное время; t^* – некоторое характерное время процесса, с.

Задача Коши для уравнения (4) может быть также решена численно на основе указанных выше конечно-разностных методов. Модель (4) позволяет визуализировать гистерезисную зависимость поляризации от напряженности приложенного поля при вариации порядка дробного дифференцирования, отвечающего за эффект памяти при реализации процесса переключения. Постановка задачи может быть модифицирована с учетом диффузионной компоненты в исходном представлении свободной энергии Ландау – Гинзбурга. Уравнение (4) преобразуется к уравнению с частными производными дробного порядка, которое в случае одной пространственной координаты примет вид (с учетом задания начального и граничных условий):

$$\frac{\xi}{t^*}\frac{\partial^\sigma P}{\partial\tau^\sigma} = \delta\frac{\partial^\chi P}{\partial x^\chi} - \alpha P - \beta P^3 - \gamma P^5 + E, \tag{5}$$

где δ – феноменологический параметр; χ – порядок дробного дифференцирования по пространственной координате.

Уравнение (5) принадлежит к одному из известных в приложениях дробно-дифференциального исчисления классов уравнений аномальной диффузии. Если зафиксировать порядок производной по координате, а порядок производной по времени будет лежать в интервале (0,1), то (5) опишет процесс субдиффузии (замедленное блуждание); классическую диффузию наблюдаем при $\sigma=1$, при $1<\sigma<2$ – выраженная супердиффузия; при $\sigma=2$ получаем классическое волновое уравнение. Если же значение σ зафиксировано, а $1<\chi<2$, то (5) – это уравнение супердиффузии (ускоренное блуждание); при $\chi=1$ получим классический перенос; $\chi=2$ дает уравнение классической диффузии.

К уравнению типа «субдиффузии» сводится фрактальная модель процесса теплопроводности [14]. Применяя данный подход к моделированию формы пироэлектрического тока в сегнетоэлектрике, введем систему соотношений:

$$I(t) = \frac{S}{d}\int_0^d \gamma(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}dx, \tag{6}$$

где $\gamma(T)$ – температурная зависимость пирокоэффициента, Кл/(м^2·К); d – толщина кристалла, м; S – площадь поверхности кристалла, м^2; $T(x,t)$ – температурное распределение в объекте, К, которое задается уравнением (с заданным тепловым потоком на границе кристалла):

$$\frac{\partial^\gamma T(x,\tau)}{\partial\tau^\gamma} = \frac{k_T t_s}{\rho c(T)}\frac{\partial^2 T(x,\tau)}{\partial x^2}, \tag{7}$$

где γ – порядок дробного дифференцирования по времени, $\gamma \in (0,1)$; $\tau = t/t_s$ – безразмерное время; t – время, с; t_s – некоторое характерное время процесса, с; k_T – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К); ρ – плотность материала, кг/м^3, $c(T)$ –зависимость удельной теплоемкости от температуры, Дж/(кг·К).

В вычислительном плане задачи типа (5), (7) могут быть решены также на основе конечно-разностного подхода и использования формулы Грюнвальда – Летникова. Детальному решению прикладных задач, сформулированных в постановках (2)-(3), (4), (5), (6)-(7), в приложении к исследованию процессов переключения поляризации и формирования поляризационных откликов сегнетоэлектриков, посвящены отдельные авторские публикации. Таким образом, дробно-дифференциальные модели, представляющие модификации детерминированных аналогов, позволяют формализовать динамические процессы, протекающие в сегнетоэлектрических материалах – эредитарных средах с фрактальной структурой. В этом случае исследователь получает более гибкий дифференциальный аппарат, позволяющий варьировать не только параметры модели (постоянные величины и параметры вычислительного эксперимента), но и «управлять» памятью системы и фрактальностью по отношению к пространственным координатам.

---

1. Ozaki, T. Fractal Aspects of Lamellar Ferroelectric Domain Structures Formed under the Influence of Depolarization Fields in CsH_2PO_4 and $(NH_2CH_2COOH)_3H_2SO_4$ / T. Ozaki, K. Fujii, J. Ohgami // Journal of the physical Society of Japan. – 1995. – V. 64, № 7. – P. 2282-2285.

2. Исупов, В.А. Природа фрактальных образований на поверхности сегнетоэлектрических кристаллов с размытым фазовым переходом // Физика твердого тела. – 1998. – Т. 40, № 7. – С. 1305-1306.

3. Пелегов, Д.В. Использование фрактального формализма для описания кинетики фазовых превращений в конечных системах: Дис. …канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2000. – 133 с.

4. Галиярова, Н.М. Диэлектрическая спектроскопия сегнетоэлектриков, фрактальность и механизмы движения доменных и межфазных границ: Дис. …д-ра физ.-мат. наук. – Воронеж, 2006. – 399 с.

5. Roy, M.K. Domain dynamics and fractal growth analysis in thin ferroelectric films / M.K. Roy, J. Paul, S. Dattagupta // IEEE Xplore. – 2010. – V. 109. – P. 014108-014108-4.

6. Maslovskaya, A. Fractal parameterization analysis of ferroelectric domain structure evolution induced by electron beam irradiation / A. Maslovskaya, T. Barabash // Proc. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – V. 168. – P. 012028 (6).

7. Tadic, B. Switching current noise and relaxation of ferroelectric domains // Eur. Phys. J. B. – 2002. – V. 28. – P. 81-89.

8. Шур, В.Я. Кинетика переключения поляризации в сегнетоэлектриках конечных размеров / В.Я. Шур, Е.Л. Румянцев, С.Д. Макаров // ФТТ. – 1995. – Т. 37, № 6. – С. 1687-1692.

9. Scott, J.F. Fractal dimensions in switching kinetics of ferroelectricst. – Cambridge: University of Cambridge Press, 1998. – 9 p.

10. Мейланов, Р.П. Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках / Р.П. Мейланов, С.А. Садыков // Журнал технической физики. – 1999. – Т. 69, № 5. – С. 128-129.

11. Масловская, А.Г. Исследование фрактальных закономерностей процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме / А.Г. Масловская, Т.К. Барабаш // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 1. – С. 42-49.

12. Diethelm, K. Algorithms for the fractional calculus: a selection of numerical method / K. Diethelm, N.J. Ford, A.D. Freed, Yu. Luchko // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2005. – V. 194. – P. 743-773.

13. Bin, Z. Model for coupled ferroelectric hysteresis using time fractional operators: Application to innovative energy harvesting: Dis. …doctor of science. – Lyon, 2014. – 95 p.

14. Zecová, M. Heat conduction modeling by using fractional-order derivatives / M. Zecová, J. Terpák // Applied Mathematics and Computation. – 2015. – V. 257. – P. 365–373.

УДК 537.563.5

ПОТЕНЦИАЛ ОДНОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ГЕЛИЯ

В.В. Насыров
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

POTENTIAL OF ONE-TIME HELIUM ATOM IONIZATION

V.V. Nasyrov
Pacific State University (Khabarovsk)
000612@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.57-59

Ионизация легких атомов электронным ударом изучается достаточно давно. В настоящее время накоплена обширная база экспериментальных данных и разработаны методы теоретического описания, которые, как правило, основаны на нерелятивистских подходах и дают хорошее соответствие расчетных и экспериментальных характеристик (e, e) и (e, 2e) процессов. Однако последние экспериментальные исследования в области протон-атомных столкновений, по измерению дифференциальных сечений в процессах ионизации атомов мишени представляют намного более строгий тест для теоретического описания, чем предыдущее поколение экспериментов.

В данной работе дан обзор трех методов построения волновых функций атома гелия, который очень часто выбирается в качестве мишени в столкновительных экспериментах, и приведены результаты расчета потенциала ионизации атома гелия, по которым можно получить представление о качестве получаемых волновых функций в обсуждаемых методах.

Волновые функции мишени удовлетворяют стационарному уравнению Шредингера

$$H\psi(\vec{r}_1+\vec{r}_2)=E\psi(\vec{r}_1+\vec{r}_2), \tag{1}$$

в котором гамильтониан двухэлектронной атомной системы с зарядом $Z=2$ в атомных единицах может быть записан в следующем виде

$$H=-\frac{\Delta_{\vec{r}_1}}{2}-\frac{\Delta_{\vec{r}_2}}{2}-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+\frac{1}{\left|\vec{r}_1+\vec{r}_2\right|}, \tag{2}$$

где $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ – координаты атомных электронов.

В подходе квантово-механической тесной связи каналов (QM-CCC) [3] двухэлектронная волновая функция атома гелия $\psi_i^{QM}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ строится с использованием подхода конфигурационного взаимодействия, при котором состояния мишени были взяты как сумма произведений одноэлектронных волновых функций:

$$\psi_i^{QM}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\sum_{\alpha,\beta}A^i_{\alpha,\beta}\phi_\alpha(r_1)\phi_\beta(r_2)\mathrm{K}_{l_\alpha l_\beta l_i m_i}(\hat{r}_1,\hat{r}_2), \tag{3}$$

где α, β, i мультииндексы, определяющие состояние квантовой системы,

$$\mathrm{K}_{l_\alpha l_\beta l_i m_i}(\hat{r}_1,\hat{r}_2)=\sum_{m_\alpha,m_\beta}\left\langle l_\alpha m_\alpha l_\beta m_\beta\middle|l_i m_i\right\rangle \mathrm{Y}^*_{l_\alpha m_\alpha}(\hat{r}_1)\mathrm{Y}_{l_\beta m_\beta}(\hat{r}_2), \tag{4}$$

$\mathrm{Y}_{lm}(\hat{r})$ – сферические гармоники, функции $\phi_\alpha(r)$ – образуют лагерровский базис

$$\phi_\alpha(r) = \frac{2\lambda_l (k-1)!}{(2l+k+1)!}(2\lambda_l r)^{l+1} \exp(-\lambda_l r) L_{k-1}^{2l+2}(2\lambda_l r), \tag{5}$$

$L_{k-1}^{2l+2}(2\lambda_l r)$ – присоединённые полиномы Лагерра, λ_l – параметры базиса.

В приближении замороженного ядра (frozen-core approximation) [2], волновая функция двухэлектронной системы

$$\psi_i^{FSA}(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \Phi_{1s}^{He^+}(r_1)\varphi_i(r_2) + \Phi_{1s}^{He^+}(r_2)\varphi_i(r_1), \tag{6}$$

строится в предположении, что один из атомных электронов находится в «замороженном» $1s$ состоянии в кулоновском поле иона He^+ ($Z = 2$) с волновой функцией $\Phi_{1s}^{He^+}(r)$ и энергией $\varepsilon_{1s}^{He^+} = -2\ a.e.$, а второй электрон – в «активном» состоянии с волновой функцией $\varphi_i(r)$ и энергией ε_i. При этом волновая функция $\psi_i^{FSA}(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$H\psi_i^{FSA}(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \left(\varepsilon_{1s}^{He^+} + \varepsilon_i\right)\psi_i^{FSA}(\vec{r_1}, \vec{r_2}), \tag{7}$$

Ранее в совместной работе [1] автором для описания (e, 2e) процессов на основе метода J-матрицы был разработан принцип построения волновых функций двухэлектронной атомной системы из дискретного и непрерывного спектра. В предположении, что атомная система находится в состояниях с дискретным спектром с некоторым значением орбитального момента L, можно определить двухэлектронные волновые функции в виде разложения по базисному набору хартри–фоковского типа

$$\psi_L(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \sum_{l\lambda} \sum_{n=1}^{N_l} \sum_{\nu=1}^{N_\lambda} a_{nl\nu\lambda}^L \Phi_{nl\nu\mu}^L(\vec{r_1}, \vec{r_2}), \tag{8}$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_{nl\nu\mu}^L(\vec{r_1}, \vec{r_2}) &= \frac{1}{\sqrt{2} r_1 r_2}\left(\chi_{nl}(r_2)\chi_{\nu\lambda}(r_1)\mathrm{K}_{l\lambda L0}(\hat{r_2}, \hat{r_1}) + \chi_{nl}(r_1)\chi_{\nu\lambda}(r_2)\mathrm{K}_{l\lambda L0}(\hat{r_1}, \hat{r_2})\right) \text{ при } \begin{matrix} n \neq \nu, \\ l \neq \lambda, \end{matrix} \\ \Phi_{nl\nu\mu}^L(\vec{r_1}, \vec{r_2}) &= \frac{1}{r_1 r_2}\chi_{nl}(r_2)\chi_{\nu\lambda}(r_1)\mathrm{K}_{l\lambda L0}(\hat{r_2}, \hat{r_1}) \text{ при } \begin{matrix} n = \nu, \\ l = \lambda. \end{matrix} \end{aligned} \tag{9}$$

Функция $\chi_{nl}(r)$ определяет псевдосостояние электрона в водородоподобном ионе с зарядом ядра $Z = 2$ и является решением радиального уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\Delta_r}{2} - \frac{2}{r}\right]\chi_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}\chi_{nl}(r), \tag{10}$$

ε_{nl} – энергия псевдосостояния с квантовыми числами nl. Волновые функции псевдосостояний в предлагаемом методе ищутся в виде разложения по квадратично-интегрируемым базисным функциям

$$\chi_{nl}(r) = \sum D_{nm}^l \mathbf{\Phi}_{ml}(r), \tag{11}$$

где функции $\mathbf{\Phi}_{ml}(r)$ образуют лагерровский базис, аналогичный (5)

$$\mathbf{\Phi}_{ml}(r) = \sqrt{\frac{2\xi_l m!}{(2l+m+1)!}}(\xi_l r)^{l+1} \exp(-\xi_l r/2) L_m^{2l+1}(\xi_l r). \tag{12}$$

Значения величин N_l и ξ_l для каждой парциальной волны приведены в табл. 1 (подбираются независимо для каждого значения L).

Таблица 1

Количество N_l учитываемых базисных функций и параметры базиса ξ_l для различных парциальных волн, используемых при расчете состояний атома He с полным орбитальным моментом L

Орбитальный момент	Параметры	s	*p*	d	e	f
L=0	N_l	25	20	20	15	0
	ξ_l	3,6	3,6	3,5	3	0
L=1	N_l	12	12	12	7	5
	ξ_l	2	2	2	2	2
L=2	N_l	8	8	8	7	5
	ξ_l	2,5	2,5	2	2	2

Для вычисления потенциалов ионизации, мы предполагаем, что атом He переходит из начального состояния с энергией E_{iL} в конечное, в котором ион He^+ остается в состоянии $1s$, а энергией выбитого электрона можно пренебречь. Так как энергия иона He^+ в этом случае известна $\varepsilon_{1s}^{He^+} = -2\,a.e. = -54{,}422\,эВ$, то потенциал ионизации может быть найден как

$$U_{ion} = \varepsilon_{1s}^{He^+} - E_{iL}. \qquad (13)$$

В табл. 2 приведены расчеты потенциалов ионизации U_{ion} данным методом, в сравнении с расчетами из статей [2], [3], а также экспериментальными данными из работы [4]. Для наглядности посчитаны ΔU_{ion} – отличия расчетных значений и экспериментальных данных. Видно, что расчеты данной работы лучше воспроизводят экспериментальные значения.

Таблица 2

Потенциалы ионизации U_{ion} и различие с экспериментом ΔU_{ion}

Состояние	Наш расчет		Abdurakhmanov [2]		LPS [2]		Moore [4]
	U_{ion}, эВ	ΔU_{ion}, эВ	U_{ion}, эВ	ΔU_{ion}, эВ	U_{ion}, эВ	ΔU_{ion}, эВ	U_{ion}, эВ
1s	-24,5786	-0,00756	-23,7416	-0,83704	-23,7414	0,84481	-24,5862
2s	-3,97128	-0,00027	-3,9035	-0,06778	-3,90343	0,06812	-3,97155
3s	-1,66491	-0,00214	-1,6483	-0,01661	-1,64828	0,01877	-1,66705
2p	-3,36872	-0,00059	-3,3307	-0,03802	-3,33198	0,03733	-3,36931
3p	-1,49524	-0,00511	-1,48847	-0,00677	-1,4895	0,01085	-1,50035
3d	-1,51293	-0,00036	-1,51024	-0,00269	-1,5115	0,00179	-1,51329

1. Кныр, В.А., Насыров, В.В., Попов, Ю.В., Стотланд, Л.Я. // ЖЭТФ. – 1996. – Т. 109. – С. 361.

2. Abdurakhmanov, B., Kadyrov, A.S., Bray, I.. // Phys. Rev. A 96. – 2017. – 022702.

3. Abdurakhmanov, B., Kadyrov, A.S., Fursa, D.V., Bray, I.., Stelbovics A.T. // Phys. Rev. A 84. – 2011. – 062708.

4. Moore, C.E. Atomic Energy Levels as Derived from Analyses of Optical Spectra // Circ. – No. 467. – Vol. 1 (Natl. Bur. Stand. U.S., U.S. GPO, Washington, D.C., 1949).

УДК 534.212

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ МОДОВОГО СОСТАВА ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН

М.С. Трусенко, А.В. Каминский, Л.В. Белим
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
000618@pnu.edu.ru

TO DETERMINING THE MODE COMPOSITION OF VOLUME ACOUSTIC WAVES

M.S. Trusenko, A.V. Kaminsky, L.V. Belim
Pacific State University (Khabarovsk)
000618@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.60-62

Использование частотных характеристик для анализа свойств среды, а также электронных устройств, получило широкое распространение в науке и технике [1, 2]. В работах [3-5] рассматривается отражение импульса излучения от границы среды с частотной дисперсией, делается вывод о возможности описания для данного процесса с помощью коэффициента отражения для комплексных частот. При этом возникающие на определенных комплексных частотах резонансные явления дают возможность сделать выводы о параметрах самой среды. В вышеуказанных работах делается предположение о том что представление о комплексном резонансе окажется полезным не только в оптике, но также и в других разделах науки и техники. В работе [6] рассматриваются комплексные спектры изгибных волн (волн Лэмба) в ограниченной пластине прямоугольной формы, сделан вывод о возможности применения результатов работ [3-5] к акустическим явлениям.

В настоящей работе рассматривается возможность использования метод спектроскопии комплексных частот для анализа распространения объемных акустических волн. Уравнения, описывающие распространение акустических волн в твердых телах и электромагнитных волн, схожи. Акустические волны, в отличие от электромагнитных, не существуют без среды, и волновые уравнения, описывающие их распространение содержат параметры, характеризующие свойства самой среды. Однако схожесть этих уравнений с электромагнитными позволяет распространить комплексную спектроскопию и на акустику.

Рассмотрим распространение в неограниченной изотропной среде двух мод плоских упругих волн: продольная волна $u_{x,L}(x, t)$ распространяется в направлении x, поперечная волна $u_{x,T}$ – в направлении y. Тогда уравнения для этих волн могут быть представлены в виде [6, 7]:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 u_{x,L}}{\partial t^2} + \gamma_L \frac{\partial u_{x,L}}{\partial t} - C_L^2 \frac{\partial^2 u_{x,L}}{\partial x^2} = f_x, \\ &\frac{\partial^2 u_{x,T}}{\partial t^2} + \gamma_T \frac{\partial u_{x,T}}{\partial t} - C_T^2 \frac{\partial^2 u_{x,T}}{\partial y^2} = f_y, \end{aligned} \tag{1}$$

где C_L, C_T – скорости распространения волн с продольной и поперечной поляризациями, соответственно; γ_L, γ_T – коэффициенты затухания для продольной и поперечной мод; f_x, f_y – внешние силы, обусловливающие возникновение объемных акустических волн в соответствующих направлениях:

$$\begin{aligned} &f_x = \mathrm{Im}(\dot{F}_{m,x} \cdot e^{-i\omega t + ik_x x}); \\ &f_y = \mathrm{Im}(\dot{F}_{m,y} \cdot e^{-i\omega t + ik_y y}). \end{aligned} \tag{2}$$

Решение системы (1) ищем в виде плоских волн:

$$u_{x,L} = \mathrm{Im}(\dot{U}_{m,L} \cdot e^{-i\omega t + ik_x x}); \quad u_{x,T} = \mathrm{Im}(\dot{U}_{m,T} \cdot e^{-i\omega t + ik_y y}). \tag{3}$$

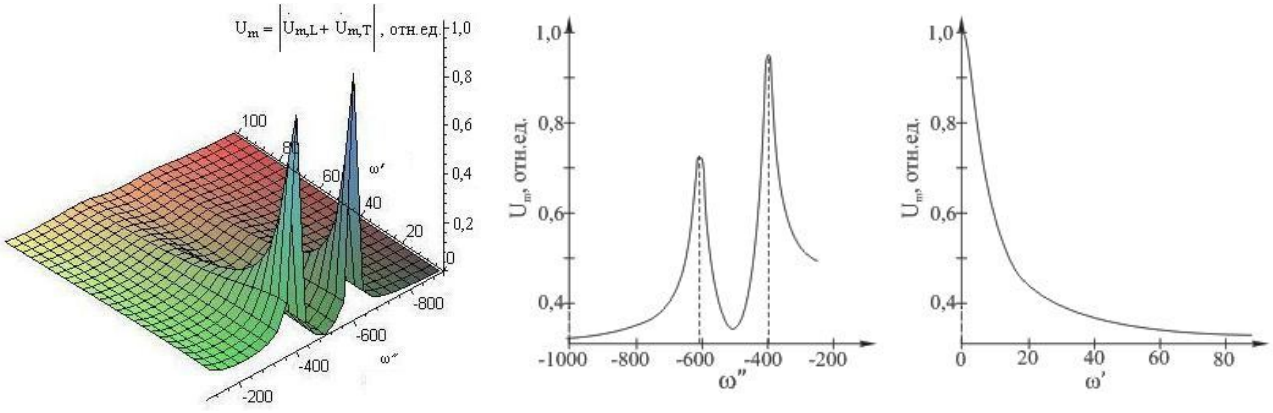
После подстановки и несложных преобразований получим:

$$\dot{U}_{m,L} = \frac{\dot{F}_{m,x}}{-\omega^2 - i\gamma_L \omega + C_L^2 k_x^2}; \; \dot{U}_{m,T} = \frac{\dot{F}_{m,y}}{-\omega^2 - i\gamma_T \omega + C_T^2 k_y^2}. \tag{4}$$

Определим результирующую амплитуду смещения элемента объема как линейную комбинацию смещений в поле продольной и поперечной волн:

$$U_m = \left| \dot{U}_{m,L} + \dot{U}_{m,T} \right|. \tag{5}$$

Выполняя в (5) замену $\omega \rightarrow \omega' + i\omega''$, где ω', ω'' – вещественная и мнимая частоты, получим вид зависимости амплитуды от комплексной частоты $U_m(\omega', \omega'')$, приведенный на рис. 1, а. Мнимая частота определяет экспоненциальный во времени характер уменьшения амплитуды импульсов вынуждающей силы f_x, f_y. При построении графика приняты следующие значения параметров: $F_{m,x} = F_{m,y} = 1$, $C_L k_x = C_T k_y = 2000$ c^{-1}, $\gamma_L = 400$ c^{-1}, $\gamma_T = 600$ c^{-1}. На рис. 1, б, в представлены зависимости, полученные фиксированием соответственно мнимой и вещественной частот. Из приведенных зависимостей видно, что они имеют явно выраженный резонансный характер, причем максимумы амплитуд деформации среды имеют место на значениях мнимых частот, практически совпадающих с принятыми значениями коэффициентов затухания. Если коэффициенты затухания для различных мод акустических волн отличаются друг от друга, то использование метода комплексных частот дает возможность разделить вклад различных мод в результирующую амплитуду деформации.



а б в

Рис. 1.

Практически применение рассматриваемого метода комплексных частот в эксперименте может быть следующим: изменять с малым шагом вещественную и мнимую части частоты, получить значения амплитуд деформаций среды, средствами компьютерного анализа извлечь из полученных данных значения резонансных частот и сделать вывод о свойствах исследуемой среды.

В работе установлена принципиальная возможность использования метода спектроскопии комплексных частот для определения мод акустических колебаний с различными коэффициентами затухания.

1. Юков, Е.А. Спектроскопия // Физическая энциклопедия / гл. ред. А. М. Прохоров. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1994. – Т. 4. – 704 с

2. Атабеков, Г.И. Основы теории цепей. –Изд. 4-е, стер. – СПб.: Лань, 2017. – 424 с.

3. Розанов, Н.Н. Комплексный резонанс и спектроскопия комплексных частот // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т. 90, Вып. 6. – С. 473-477.

4. Розанов, Н.Н. Комплексный резонанс при френелевском отражении импульсов излучения // ЖЭТФ. – 2010. – Т. 138, Вып. 4 (10). – С. 605-611.
5. Розанов, Н.Н. Комплексный резонанс при периодической раскачке осциллятора // Оптика и спектроскопия. – 2012. – Т. 112. – № 6. – С. 970-973.
6. Жуков, Е.А. Комплексный резонанс в акустике / Е.А. Жуков, В.И. Жукова, А.В. Каминский // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XVI региональной научной конференции, Хабаровск, 1–4 октября 2018 г. / под ред. А.И. Мазура. – Хабаровск : Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2018. – С. 175 - 177.
7. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: В 10 т. – Т. 7. Теория упругости /Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1987. – 248 с.

УДК [612.216.2/.217:616.24-073.173/-073.7]001.891.57

АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИКИ ДЫХАНИЯ

В.Ф. Ульянычева[1], Н.В. Ульянычев[2]
[1]Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
[2]Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания (г. Благовещенск)
nikolaj287@gmail.com

HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR RESEARCH OF THE RESPIRATORY MECHANICS

V.F. Ulyanycheva[1], N.V. Ulyanychev[2]
[1]Amur State University (Blagoveshchensk)
[2]Far Eastern Scientific Center for Physiology and Respiratory Pathology (Blagoveshchensk)
nikolaj287@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.62-65

Моделирование в области механики дыхания до последнего времени ограничивается поиском взаимосвязи между плевральным давлением и скоростью воздушного потока на основе известных геометрических характеристик воздухоносных путей и механических характеристик паренхимы легких. Такой подход имеет ряд существенных недостатков. Главный из них - выключение из рассмотрения дыхательных мышц и, вследствие этого, невозможность исследования вентиляции, как управляемого процесса. В свою очередь, в публикациях, посвященных моделированию функции дыхательной мускулатуры, как правило, не рассматривается вентиляция легких. Имеются работы, где связь между вентиляцией и функцией дыхательной мускулатуры исследуется экспериментально. В работе, представленной на ФФПИО 2017 [1], сделана попытка построения модели механики дыхания, в которой центральная роль отведена дыхательной мускулатуре. Главная задача легких - газообмен, начальной стадией которого является вентиляция легких. Вентиляция в свою очередь обеспечивается перемещением стенок грудной клетки и диафрагмы под действием дыхательной мускулатуры. Иными словами, дыхательная мускулатура является центральным исполнительным звеном системы внешнего дыхания, что и определяет важность своевременной оценки качества ее функционирования. Этот подход позволяет детально рассмотреть любой дыхательный маневр и получить уравнения, описывающие его основные закономерности.

В рамках данной работы разрабатывается автоматизированный метод исследования механики дыхания, который позволит проводить опытную проверку разрабатываемой модели. Суть метода заключается в одновременной регистрации мышечной активности с помощью электромиографа и паттерна дыхания с помощью спирографа. Следствием работы дыхательной мускулатуры является движение вдыхаемого и выдыхаемого воздуха, поэтому наряду с электромиографическим исследованием в разрабатываемую установку были включены средства для определения характеристик паттерна дыхания. Одновременное исследование нескольких звеньев дыхательной системы позволяет выявить и экспериментально подтвердить функциональную взаимосвязь между отдельными подсистемами, установить их роль и взаимный вклад в работу дыхательной системы.

Блок-схема, разрабатываемой установки исследования механики дыхания, представлена на рис. 1. Для получения первичных данных используются серийно выпускаемые медицинские приборы с сертифицированной метрологической характеристикой и электробезопасностью.

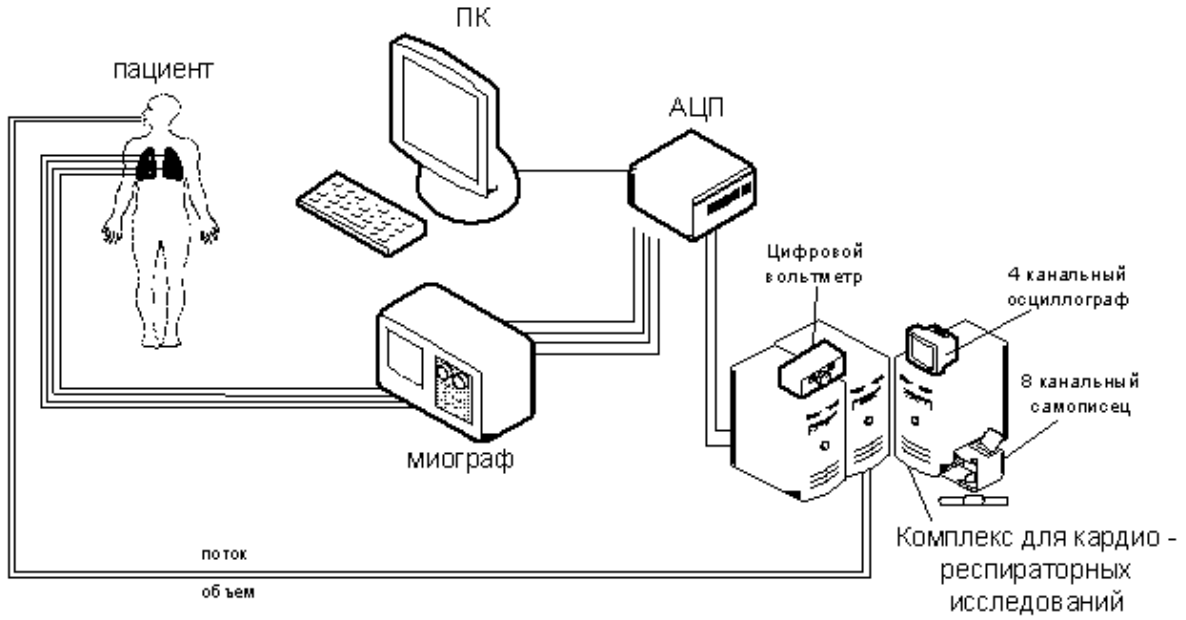


Рис. 1. Блок-схема разрабатываемой установки.

Работа устройства происходит по следующей схеме. Биоэлектрические потенциалы, возникающие в мышцах, снимаются поверхностными электродами. Эти биоэлектрические сигналы усиливаются четырьмя каналами усиления настолько, чтобы сигналы, снятые с выходов усилителей были достаточно большие для подачи на блок АЦП. Одновременно по отдельным каналам на блок АЦП подаются сигналы потока и объема вдыхаемого - выдыхаемого воздуха со спирографа входящего в комплекс для кардио-респираторных исследований. В блоке АЦП все каналы оцифровываются и далее по шине USB 2.0 подаются на компьютер в виде двоичного кода. С помощью пакета специальных программ данные электромиографии и спирографии пациента обрабатываются в соответствии с выбранной методикой обследования.

Для полноценного функционирования системы разработан пакет специальных программ, которые осуществляют диалог с пользователем и управление аппаратными средствами разрабатываемого комплекса. Состав программного обеспечения можно разделить на следующие подпрограммы: 1) главная программа; 2) подпрограмма снятия и визуального отображения данных (СВОД); 3) подпрограмма расчета показателей спирограммы (СПИРО); 4) подпрограмма расчета показателей миограммы (МИО).

Структура программного обеспечения имеет блочную структуру (рис. 2), где каждый блок является самостоятельной законченной программой, что позволяет легко наращивать число решаемых задач простым добавлением новых блоков.

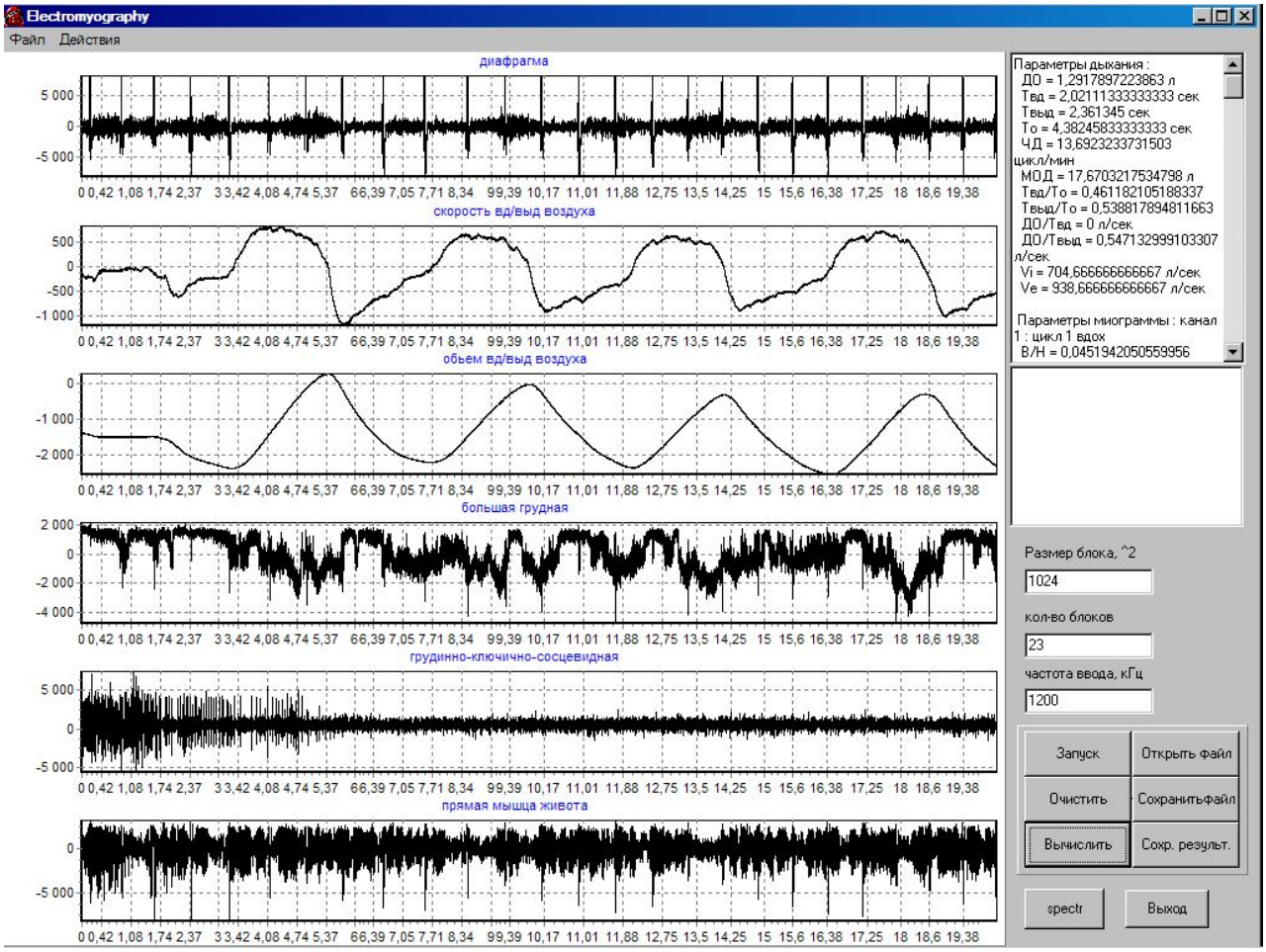


Рис. 2. Структура программного обеспечения.

Главная программа (рис. 3) обеспечивает диалог с пользователем и взаимодействие подпрограмм между собой. Окно программы состоит из нескольких частей: области отображения данных, область вывода результатов расчета показателей, область ввода-вывода параметров работы АЦП, область управления программой и обеспечения диалога с пользователем.

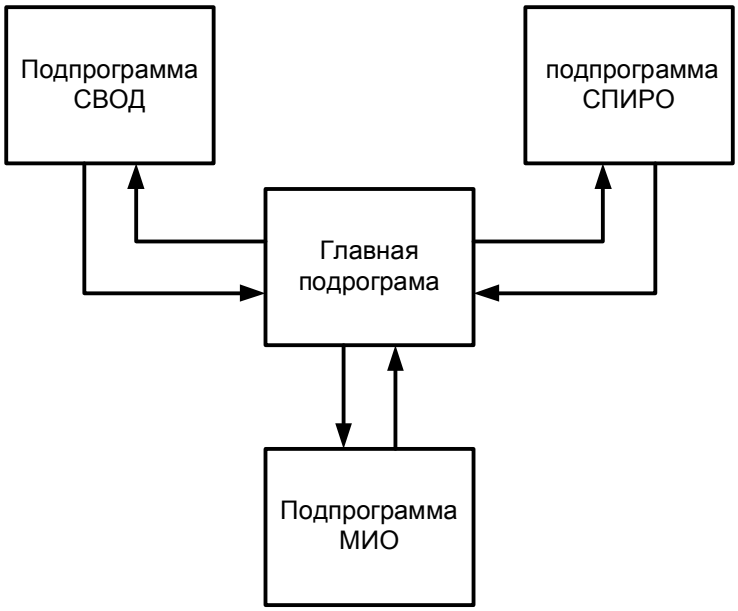


Рис. 3. Внешний вид программы.

Область отображения данных находится в центральной части главного окна программы и позволяет отображать данные, снимаемые непосредственно с АЦП или загруженные из файла на

компьютере. Данные отображаются в графическом виде, где каждому каналу соответствует свой график. Верхний график соответствует сигналу миографии снимаемого с диафрагмы исследуемого пациента. Второй и третий графики соответственно скорость и объем вдыхаемого выдыхаемого воздуха. Четвертый график – сигнал миографии с большой грудной мышцы, пятый – сигнал миографии с грудино-ключично-сосцевидной мышцы, нижний график – миограмма с прямой мышцы живота. По горизонтальной оси откладывается время в секундах, по вертикальной - числовые значения амплитуд сигнала в цифровом коде, снимаемого с АЦП. Значению 8000 на выходе АЦП соответствует амплитуда сигнала в 5 В.

Область вывода результатов расчета находится в правой верхней части главного окна программы и представляет собой многострочный текстовый редактор. В данную область выводятся результаты расчета основных параметров дыхания. Также возможно сохранение данных параметров в текстовом файле на жесткий диск компьютера.

Область ввода-вывода параметров работы АЦП находится в левой части главного окна программы под областью вывода результатов расчета и содержит окно и поля вывода и ввода параметров работы АЦП соответственно. В поля ввода параметров работы АЦП пользователь устанавливает частоту снятия данных, размер блока, а также количество блоков данных. После инициализации блока АЦП параметры его работы выводятся в окно вывода параметров работы АЦП.

Область управления программой и обеспечения диалога с пользователем располагается в нижней части главного окна программы под областью ввода-вывода параметров работы АЦП и представляет собой набор кнопок. Работа всех кнопок дублируется в главном меню программы для удобства работы пользователя. Главное меню программы находится в верхней части главного окна.

Разработанная автоматизированная система исследования дыхательной мускулатуры внедрена в клиническую практику Дальневосточного научного центра физиологии и патологии дыхания. Первые исследования на реальном контингенте показали работоспособность, а также удобство применения разработанного метода. В дальнейшем, после накопления определенного статистического материала, возможно рассмотрение вопроса о стандартизации методики.

Развитый в работе подход дает возможность включить в анализ механики дыхания дыхательную мускулатуру, что снимает ограниченность существующих методов и открывает выход на системный уровень анализа.

Разработанная система включает совместный анализ данных спирографии и миографии, и позволяет диагностировать различные состояния дыхательной системы.

Основные особенности данной работы:

1. Усовершенствован метод электромиографии для дыхательных мышц, теперь анализ миограммы ведется с учетом паттерна дыхания. Отдельно рассматривается работа дыхательных мышц во время вдоха и во время выдоха.

2. Применение метода обработки сигнала на основе анализа Фурье, позволило выявить ряд спектральных параметров, которые наряду с амплитудными несут в себе информацию о функционировании дыхательной мускулатуры.

3. Применение частотного фильтра позволило отфильтровать сигнал ЭКГ от сигнала миографии, не изменяя форму последнего. Благодаря чему исключено влияние ЭКГ на результаты исследования.

---

1. Ульянычев, Н.В., Ульянычева, В.Ф., Килин, Е.В. Исследование механики дыхания на системном уровне // Физика: фундаментальные и прикладные исследования: материалы XV региональной научной конференции. – Благовещенск: Изд-во АмГУ, 2017. – С. 69-73.

Секция 2

Физика конденсированного состояния

УДК 538.911

НЕСОРАЗМЕРНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ НА ГРАНИЦЕ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА В ЦИРКОНАТЕ СВИНЦА С МАЛЫМ ДОБАВЛЕНИЕМ ТИТАНА

Д.А. Андроникова[1], Ю.А. Бронвальд[2], А.В. Филимонов[2], С.Б. Вахрушев[1]
[1]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе (г. Санкт-Петербуг)
[2]Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого (г. Санкт-Петербург)
andronikova.daria@gmail.com

INCORRECTIBLE INSTABILITY AT THE BORDER OF THE BRILLUINE ZONE IN LEAD ZIRCONATE WITH A SMALL ADDITION OF TITANIUM

D.A. Andronikova[1], Yu.A. Bronwald[2], A.V. Filimonov[2], S.B. Vakhrushev[1]
[1]Physical and Technical Institute. A.F. Ioffe (St. Petersburg)
[2] St. Petersburg State Polytechnic University of Peter the Great (St. Petersburg)
andronikova.daria@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.66-76

Цирконат-титанат свинца $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ (ЦТС) – активно исследуемый перовскитоподобный функциональный материал, наиболее всего известный благодаря высоким пьезоэлектрическим коэффициентам, делающим его одним из лидеров на рынке пьезоэлектрических материалов [1]. В области концентраций $0 < x < 0.07$ ЦТС проявляет антисегнетоэлектрические свойства. Антисегнетоэлектрический ЦТС вызывает интерес не только как модельный объект для исследования природы антисегнетоэлектрического состояния, но и как перспективный материал для создания систем охлаждения, основанных на электрокалорическом эффекте [2], устройств накопления энергии конденсаторного типа [3], а также устройств хранения информации высокой плотности записи [4]. Стоит отметить, что область фазовой диаграммы, соответствующая малым концентрациям титана, до сих поря является мало исследованной. Это объясняется как большим количеством кристаллических фаз, наблюдающихся в данной области концентраций, так и отсутствием монокристаллических образцов достаточного качества.

В области концентраций $0 < x < 0.07$ ЦТС испытывает два фазовых перехода: из кубической параэлектрической фазы в промежуточную и далее в антисегнетоэлектрическую фазу. Сообщалось о наличии дополнительной фазы между промежуточной и антисегнетоэлектрической, отличающейся несоразмерной модуляцией свинцовой подрешетки. Промежуточная фаза предположительно имеет ромбоэдрическую симметрию [5, 6] и является сегнетоэлектрической [6]. Переход в данную фазу характеризуется возникновением сверхструктурных рефлексов М типа в точках $Q_M = (½+h, ½+k, l)$ [7].

Сообщалось также о наличии сателлитных рефлексов в окрестности Q_M отражений [7, 8]. Были предложены различные варианты объяснения природы данных сателлитных рефлексов: в работе [7] возникновение сателлитов связывали с модуляцией угла вращения кислородных октаэдров, в работе [8] - с рассеянием на антифазных доменных границах. Полное понимание природы их возникновения на данный момент отсутствует.

В настоящем докладе приведены результаты первого исследования промежуточной фазы в ЦТС методом монокристальной дифракции с использованием синхротронного излучения, уточнены детали структуры данной фазы. На основании анализа диффузного рассеяния обсуждается природа фазового перехода из параэлектрической в промежуточную фазу.

Характеристика образцов и описание эксперимента

Объектами исследования служили монокристаллические образцы ЦТС ($PbZr_{1-x}Ti_xO_3$) с концентрацией титана x = 0.007 (ЦТС0.7). Монокристаллы были предоставлены группой под руководством Леонтьева И.Н. (Южный федеральный университет). Подготовка образцов для проведения экспериментов по регистрации синхротронного излучении (СИ) включала: ориентацию образцов, вырезание образцов необходимой формы, уменьшение их размера до необходимого с точки зрения минимизации поглощения образцом падающего излучения и травление. В результате монокристаллы имели форму иголки с характерными размерами 0.05x0.05x0.1 (мм).

Дифракционные измерения, а также регистрация картин диффузного рассеяния, были проведены на универсальном дифрактометре PILATUS SNBL синхротронного источника ESRF. Длина волны падающего излучения составляла 0.95 Å.

Структура промежуточной фазы

В результате сканирования обратного пространства были восстановлены трехмерные распределения интенсивности в координатах обратного пространства. На рис. 1 приведены восстановленные области обратного пространства в окрестности фундаментального брэгговского рефлекса Q_{Br} = (0, 0, 2) и сверхструктурного рефлекса Q_M = (0, 0.5, 1.5).

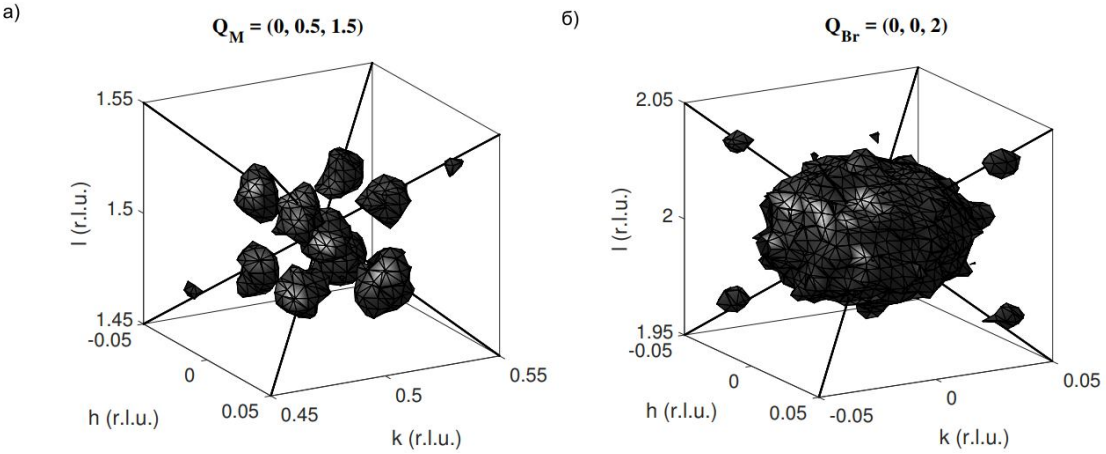


Рис. 1. Трехмерное распределение интенсивности СИ в координатах обратного пространства в окрестности Q_M = (0, 0.5, 1.5) и Q_{Br} = (0, 0, 2) рефлексов в промежуточной фазе в ЦТС0.7. Линиями показаны различные направления семейства <111>.

Полученные картины позволяют установить наличие сложной системы сателлитных рефлексов в окрестности как основных, так и сверхструктурных рефлексов. Вблизи сверхструктур М-типа существуют сателлитные рефлексы первого порядка Q_M + {δ, δ, δ} и сателлитные рефлексы второго порядка Q_M + {2δ, 2δ, 2δ}. В окрестности фундаментальных рефлексов наблюдаются только сателлитные рефлексы второго порядка. Величина δ была определена равной $\delta \approx 0.018$ r.l.u.

В работе [8] было предложено, что возникновение данных сателлитных рефлексов может быть объяснено рассеянием на антифазных доменных границах, разделяющих антипараллельные смещения ионов свинца. Нами была проанализирована данная версия [10], для чего было проведено моделирование картины рассеяния от антифазных доменов, характеризующихся антипараллельными смещениями ионов свинца. Было показано, что в рамках данной модели удается воспроизвести положения сателлитов первого и второго порядка вблизи Q_M точек, но невозможно воспроизвести сателлитные рефлексы второго порядка вблизи Q_{Br}.

Таким образом, для объяснения структуры промежуточной фазы недостаточно учета только антифазных доменных границ. Мы предполагаем, что промежуточная фаза может характеризоваться наличием модуляции, описываемой насоразмерным вектором модуляции. К сожалению, имеющиеся на данных момент дифракционные данные сложны для решения структуры промежуточной фазы вследствие большого числа структурных доменов. Для полного понимания структуры данной фазы необходимо контролируемое получение монодоменных образцов или образцов с уменьшенным числом доменов, что является задачей дальнейших исследований.

Диффузное рассеяние в параэлектрической фазе

Для анализа природы фазового перехода из параэлектрической в промежуточную фазу нами были проведены измерения диффузного рассеяния (ДР) СИ в параэлектрической фазе в широком диапазоне температур. Исследование ДР в окрестности центра зоны Бриллюэна было проведено ранее [10], и было показано, что в параэлектрической фазе ЦТС0.7 центре зоны Бриллюэна наблюдается сильное анизотропное ДР, интенсивность которого критически зависит от температуры. Мы предполагаем, что данное рассеяние является следствием флуктуаций сегнетоэлектрического параметра порядка.

В рамках данного исследования особое внимание было уделено особенностям ДР на границе зоны Бриллюэна, точнее – в окрестности Q_M точек. В случае структуры типа перовскита стоит выделять два типа сверхструктур в точках $Q_M = (½+h, ½+k, l)$: симметричные, т.е. $h = k$, и несимметричные, $h \neq k$. Рассеяние в симметричных Q_M точках отличается тем, что в него не вносит вклад система кислородных октаэдров. В несимметричных Q_M точках наблюдается рассеяние от всех атомов соединения. Таким образом, рассматривая по отдельности симметричную и несимметричную Q_M точки можно установить, какую роль играет разупорядочение кислородного остова в формировании ДР.

На рис. 2 приведен срез обратного пространства плоскостью (*hk0*) в параэлектрической фазе. Можно заметить, что картина рассеяния в симметричной и несимметричных точках заметно отличается. Для более детального анализа были построены одномерные профили интенсивности вдоль <110> направлений, проходящие через несимметричную (рис. 2б) и симметричную (рис. 2в) точки.

В несимметричной Q_M точке распределение ДР является сильно асимметричным относительно границы зоны Бриллюэна. В области, отстоящей от границы на $q_{inc} \approx 0.03$ r.l.u. наблюдается локальный максимум интенсивности ДР. С уменьшением температуры, т.е. с приближением к точке фазового перехода в промежуточную фазу, интенсивность ДР в q_{inc} испытывает рост, что проиллюстрировано на рис. 2б. С другой стороны от границы зоны Бриллюэна ДР является слабым и от температуры не зависит. ДР в окрестности симметричной Q_M точки локальных максимумов не имеет и слабо зависит от темпераутры (см. рис. 2в). Таким образом, обнаружено явное различие в распределении и температурном поведении ДР в окрестности Q_M точек различного типа. Исходя из этого можно предположить, что рассеяние от системы кислородных октаэдров вносит существенный вклад в развитие неустойчивости, проявляющейся в виде зависящего от температуры ДР в области q_{inc}. Рост ДР при приближении к температуре фазового перехода может быть связан со смягчением одной из фононных мод. Тот факт, что ДР испытывает рост в области, смещенной от М точки, указывает на то, что данная фононная мода является несоразмерной.

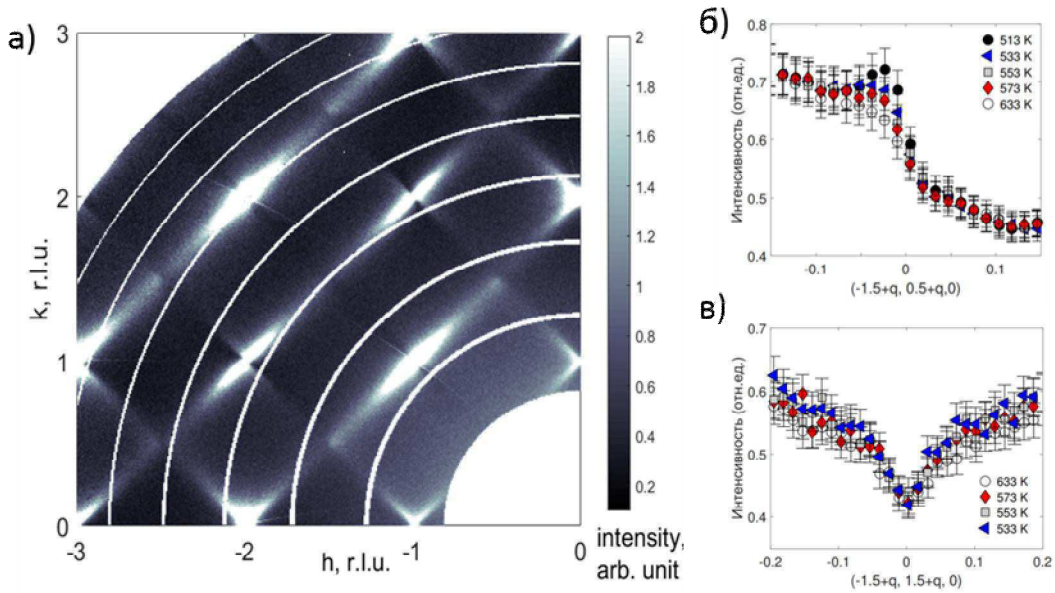


Рис. 2. а) – распределение интенсивности синхротронного излучения в плоскости (*hk0*) в параэлектрической фазе ЦТС0.7; б), в) – распределение интенсивности ДР в окрестности: б) несимметричной Q_M точки вдоль линии [1.5+q 0.5-q 0] и в) симметричной Q_M точки вдоль линии [1.5+q 1.5-q 0]. Распределения приведены для различных температур в параэлектрической фазе.

Заключение

На основании анализа результатов дифракции СИ в ЦТС0.7 в промежуточной фазе показано, что ее структура характеризуется наличием сложной системы сверхструктурных рефлексов. Показано, что возникновение данных рефлексов невозможно объяснить только с помощью антифазных доменов. Мы предполагаем, что промежуточная фаза может характеризоваться наличием модуляции, описываемой насоразмерным волновым вектором.

Анизотропия и температурная зависимость ДР указывает на то, что в параэлектрической фазе сосуществуют два типа флуктуаций: полярные флуктуации в центре зоны Бриллюэна и флуктуации несоразмерно модулированного параметра порядка на ее границе. Для объяснения несоразмерного фазового перехода в промежуточную фазу можно предположить биквадратичную связь соответствующих параметров порядка, при которой сегнетоэлектрические флуктуации индуцируют несоразмерную неустойчивость.

Работа Андрониковой Д.А. поддержана стипендией Президента РФ СП-3762.2018.5.

1. Haertling, G.H. Ferroelectric ceramics: history and technology // Journal of the American Ceramic Society. – 1999. – V. 82. – P. 797-818.

2. Mischenko, A.S Giant electrocaloric effect in thin-flm PbZr0.95Ti0.05O3 / A.S. Mischenko, Q. Zhang, J.F. Scott, R.W. Whatmore, N.D. Mathur // Science. – 2006. – V. 311. – P. 1270-1271.

3. Liu, H.A brief review on the model antiferroelectric PbZrO3 perovskite-like material / H. Liu, B. Dkhil // Zeitschrift für Kristallographie Crystalline Materials. – 2011. – V. 226. – P. 163-170.

4. Wei, X.-K. Ferroelectric translational antiphase boundaries in nonpolar materials / X.-K.Wei, A.K.Tagantsev, K.Roleder, C.-L.Jia, N.Setter // Nature communications. – 2014. – V. 5. – P. 3031.

5. Buixaderas, E. Catching the intermediate phase in PZT 99/1 single crystals / E. Buixaderas, T. Ostapchuk, M. Savinov, I. Gregora, J. Hlinka // Phase Transitions. – 2014. – V. 87. – P. 1105–1113.

6. Viehland, D. Transmission electron microscopy study of high-Zr-content lead zirconate titanate // Physical Review B. – 1995. – V. 52. – P. 778.

7. Dai, X. Effect of oxygen octahedron rotations on the phase stability, transformational characteristics, and polarization behavior in the lead zirconate titanate crystalline solution series / X. Dai, Z. Xu, D. Viehland. //Journal of the American Ceramic Society. – 1995. – V. 78. – P. 2815-2827.

8. Ricote, J. A TEM and neutron diffraction study of the local structure in the rhombohedral phase of lead zirconate titanate / J. Ricote, D.L. Corker, R.W. Whatmore, S.A. Impey, A.M. Glazer, J. Dec, K. Roleder // Journal of Physics:Condensed Matter. – 1998. – V. 10. – P. 1767

9. Андроникова, Д.А. Особенности структуры промежуточной фазы в цирконате-титанате свинца с высоким содержанием циркония / Д.А. Андроникова, Ю.А. Бронвальд, Н.Г. Леонтьев, И.Н. Леонтьев, Д.Ю. Чернышов, А.В. Филимонов, С.Б. Вахрушев // Физика твердого тела. – 2019. – V. 10.

10. Андроникова, Д.А. Критическое рассеяние синхротронного излучения в цирконате-титанате свинца с малой концентрацией титана / Д.А. Андроникова, Н.Г. Леонтьев, И.Н. Леонтьев, Д.Ю. Чернышов, А.В. Филимонов, С.Б. Вахрушев // Физика твердого тела. – 2015. – V. 57. –P. 80-85.

УДК 538.958

РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИИ НАВЕДЕННЫХ ЦЕНТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ В ОКСИДЕ ЦИНКА

И.В. Верхотурова, В.В. Нещименко
Амурский государственный университет (г.Благовещенск)
rusia@mail.ru

CALCULATION OF THE CONCENTRATION OF INDUCED ABSORPTION CENTERS IN ZINC OXIDE

I.V. Verkhoturova, V.V. Neshchimenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
rusia@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.70-72

В оксиде цинка, применяемого в качестве пигмента терморегулирующих покрытий класса «солнечные отражатели», при длительном действии ионизирующего излучения космического пространства образуется большое количество центров поглощения. Их образование и накопление негативно сказывается на оптических свойствах терморегулирующих покрытий. В основном это влияет на отражательную способность терморегулирующих покрытий, приводя к ее уменьшению [1]. Ионизирующее излучение космического пространства сочетает в себе множество компонент излучений различных как по составу, так и по энергиям, причем эти компоненты могут воздействовать на терморегулирующие покрытия космического аппарата в различных сочетаниях и в разной временной последовательности. При таком воздействии возникающие в материалах радиационные эффекты имеют сложный характер [2].

Понимание механизмов образования и закономерностей накопления наведенных центров поглощения при совместном воздействии на материал нескольких факторов космического пространства является важным для получения радиационностойких терморегулирующих покрытий [1]. Одной из задач исследования механизмов образования центров поглощения в оксиде цинка под действием ионизирующего излучения является получение кинетических кривых накопления наведенных поглощающих центров, строящихся на основе значений концентрации наведенных центров [3].

В настоящей работе представлены результаты расчета концентрации наведенных центров поглощения в оксиде цинка, облученного протонами.

Облучение микропорошков оксида цинка потоком протонов с энергией 100 кэВ проводилось в комплексном имитаторе факторов космического пространства. Регистрация спектров диффузного отражения оксида цинка поле облучения ионизирующим излучением проводилась на месте (*in situ*).

Облучение оксида цинка потоком протонов оказывает влияние на деградацию оптических свойств оксида цинка в ультрафиолетовой и видимой области спектра, что выражается в уменьшении коэффициента отражения (рис. 1).

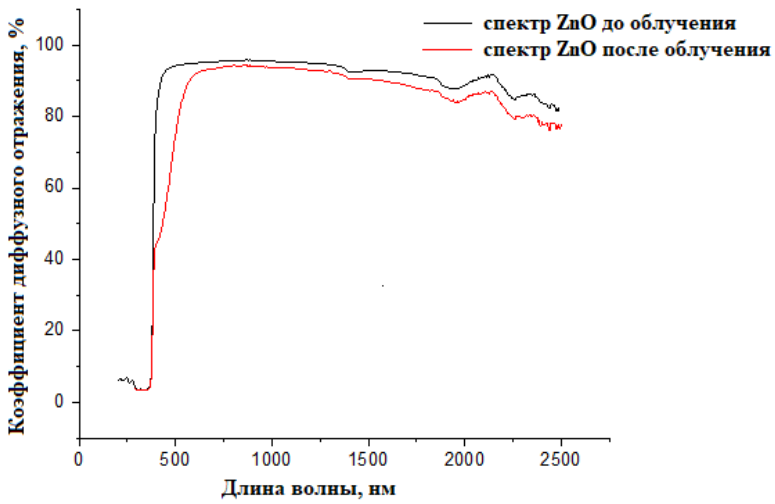


Рис. 1. Спектры диффузного отражения оксида цинка, до и после облучения протонами.

Известно, что концентрация наведенных центров поглощения связана с площадью под полосой поглощения соответствующего дефекта и силой осциллятора этого дефекта. Для расчета концентрации центров поглощения проводили разложение разностных спектров диффузного отражения на индивидуальные полосы. При разложении спектра соблюдали следующие условия: использовали комбинированную функцию, состоящую из 80% зависимости Гаусса и 20% зависимости Лоренца; индивидуальные полосы поглощения не должны быть вложенными друг в друга; результат разложения должен давать минимум дисперсии между полученным интегральным спектром элементарных полос и исходным разлагаемым спектром. Разложение разностных спектров диффузного отражения оксида цинка на индивидуальные полосы осуществлялось исходя из представленных в работе [1] энергии полос поглощения дефектов оксида цинка.

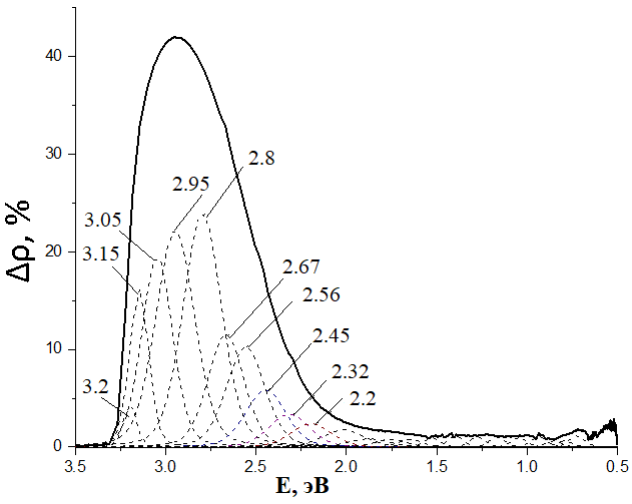


Рис. 2. Разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, разложенный на индивидуальные полосы.

Облучение поликристаллического оксида цинка приводит к образованию сплошной полосы наведенного поглощения в УФ и видимой областях спектра. На рис. 2 представлен разностный спектр диффузного отражения оксида цинка, после облучения протонами, разложенный на индивидуальные полосы поглощения, относящиеся к дефектам катионной и анионной подрешетки.

Для определения площади под индивидуальной полосой поглощения использовали интегральную сумму, согласно которой, площадь под кривой поглощения, равна произведению квадрата величины шага энергии электромагнитного поля на сумму произведения амплитуды спектра поглощения на номер шага.

В рамках классической теории сила осциллятора напрямую связана с интегралом полосы поглощения следующим образом:

$$f = \frac{8\pi^2 mc}{3he^2 n}\int_{\tilde{\nu}_1}^{\tilde{\nu}_2}\varepsilon(\tilde{\nu})d\tilde{\nu}\,, \qquad (1)$$

где $\int_{\tilde{\nu}_1}^{\tilde{\nu}_2} \varepsilon(\tilde{\nu})d\tilde{\nu}$ – интегральный молярный коэффициент экстинкции равный площади под линией поглощения; $\tilde{\nu}$ – волновое число, см$^{-1}$ [4].

Расчет концентрации центров поглощения производился по формуле Смакулы-Декстера [5]:

$$N = \frac{A}{f} \cdot \frac{n}{\left(n^2+2\right)^2} \cdot \alpha_{\max} \cdot \Delta E, \quad (2)$$

где n – показатель преломления необлученного оксида цинка, определяемый по дисперсионной кривой для каждого максимума индивидуальной полосы поглощения; α_{max} – максимальный коэффициент поглощения, определяемый по высоте пика полосы поглощения центра поглощения, см$^{-1}$; ΔE – полуширина полосы поглощения, определяемая на полувысоте пика полосы поглощения, эВ; A – числовой коэффициент, учитывающий используемые при разложении формы полос поглощения; f – сила осциллятора (в общем случае принимает значения $0{,}1 < f \leq 1$) [6].

Проведен расчет сил осцилляторов для наведенных центров поглощения в оксиде цинка, полосы поглощения которых находятся в диапазоне энергий от 3,20 до 2,20 эВ. Результаты расчета сил осцилляторов и концентрации наведенных дефектов в облученном протонами оксиде цинка представлены в таблице.

Результаты расчета силы осцилляторов и концентрации радиационных дефектов в оксиде цинка

E, эВ	n	ΔE, эВ	ρ_{max}, %	α_{max}, см$^{-1}$	f	N·10^{15}, см$^{-3}$
3,20	2,32	0,10	4,17	1,37	0,48	0,12
3,15	2,30	0,13	16,22	0,78	0,35	1,82
3,05	2,21	0,22	19,17	0,71	0,54	2,29
2,95	2,18	0,28	22,22	0,65	0,63	2,33
2,80	2,12	0,28	23,93	0,62	0,61	2,39
2,67	2,09	0,25	11,44	0,94	0,82	1,45
2,56	2,07	0,25	10,09	0,99	0,86	1,43
2,45	2,05	0,25	5,82	1,23	1,07	0,98
2,32	2,03	0,25	3,32	1,47	1,28	0,20
2,20	2,01	0,25	2,22	1,65	1,44	0,15

Показано, что значения сил осцилляторов принимают значения от 0.1 до 1. Однако некоторые значения сил осцилляторов выходят за верхнее предельное значение, что требует уточнения.

Рассчитана концентрация наведенных центров поглощения в облученном ZnO, необходимая для построения кинетических кривых накопления радиационных центров окраски. Показано, что максимальные значения концентрации соответствует дефектам $Zn_i^{2+}, Zn_i^{+}, V_{Zn}^{2-}, V_{Zn}^{-}$ обладающим максимальными значениями площади под полосой поглощения.

1. Нещименко, В.В. Структура, свойства и радиационная стойкость оксидных микро- и нанопорошков и отражающих покрытий, изготовленных на их основе: Дис. …д-ра физ.-мат. наук. – Томск: ТУСУР, 2016. – 273 с.

2. Новиков, Л.С. Радиационные воздействия на материалы космических аппаратов: учеб. пособие. – М.: Университетская книга, 2010. – 192 с.

3. Михайлов, М.М. Изменение оптических свойств терморегулирующих покрытий космических летательных аппаратов под действием протонов солнечного ветра / М.М. Михайлов, В.В. Шарафутдинова // Известия вузов. Физика. – 1998. – № 6. – С. 83-88.

4. Мельников, М.Я., Иванов, В.Л. Экспериментальные методы химической кинетики. Фотохимия: учебное пособие. – М.: Изд-во МГУ, 2004. – 125 с.

5. Dexter, D.L. Absorption of light by atoms in solids / D.L. Dexter // Phys. Rev. – 1956. – V. 101B. – P. 48-55.

УДК 621.3383.52 / 621.327.2

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЙ РОСТ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК Ca_2Si, ВЫРАЩЕННЫХ НА Si(111) С ЖЕРТВЕННЫМ СЛОЕМ Mg_2Si

К.Н. Галкин[1], Н.Г. Галкин[1], С.А. Доценко[1], Е.Ю. Субботин[1], Е.Е. Чусовитин[1], С.А. Пячин[2], И.А. Астапов[2]

[1]Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток)

[2]Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г. Хабаровск)

galkinkn@iacp.dvo.ru

EPITAXIAL GROWTH AND OPTICAL PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR Ca_2Si FILMS GROWN ON Si (111) WITH A Mg_2Si VICTIM LAYER

K.N. Galkin[1], N.G. Galkin[1], S.A. Dotsenko[1], E.Yu. Subbotin[1], E.E. Chusovitin[1], S.A. Pyachin[2], I.A. Astapov[2]

[1]Institute of Automation and Control Processes FEB RAS (Vladivostok)

[2]Institute of Materials Science of the Kola Science Center FEB RAS (Khabarovsk)

galkinkn@iacp.dvo.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.73-76

1. Введение

Полупроводниковые силициды щелочноземельных металлов (Ca, Mg) привлекают значительное внимание как перспективные материалы для термоэлектрических преобразователей [1], в том числе и в виде толстых пленок на кремнии [2]. Наибольшие сложности для роста на кремнии представляет полупроводниковый силицид кальция (Ca_2Si) из-за наличия большого количества силицидов в системе Si-Ca и близких энергий формирования [3]. Для объемных слоев Ca_2Si была предложена и протестирована методика его роста через жертвенный слой Mg_2Si [4]. Она была также проверена на сверхтонких слоях Ca_2Si, выращенных через жертвенный слой Mg_2Si [5]. Однако толстые пленки таким методом не были выращены и не определены основные параметры ростового процесса.

В данной работе проведен рост тонких и толстых пленок Ca_2Si на Si(111) с предварительно сформированным эпитаксиальным слоем Mg_2Si, исследованы их атомная, кристаллическая и электронная структуры и оптические свойства.

2. Эксперимент

Рост пленок Ca_2Si проводился на подложках Si(111) с предварительно сформированным тонким эпитаксиальным слоем Mg_2Si в сверхвысоковакуумной камере (СВВ) установки OMICRON Compact с базовым вакуумом 1×10^{-10} Торр. Камера была оснащена сублимационными источниками Si и ячейкой Кнудсена для осаждения Ca, анализаторами ДМЭ и ЭОС/ХПЭЭ и кварцевым датчиком толщины. В качестве подложек и сублимационных источников Si использовались полосы Si(111) проводимости n-типа с удельным сопротивлением 2000 Ω × см. Скорость осаждения Ca и Si по данным датчика толщины кварца составляла 1,2-2,2 нм/мин и 0,8-1,0 нм/мин, соответственно, в разных экспериментах. Три образца с пленками Ca_2Si на матрице Mg_2Si/Ca_2Si были выращены с толщиной 100-220 нм. На каждом этапе роста контролировали картины ДМЭ и спектры ЭОС и ХПЭЭ. После

выгрузки образцов из камеры СВЧ морфология поверхности пленок силицида Ca, а также оптические свойства пленок исследовались с помощью методов, описанных в [6].

3. Результаты и обсуждение

Формирование слоя Mg_2Si сопровождалось изменениями в спектрах ЭОС (не показаны) и ХПЭЭ (рис. 1, d), а также преобразованием картины ДМЭ Si(111)7x7 (Рис. 1, a) в картину Mg_2Si(111)1x7 (рис. 1, c), что соответствует эпитаксиальному росту с напряженной решетки Mg_2Si на Si(111). При этом выполняются эпитаксиальные соотношения: Mg_2Si(111)||Si(111), Mg_2Si[11-2]||Si[-110] и Mg_2Si[1-10]||Si[11-2]. Поскольку постоянная решётки Mg_2Si на 15.5% [3] больше постоянной решётки Si(111), то для их сопряжения наблюдается поворот на 30^o и упругое сжатие решетки Mg_2Si. Для сжатой на 1.9% решётки Mg_2Si (a_{Mg2Si}=6.2718 Å) наблюдается хорошее сверхструктурное сопряжение: 1 Mg_2Si[11-2]≈2 Si[1-10], 3 Mg_2Si[1-10]≈ 2 Si[11-2]. Данные ХПЭЭ (рис. 1, d) показали формирование интенсивных поверхностного (9.8 эВ) и объемного (13.7 эВ) плазмонов, характерных для эпитаксиального слоя Mg_2Si [7]. Модельное изображение ДМЭ (рис. 1, b), полученные для сжатой на 1.9% решётки Mg_2Si, хорошо согласуется с экспериментальной картиной ДМЭ (рис. 1, c).

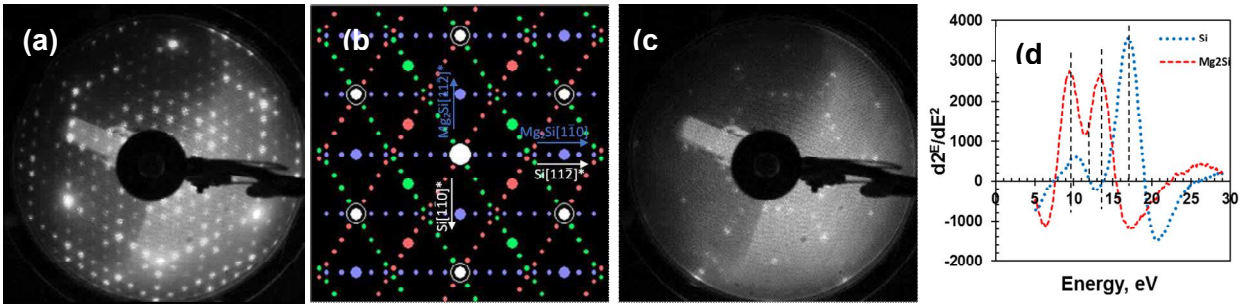


Рис. 1. ДМЭ картины (E_p=44.1 эВ) от поверхности Si(111)7x7(a) и поверхности Mg_2Si(111)1x7 (c), а также схема картины ДМЭ Mg_2Si(111)1x7 (b) и спектры ХПЭЭ от Si(111)7x7 Mg_2Si(111)1x7 (d).

Трансформацию тонкого слоя Mg_2Si в процессе осаждения Ca (1 нм) контролировали методами ДМЭ, ЭОС и ХПЭЭ. При температуре 250°C происходил выход атомов Mg из решетки Mg_2Si путем замещения атомами кальция и преобразования решетки, поскольку решетки Mg_2Si и Ca_2Si относятся к разным пространственным группам: Fm3m и Pnma [8], соответственно. Трансформация фаз была подтверждена по данным ЭОС. В ее процессе сначала исчезла картина ДМЭ от Mg_2Si и появился фон, а по данным ХПЭЭ (рис. 1, d) появились пики поверхностного (10.3 эВ) и объемного (13.7 эВ) плазмонов, которые согласуется с данными работы [5], что свидетельствует о формировании затравочного слоя Ca_2Si. Увеличение толщины пленки Ca_2Si проводили методом МЛЭ при температурах подложки 250-300°C.

Для всех трех образцов с разными толщинами после осаждения была зафиксирована картина ДМЭ (рис. 2, в) в широком диапазоне энергий электронов (17.1 – 91.1 эВ), которая была промоделирована и отнесена к картине Ca_2Si(010)1x1 (рис. 2, а). Совмещение картин Mg_2Si(111)1x7 и Ca_2Si(0101)1x1 представлено на рис. 1, c, что доказывает переход от картины одного силицида к другому и их частичное совмещение на экспериментальной картине ДМЭ (рис. 2, в). По данным ДМЭ на двух этапах роста установлено сопряжение следующих плоскостей: Mg_2Si(111)||Si(111) и Ca_2Si(010)||Mg_2Si(111), а также определены сопряжения основных направлений: Mg_2Si[11-2]||Si[-110] и Ca_2Si[100]||Mg_2Si[11-2]; Mg_2Si[1-10]||Si[11-2] и Ca_2Si[001]||Mg2Si[1-10]. Установлены с учетом упругой деформации по двум постоянным решетки Ca_2Si (a (+0.15%), c (-1.51%) сверхструктурное сопряжение между двумя силицидами: 2 Ca_2Si[100] ≈ 1 Mg_2Si[11-2] ≈ 1Si[1-10] и 3 Ca_2Si[001] ≈3 Mg_2Si[1-10] ≈ 2 Si[11-2].

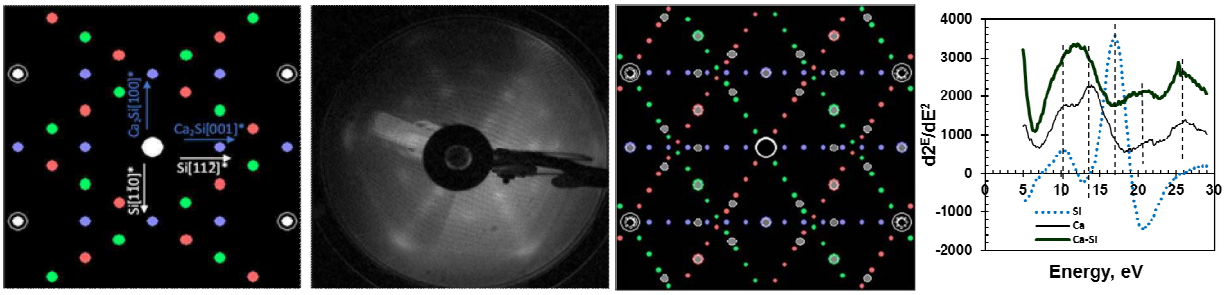


Рис. 2. Схема картины ДМЭ $Ca_2Si(010)1x1$ (a) и совмещения картин ДМЭ от $Ca_2Si(010)1x1$ и $Mg_2Si(111)1x7$ (b). Экспериментальная картина ДМЭ (E_p = 17.1 эВ) от выращенной пленки Ca_2Si (b) и спектры ХПЭЭ от Si(111)7x7 и двух стадий формирования пленки $Ca_2Si(010)1x1$ (d).

После выгрузки образцов из ростовой камеры по спектрам пропускания (рис. 3, а) и отражения (рис. 3, б) и расчетам оптических функций установлено, что пленка Ca_2Si является узкозонным (0.46±0.02 эВ) прямозонным полупроводником для всех трех образцов пленок с разными толщинами. В колебательном спектре пропускания (рис. 3, в) обнаружены 4 пика: 95, 164, 198 и 246 $см^{-1}$, которые также отвечают пикам в Ca_2Si [9]. По данным КРС спектроскопии (рис. 3, г) обнаружены 8 КРС-активных пиков (109, 117, 133, 143, 188, 203 и 253 $см^{-1}$), для которых проведена идентификация по группам колебаний в Ca_2Si [9]. Эпитаксиальные пленки Ca_2Si по данным АСМ состоят из плоских зерен с размерами 120-200 нм.

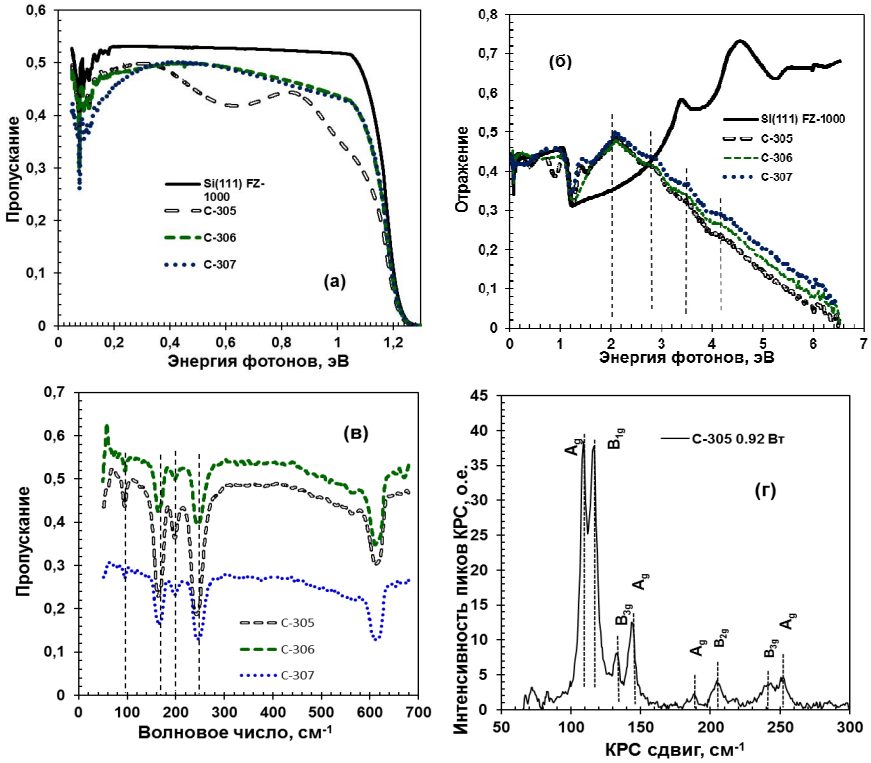


Рис. 3. Спектры пропускания (а), отражения (б), пропускания в ИК-области (в) для трех образцов (С-305, С-306, С-307) и кремниевой подложки и спектр КРС для образца С-305 (г).

Структура пленок силицида кальция была исследована методом рентгеновской дифракции (РД) при углах падения 2Θ = 25-75°. По данным спектров РД (рис. 4) в пленках образцов С-306 и С-307 обнаружены только пик кремния Si(222) и слабые отдельные пики от Ca_2Si: (400) и (600). Сравнение с данными для решетки CaSi (Cmcm) показали наличие только одного близкого пика, но не совпадающего с пиком $Ca_2Si(400)$. Поэтому можно говорить об эпитаксиальной ориентации зерен Ca_2Si в выращенных пленках и их однофазности.

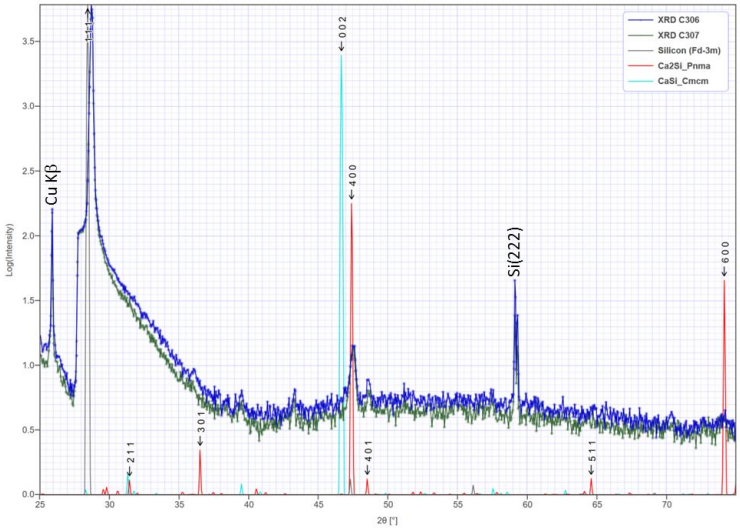


Рис. 4. Спектры рентгеновской дифракции для образцов С-306 и С-307 со вставленными положениями отдельных пиков решеток Ca_2Si (Pnma) и CaSi (Cmcm), а также кремния (Fd-3m).

3. Conclusions

Разработан метод формирования затравочного слоя Ca_2Si через двумерный жертвенный слой Mg_2Si на Si(111), установлена оптимальная температура (250 °C) трансформации Mg_2Si в Ca_2Si и выращены эпитаксиальные пленки Ca_2Si при температуре 250°C толщиной до 220 нм. Промоделированы картины ДМЭ и определены условия сопряжения на двух границах раздела: $Mg_2Si(111)||Si(111)$ и $Ca_2Si(010)||Mg_2Si(111)$ и установлены ячейки сверхструктурного совпадения двух силицидов и кремния. По данным оптической и КРС спектроскопии подтверждено формирование Ca_2Si, установлены КРС- и ОС-активные фононы и показано, что напряженные слои Ca_2Si являются узкозонным (0.46±0.02 эВ) и прямозонным полупроводником. Методом рентгеновской дифракции и моделирования установлено, что основной фазой в эпитаксиальных пленках является Ca_2Si с эпитаксиальной ориентацией относительно подложки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00123_а). Оптические исследования проведены при поддержке ИАПУ ДВО РАН (бюджетное финансирование).

1. Zaitsev, V.K., Fedorov, M.I., Eremin, I.S., Gurieva, E.A. / ed. By D.M. Rowe. Thermoelectrics Handbook Macro to Nano, 2006.

2. Manfrinetti, P. The phase diagram of the Ca–Si system / P. Manfrinetti, M.L. Fornasini, A. Palenzona // Intermetal. – 2000. – V. 8. – 223-228.

3. Hu, J. Optical and electronic properties of M_2Si (M = Mg, Ca, Sr) grown by reactive deposition technique / J. Hu, A. Kato, T. Sadoh, Y. Maeda, K.N. Galkin, T.V. Turchin, N.G. Galkin, H. Tatsuoka // Int. J. Mod. Phys. B. – 2010. – V. 24. – P. 3693-3699.

4. Dotsenko, S.A. Growth, optical and electrical properties of Ca2Si film growth on Si(111) and Mg2Si/Si(111) substrates / S.A. Dotsenko, D.V. Fomin, K.N. Galkin, D.L. Goroshko and N.G. Galkin // Physics Procedia. – 2011. – V. 11. – 95-98.

5. Galkin, N.G. Conducting $CaSi_2$ transparent in infra-red / N.G. Galkin, S.A. Dotsenko, K. N. Galkin, D.B. Migas, V. O. Bogorodz, A.B. Filonov, V.E. Borisenko, I. Cora, B. Pécz, D.L. Goroshko, A.V. Tupkalo, E.A. Chusovitin, E.Y. Subbotin // J. Alloys and Compounds. – 2019. – V. 770. – 710-720.

6. Wirgen, C. Epitaxial silicide formation in the Mg/Si(111) system /C. Wirgen, J.N. Andersen, R. Nyholm, U.O. Karlsson // Surface Science. – 1993. – V. 289. -290-296.

7. Migas, D.B. Comparative study of structural, electronic and optical properties of Ca_2Si, Ca_2Ge, Ca_2Sn, and Ca_2Pb / D. B. Migas, L. Miglio, V. L. Shaposhnikov and V. E. Borisenko // Physical Review B. – 2003. – V. 67. – P. 205203.

8. Galkin, K.N. The model of the magnesium silicide phase ($\sqrt{3}x\sqrt{3}$)-R30° on Si(111) / K.N. Galkin, M. Kumar, S.M. Shivaprasad, N.G. Galkin // Physics Procedia. - 2011. – V. 11. – P. 47-50.

9. Tani, J.-I. Investigation of structural, elastic, and lattice-dynamical properties of Ca_2Si, Ca_2Ge, and Ca_2Sn based on first-principles density functional theory / J.-I. Tani, H. Kido // Comput. Mater. Science. – 2015. – V. 97. – P. 36-41.

УДК 621.3383.52 / 621.327.2

ПОЛУПРОЗРАЧНЫЕ И ПРОВОДЯЩИЕ ПЛЕНКИ МОНОСИЛИЦИДА И ДИСИЛИЦИДА КАЛЬЦИЯ НА КРЕМНИИ ДЛЯ КРЕМНИЕВОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Н.Г. Галкин. К.Н. Галкин
Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток)
galkin@iacp.dvo.ru

SEMI-TRANSPARENT AND CONDUCTIVE FILMS OF CALCIUM MONOSILICIDE AND DISILICIDE ON SILICON FOR SILICON OPTOELECTRONICS

N.G. Galkin and K.N. Galkin
Institute of Automation and Control Processes FEB RAS (Vladivostok)
galkin@iacp.dvo.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.77-88

1. Введение

Силициды кальция как экологически чистые материалы занимают особое место среди силицидов различных металлов, в том числе и щелочноземельных металлов. Это связано в первую очередь с широким набором свойств силицидов кальция от полупроводниковых [1, 2], до металлических и полуметаллических [3-5]. Это может привести к их широкому использованию: (1) в энергетике и аэрокосмической технике как хороших термоэлектриков [6], (2) в электронике – как полупроводниковых соединений с различной шириной запрещенной зоны (Ca_2Si [1, 7] и Ca_3Si_4 [2]) и перспективных в качестве фотодетекторов или даже полупрозрачных проводящих сред ($CaSi_2$ [8]) и совместимых с кремниевой планарной технологией, и (3) как сред для хранения водорода (Ca_2Si [9], Ca_2SiH_x [10]). Столь широкий спектр свойств и возможных применений связан с тонкой подстройкой электронной структуры силицидов кальция при увеличении концентрации кремния и изменения доли ковалентной и ионной связи в них за счет вовлечения в связь с кремнием d-электронов Ca [3, 4, 11-13].

Достаточно большое внимание было уделено эпитаксиальному росту $CaSi_2$ на Si(111) [8, 14-16] и двойным гетероструктурам на его основе [8, 17, 18], но пленкам CaSi и $CaSi_2$ на подложках Si(111) и Si(100) не уделено заметного внимания до настоящего времени. Это связано с тем, что в системе Ca-Si существует 6 силицидов [19] с небольшой разницей в энергии формирования силицидов кальция различного состава [20-22], а также – с влиянием рассогласования кристаллических решеток силицидов кальция при росте в виде пленок [18, 23]. Это приводит к росту смеси фаз на кремнии, что осложняет их эпитаксиальный рост, а также – их использование для практических целей и построения приборных структур.

В данной работе основное внимание будет уделено силицидам кальция (CaSi и $CaSi_2$) с полуметаллическими свойствами и частичной прозрачностью в ближнем и среднем ИК-диапазоне. Будут представлены структура, оптические и электрические свойства пленок, включая эпитаксиальные, на подложках Si(111) и Si(100). На основе анализа свойств выращенных пленок будут предложены виды приборных структур, в которых они могут быть использованы.

2. Эксперимент

Рост пленок силицида Ca проводился в сверхвысоковакуумной (СВВ) камере установки OMICRON Compact с базовым вакуумом $1 \cdot 10^{-10}$ Торр. Камера СВН была оснащена источниками суб-

лимации ячеек Si и Кнудсена для осаждения Ca и Mg, анализаторами ДМЭ и ЭОС/ХПЭЭ и кварцевым датчиком толщины. Пленки силицида Ca выращивали путем совместного осаждения Ca и Si или осаждения Ca на подложки Si(100) и Si(111) при различных температурах от 190 до 500 ^{o}C. Прямоугольные полоски FZ Si(111) или Si(100) (4,6x12 мм^2) p-типа с удельным сопротивлением соответственно 2000 Ом·см и 45 Ом·см, соответственно, использовались как подложки и/или источники сублимации кремния. В качестве испарительного источника Ca с нагревом постоянным током использовали Ta-пробирку с небольшим количеством Ca (около 100 мг). В обоих образцах скорости осаждения Ca и Si, откалиброванные по кварцевому датчику толщины, составляли (2,5-5,5) нм/мин и (0,8-1,5) нм/мин, соответственно, в разных экспериментах. Шесть образцов с моно- и дисилицидными пленками Ca были выращены методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и реактивной эпитаксии (РЭ) при различных температурах и дополнительном (иногда) отжиге. После выгрузки образцов из СВВ камеры морфология поверхности пленок силицида Ca и ее структура, а также оптические и электрические свойства выращенных пленок были исследованы с использованием методов, описанных в [8, 18, 24].

3. Результаты и обсуждения

Морфология, состав и структура пленок силицидов кальция в образцах *A – F* исследованы нами ранее методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской дифракции (РД) в работах [8, 18, 24]. Установлено, что при температуре 330°C (образец A) на подложке Si(100) формируется смесь двух фаз Ca_2Si и CaSi [24]. Поскольку рост осуществлялся методом МЛЭ, то пленка имеет небольшую среднеквадратичную шероховатость (3.12 нм) по данным АСМ, что связано с небольшим массопереносом кремния и началом кристаллизации силицида кальция в объеме пленки, а не от границы раздела с кремнием. Изменение ориентации подложки на Si(111) и МЛЭ-рост при температурах: 190 ^{o}C (образец *D*) и 320°C (образец *E*) привели к преимущественному росту нанокристаллов CaSi(100) параллельно плоскости Si(111) и отсутствию вклада от Ca_2Si, но кристаллизация от подложки также не наблюдалась. При температуре 500°C был проверен МЛЭ-рост на поверхности (111) кремния. В обоих образцах (*B* и *C*) кристаллизация с эпитаксиальным соотношением CaSi(010)/Si(001) происходила от границы раздела, а в приповерхностной области происходило обогащение состава смеси кальцием, и кристаллизовался слой $CaSi_2$(1-20) поверх слоя CaSi(010). Последний факт подтверждался наблюдением картин ДМЭ от $CaSi_2$(010)1x1 для образцов *B* и *C*. Наилучшее сопряжение наблюдалось при росте $CaSi_2$ на подложке Si(111) при температурах 400-900°C [14-16], в том числе оно подтвердилось в наших экспериментах при росте методом РЭ при температуре 500°C (образец F): hR6-$CaSi_2$ (001)/ Si(111).

Проведем сравнительный анализ оптических свойств пленок $CaSi_2$ и CaSi с учетом их реальной структуры и количества формируемых кальциевых силицидных фаз. На рис. 1 представлены спектры отражения в диапазоне от 0.05 эВ до 6.5 эВ и спектры пропускания образцов, выращенных при умеренных температурах до 330°C (рис. 1, а) и при температуре 500°C (рис. 1, в). Видно, что спектры пропускания образцов с пленками силицидов кальция характеризуются ограниченной областью прозрачности от 0.1 эВ до 1.2 эВ, где высокоэнергетическая граница определяется началом фундаментального перехода в кремнии. Спектры отражения образцов двух серий также отличаются в области высокоэнергетических переходов (рис. 1, а, в). Образцы первой серии имеют основной пик отражения при 2.1 эВ, после которого наблюдается уменьшение коэффициента отражения. Образцы второй серии имеют колоколообразный спектр отражения с 4 пиками при 2.1, 2.7, 3.5 и 4.5 эВ. Следовательно, пленки относятся к разным силицидным фазам. Первый тип спектра отражения в соответствии с данными структурных исследований отнесем к CaSi, а второй спектр – к $CaSi_2$. Замечено, что при близких толщинах пленки в низкотемпературных образцах (*A*, *D*, *E*) с основным вкладом от CaSi имеют более высокую прозрачность (рис. 1 а), чем пленки в высокотемпературных образцах (*B*, *C*, *F*) с основным вкладом от hR6-$CaSi_2$ (рис. 1 в).

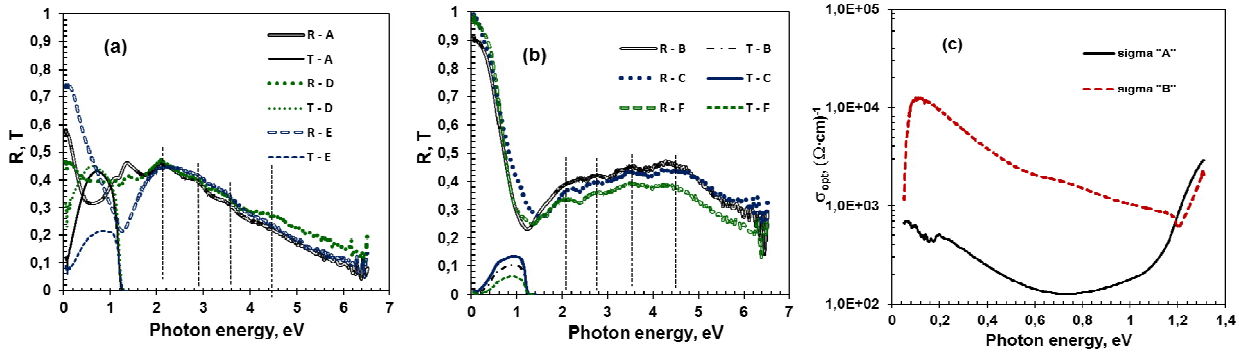


Рис. 1. Спектры пропускания (T) и отражения (R) для серии низкотемпературных образцов (A, D, E) (a) и высокотемпературных образцов B, C, F) (b). Рассчитанные для образцов A и B зависимости оптической проводимости в пленках от энергии фотонов (c).

Используя модель двухслойной структуры [25], были проведены расчеты всех основных оптических функций для двух пленок в образцах *A* и *B*, относящихся к разным сериям. На основе этих данных была рассчитана оптическая проводимость [25] для каждой пленки (рис. 1, c). Видно, что пленка (CaSi) в низкотемпературном образце имеет минимум оптической проводимости при 0.7 эВ. При энергиях ниже 0.7 эВ наблюдается увеличение оптической проводимости, связанное с поглощением на свободных носителях, которые поступают из «карманов» в зонной энергетической структуре CaSi около уровня Ферми [12], характерной для полуметаллов. В пленке hR6-$CaSi_2$ высокотемпературного образца при энергиях ниже 1.2 эВ наблюдается постепенный рост оптического поглощения до 0.08 эВ с последующим его снижением при меньших энергиях (рис. 1, c). Это также связано с концентрацией носителей в «карманах» в зонной энергетической структуре $CaSi_2$ около уровня Ферми [8,12]. В целом оптическая проводимость в пленке образца *B* (hR6-$CaSi_2$) превышает в 20-30 раз проводимость в пленке образца *A* (CaSi), в области энергий фотонов ниже 1 эВ, что свидетельствует о большей концентрации носителей около уровня Ферми в hR6-$CaSi_2$. При этом в ИК-области спектра сохраняется частичная прозрачность за счет умеренного коэффициента поглощения ($5\cdot10^3 – 5\cdot10^4$ см$^{-1}$ [8,24]), что связано по данным теоретических расчетов из первых принципов с малыми величинами дипольных матричных элементов при межзонных переходах через уровень Ферми [8].

Проведем анализ электрической проводимости пленок и сравним эти данные с их оптической проводимостью. На рис. 2 представлены зависимости удельной проводимости, концентрации основных носителей (электронов) и их подвижности для пленок в образцах *A*, *B* и *E*. Пленки в образцах *A* и *E* относятся к низкотемпературной группе с преимущественным вкладом CaSi, а образец *B* – имеет в качестве основной фазы hR6-$CaSi_2$. Во всех пленках основными носителями во всем температурном диапазоне 7-300 К были электроны, что свидетельствует о большей плотности состояний в «карманах» с электронной проводимостью, чем с дырочной, как предполагалось по данным теоретических расчетов [8, 12]. В пленке образца *A* (состав CaSi+Ca_2Si) практически отсутствовала температурная зависимость проводимости до 50 К, что связано разнонаправленными зависимостями концентрации электронов и подвижности электронов с понижением температуры. В пленке образца *E* (CaSi) наблюдалось некоторое повышение проводимости с понижением температуры и более слабое уменьшение концентрации электронов (с $2\cdot10^{18}$ см$^{-3}$ до $5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$) с понижением температуры (рис. 2, в). Дальнейшее немонотонное уменьшение (увеличение) проводимости в обоих образцах с понижением температуры может быть связано как с частичным шунтированием подложкой (ниже 25 К), так и с блокированием при температурах 50-25 К выхода электронов из нанокристаллов CaSi в аморфную матрицу за счет барьера между ними, а также с неоднофазностью системы (присутствует фаза Ca_2Si). Для образца *B* не наблюдалось такой немонотонной зависимости проводимости (рис. 2, а). Величина удельной проводимости слабо возрастала до 50 К и затем насыщалась. Это коррелирует со слабыми температурными зависимостями концентрации электронов ($1.8\cdot10^{20} – 1.2\cdot10^{21}$ см$^{-3}$, рис. 2, в) и их подвижности (126 – 600 см^2/В·сек, рис. 2, с) в широком диапазоне температур 300 – 50 К. Величины из-

меренной удельной проводимости и рассчитанной оптической проводимости близки по порядку величины для обоих типов пленок. По абсолютной величине проводимость пленок CaSi примерно на один порядок меньше проводимости пленок hR6-$CaSi_2$ при сопоставимых толщинах.

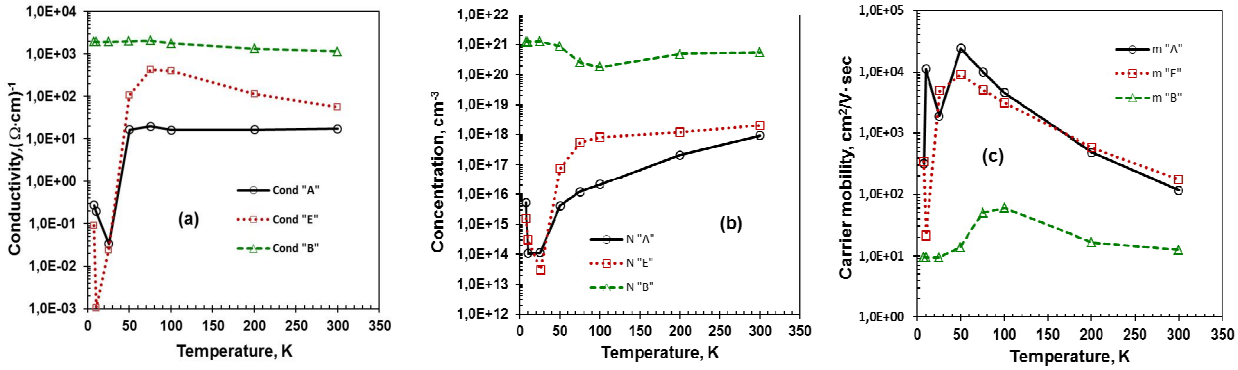


Рис. 2. Температурные зависимости удельной проводимости (а), концентрации основных носителей (электронов) (в) и их подвижности (с) в образцах *A*, *B* и *E*.

Эпитаксиальные пленки $CaSi_2$ являются более проводящими по сравнению с нанокристаллическими пленками с составом CaSi за счет высокой и практически независимой от температуры концентрации свободных электронов около уровня Ферми в зонной структуре полуметалла [8, 12], но и поглощение света в них более значительное. Известно [15], что на n-типе кремния высота барьера Шоттки $CaSi_2$/Si-n составляет 0.25 эВ, а на кремнии p-типа проводимости она равна 0.82 эВ. Поэтому первым применением может быть создание фотодиодов на основе эпитаксиальной пленки $CaSi_2$ и Si p-типа проводимости с границей внутреннего фотоэффекта около 1.5 мкм, а барьер $CaSi_2$/Si-n может быть использован в качестве омического контакту к кремнию n-типа проводимости при дополнительном легировании и увеличении концентрации в нем электронов.

Второе применение это создание полупрозрачных и проводящих контактных площадок к солнечным элементам на основе Si p-n перехода (контакт к n-слою кремния) или его модификаций. Необходимо выбрать толщину пленки $CaSi_2$ не более 50 нм, чтобы обеспечить примерно 30-40% пропускание света к ниже лежащим структурам, как в ИК области света, так и частично в видимой до 2.5 – 3.0 эВ. При энергиях фотонов менее 0.4 эВ коэффициент отражения резко возрастает более 80%, что позволит отражать большую часть падающего среднего и дальнего ИК-излучения.

Для уменьшения коэффициента отражения в видимой части спектра и увеличения светового потока в солнечную батарею, можно использовать создание профилированной поверхности до роста на ней дисилицида кальция. Удельное сопротивление слоя составляет менее $7 \cdot 10^{-4}$ $(Ом \cdot см)^{-1}$, что соответствует с учетом размеров площади пленки слоевому сопротивлению 26-40 Ом/кв. Поскольку слоевое сопротивление уменьшается при гелиевых температурах, то такие солнечные элементы могут использоваться на земле и в космосе. С учетом того, что дисилицид кальция обладает ограниченной окислительной стойкостью, то его необходимо закрывать тонким слоем легированного поликристаллического кремния n-типа в едином ростовом процессе толщиной не более 10 нм. В этом случае пленки $CaSi_2$ являются конкурентом прозрачного и проводящего контакта на основе смеси высоколегированного оксида индия и оксида олова (ITO), который является дорогостоящим материалом и требует специального легирования и многоступенчатых отжигов. ITO контакты также не могут быть использованы при низких температурах, поскольку их ионная проводимость уменьшается на несколько порядков по величине.

3. Выводы

Для исследования взаимосвязи структуры, оптических и электрических свойств выращены пленки CaSi и $CaSi_2$ с различной степенью кристалличности: от нанокристаллических до эпитаксиальных.

Установлено, что пленки силицида кальция, выращенные методом МЛЭ при температурах 300-330°С, являются однородной смесью аморфного и нанокристаллического CaSi на подложке Si(111), а в случае МЛЭ роста при тех же температурах на подложке Si(100) в них наблюдается добавление нанокристаллической фазы Ca_2Si. При росте методом МЛЭ (Т= 500°С) на поверхности Si(100)2x1 происходит эпитаксиальный рост CaSi(010) от подложки, а на поверхности пленки наблюдается гетероэпитаксиальный рост hR3-$CaSi_2$(1-20) на CaSi(010). Гетероэпитаксиальный рост $CaSi_2$ наблюдается на подложке Si(111) при 500 ^oC в процессе осаждения атомов кальция, что приводит к реализации другого эпитаксиального соотношения: hR6-$CaSi_2$(001)/Si(111). Исследование спектров отражения и пропускания выращенных пленок показало, что пленки CaSi и $CaSi_2$ имеют область частичной прозрачности в диапазоне энергий фотонов 0.4-1.2 эВ, что связано с их полуметаллическими свойствами и фиксированной концентрацией носителей около уровня Ферми. Более высокая прозрачность пленок CaSi определяется меньшей в них концентрацией свободных электронов. Пленки $CaSi_2$ характеризуются концентрацией свободных электронов около 10^{21} $см^{-3}$ в диапазоне температур 7-300 К, высоким отражением (80-90%) в области энергий фононов менее 0.4 эВ, малым слоевым сопротивлением и частичной прозрачностью в области энергий фотонов 0.4 – 3.0 эВ при толщинах до 50нм. Это позволяет использовать пленки $CaSi_2$ в качестве высоко проводящих и частично прозрачных контактов к солнечным элементам на основе кремния, а также в качестве материала для ИК-фотодиодов с барьером Шоттки $CaSi_2$/Si-p. что приводит к снижению удельной проводимости на один порядок по величине по сравнению с пленками $CaSi_2$ при комнатной температуре и резкому ее снижению при глубоком охлаждении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-02-00123_а) и бюджетного финансирования ИАСР ДВО РАН по спектроскопии комбинационного рассеяния света.

---

1. Lebegue, S. Calculated quasiparticle and optical properties of orthorhombic and cubic Ca_2Si / S. Lebegue, B. Arnaud, M. Alouani //, Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 085103.

2. Migas, D.B. New semiconducting silicide Ca_3Si_4 / D.B. Migas, V.L. Shaposhnikov, A.B. Filonov, N.N. Dorozhkin, V.E. Borisenko // J. Phys. Cond. Matt. – 2007. – V. 19. – P. 346207.

3. Bisi, O. Chemical bond and electronic states in calcium silicides: Theory and comparison with synchrotron-radiation photoemission / O. Bisi, L. Braikovich, C. Carbone, I. Lindau, A. Iandelli, G.L. Olcese, A. Palenzona // Phys. Rev. B. – 1989. – V. 40. – P. 10194.

4. Fahy, F. Electronic and structural properties of $CaSi_2$ / S. Fahy, D.R. Hamann // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 41. – P. 7587-7593.

5. Affronte, M. Low temperature properties of calcium mono- and disilicides / M. Affronte, O. Laborde, G.L. Olsece, A. Palenzona // J. Alloys and Compounds. – 1998. – V. 274. – P. 68-75.

6. Tani, J. Investigation of structural, elastic, and lattice-dynamical properties of Ca_2Si, Ca_2Ge, and Ca_2Sn based on first-principles density functional theory / J. Tani, H. Kido // Comput. Mater. Sci. – 2015. – V. 97. –P. 36-43.

7. Imai, Y. Electronic structures of semiconducting alkaline-earth metal silicides / Y. Imai, A. Watanabe, M. Mukaida // J. Alloys and Compounds. – 2003. – V. 358. – P. 257-263.

8. Galkin, N.G. Conducting $CaSi_2$ transparent in infra-red / N.G. Galkin, S.A. Dotsenko, K. N. Galkin, D.B. Migas, V. O. Bogorodz, A.B. Filonov, V.E. Borisenko, I. Cora, B. Pécz, D.L. Goroshko, A.V. Tupkalo, E.A. Chusovitin, E.Y. Subbotin. // J. Alloys and Compounds. – 2019. – V. 770. – P. 710-720.

9. Wu, H. Structure and hydrogenation properties of the ternary alloys $Ca_{2-x}Mg_xSi$ ($0 \le x \le 1$) / H. Wu, W. Zhou, T.J. Udovic, J.J. Rush // J. Alloys and Compounds. – 2007. – V. 446-447. – 101-105.

10. Wu, H. Hydrogen Storage In A Novel Destabilized Hydride System, Ca_2SiH_x: Effects of Amorphization / H. Wu, W. Zhou, T.J. Udovic, J.J. Rush // Chem. Mater. – 2007. – V. 19. – P. 329-334.

11. Sarma, D.D. Electronic structure of CaSi and $CaSi_2$ / D.D. Sarma, W. Speier, L. Kumar, C. Carbone, A. Spinsanti, O. Bisi, A. Iandelli, G. L. Olcese, A. Palenzona // Z. Phys. Cond. Matt. – 1988. – V. 71. – P. 69-74.

12. Yang, Z. First-principle studies of Ca–X (X=Si,Ge,Sn,Pb) intermetallic compounds / Z. Yang, D. Shi, B. Wen, R. Melnik, S. Yao, T. Li // J. Sol. St. Chem. – 2010. – V. 183. – P. 136-143.

13. Kurylyshyn, I.M. Probing the Zintl–Klemm Concept: A Combined Experimental and Theoretical Charge Density Study of the Zintl Phase CaSi / I.M. Kurylyshyn, T.F. Fassler, A. Fischer, C. Hauf, G. Eickerling, M. Presnitz, W. Scherer // Angew. Che. Int. – 2014. – V. 53. – P. 3029-3032.

14. Morar, J.F. Metallic $CaSi_2$ epitaxial films on Si(111) / J.F. Morar, W. Wittmer, Phys. Rev. B. – 1988. – V. 37. – P. 2618-2623.
15. Wurz, J.F. Solid-phase epitaxy of $CaSi_2$ on Si(111) and the Schottky-barrier height of $CaSi_2$/Si(111) / R. Wurz, M. Schmidt, A. Schopke, W. Fuhs // Appl. Surf. Sci. – 2002. – V. 190. – P. 437.
16. Vogg, G. From $CaSi_2$ to siloxene: epitaxial silicide and sheet polymer films on silicon / G. Vogg, M.S. Brandt, M. Stutzmann, M. Albrecht // J. Crystal Growth. – 1999. – V. 203. – P. 570-581.
17. Galkin, N.G. Formation and optical properties of semiconducting thick Ca silicide films and Si/CaxSi/Si heterostructures on Si(111) substrate / N.G. Galkin, D.A. Bezbabnyi, K.N. Galkin, S.A. Dotsenko, E. Zielony, R. Kudrawiec, J. Misiewicz // Phys. St. Sol. C. – 2013. – V. 10. – P. 1819-1823.
18. Galkin, N.G. Epitaxial relations, crystalline structure and defects in the double Si(111)/hR6 $CaSi_2$/Si(111) heterostructures / N.G. Galkin, S.A. Dotsenko, K. N. Galkin, L. Dózsa, I. Cora, B. Pécz // JJAP Conf. Proc. – 2017. – V. 5. – P. 011403.
19. Manfrinetti, P. The phase diagram of the Ca–Si system / P. Manfrinetti, M.L. Fornasini, A. Palenzona // Intermetallics – 2000. – V. 8. – P. 223-228.
20. Wen, C. Phase selection during calcium silicide formation for layered and powder growth / C. Wen, A. Kato, T. Nonomura, H. Tatsuoka, J. // Alloys and Compounds. – 2001. – V. 509. – P. 4583.
21. Imai, Y. Energetics of alkaline-earth metal silicides calculated using a first-principle pseudopotential method / Y. Imai, A. Watanabe // Intermetallics. – 2002. – V. 10. – P. 333-337.
22. Li, X.D. Structural, electronic, elastic, and thermodynamic properties of CaSi, Ca2Si, and CaSi2 phases from first-principles calculations / X.D. Li, C.H. Wei, W.D. Han, N.G. Zhou, Physica B: Cond. Matt. – 2018. – V. 538. – P. 54-61.
23. W.B. Pearson, A handbook of Lattice Spacing and Structure of Metals and Alloys. – New York: Pergamon Press, 1958.
24. Galkin. N.G. Comparison of the structural, optical and thermoelectrical properties of Ca silicide films with variable composition on Si substrates / Galkin, N.G. N.G. Galkin, K.N. Galkin, I.M. Chernev, D.L. Goroshko, E.A. Chusovitin, A.V. Shevlyagin, A.A. Usenko, V.V. Khovailo // Defect and Diffusion Forum. - 2018. – V. 386. – P. 3-8.
25. Galkin, N.G. Optical and photospectral properties of $CrSi_2$ A-type epitaxial films on Si(111) / N.G. Galkin, A.M. Maslov, A.V. Konchenko // Thin Solid Films. – 1997. – V. 311. – P. 969-972.

УДК 535.34

РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ В ПОЛЫХ ЧАСТИЦАХ ОКСИДА ЦИНКА, ИНДУЦИРОВАННЫЕ ВОЗДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРОТОНОВ

А.Н. Дудин, В.В. Нещименко
Амурский государственный университет (г.Благовещенск)
andrew.n.dudin@gmail.com

RADIATION DEFECTS IN HOLLOW PARTICLES OF ZINC OXIDE, INDUCED BY EXPOSURE TO LOW-ENERGY PROTONS

A.N. Dudin, V.V. Neshchimenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
andrew.n.dudin@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.82-86

Порошки на основе оксида цинка (ZnO) обладают разнообразными электрическими, оптическими, люминесцентными, фотоэлектронными и каталитическими свойствами, а также широким рядом потенциальных применений. Высокая актуальность, данного материала, связана с большой шириной запрещенной зоны и стабильной структурой обеспечивающей относительно высокую фото- и радиационную стойкость. Особый интерес вызывает применение данного материала в качестве пигментов терморегулирующих покрытий (ТРП) космических аппаратов [1, 2].

Как и другие пигменты ТРП, порошки оксида цинка подвержены воздействию различных видов космического излучения. Возникающие при облучении, различного рода дефекты кристаллической решетки ведут к уменьшению отражающей способности и к увеличению интегрального коэффициента поглощения. Определение типов наведенных радиационных дефектов и их концентраций для различных конфигураций частиц оксида цинка, является весьма актуальной задачей, связанной с ТРП.

Метод Монте-Карло, используемый в система библиотек GEANT4 [3], является одним из самых эффективных способов моделирования прохождения частиц через вещество. Применения данного метода, дает возможность с высокой точностью оценить траекторию частицы, потерю энергии на каждом шаге моделирования и проектировать изделия космической техники с проведения меньшего количество лабораторных экспериментов и натурных испытаний.

Целью настоящей работы является анализ спектров наведенного поглощения полых частиц ZnO, а также сравнение результатов с расчётными данными полученными в программном комплексе GEANT4.

Полые частицы ZnO получены гидротермическим методом из раствора, содержащего 2,5 моля $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$, 1 моль деионизированной воды и 7,5 моля NH_4HCO_3, который был перелит в автоклав с тефлоновым стаканом и нагрет до 180 ^oC со временем выдержки 15 часов [4]. После синтеза порошки были промыты спиртом, высушены при 60 ^oC на воздухе и термообработаны при температуре 650°C. Морфологию поверхности анализировали на РЭМ Helios NanoLab 660.

Облучение осуществляли протонами с энергией 100 кэВ, флюенс $5 \cdot 10^{15}$ $см^{-2}$, плотностью потока $1 \cdot 10^{12}$ $см^{-2}с^{-1}$, в вакууме $5 \cdot 10^5$ Па. Аналогичные значения величин задавались в GEANT4. Интегральный коэффициент поглощения рассчитывали в соответствии со стандартами ASTM (E490-00a и E903-96).

Моделирование производилось в программном комплексе GEANT4, где были построены полые частицы диаметром 1000 нм с формой сферы и толщиной стенки 50 нм. Построенные геометрические формы помещались в вакуум мирового объема, размером в 2 мкм. Для генерации пучка протонов с энергией 100 кэВ используется общий источник частиц. Процесс взаимодействия частиц с мишенью описывается гауссовым распределением. Пороговая энергия смещения для атомов ZnO имела значение − 57 эВ. Регистрация рожденных частиц осуществлялась на всем протяжении мирового объема.

При моделировании учитывались процессы используемы в наборе физики QGSP_BIG_EMY, включающие в себя: ионизацию среды, множественное рассеивание, упругое и неупругое рассеивание адронов, тормозное излучение и т.д.

Расчет концентрации центров поглощения производился на основании формулы Смакулы-Декстера [5]:

$$N = A\frac{n}{\left(n^2+2\right)^2}K_m \Delta E f^{-1}, \qquad (1)$$

где n – показатель преломления ZnO; K_m – максимальный коэффициент поглощения ($см^{-1}$); ΔE – полуширина полосы (эВ); f – сила осциллятора (принимаемая за единицу); за числовой коэффициент A принято значение $0{,}96 \cdot 10^{17}$, учитывающие используемые при разложении 20% лоренцовой и 80% гауссовой формы полосы поглощения.

Сила осциллятора f согласно [5], определяется по формуле:

$$f = \frac{2}{3}\frac{m_e x^2 \omega}{\hbar^2}, \qquad (2)$$

где m_e – масса электрона; $\hbar^2$ – редуцированная постоянная Планка; x – координата электрона в системе; ω – энергия уровней перехода.

Согласно основной теореме Томаса-Рейхе-Куна [6] о сумме сил осцилляторов, имеем $f = 1$ (для многих сильно окрашенных соединений). В общем случае сила осциллятора принимает значения $0,1 < f \leq 1$.

Концентрация дефектов по Френкелю, рассчитанная в GEANT4, определялась с помощью модифицированной формулы Кинчина-Пиза [7]:

$$FP \sim E_{dis} / 2,5E_d , \quad (3)$$

где E_d – пороговая энергия смещения; E_{dis} – диссипируемая энергия в ядерных столкновениях.

Из полученных на растровом электронном микроскопе изображений следует (рис.1.А), что при синтезе гидротермальным методом образуются полые частицы ZnO сферической формы размером от 500 до 2000 нм, часть из которых скреплена между собой. Выход частиц сферической формы составляет порядка 90%. Изображение аналогичной модельной частицы представлено на рис. 1.Б.

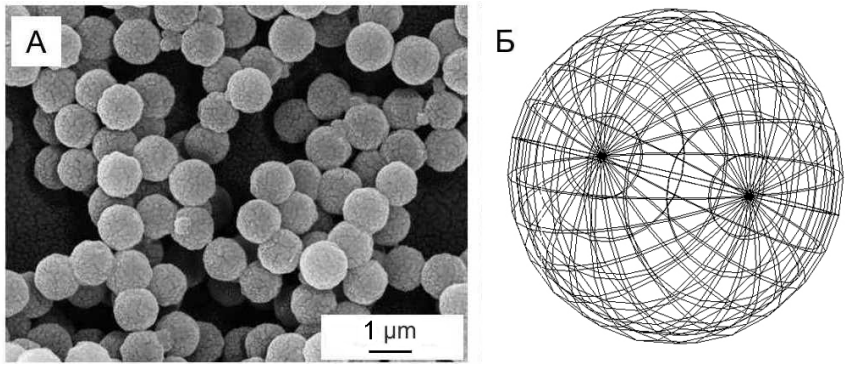


Рис. 1. РЭМ полых частицы ZnO (А) и модель аналогичной частицы в GEANT4 (Б).

Рентгеноструктурный анализ показал, что при синтезе полых частиц ZnO регистрируются пики, относящиеся к структуре вюрцит (*P63mc*), аморфные фазы отсутствуют. Изменения постоянных решеток связаны с различными растягивающими напряжениями, обусловленными дефектами упаковки и приводящими к неупругой деформации решётки [4]. Такие искажения происходят вдоль оси *a* [8].

Из спектров диффузного отражения, полученных на сканирующем двухлучевом спектрофотометре с двойным монохроматором Perkin Elmer Lambda 950, следует [9], что коэффициент отражения в УФ- и видимой областях достигает 90%. Отражательная способность порошков из объемных частиц выше, чем у полых порошков [9], в области длин волн от края основного поглощения и до ближней ИК-области. Меньшее значение коэффициента отражения полых частиц обусловлено высокой концентрацией собственных дефектов в кристаллической решетке наноструктурированных частиц.

Из спектров наведенного поглощения после облучения протонами ($\Delta\rho_\lambda = \rho_{\lambda 0} - \rho_{\lambda\Phi}$, где $\rho_{\lambda 0}$ и $\rho_{\lambda\Phi}$ - спектры диффузного отражения до и после облучения соответственно) с энергией 100 кэВ, флюенсом $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$ (рис.2) порошков полых частиц следует, что воздействие ионизирующего излучения создает центры окраски, полосы которых образуют сплошной спектр поглощения в УФ- и видимой областях. Для порошков ZnO характерны полосы поглощения с высокой интенсивностью в области от 2 до 3,2 эВ, в ближней ИК-области интенсивность полос незначительная.

Концентрация наведенных центров, из разложения спектров (рис.2), рассчитывалась по формуле (1). Помимо обозначенных дефектов (рис.2) относящихся к соответствующим пологам поглощения, также имеется наличие неидентифицированных полос 2,02, 1,76, 1,53, 1,4 эВ, а также регистрируются полосы вблизи энергий 1,65, 0,87, 0,8, 0,64 эВ, которые идентифицируются как полосы поглощения различных мод ОН-групп.

Из анализа спектров $\Delta\rho_E$ (рис.2) облученных протонами порошков оксида цинка с зернами микронных размеров с учетом известных значений энергии полос поглощения собственных дефектов, способных поглощать в данных диапазонах, следует, что основной вклад в поглощение вносят

междоузельные ионы цинка $Zn_i^{\cdot}$, связанная с ней пара $V_{Zn}^{\prime\prime}$-$Zn_i^{\cdot}$, кислородные вакансии $V_O^{\cdot\cdot}$, вакансии цинка $V_{Zn}^{\prime}$ и $V_{Zn}^{\prime\prime}$. Полосы поглощения в диапазоне энергий от 1 до 2 эВ имеют малую интенсивность. Эти полосы обусловлены междоузельным кислородом $O_i^{\prime}$ и O_i^X и вакансиями кислорода V_O^X. Помимо этого, в данной области наблюдается восстановление дефектов, т.е. отжиг возникших до облучения дефектов, связанных с неидеальной морфологией поверхности.

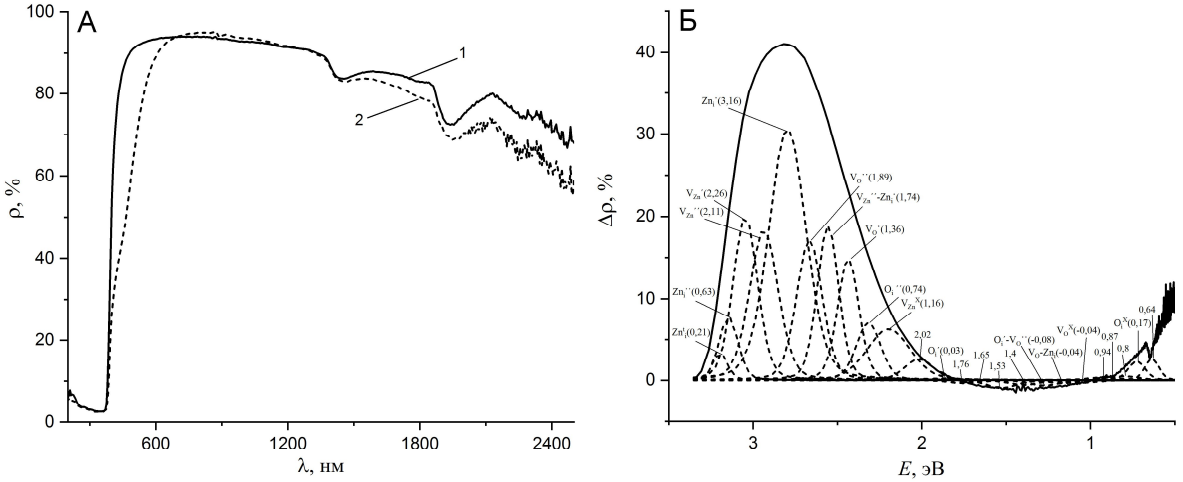


Рис. 2. Спектры диффузного отражения А (1 – до, 2 – после облучения) и наведенного поглощения Б полых частиц ZnO, разложенный на элементарные составляющие

В таблице представлены результаты численного моделирования воздействия протонов на полые частицы ZnO, построенные в комплексе GEANT4.

Результаты численного моделирования в комплексе GEANT4

Длина свободного пробега, Å	8,12
Количество первично-выбитый атомов	1345129
Средняя кинетическая энергия ПАВ, эВ	1,602
Концентрация пар Френкеля, $см^{-3}$	$17{,}76 \cdot 10^{17}$
Удельные потери энергии, МэВ*$см^2$/г	330,4

При анализе экспериментальных и расчетных данных, можно заметить соответствие концентраций образовавшихся дефектов по порядку величины у полых частиц оксида цинка. Суммарная концентрация дефектов, исходя из экспериментальных результатов, равна $17{,}7 \cdot 10^{16}$ $м^{-3}$, против $17{,}16 \cdot 10^{16}$ $м^{-3}$ из расчетной модели.

Повышенная радиационная стойкость к действию протонов полых частиц по сравнению с объемными частицами, вероятно, связана с тем, что в данных частицах вероятность образования радиационных дефектов в объеме сферических частиц мала из-за отсутствия материала внутри полой частицы. Такие структуры обладают малыми ионизационными потерями и высокой способностью к релаксации радиационных дефектов в тонком слое сферы.

Результаты выполненных исследований показали, что отражательная способность полых частиц ZnO во всей области спектра от 200 до 2500 нм меньше, чем у объемных частиц микронных размеров [9]. Причиной такого уменьшения является большая удельная поверхность полых частиц. Анализ экспериментальных и расчетных данных, демонстрирует соответствие концентрации образовавшихся дефектов по порядку величины.

1. Kiomarsipour, N., Razavia, R.S., Ghani, K. Improvement of spacecraft white thermal control coatings using the new synthesized Zn-MCM-41 pigment // Dyes and Pigments. – 2013. – V. 96. – P.403–406.

2. Singh, S.C. Zinc oxide nanostructures. synthesis, characterizations and device applications // Journal of Nanoengineering and Nanomanufacturing. – 2013. – V.3. – P.1-28.

3. Agostinelli, S., Allison, J., Amak, K., Apostolakis, J. et al. Geant4 – a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2003. – V.506. – P. 250.
4. Neshchimenko, V.V., Li, C.D., Mikhailov, M.M., Dudin, A.N. Effect of the Surface Morphology of Zinc Oxide Particles on their Radiation Stability // Physics and Technology of Nanostructured Materials IV. – 2018. – P. 338-342.
5. Dexter, D.L. Absorption of light by atoms in solids // Phys. Rev. – 1956. – V. 101B. – P. 48-55.
6. Давыдов, А.С. Квантовая механика. – М.: Наука, 2014. – С. 704.
7. Leroy, C., Rancoita, P. Principles of Radiation Interaction in Matter and Detection // World scientific publishing. – 2016. – P. 1344.
8. Kahoulia, M., Barhoumia, A., Bouzida, A. et al. Structural and optical properties of ZnO nanoparticles prepared by direct precipitation method // Superlattices and Microstructures. – 2015. – V.85. – P. 7-23.
9. Нещименко, В.В., Чундун, Ли, Михайлов, М.М. Деградация оптических свойств микро- и нанопорошков оксида цинка при облучении протонами и электронами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2019. –№ 1. – С.88-91.

УДК 549.67:537.226

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРИРОДНОГО КЛИНОПТИЛОЛИТА

С.В. Ланкин
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
svlankin@yandex.ru

ELECTRICAL PROPERTIES OF NATURAL CLINOPTILOLITE

S.V. Lankin
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
svlankin@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.86-89

Цеолиты – кристаллические водные алюмосиликаты, структура которых имеет однородные поры молекулярных размеров, вмещающие слабо связанные с каркасом различные катионы и молекулы воды. Вода может быть удалена при нагреве или вакуумировании цеолита, что мало влияет на алюмосиликатный жесткий каркас [2, 3, 9, 13, 15]. Передвижение слабо связанных катионов металлов и молекул воды в порах приводит к изменениям электрических свойств цеолита, которые полностью определяются онами металлов [2, 11].

Природные цеолиты выходят на первое место по востребованности среди полезных ископаемых. 70-е гг. прошлого столетия человечество вступило в «цеолитовый» век в связи с большой актуальностью проблемы всемирного оздоровления и охраны окружающей среды. Природные месторождения цеолитов не были хорошо известны. Поэтому мировая промышленность базировалась на их синтетических аналогах. В прошлом столетии высокая стоимость, небольшие объемы производства цеолитов определяли узкие области их использования (нефтехимическая промышленность). По целому ряду свойств [1, 5, 15] природные цеолиты (клиноптилолит, морденит) не уступают и превосходят синтетические, при стоимости в 20-100 раз меньшей. Исследования последних десятилетий показали, что природные цеолиты обладают хорошей адсорбцией, избирательностью, прочностью гранул, фильтрацией, регенерацией, каталитической активностью, низкой электропроводностью и теплопроводностью, большой удельной поверхностью и т.д. Цеолиты и цеолитоподобные регулярные диэлек-

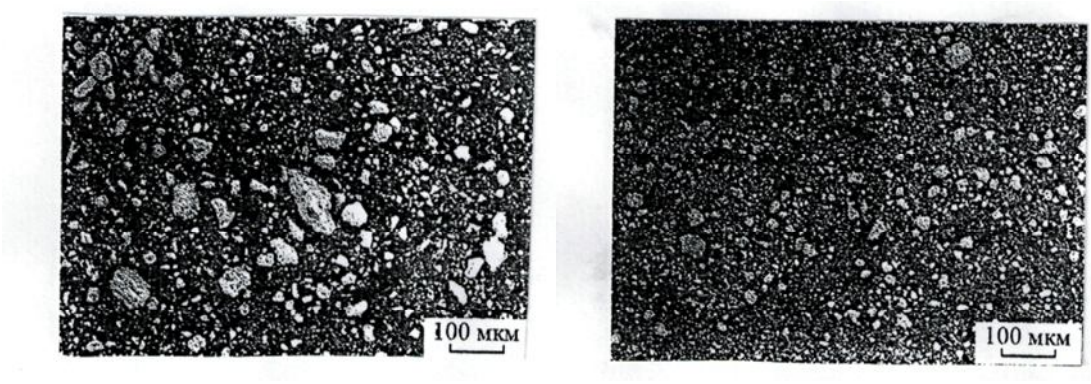
трические матрицы широко используются в химии, технике (газоанализатор с изменяющейся электропроводностью), в современной физике наноструктур для создания нанокомпозиционных материалов [1-5].

Целью данной работы являлось исследование электрических свойств (диэлектрическая проницаемость, электропроводность, тангенс угла диэлектрических потерь) природного клиноптилолита Вангинского месторождения Амурской области. Это исследование продиктовано необходимостью обнаружения корреляции между указанными свойствами и структурными изменениями при нагревании поликристаллических образцов, а также для углубления теоретических и практических представлений физических процессов.

В качестве исходного минерала применялся природный клиноптилолит Вангинского месторождения Амурской области [9-13]. Петрографические исследования показали, что основная масса цеолита представлена клиноптилолитом с примесью гейландита. Состав элементарной ячейки $(Na_{0,5}K_{1,5}Mg_{1,0}Ca_{2,0}Al_{8.,0}Si_{37,0}O_{90,0})21H_2O$. Усредненный химический состав клиноптилолита по атомно-адсорбционному анализу приведен в работах [8, 11, 12]. Цеолитовую породу измельчали в шаровой мельнице до удельной поверхности $5 \cdot 10^3$ м^2/кг. Затем отмывали от глинистых минералов гидрослюд, высушивали, модифицировали 0,5 М растворами NaCl в течение суток. Порошок клиноптилолита (гранулы класса 0,15-0,05 мм) прокаливались в печи в течение часа при температуре от 100 до 300°С и помещались в эксикатор для дегидратации. Для измерения микрокристаллы клиноптилолита прессовались с помощью гидравлического пресса при давлении 20 МПа в виде таблеток диаметром 10 мм и толщиной 2 мм. Измерения электрофизических характеристик образцов с графитовыми электродами на переменном токе проводились с помощью RLC – измерителя Е7-14 на частоте 1 кГц с использованием параллельной схемы замещения. Температурные зависимости ионной проводимости и емкости исследовались в динамическом режиме со скоростью от 2 до 3 градусов в минуту. Методика электрических измерений приведена в работах [11-13]. Общая экспериментальная погрешность не превышала 10%.

Гранулометрический анализ показал, что порошок цеолита имел широкий диапазон распределения частиц по размерам от 3,0 до 100 мкм. С увеличением времени механической обработки в мельнице происходят изменения среднего размера частиц порошка цеолита.

На рис. 1 приведены СЭМ – изображения поверхностей измельченных гранул клиноптилолита: *a* – порошок после механической обработки в течение 15 минут (средний размер зерна 50 мкм); *b* – порошок цеолита после механической обработки в течение 30 минут (средний размер зерна 30 мкм).



a *b*

Рис. 1. СЭМ-изображения: *a* – порошок цеолита после механической обработки 15 мин.; *b* – порошок цеолита после механической обработки 30 мин.

В результате механической обработки анализ показал, что большинство частиц потеряли первоначальную форму и преобразовались в частицы с формой, близкой к сферической. Некоторые гра-

нулы «слиплись». Дальнейшая механическая обработка (через 60 минут) привела к небольшому увеличению размера зерна, к росту удельной поверхности $20 \cdot 10^4$ м^2/кг, к изменению фазового состава, микроискажениям кристаллической решетки [6].

Температурная зависимость ионной проводимости гидратированного поликристаллического клиноптилолита (σ, мкСм/м) приведена на рис. 2 (кривая 2).

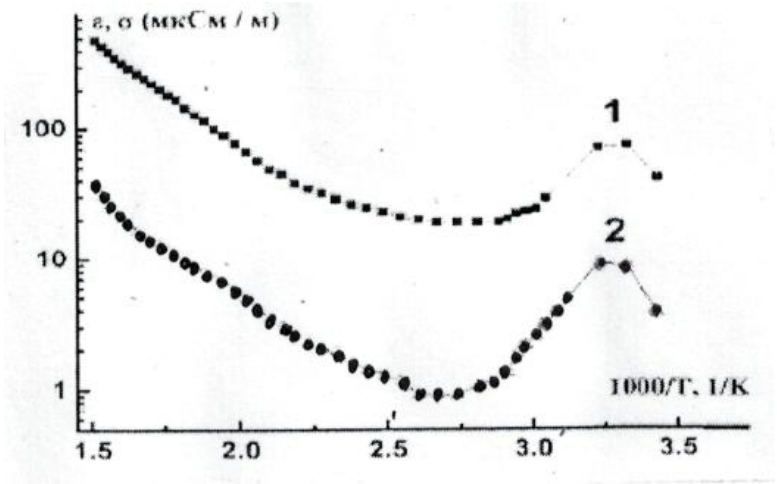


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости (1) и удельной проводимости (2) поликристаллического клиноптилолита на частоте 1 кГц.

Измерения были выполнены в атмосферных условиях. Как видно из рисунка, при нагревании электропроводность вначале возрастает, достигая максимума при температуре 340 К, затем заметно уменьшается и при температуре более 400 К – вновь увеличивается. Такой ход электропроводности можно объяснить тем, что для гидратированного клиноптилолита (морденита) специфично «двухфазное состояние» цеолитной воды. Одна часть молекул воды может свободно перемещаться в цеолитовых трехмерных порах (каналах), другая же – жестко связана с каркасом цеолита [7, 11, 13]. Связанные молекулы воды могут закупорить каналы и тем самым перекрыть путь к перемещению катионов. В клиноптилолите даже при температуре 380 К остается около 10% жестко связанной с каркасом воды. Полная дегидратация для клиноптилолита появляется в интервале температур 650-720 К. Поэтому можно предположить, что зависимость проводимости от температуры обусловлена устранением такой блокировки.

Зависимость действительной части диэлектрической проницаемости (ε) от температуры прессованного образца клиноптилолита на частоте 1 кГц, приведена также на рис. 2 (кривая 1). Обе кривые показывают аналогичные характерные особенности. Аррениусовые температурные зависимости кривых позволили оценить энергию активации ($E \leq 0{,}4$ эВ). Полученные значения энергии близки к литературным данным [7, 10, 13].

Зависимость тангенса угла диэлектрических потерь (tgδ) от температуры для исследуемых образцов клиноптилолита при частоте переменного тока 1 кГц представлена на рис. 3.

На рис. 3 кривая 1 отражает изменение tgδ в интервале температур 50-300°С для исходного (беспримесного) образца. Функциональная зависимость почти линейная, значение tgδ находится в интервале 0,1-0,15. Кривая 2 отражает изменение тангенса угла диэлектрических потерь с ростом температуры для примесных образцов (клиноптилолит + 1 вес. % нитрата висмута). Введение молекул соли висмута в поры матрицы цеолита можно рассматривать как наночастицы. Функциональная зависимость второй кривой нелинейная. Вблизи температур 250°С наблюдается резкий рост tgδ. Такую зависимость можно качественно объяснить выходом молекул воды из каркаса цеолита и разложением соли висмута, внедренных в поры матрицы клиноптилолита.

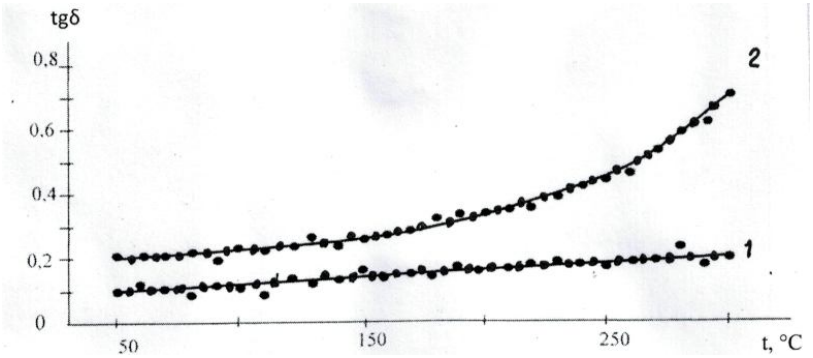


Рис. 3. Температурная зависимость тангенса угла диэлектрических потерь для поликристаллических образцов: 1 – клиноптилолит без примесей; 2 – клиноптилолит с содержанием нитрата висмута (1 вес. %).

В заключение можно отметить, что особенности температурных зависимостей диэлектрической проницаемости, ионной проводимости и тангенса угла диэлектрических потерь поликристаллического клиноптилолита связаны с характером выхода молекул воды из каналов матрицы цеолитов. Уменьшение размера зерна и увеличение удельной поверхности особенно на электрические свойства клиноптилолита не отражаются. Тангенс угла диэлектрических потерь показывает, что клиноптилолит является плохим изолятором. Для получения керамических изделий из этого класса природных цеолитов требуются дополнительные химические и физические исследования.

1. Fanda, X. Methodologies for shortening test period of coupled head-moisture transfer in building envelopes / X. Fanda, A.K. Athienitis, P.P. Fazio // Applied Thermal Engineering. – 2009. – V. 29. – P. 787-792.

2. Gottardi, G. Natural Zeolites / G. Gottardi, E. Galli // Berlin Springer Verlag. – 1985. – 409 p.

3. Korkina, O. Structural and physicochemical properties of natural zeolites: clinoptiololite and mordenite / O. Korkina, R. Leboda, Y. Skubiszewska-Zieba, T. Vrublevska, V.M. Gunko // Microporos and Mesoporos Materials. – 2006. – V. 87. – P. 243-254.

4. Lin, C.H. Evolving applications of zeolite molecular sieves / C.H. Lin, K.A. Dambrowitz, S.M. Kuznicki // The Canadian Journal of Chemical Engineering. – 2012. – V. 90. – № 2. – P. 207-216.

5. Zhou, C.H. Fundamental and applied research on clay minerals: From climate and environment to nanotechnology / C.H. Zhou, J. Keefing // Applied Clay Science. – 2013. – V. 74. – P. 3-9.

6. Бузимов, А.Ю. Влияние механической обработки на структуру и свойства природного цеолита // А.Ю. Бузимов, С.Н. Кульков, L.A. Gomze, R. Geber // Перспективные материалы. – 2018. – № 4. – С. 31-36.

7. Гусев, К.В. Оптические и электрические свойства морденита // К.В. Гусев, М.С. Иванова, Т.Г. Кастрюлина // Вестник Псковского государственного университета. – 2015. – № 6. – С. 125-133.

8. Евдокимова, В.А. Особенности электрических свойств природных цеолитов обогащенных нитратом висмута / В.А. Евдокимова, С.В. Ланкин // Научно-технический вестник Поволжья. – 2015. – № 1. – С. 14-18.

9. Евдокимова, В.А. Структурные изменения клиноптилолита в процессе его дегидратации / В.А. Евдокимова, С.В. Ланкин // Научно-технический вестник Поволжья. – 2015. – № 2. – С. 19-23.

10. Карачедов, Г.Р. Электропроводность натриевой формы цеолита А // Известия СО АН СССР. Сер. хим. наук. – 1985. – Вып. 6. – № 17. – С. 79-88.

11. Колесникова, Л.Г. Ионный перенос в клиноптилолите: монография / Л.Г. Колесникова, С.В. Ланкин, В.В. Юрков. – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2007. – 113 с.

12. Ланкин, С.В. Электрические методы исследования адсорбции ПАУ природным цеолитом // LAPLAMBERT Academic Publisching. – 2013. – 94 с.

13. Ланкин, С.В. Электропроводность клиноптилолита и его ионообменных форм / С.В. Ланкин, В.В. Юрков // Перспективные материалы. – 2006. – № 5. – С. 59-62.

14. Никишина, В.А. Влияние механической активации на свойства природных цеолитов / В.А.Никишина, А.Н. Стрелецкий, И.Н. Мешков, И.В. Колбанев // Неорганические материалы. –2011. – Т. 47, № 12. – С. 1470-1475.

15. Юрков, В.В. Цеолиты Амурской области / В.В.Юрков, С.В. Ланкин, С.В. Барышников // Вестник ДВО РАН. – 2004. – № 1. – С. 69-79.

УДК 544.723.2

АДСОРБЦИЯ МОЛЕКУЛ 3,4-БЕНЗПИРЕНА В ФУЛЛЕРИТОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

Т.А. Мередели на, С.В. Барышников
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
biofirm@mail.ru

ADSORPTION OF MOLECULES OF 3,4-BENZPYRENE IN FULLERITE COMPOUNDS

T.A. Meredeline, S.V. Baryshnikov
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
biofirm@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.90-92

Нарушения технологических режимов, использование низкокачественного топлива и сырья, экономия на природоохранных мероприятиях в условиях современного производства, приводят к увеличению объемов выбросов вредных ингредиентов в окружающую среду. Среди органических соединений, загрязняющих атмосферу, почвы и природные воды, особое место занимают ПАУ – полициклические ароматические углеводороды. Эти вещества относятся к супер-экотоксикантам 1 класса опасности, поскольку многие из них, обладают канцерогенными свойствами и способны к накоплению в природных объектах. В химической структуре ПАУ присутствуют от трех и более бензольных колец, установлено, что наиболее активны полициклические углеводороды с четырмя-шестью кольцами в цикле, причем важна последовательность сочленения колец, будет канцерогенен углеводород из пяти колец или нет, зависит от того, как присоединится именно пятое кольцо. Встает задача поиска адсорбента с наиболее удобной матрицей для адсорбции и удержания молекул ПАУ. Данная работа посвящена изучению механизмов адсорбции молекул 3,4-бензпирена фуллеритовыми соединениям.

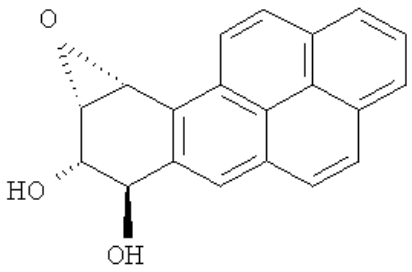


Рис. 1. Молекула 3,4-бензпирена (пунктиром показаны возможные места разрыва двойных связей).

Одним из самых мощных и широко распространенных канцерогенов является 3,4-бензпирен $C_{20}H_{12,}$ кристаллическое вещество с молярной массой 252,31 г/моль, мало или практически не растворимое в воде. Температура плавления и кипения 3,4-бензпирена составляет 177°С и 456°С соответственно. Молекула 3,4-бензпирена состоит из пяти бензольных колец, имеет вытянутую форму с размерами 3×12 Å.

С точки зрения электронной теории плоская молекула 3,4-бензпирена имеет так называемые «заливы» («bay region»), области, находящиеся примерно напротив «заливов» обладают высокой плотностью π-электронов («K-region»), образующиеся связи в этих частях молекулы считаются очень активными и соответственно канцерогенными [1].

В качестве адсорбентов были выбраны два фуллеритовых соединения, конденсированные системы, состоящие из кристаллов размером 5-20 мкм. Адсорбент № 1 представлял собой молекулы фуллерена C_{60} в твердом состоянии. При комнатной температуре кристалл C_{60} имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку. Период такой решетки составляет а = 1,417 нм, средний диаметр молекулы C_{60} – 0,708 нм, расстояние между соседними молекулами C_{60} примерно 1 нм. Плотность

фуллерита 1,7 г/см3, что значительно ниже, чем у графита (2,3 г/см3), и алмаза (3,5 г/см3), это связано с тем, что молекулы фуллерена полые. Элементарная ячейка кристаллической решетки фуллерита содержит 8 тетраэдрических пустот с размерами 0,22 нм и 4 октаэдрических пустоты в 0,42 нм, каждая из пустот окружена 4 и 6 молекулами C_{60}. Адсорбент под №2 – соединение $C_{60/70}$, в состав которого входят 86% фуллерена C_{60} и 14% фуллерена C_{70}. C_{70} обладает объемноцентрированной (ОЦК) решеткой, в отличие от фуллерена C_{60} в экваториальной области имеет вставку из 10 атомов углерода, в результате чего молекула становится вытянутой в форме мяча для игры в регби (рис. 2) [2].

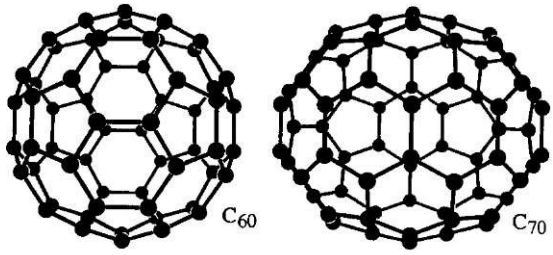


Рис. 2. Модели молекул фуллеренов C_{60} и C_{70}.

Анализ проводился методом Э. Шпольского, на основе модели «ориентированного газа». 3,4-бензпирен был растворен в н-гексане с концентрацией ~10^{-3} г/см, на 1 мл раствора использовалось по 0,1 $см^3$ адсорбента, образцы выдерживались в течение суток в темноте. Н-гексан имеет удобную матрицу для молекулы 3,4-бензпирена, при охлаждении до температуры 77 К исследуемые молекулы оказываются изолированными друг от друга и жестко закрепленными в растворителе, что и позволяет получать спектры, состоящие из серий спектральных линий с ярко выраженной индивидуальностью [3]. Возбуждение флуоресценции проводилось ртутно-кварцевой лампой с фильтром на длину волны 3650 Å. Спектры регистрировались двухпризменным спектрографом ИСП-51. Обработка данных со спектрографа осуществлялась посредством разработанного аппаратно-программного комплекса на основе ПЗС линейки TCD1304DG и макетной платы Nucleo-F303re. Высокочувствительная ПЗС линейка содержит 3648 активных пикселей размерами 8 мкм ∗ 200 мкм, ширина рабочей зоны составляет 29,1 мм, спектральный диапазон 300 – 1100 нм. Для работы оператора на персональном компьютере была создана программа на языке Java, осуществляющая получение данных, построение графиков спектра и сохранение информации в файлах формата табличных процессоров [4].

Сравнивая интенсивности головных мультиплетов квазилинейчатых спектров исследуемых образцов, видно, что адсорбент № 2, состоящий из смеси фуллеренов C_{60} и C_{70} адсорбирует 3,4-бензпирен эффективнее, чем адсорбент № 1 (рис .3).

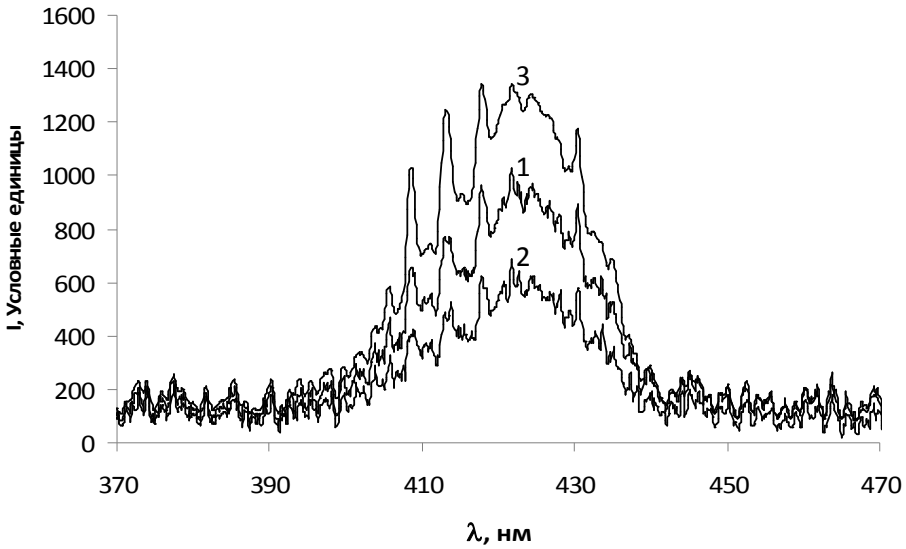


Рис. 3. Спектры люминесценции растворов: 1 – адсорбированного фуллеритом C_{60}; 2 – адсорбированного фуллеритом $C_{60/70}$; 3 – 3,4-бензпирена.

Для объяснения полученного результата необходимо рассмотреть все возможные механизмы адсорбции для данных систем. Фуллериты являются конденсированной системой, в которой отдельные молекулы сохраняют свою индивидуальность, н-гексан химически нейтрален по отношению и к бензпирену и к фуллеренам, что сразу исключает хемосорбцию. Формирование эндоэдралов, т.е. проникновение молекул 3,4-бензпирена в полость фуллерена, требует высоких температур до 1000°С, что при комнатной температуре данного эксперимента невозможно. Исходя из условий эксперимента, может иметь место физическая сорбция. В структуре фуллерита на межузлия приходится около 26% объема элементарной ячейки, молекулы 3,4-бензпирена легко размещаются в этих пространствах. С учетом того, что радиус молекулы фуллерена C_{70} больше радиуса молекулы фуллерена C_{60}, площадь активной поверхности сорбции для смеси $C_{60/70}$ можно считать большей, чем у адсорбента №1, состоящего только из молекул C_{60}. Сорбенты с бóльшей площадью активной поверхности, как известно, адсорбируют эффективнее, что и объясняет результаты нашего эксперимента. В силу симметрии и в результате постоянного вращения собственного дипольного момента фуллерены не имеют, молекула 3,4-бензпирена полярная, но тоже с небольшим p = 0,049 D (1 D = $3{,}33564 \cdot 10^{-30}$ Кл·м), по этому, в данном случае есть смысл говорить о дисперсионных силах, которые возникают вследствие взаимодействия мгновенных диполей. На границе раздела адсорбент-адсорбант возникают дисперсионные взаимодействия ван-дер-ваальсового типа, интенсивность силового поля на поверхности адсорбента зависит от электронной структуры взаимодействующих частиц. Атомы углерода в молекуле фуллерена связаны σ- и π-связями, каждая молекула C_{60} имеет 60 свободных π-электрона, а молекула C_{70} соответственно 70 π-электронов. Молекула 3,4-бензпирена в каждом бензольном кольце содержит по 6 π-электронов, 30 несвязанных π-электрона могут свободно перемещаться по всей молекуле. Таким образом, должны провзаимодействовать два ароматических соединения с высокой электронной плотностью. Благодаря высокой мобильности π-электронов, флуктуации электронной плотности внутри молекул могут легко смещаться, образуя кратковременные диполи. Слетер и Кирквуд показали, что энергия дисперсионного взаимодействия прямо пропорциональна числу внешних электронов атома. Адсорбент № 2, имеющий бóльшее количество π-электронов, должен эффективнее адсорбировать молекулу 3,4-бензпирена, что и доказано на опыте [5].

Как показали исследования, из двух фуллеритовых систем C_{60} и $C_{60/70}$ более эффективным адсорбентом оказалась система $C_{60/70}$, что объясняется бóльшей энергией дисперсионного взаимодействия с молекулами 3,4-бензпирена и большей площадью удельной поверхности.

---

1. Пульман, А. Электронная структура и канцерогенная активность молекул ароматических веществ / А.Пульман, Б. Пульман // Успехи в изучении рака. – 1955. – Т. 3. – С. 305-352.

2. Волков, А.И. Большой химический справочник / А.И. Волков, И.М. Жарский. – Мн.: Современная школа, 2005. – 608 с.

3. Осадько, И.С. Линейчатые спектры примесных молекул в н-парафиновых матрицах и теория примесного центра / И.С. Осадько, Р.И. Персонов, Э.В. Шпольский // Изв. АН СССР. Сер. Физич. – 1973. – Т. 37, № 3. – С. 540-544.

4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51». Автор: Антонов А.А. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 07 мая 2019 г.

5. Комаров, В.С. Адсорбенты и их свойства // Наука и техника. – 1977. – 248 с.

УДК 537.226

РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ИОДИДЕ ДИИЗОПРОПИЛАММОНИЯ

А.Ю. Милинский
Благовещенский государственный педагогический университет» (г. Благовещенск)
a.milinskiy@mail.ru

SIZE EFFECT IN IODIDE DIISOPROPYLAMMONIUM

A.Yu. Milinsky
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
a.milinskiy@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.93-96

Органические сегнетоэлектрики семейства диизопропиламмония можно рассматривать как альтернативу классическим сегнетоэлектрикам на основе свинца в связи с большим значением спонтанной поляризации, относительно высокой температурой плавления и экологической безопасностью [1-7]. Благодаря этим свойствам ниже перечисленные сегнетоэлектрики являются потенциальными материалами для применения в органической микроэлектронике [8]. К таким соединениям относятся: diisopropylammonium chloride (C6H16NCl), сокращенно DIPAC Ps ~ 8.2 мкКл×см–2, Tc = 440 K [1,2]; diisopropylammonium bromide (C6H16NBr), сокращенно DIPAB Ps ~ 23 мкКл×см–2, Tc = 426 K [3-5]; diisopropylammonium iodide (C6H16NI), сокращенно DIPAI. Относительно иодида диизопропиламмония, в литературе имеются противоречивые сведения [6,7]. В работе [6] были получены монокристаллы DIPAI, обладающие спонтанной поляризацией Ps ~ 33 мкКл×см–2 и температурой Кюри 415 K. Однако, авторы [7] при исследовании кристаллов DIPAI не обнаружили в нем сегнетоэлектрическое состояние.

В данной работе приводятся результаты исследования диэлектрических свойств нанокомпозитов на основе иодида диизопропиламмония и пористого оксида алюминия.

При комнатной температуре DIPAI принадлежит к орторомбической неполярной хиральной пространственной группе P212121 [6, 7]. Однако при нагревании в зависимости от растворителя, в котором происходила перекристаллизация DIPAI, возможны два сценария. Согласно работе [6], в которой использовался этанол, увеличение температуры до 369 K приводит к возникновению полярной моноклинной фазы с симметрией P21, стабильной до 415 K. Выше 415 K DIPAI переходит в неполярную моноклинную фазу P21/m. В процессе охлаждения при 407 K наблюдается фазовый переход, при котором DIPAI превращается из P21/m в полярную моноклинную фазу с симметрией P21 и остается в этом состоянии вплоть до комнатной температуры.

При использовании раствора этанол-метанол (1:1) авторы работы [7] не обнаружили в полученных образцах полярной фазы P21. При нагреве образца до температуры 376 K происходил фазовый переход из неполярной орторомбической фазы P212121 в неполярную моноклинную фазу P21/m.

В наших исследованиях иодид диизопропиламмония был получен реакцией диизопропиламина с водным раствором иодоводородной кислоты (мольное соотношение 1:1). Согласно полученному спектру XRD, поликристаллический иодид диизопропиламмония при комнатной температуре находится в орторомбической фазе P212121. Для исследования диэлектрических и тепловых свойств порошок DIPAI прессовался в виде таблеток диаметром 12 мм и толщиной около 1.5 мм при давлении 7500 кг/см^2.

Для получения нанокомпозитов использовались оксидные пленки Al2O3, изготовленные фирмой «TopMembranes Technology (China)», с диаметрами пор 330, 190, 90 и 60 нм. Глубина пор составляла около 50 мкм. Внедрение сегнетоэлектрика в поры производилось из нагретого насыщенного раствора C6H16NI в метаноле. Степень заполнения пор, определенная по изменению массы пленок, составляла не менее 60%.

Измерение комплексной диэлектрической проницаемости проводилось с использованием цифрового измерителя иммитанса Е7–25 с частотным диапазоном $20 \div 10^6$ Гц. В качестве электродов использовалась серебреная паста. Температура определялась с помощью электронного термометра ТС-6621 с хромель-алюмелевой термопарой.

Методика нелинейных измерений описана в [9, 10]. Напряженность электрического поля для объемных и нанокомпозитных образцов DIPAI в процессе измерения составляла около 80 В/мм. В работе исследовались температурные зависимости коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ – отношение амплитуды третьей гармоники к амплитуде основного сигнала.

Результаты исследований диэлектрической проницаемости ε′ для образцов DIPAI на разных частотах представлены на рис. 1*а*. При первом прогреве до 390 K на зависимостях ε′(*T*) наблюдается одна аномалия, при температуре 381 K, соответствующая переходу из орторомбической фазы $P2_12_12_1$ в моноклинную фазу $P2_1/m$ [7]. При охлаждении температура перехода соответствует 361 K. Рост частоты приводит к уменьшению ε′(ω), что совпадает с данными [7] для монокристаллов.

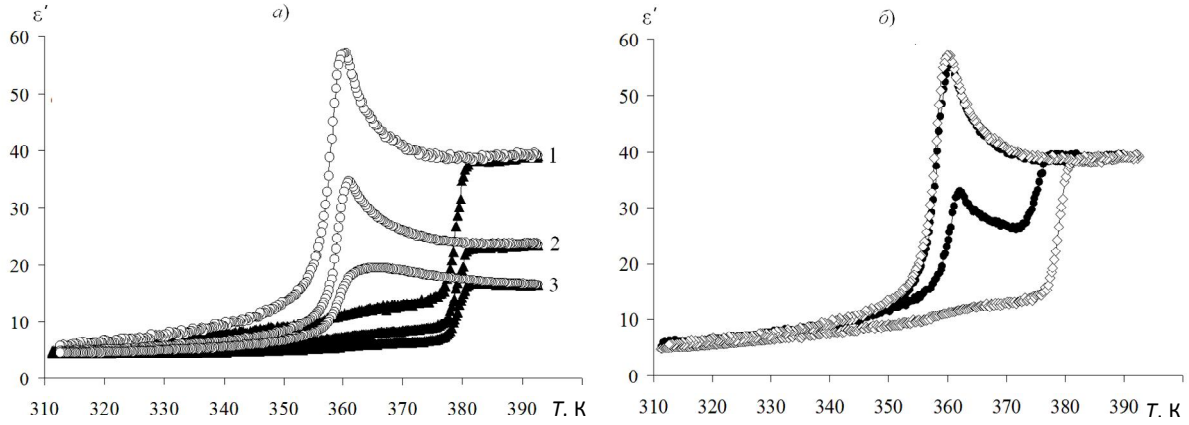


Рис. 1. Зависимости ε'(*T*) для поликристаллического образца DIPAI, полученные при первом проходе до 390 K на частотах 1 кГц – 1, 10 кГц – 2 и кГц – 3 (*а*). Зависимости ε'(*T*) для поликристаллического образца DIPAI полученные на частоте 1 кГц при первом проходе до 390 K (ромбы) и после прогрева до 420 K (круги) (*б*). Заполненные символы соответствуют нагреву, не заполненные – охлаждению.

Было обнаружено, что температурная предыстория меняет последовательность фазовых переходов в поликристаллическом образце DIPAI. Предварительный прогрев образцов выше 420 K приводит к появлению двух фазовых переходов в режиме нагрева с температурами 363 и 378 K (рис. 1*б*). В режиме охлаждения температура фазовых переходов совпадает в пределах 1° (рис. 1*б*).

Наличие двух фазовых переходов для поликристаллического DIPAI, вероятно, связано с формированием промежуточной сегнетоэлектрической фазы $P2_1$, согласно работе [6]. Для проверки данного предположения были исследованы нелинейные свойства образца DIPAI при первом проходе до 390 K и после нагрева до 420 K. Согласно полученным результатам, при первом проходе до 390 K коэффициент третьей гармоники в процессе нагрева и охлаждения слабо зависит от температуры (рис. 2), тогда как после предварительного прогрева до 420 K резкий рост коэффициента $\gamma_{3\omega}$ начинается при 363 K и заканчивается при 378 K. В процессе охлаждения резкий рост $\gamma_{3\omega}$ начинается при 361 K. Указанные значения температур согласуются с данными, полученными при исследовании температурных зависимостей диэлектрической проницаемости и теплоемкости. Следует отметить,

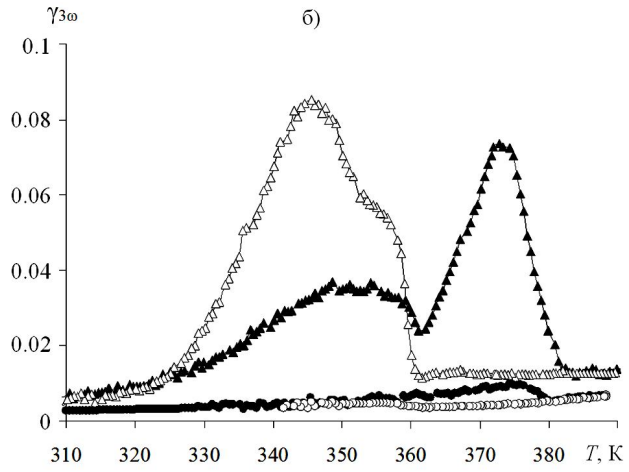


Рис.2. Зависимости $\gamma_{3\omega}(T)$ для образца поликристаллического DIPAI полученные при первом проходе до 390 K (круги) и после прогрева до 420 K (треугольники). Заполненные символы соответствуют нагреву, не заполненные – охлаждению (*б*).

что значение коэффициента третьей гармоники при нагреве до температуры 360 меньше, чем при охлаждении, что указывает на частичный переход DIPAI в параэлектрическую фазу. Выдержка образца при комнатной температуре более суток полностью переводит DIPAI в параэлектрическую фазу и коэффициент $\gamma_{3\omega}$ не растет при нагревании вплоть до температуры фазового перехода при 363 K. Для нанокомпозитов DIPAI/Al_2O_3, в отличие от объемных образцов, сегнетоэлектричекая фаза появляется уже при первом проходе. На рис. 3 в качестве примера показаны температурные зависимости $\varepsilon'(T)$ и $\gamma_{3\omega}(T)$ для DIPAI в порах Al_2O_3 размером 60 нм. Кривые диэлектрической проницаемости, полученные при нагреве и охлаждении, имеют один размытый пик (рис. 3,*а*). Однако на зависимости коэффициента третьей гармоники от температуры четко различим температурный интервал, в котором нелинейный отклик сильно возрастает в связи с появление сегнетоэлектрической фазы (рис.3,*б*).

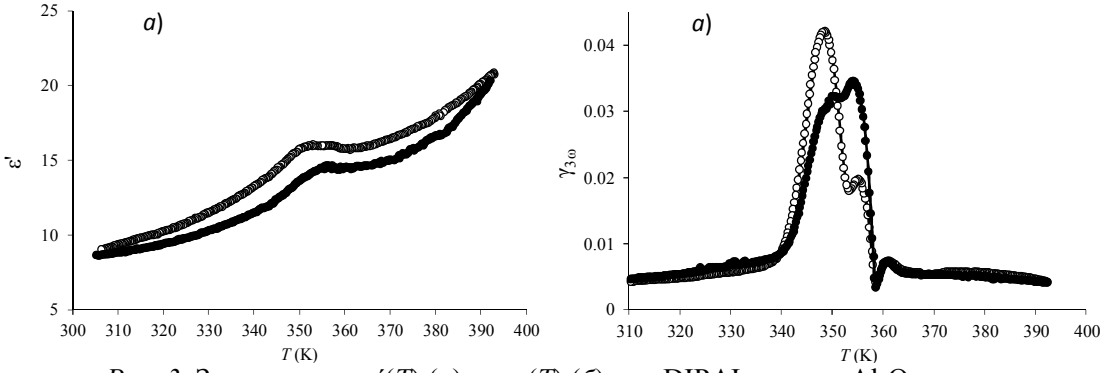


Рис. 3. Зависимости $\varepsilon'(T)$ (*а*) и $\gamma_{3\omega}(T)$ (*б*) для DIPAI в порах Al_2O_3 с размером пор 60 нм. Заполненные символы соответствуют нагреву, не заполненные – охлаждению (*б*)

На рис. 4 представлена зависимость температуры появления и исчезновения сегнетоэлектрической фазы в объемном и нанокомпозитных образцах.

Таким образом, в настоящей работе обнаружено влияние термической предыстории на возникновение сегнетоэлектрического состояния в поликристаллических образцах DIPAI. Для нанокомпозитных образцов DIPAI/Al_2O_3 обнаружено линейное понижение температуры фазовых переходов при уменьшении размера пор.

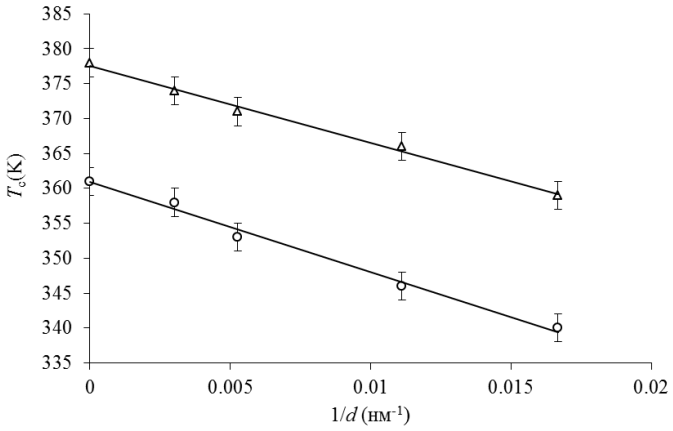


Рис.4. Зависимости температуры фазовых переходов в нанокомпозитных образцах DIPAI от обратного размера пор. Точка $d = 0$ соответствует объемному образцу.

1. Fu, D.-W. Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition

temperature and practical utilization level of spontaneous polarization / D.-W. Fu, W. Zhang, H.-L. Cai, J.-Z. Ge, Y. Zhang, R.-G. Xiong // Adv. Mater. – 2011. – V. 23. – P. 5658-5662.

2. Baryshnikov, S.V. Impact of nanoconfinement on the diisopropylammonium chloride ($C_6H_{16}ClN$) organic ferroelectric / S.V. Baryshnikov, E.V. Charnaya, A.Yu. Milinskiy, V.A. Parfenov, I.V. Egorova // Phase Transitions. – 2018. – V. 91. – P. 293-300.

3. Fu, D.-W. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal / D.-W. Fu, H.-L. Cai, Y. Liu, Q. Ye, W. Zhang, Y. Zhang, X.-Y. Chen, G. Giovannetti, M. Capone, J. Li, R.-G. Xiong. // Science. – 2013. – V. 339. – P. 425-8.

4. Piecha, A. Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide / A. Piecha, A. Gagor, R. Jakubas, P. Szklarza. // Cryst. Eng. Comm. – 2013. – V. 15. – P. 940-944.

5. Барышников, С.В. Размерный эффект в нанокомпозитах на основе молекулярного сегнетоэлектрика бромида диизопропиламмония / С.В. Барышников, А.Ю. Милинский, Е.В. Чарная, И.В. Егорова. // ФТТ. – 2019. – Т. 61. – С.273-277.

6. Saripalli, R.K. Observation of ferroelectric phase and large spontaneous electric polarization in organic salt of diisopropylammonium iodide / R.K. Saripalli, S. Diptikanta, S. Prasad, H. Nhalil, H.L. Bhat, T.N. Guru Row, E. Suja // J. Appl. Phys. – 2017. – V. 121. – P. 114101-5.

7. Piecha-Bisiorek, A. Phase sequence in diisopropylammonium iodide: avoided ferroelectricity by the appearance of a reconstructed phase / A. Piecha-Bisiorek, A. Gągor, D. Isakov, P. Zieliński, M. Gałązka, R. Jakuba // Inorg. Chem. Front. – 2017. – V.4. – P. 553-558.

8. Yahia, I.S. Microelectronic properties of the organic Schottky diode with pyronin-Y: Admittance spectroscopy, and negative capacitance / I.S. Yahia, H.Y. Zahran, F.H. Alamri, M. Aslam Manthrammel, S. AlFaify, A. Atif Mossad. // Physica B: Condensed Matter. – 2018. – V. 543. – P. 46-53.

9. Ikeda, S. Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene / S. Ikeda, H. Kominami, K. Koyama, Y.J. Wada // J. Appl. Phys. – 1987. – V. 62. – P. 3339-3344.

10. Барышников, С.В. Диэлектрические и калориметрические исследования KNO_3 в порах наноразмерных силикатных матриц МСМ-41 / С.В. Барышников, Е.В. Чарная, А.Ю. Милинский Ю.А. Шацкая, D. Michel // ФТТ. – 2012. – Т.54. – С.594-599.

УДК 538.911; 538.97

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В КОМПОЗИТЕ «НИТРИТ НАТРИЯ + 3D-SBA-15»

А.А. Набережнов[1], Е.В. Стукова[2], О.А. Алексеева[3], С.А. Новикова[4], A. Franz[5]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе (г. С.-Петербург)

[2]Амурский государственный университет (г. Благовещенск)

[3]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (г. С.-Петербург)

[4]Институт химии и химической технологии СО РАН (г. Красноярск)

[5]Helmholtz Zentrum Berlin (Berlin, Germany)

alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

FERRO-ELECTRIC PHASE TRANSITION IN THE COMPOSITE «SODIUM NITRITE + 3D-SBA-15»

A.A. Naberezhnov[1], E.V. Stukova[2], O.A. Alekseeva[3], S.A. Novikova[4], A. Franz[5]

[1]Institute of Physics and Technology A.F. Ioffe (St. Petersburg)

[2]Amur State University (Blagoveshchensk)

[3] St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great (St. Petersburg)

[4]Institute of Chemistry and Chemical Technology SB RAS (Krasnoyarsk)

[5]Helmholtz Zentrum Berlin (Berlin, Germany)

alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.97-100

Для нанокомпозитов, содержащих ультрадиспергированные наночастицы нитрита натрия, получены интересные как с точки зрения практического применения (высокие значения диэлектрической проницаемости в параэлектрической фазе на низких частотах [1,2]), так и для теории фазовых переходов (ФП) в условиях ограниченной геометрии [3,4]. Основная часть данных для этих нанокомпозитных материалов (НКМ) была получена при использовании в качестве исходных матриц либо пористых стекол (PG), либо искусственных опалов, а внедрение $NaNO_2$ в поры проводилось либо из расплава, либо из водного раствора. Поры в пористых боросиликатных стеклах образуют *случайную* многосвязную трехмерную (3D) дендритную систему, причем средний диаметр пор можно управляемо варьировать в пределах 3 – 300 нм. В опалах формируется многосвязная *регулярная* 3D структура пор, образованная (в первом порядке) плотноупакованными сферами аморфного SiO_2 с диаметром D ~ 200–250 нм [5], что, в целом, приводит к появлению 3 типов пор (полостей) с различными средними размерами. Например, в случае D =250 нм имеются поры со средним размером около 100 (8) нм, 58 (4) нм и 20 (3) нм. Матрица 3D-SBA-15, также как и PG и опалы, состоит из SiO2, но имеет *регулярную* систему квазиодномерных (1D) каналов, диаметр которых можно контролируемым образом изменять от 4 до 30 нм. Было также установлено [6], что в 3D-SBA-15 существуют 2 типа пор: гексагонально-упорядоченные каналы и локально разупорядоченные и случайно распределенные слившиеся поры, т.е. топология этих матриц существенно отличается от топологии PG и опалов. Вопрос же о влиянии топологии на свойства НКМ до сих пор остается малоизученным, что и стало основной целью данной работы.

Матрицы были изготовлены в ИХХТ СО РАН по технологии, близкой к изложенной в статье [7]. 3D-SBA-15 отличаются тем, что в стенках 1D каналов имеются субмезопоры («разрывы» со средним диаметром около 20 Å), связывающие каналы между собой. Диаметр канала для этих матриц составлял 94±5 Å, толщина стенок 28(2) Å, а параметр ячейки – 122.6 ± 7.4 Å. Внедрение сегнетоэлектрика $NaNO_2$ в поры наноразмерных силикатных матриц проводилось из водного раствора в АмГУ. Контроль степени заполнения проводился с помощью взвешивания образцов до и после заполнения. Степень заполнения составляла 60-70%. Измерения температурной эволюции кристаллической структуры НКМ 3D-SBA-15 + $NaNO_2$ проводились на нейтронном дифрактометре высокого разрешения E9 (реактор BER II, Helmholtz Zentrum Berlin, Германия) при нагреве и охлаждении. Длина волны падающих нейтронов составляла 1.798 Å, температурный интервал измерений: от комнатной температуры (RT) до 450 K при нагреве и 450 – 380 K при охлаждении, т.е. выше и ниже температуры сегнетоэлектрического фазового перехода. Стабильность поддержания температуры во время измерений была не хуже ±0.5 K.

Результаты и обсуждение

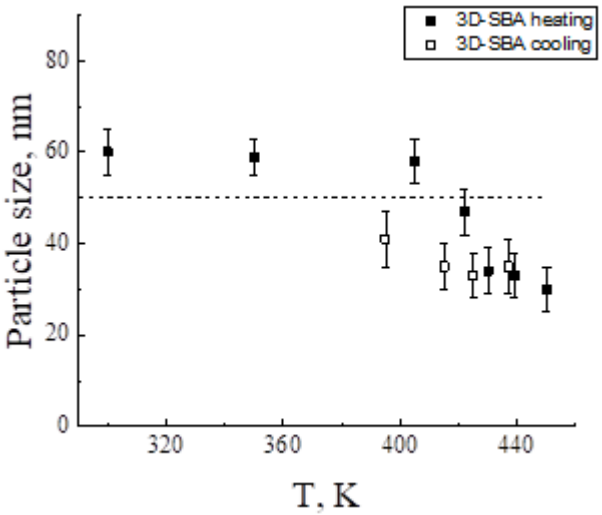


Рис. 1. Температурная зависимость размера наночастиц $NaNO_2$ в 3D-SBA-15 при нагреве и охлаждении.

На дифракционных спектрах при всех температурах наблюдались острые пики, соответствующие структуре нитрита натрия, на фоне от аморфного SiO_2. Анализ формы линии брэгговских отражений и моделирования отклика с учетом реального экспериментального разрешения позволяет сделать предварительное заключение, что вклад от массивного $NaNO_2$, который мог бы кристаллизоваться на поверхности гранул 3D-SBA-15 или в промежутках между ними не превышает 20 %, так как такая примесь массивного материала приводила бы к видимому отличию формы пиков от наблюдаемых в эксперименте. Предполагая, что вклад массивного материала мал, мы определили размер наночастиц нитрита натрия и построили соответствующую температурную зависимость, приведенную на рис. 1. Пунктирная линия на рис. 1 указывает критический размер наночастиц нитрита натрия, меньше которого для НКМ на основе PG ранее наблюдалась смена рода сегнетоэлектрического ФП от первого (характерного для массива) ко второму [3].

Как видно из рис. 1, размер наночастиц существенно больше диаметра канала матрицы, и можно ожидать, что в 3D-SBA-15 формируются в каналах нанонити нитрита натрия, т.е. форма наночастиц в значительной мере анизотропна. Так как поляризация в $NaNO_2$ направлена вдоль оси **b,** то энергетически выгодно формирование нанонитей с осью **b** вдоль канала, а это, в свою очередь, должно приводить к тому, что экспериментальная ширина отражения типа (0 h 0) должна быть меньше, чем для отражений, например, типа (0 0 h). Мы провели такое сравнение (рис. 2) и никакого различия в ширинах отражений (020) и (002) не обнаружили. Это свидетельствует в пользу, что наночастицы образуют кластер, захватывающий несколько соседних каналов, благо сама внутренняя структура 3D-SBA-15 этому способствует (наличие «разрывов» в стенках, связывающих соседние каналы).

Второй несколько неожиданный факт, наблюдаемый на рис. 1, связан с тем, что выше ~ 405 K и по мере приближения к температуре ФП размер наночастиц резко уменьшается. Такое поведение в первую очередь может быть связано с эффектом «размерного плавления», когда уменьшение размера наночастиц приводит к резкому понижению температуры плавления и, в первую очередь, к появле-

нию расплава на поверхности наночастицы. Естественно появление такого расплавленного слоя приводит к уменьшению эффективного (сохранившего кристаллическую структуру) размера частицы, и в эксперименте должно приводить к наблюдаемому значительному (в 2-2.5 раза при таком изменении размера) уменьшению интегральной интенсивности упругих пиков. Проведенный анализ температурной зависимости (рис. 3) интегральной интенсивности нескольких брэгговских пиков, интенсивность которых не зависит от сегнетоэлектрического параметра порядка [3, 8], для данного НКМ показал, что при нагреве вплоть до T = 430 K подобного эффекта не наблюдается.

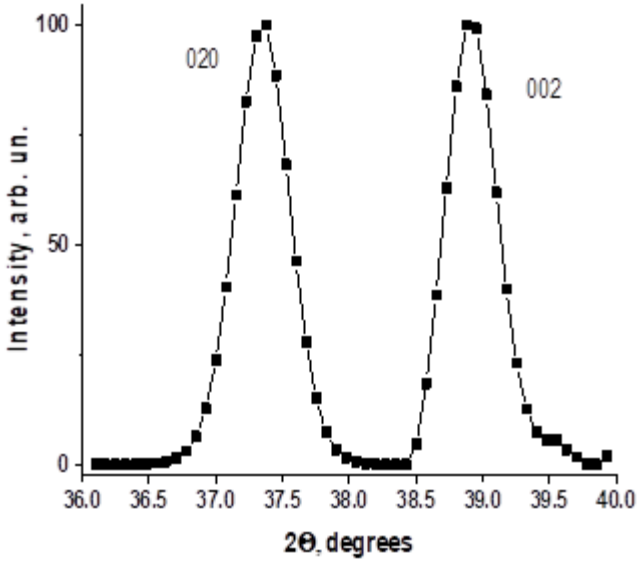


Рис. 2. Форма линии упругих пиков (020) и (002) в НКМ $NaNO_2$ + 3D-SBA-15 при 300 K

Другим возможным механизмом уменьшение когерентного размера нанокластера, охватывающего несколько соседних каналов, в силу неких внутренних особенностей самой матрицы.

Действительно, как показано в работе [9] данная матрица в диапазоне 298 – 1573 K имеет большой отрицательный коэффициент теплового расширения (КТР): $\alpha_a = -4.3\times10^{-6}$ K^{-1}, что и может приводить при нагреве к утрате когерентности внутри нанокластера из-за появления в нём разрывов при сжатии.

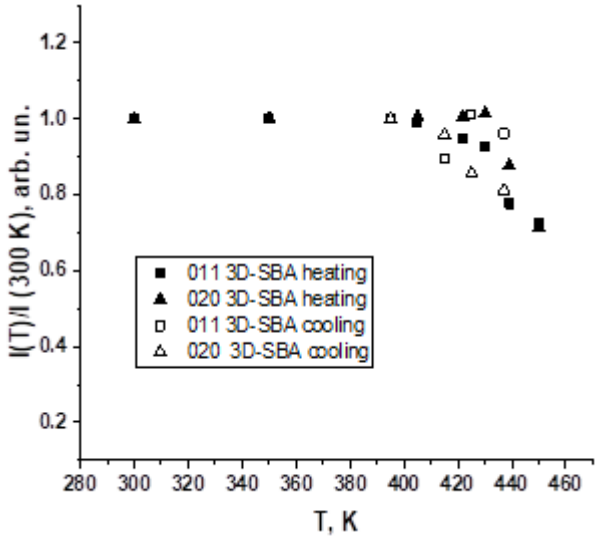


Рис. 3. Температурная зависимость интенсивности упругих пиков (011) и (020) в НКМ $NaNO_2$ + 3D-SBA-15 при нагреве и охлаждении.

На следующем этапе из анализа дифрактограмм были получены температурные зависимости сегнетоэлектрического параметра порядка η(T) при нагреве (черные квадраты) и охлаждении (белые квадраты), представленные на рис. 4. Температура ФП (432 ± 1.5 K), определенная из аппроксимации поведения η(T) до пересечения с осью абсцисс, хорошо совпадает с данными, полученными из диэлектрической спектроскопии [10]. С другой стороны, для наночастиц нитрита натрия такого размера T_C, согласно данным в статье [3], должна быть значительно меньше (ниже 426 K). Причиной наблюдаемого различия, по-видимому, опять же является эффект сжатия НКМ из-за отрицательного КТР самой матрицы. Действительно в работе [11] показано, что увеличение давления, приложенного к образцу нитрита натрия, приводит к повышению T_C. Таким образом, для данного НКМ существует конкуренция двух механизмов: размерный эффект ведет к понижению ТС, в то время как сжатие матрицы сдвигает эту температуру вверх, в результате ФП происходит при несколько более высокой температуре, чем ожидается для наночастиц с характерным размером около 30 – 35 нм.

Теперь обратимся к зависимости η (T) при охлаждении. К сожалению, детальной зависимости параметра порядка при обратном ходе мы получить не смогли из-за недостатка экспериментального

времени, но, тем не менее, ряд важных выводов сделать можно.Первое – при 425 К параметр порядка η = 0 ± 0.04, т.е. при этой температуре сегнетоэлектрическая фаза еще практически отсутствует, и, таким образом, ФП при охлаждении происходит ниже 425 К, что и следует ожидать для наночастиц такого размера. Второе – из величины ошибки определения параметра η при 425 К можно получить оценку вклада массивного нитрита натрия, которая, согласно расчету, не превышает 10 %. Третье – в данном НКМ существует температурный гистерезис в поведении η(T), величина которого составляет около 10 – 15 К и определяется, в основном, свойствами самой матрицы.

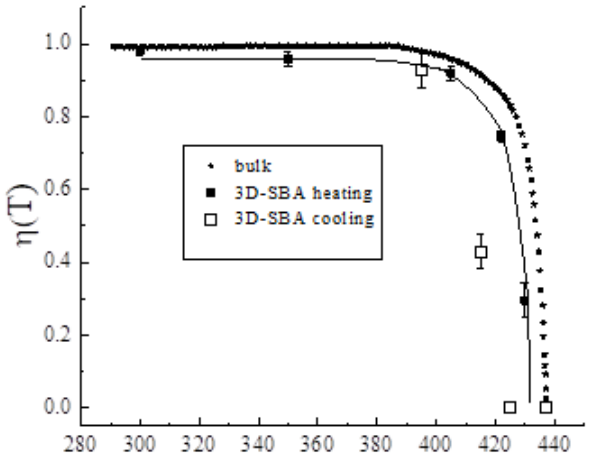


Рис. 4. Температурная зависимость параметра порядка η(T) для НКМ $NaNO_2$ + 3D-SBA-15 при нагреве и охлаждении.

Заключение

В работе проанализирована температурная эволюция кристаллической структуры НКМ 3D-SBA-15 + $NaNO_2$, получены температурные зависимости сегнетоэлектрического параметра порядка η(T) при нагреве и охлаждении. Показано, что вклад в рассеяние нейтронов от массивного нитрита натрия не превышает 10%. Определена температура перехода (при нагреве) T=432 ± 1.5 К из сегнетоэлектрической фазы в высокотемпературную параэлектрическую. Установлено, что в зависимости η(T) наблюдается температурный гистерезис ~ 10 - 15 К, появление которого в значительной степени обусловлено собственными свойствами матрицы, в частности отрицательным КТР для 3D-SBA-15.

В Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого исследования выполнялись в рамках тематики проекта 3.1150.2017/4.6. В АмГУ работа выполнена при частичной поддержке проекта Минобрнауки РФ 3.5512.2017/8.9.

1. Colla, E.V. Ferroelectric phase transitions in materials embedded in porous media / E.V. Colla, E.Y. Koroleva, Yu.A. Kumzerov, B.N. Savenko // Ferroelectrics Letters. – 1996 – Vol. 20, № 5-6 – P. 143-147.

2. Pan`kova, S.V. The giant dielectric constant of opal containing sodium nitrate nanoparticles / S.V. Pan`kova, V.V. Poborchii, V.G. Solov'ev // Jour. Phys.: Cond. Matt. – 1996 – Vol. 8 – P. L203-L206.

3. Naberezhnov, A. Structure and properties of confined sodium nitrite / A. Naberezhnov, A. Fokin, Yu. Kumzerov, A. Sotnikov, S. Vakhrushev, B. Dorner // Eur. Phys. J. E. – 2003. – Vol. 12. – P. s21 –s24

4. Вахрушев, С.Б. Структура и диэлектрический отклик нанокомпозитных твердых растворов $Na_{1-x}K_xNO_2$ / С.Б. Вахрушев, И.В. Голосовский, Е.Ю. Королева, А.А. Набережнов, Н.М. Окунева, О.П. Смирнов, А.В. Фокин, M. Tovar, M. Glazman // ФТТ. – 2008. – Т. 50, № 8 - С. 1489-1495.

5. Богомолов, В.Н. Особенности теплопроводности синтетических опалов / В.Н. Богомолов Д.А. Курдюков, Л.С. Парфеньева, А.В. Прокофьев, С.М. Самойлович, И.А. Смирнов, А. Ежовский, Я. Муха, Х. Мисерек // ФТТ. – 1997 – Т. 39 – С. 392-398.

6. Yuan, P. A systematic study of long-range ordered 3D-SBA-15 materials by electron tomography / P. Yuan, L. Tan, D. Pan, Y. Guo, L. Zhou, J. Yang, J. Zou, C. Yu // New J. Chem. – 2011 - Vol. 35. – P. 2456-2461.

7. Parfenov, V.A. Structural consequences of the fluorides using in the synthesis of SBA-15 mesostructured silica / V.A. Parfenov, I.V. Ponomarenko, S.A. Novikova // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – Vol. 232. – P. 193-199.

8. da Costa, Lamas A. On the Use of Powder Diffractometry in the Study of Phase Transitions / Lamas A. da Costa, S.-L. Chang, S. Caticha-Ellis // Phys. stat. sol (a). – 1981. – Vol. 68. – P. 173-178.

9. Shah, P. Thermal stability of Mesoporous SBA-15 and Sn-SBA-15 Molecular Sieves: An in situ HTXRD study / P. Shah, V. Ramaswamy // Microporous and Mesoporous Mater. – 2008. – Vol. 114. – P. 270-280.

10. Ефимова, О.В. Размерный эффект в нанокомпозите на основе нитрита натрия, внедренного в матрицу 3D-SBA-15 / О.В. Ефимова, Е.В. Стукова, Е.Ю. Королева, Р.В. Суханов // Вестник АмГУ. – 2017. – Т. 79. – С. 165-169.

11. Rapport, E. Phase Diagrams of Sodium Nitrite and Potassium Nitrite to 40 kbar // Journal of Chemical Physics. – 1966. – Vol. 46, № 8. –P. 2721-2728.

УДК 537.312:53.092

ТРАНСПОРТ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ГРАФИТЕ ПРИ ХОЛОДНОМ СЖАТИИ

Г.В. Тихомирова, Т.К. Петросян, Г.В. Суханова, А.В. Тебеньков
Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (г. Екатеринбург)
Galina.Tikhomirova@urfu.ru

TRANSPORT AND PHASE TRANSITIONS IN GRAPHITE DURING COLD COMPRESSION

G.V. Tikhomirova, T.K. Petrosyan, G.V. Sukhanova, A.V. Tebenkov
Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg
Galina.Tikhomirova@urfu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.101-103

Воздействие высокого давления на графит приводит к образованию новых углеродных связей и переходу из sp^2 к sp^3-гибридизованному состоянию. Следствием данного процесса является появление кубического и гексагонального алмазов [1], а также фаз высокого давления (к примеру, M-углерода [2, 3] или C48(2i+1) [4]). Для фазового перехода от графита к алмазу помимо давления требуется ещё и высокая температура [5].

Ряд исследовательских групп теоретическими [1] и экспериментальными [6] методами обнаружили сверхтвёрдые фазы углерода, которые отличаются по структуре от алмаза и формируется под воздействием высокого давления при комнатной температуре. Однако, данные, касающиеся этих переходов (например, M-, Z-, W-, bct-C4 углерод и другие), остаются неоднозначными [6]. Большое количество теоретических моделей структуры сверхтвёрдых фаз углерода связано, в том числе и с недостатком экспериментальных данных. Согласно расчётам, практически все указываемые фазы графита холодного сжатия обладают твёрдостью, сравнимой с алмазом, прозрачностью и диэлектрическими свойствами. Большинство исследователей сходится во мнении, что данные фазовые переходы являются обратимыми при декомпрессии до нормального давления, что указывает на метастабильный характер фаз [1-4, 6], и что для преобразования в них требуется длительное время. Также было обнаружено, что образование этих углеродных фаз зависит от типа исходного материала (например, порошок, монокристалл, пиролитический графит) [6]. Поэтому изучение свойств различных типов графита под воздействием высокого давления по-прежнему представляет большой интерес.

В этой работе представлены результаты исследований барических зависимостей проводимости и термоэлектродвижущей силы (ТЭДС) трёх типов графита (порошкообразный графит малозольный особо чистый (ГМЗ ОСЧ), высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) и природный графит (ПГ) из приангарского месторождения) при комнатной температуре.

Измерения проводились в камере высокого давления с алмазными наковальнями из синтетических алмазов «карбонадо». Данные наковальни обладают проводящими свойствами, сопротивление наковален составляет несколько Ом при короткозамкнутом состоянии, и слабо зависит от давления и температуры. Методика позволяет проводить исследование одного и того же образца несколькими циклами увеличения – уменьшения давления на образец, а также выдерживать образец под нагрузкой длительное время. В установке для измерения ТЭДС применялась термопара медь-константан.

Измерения ТЭДС для образцов проводили следующим образом: на каждом шаге увеличивали давление на 1-3 ГПа и измеряли зависимость ТЭДС от времени до установления постоянного значения, потом вновь увеличивали давление и так до определенного давления, после которого также пошагово уменьшали давление. В следующем цикле измерений давление повышали до более высокого. Циклы проводили до давлений 16, 19, 29, 35,5, 47 ГПа. Время выдержки образца в каждой точке при постоянном давлении составляло от 1 минуты до нескольких часов.

На зависимостях R(P) всех образцов графита обнаружен ряд особенностей. Причем если для образцов ГМЗ ОСЧ и ПГ область обнаруженных особенностей несколько размыта и составляет 20-35 ГПа, то для ВОПГ особенности наблюдаются в двух областях давлений - 20-27 и 30-35 ГПа. Наблюдавшиеся особенности связываются с фазовыми переходами в графите при этих давлениях [7].

На рис. 1 представлены барические зависимости ТЭДС для ВОПГ и ГМЗ ОСЧ. Из рис. 1а видно, что зависимости ТЭДС(Р) для циклов, измеренных до 16 и до 19 ГПа, почти не отличаются, гистерезис практически отсутствует. Для циклов при давлениях до 29 и до 35 ГПа характерно наличие большого гистерезиса, что указывает на формирование новой фазы. И, наконец, для цикла, измеренного до 47 ГПа видно, что гистерезис становится незначительным, т.е. новое состояние уже сформировалось.

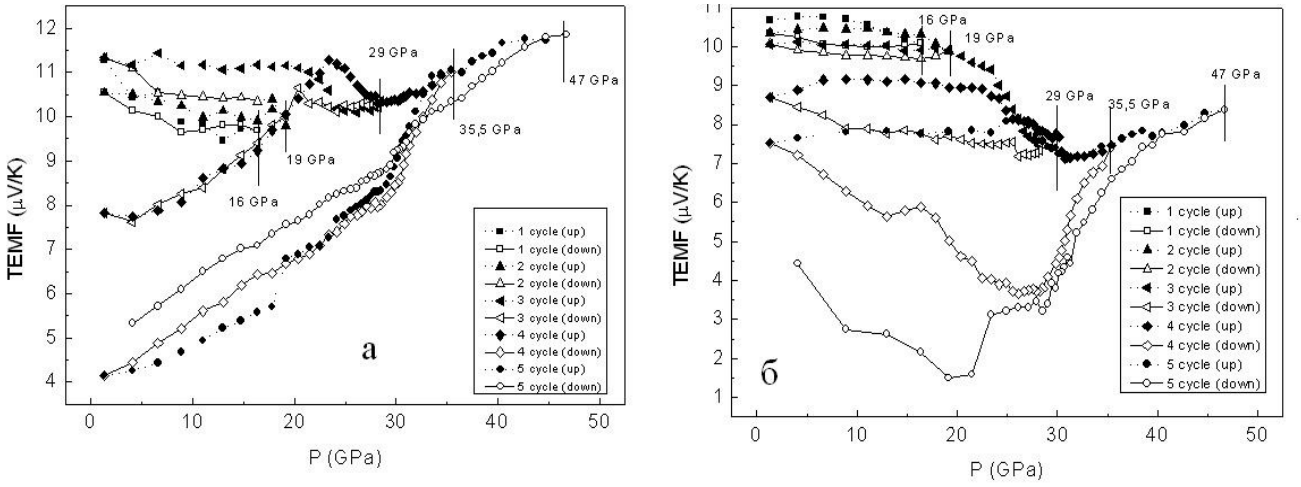


Рис. 1. Барическая зависимость ТЭДС: а) ВОПГ; б) ГМЗ ОСЧ.

Для образца ГМЗ ОСЧ ситуация несколько отличается. Не обнаружено третьего этапа (полного формирования нового состояния). Возможно, для порошкообразного образца требуется либо большее давление, либо предварительная обработка (например, более длительная выдержка при высоком давлении).

Для образцов природного графита характерно наличие большого гистерезиса для зависимостей 29-39 ГПа, однако зависимости ТЭДС(Р) при измерениях до 47 ГПа хотя и имеют меньший гистерезис, чем для ГМЗ ОСЧ, но гистерезис присутствует. Кроме того, в отличии от ВОПГ и ГМЗ ОСЧ для природного графита наблюдается рост ТЭДС в зависимости от цикла нагружения, что требует дополнительных исследований.

Дополнительно исследовалась возможность возникновения новых фаз углерода из графита при длительной выдержке под давлением от 18 до 45 ГПа. Время выдержки при фиксированном давлении составляло сутки. Обнаруженные особенности на барических зависимостях сопротивления и времен релаксации сопротивления в области 27-35 ГПа, по-видимому, связаны с возникновением зародышей новой фазы. На СЭМ-снимке (рис. 2) изображение поверхности образца, подвергнутого давлению в 45 ГПа, ясно прослеживаются включения новой фазы, которая сохранилась после снятия нагрузки. Однако фаза на графике барической зависимости электросопротивления проявляет себя слабо, так как шунтируется большим количеством графита, оставшегося после воздействия на обра-

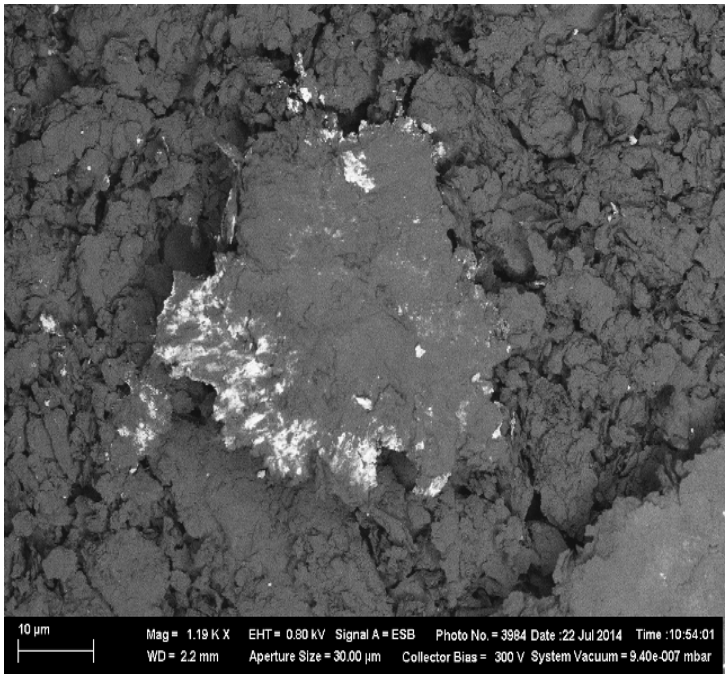


Рис. 2. СЭМ-изображение отпечатка обработанного давлением образца графита в фазовом контрасте.

зец давлением. Обнаружено два различных времени релаксации. Первое не превышает 40 секунд. Однако при более длительной выдержке под давлением в области давлений 27-35 ГПа время релаксации составляет несколько часов.

Таким образом, на зависимостях R(P) образцов ГМЗ ОСЧ и ПГ обнаружен ряд особенностей, которые в большинстве своём обратимы при снятии нагрузки. Возможно, для этих образцов требуются либо большие давления, либо предварительная обработка. На барических зависимостях сопротивления для ВОПГ особенности выражены сильнее, что, по-видимому, связано с высокой ориентацией плоскостей в этом образце

Так как исследование ТЭДС является более структурно чувствительным методом, особенности на графиках ТЭДС(P) более ярко выражены, чем для зависимостей R(P). Однако области давлений, в которых обнаружены особенности, совпадают для обеих методик. Из результатов исследования барической зависимости ТЭДС для ВОПГ можно сделать вывод, что возможно получение относительно стабильной углеродной фазы высокого давления. Для ГМЗ ОСЧ и природного графита, при равных условиях эксперимента (данного диапазона давлений и времени обработки давлением) недостаточно для окончательного формирование новой фазы. Т.е. фазовый переход в графите при высоком давлении зависит от вида исходного образца.

1. Zhai, J. A review on the structure of cold-compressed graphite phase / J. Zhai, A. Wan, W. Wu // Mod. Phys. Lett. B. – 2015. – V.29. – P. 1530011.

2. Oganov, A.R. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: principles and applications / A. R. Oganov, C. W. Glass // J. Chem. Phys. – 2006. – V. 124. – P. 244704(15).

3. Li, Q. Superhard Monoclinic Polymorph of Carbon / Q. Li, Y. Ma, A. R. Oganov, Hongbo Wang, Hui Wang, Ying Xu, Tian Cui, Ho-Kwang Mao, Guangtian Zou // Phys. Rev. Lett. – 2009. – V. 102. – P. 175506(4).

4. Xu, N. A new family of sp^3-hybridized carbon phases / N.Xu, J.-F.Li, B.-L. Huang, B.-L. Wang // Chin. Phys. B. – 2016. – V. 25. – P. 016103(5).

5. Blank, V.D. Phase diagram of carbon and the factors limiting the quantity and size of natural diamonds / V.D. Blank, V.D. Churkin, B.A. Kulnitskiy, I.A. Perezhogin ,A.N. Kirichenko , V.N. Denisov, S.V. Erohin, P.B. Sorokin, M.Y. Popov .// Nanotechnology. – 2018. – V. 29. – P 115603.

6. Wang, Y. From soft to superhard: Fifty years of experiments on cold-compressed graphite / Y. Wang, K.K.M. Lee // J. Superhard Materials. – 2015. – V. 34. – P. 360-370.

7. Petrosyan, T.K. Studies of graphite transformation at cold compression / T.K. Petrosyan, G.V. Tikhomirova, D.K. Kuznetsov // J. Phys.: Conf. Ser. – 2015. – V. 653. – P. 012096(3).

УДК 621.3.049.76

НАНОТЕХНОЛОГИИ В ЭЛЕКТРОНИКЕ. ЕСТЬ ЛИ ПРЕДЕЛ МАСШТАБИРОВАНИЮ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ

А.В. Филимонов
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (г. Санкт – Петербург)
filimonov@rphf.spbstu.ru

NANOTECHNOLOGIES IN ELECTRONICS. IS THERE THE LIMIT TO SCALING INTEGRAL SCHEMES

A.V. Filimonov
St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great (St. Petersburg)
filimonov@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.104-107

Введение

Еще в начале 1965 г., примерно за три с половиной года до создания корпорации Intel, Гордон Мур написал внутренний доклад «Будущее интегральной электроники» с графиком, соединяющим 5 точек и связывающим число компонентов интегральных схем (ИС) и их минимальную цену для периода 1959-1964 гг. с предсказанием развития на следующие 10 лет. В докладе отмечалось, что появление новых моделей микросхем наблюдалось спустя примерно одинаковые периоды (18–24 месяца) после предшественников, при этом количество транзисторов в них возрастало каждый раз приблизительно вдвое. Мур пришел к выводу, что при сохранении этой тенденции мощность вычислительных устройств за относительно короткий промежуток времени может вырасти экспоненциально. Чуть позже отредактированная версия появилась в виде статьи в журнале Electronics 19 апреля 1965 г. [1].

В 1975 г. на ежегодной встрече Института инженеров по электротехнике и электронике (IEEE) Мур (уже как президент и исполнительный директор Intel) скорректировал свою закономерность до удвоения каждые 2 года, добавив в последние данные не только микросхемы памяти, но и гораздо более сложные по структуре микропроцессоры. Для корпорации Intel он стал (и остается до сих пор) руководящим принципом развития всей отрасли. Несмотря на сложности, эксперты не видят особых проблем с дальнейшей миниатюризацией в следующем десятилетии и полагают, что удастся найти решения для того, чтобы отодвигать предел закона Мура на все более дальнюю перспективу.

Рассмотрим основные закономерности, которые необходимо соблюдать при уменьшении размеров активных элементов ИС.

Масштабирование полевых транзисторов в интегральных схемах

Современные цифровые микросхемы основаны на КМОП–технологии, которая экономична и использует комплементарные пары *n*–МОП и *p*–МОП транзисторов. Огромным преимуществом этой технологии является также возможность масштабирования (*scaling*), т. е. пропорционального изменения всех размеров прибора без ухудшения его характеристик. С того времени, когда был создан первый процессор, размеры всех его элементов и расстояния между ними постоянно уменьшались, а архитектура и структура самого МОП–транзистора при этом практически не менялись.

Рис. 1 показывает, как за последние десятилетия изменялись линейные размеры и быстродействие КМОП–транзисторов и ИС на примере продукции корпорации Intel [2]. Приведенные на рисунке значения *проектных норм* – это линейное разрешение литографии, которая использована в данном технологическом цикле. Обычно это значение близко к длине затвора L_G и, разумеется, много меньше реальных размеров самого МОП–транзистора, которые и задают в ИС плотность упаковки.

Основные принципы масштабирования (закон Деннарда)

Классическая схема масштабирования предусматривает, что при уменьшении всех размеров элементов микросхемы должно оставаться неизменным электрическое поле.

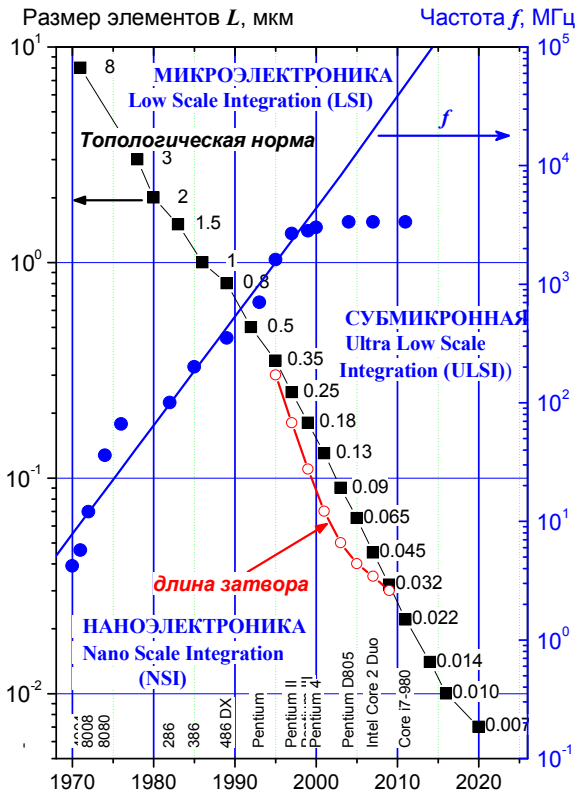


Рис. 1. Изменение размеров элементов ИС и рабочей частоты по годам (данные Intel).

Впервые теорию масштабирования разработал один из ведущих сотрудников IBM Роберт Деннард (*R.H. Dennard*), который в 1968 г. изобрел полупроводниковую динамическую память с произвольным доступом. Совершенствуя эту памяти, он установил, что при уменьшении линейных размеров МОП–транзистора и пропорциональном уменьшении подаваемого на затвор напряжения переключающие свойства транзистора сохраняются, а скорость переключения повышается. Из этого следовало, что для повышения производительности ИС надо увеличивать плотность упаковки и рабочую частоту, а энергопотребление снижать.

Анализ полученных результатов позволил Деннарду и его сотрудникам опубликовать в 1974 г. статью [3], которая вскоре заслужила имя собственное – ее стали называть *Scaling Paper*. Эта статья определила будущее технологии производства цифровых микросхем на несколько десятилетий.

Очевидно, что уменьшение физических размеров в k раз приводит к пропорциональному уменьшению емкости затвора и рабочего тока, а также к соответствующему возрастанию быстродействия. Уменьшается также рассеиваемая каждым элементом мощность, однако затрачиваемая на единицу площади мощность при классическом масштабировании не должна меняться в результате увеличения плотности упаковки. Важным параметром, определяющим производительность вычислений, является энергия, затрачиваемая процессором на операцию с одним битом (*power-delay product*) $E_{bit} = P \cdot \tau$, которая при классическом масштабировании уменьшается в k^3 раз. Наконец, при пропорциональном уменьшении всех размеров проводников, соединяющих элементы ИС друг с другом (межсоединений), неизбежно возрастают сопротивление этих проводников и относительные омические потери в них, в результате чего все большая часть подводимой энергии тратится на нагрев соединительных проводников.

В течение нескольких десятилетий при постоянном уменьшении размеров элементов ИС вплоть до топологической нормы 130 нм все законы классического масштабирования, действительно, удавалось выполнять, хотя это и требовало дополнительных усилий по борьбе с возрастающими паразитными утечками.

Фундаментальные ограничения на масштабирование МОП–транзисторов

За прошедшее время неоднократно высказывались прогнозы об окончании «эры масштабирования». Один из наиболее существенных был связан с «литографическим порогом», поскольку, из-за дифракционных эффектов невозможно оптическими методами получить пространственное разрешение меньше длины волны излучения (150 нм). Другое существенное ограничение связано с тем, что при уменьшении толщины подзатворного окисла SiO_2 до 3 нм и меньше наблюдается катастрофическое возрастание паразитного тока, обусловленного туннелированием электронов из затвора в канал. Однако ученые и технологи ценой немалых усилий смогли преодолеть эти барьеры.

Тем не менее, фундаментальные ограничения на минимальные размеры МОП–транзисторов все–таки существуют. Первое из них связано с тем, что в любой реализации двоичной логики состояния, соответствующие логической единице, и состояния, определяющие логический ноль, должны быть различимы. Это означает, что для перехода из одного состояния в другое необходимо затратить энергию E_{bit} (энергия для обработки одного бита информации), чтобы преодолеть потенциальный барьер между этими состояниями. В случае классической статистики Больцмана вероятность такого перехода $P_{\text{кл}}$ задается известной формулой $P_{кл} = \exp\left(-\frac{E_{bit}}{kT}\right)$.

Состояния будут различимы только в том случае, если эта вероятность меньше (желательно, много меньше), чем 0.5. Отсюда следует очевидное условие различимости состояний:

$E_{bit} \geq kT \cdot \ln 2$ (0.179 эВ при T = 300 К)

Это выражение обычно называется формулой Шеннона–Неймана–Ландауэра (*Shannon–Neumann–Landauer*) или просто SNL.

Рассмотренное ограничение на возможные пределы масштабирования, однако, не является главным. В частности, минимально возможные линейные размеры канала транзистора ($x_{\min}$) и максимальная рабочая частота ($f_{\max} = 1/t_{\min}$) ограничиваются известными соотношениями неопределенностей Гейзенберга. В соответствии с ними можно написать:

$$x_{\min}\frac{h}{2\pi\cdot\Delta p} = \frac{h}{2\pi\cdot\sqrt{2m\cdot E_{bit}}} = \frac{h}{2\pi\cdot\sqrt{2m\cdot kT\ln 2}} \approx 1{,}5\text{нм при 300 К}$$

$$t_{\min}\frac{h}{2\pi\cdot\Delta E} = \frac{h}{2\pi\cdot kT\ln 2} \approx 4\cdot 10^{-14}\text{с при 300 К}$$

Очевидно, что полученное значение $x_{\min}$ в ближайшее время вряд ли будет ограничивающим фактором, т. к. на порядок меньше современных топологических норм. Точно также и предельно возможная частота, определяемая выражением 3.7 – 25 ТГц, – намного больше достигнутой сейчас.

С другой стороны, еще в 2004 г. Патрик Гелсингер (Intel), заявил о том, что если продолжать использовать современные методы разработки процессоров, то к 2010 г. они будут вырабатывать больше тепла на квадратный миллиметр, чем ядерный реактор. Таким образом, уже на современном этапе развития технологии очевидно, что не получится одновременно увеличивать и плотность упаковки элементов, и рабочую частоту – в каждом конкретном случае придется выбирать что–нибудь одно, в зависимости от того, для чего данная ИС предназначена [4].

Проблемы, связанные со свойствами материалов и структурой приборов

Традиционная структура МОП–транзисторов обеспечила уменьшение их линейных размеров от 10 мкм в 70-е гг. прошлого века до субмикронного диапазона без внесения каких-либо структурных изменений и в полном соответствии с законами Мура и Деннарда. Это продолжалось в течение многих лет вплоть до достижения проектной нормы 180 нм. Дальнейшее продвижение по этому пути,

однако, столкнулось с рядом проблем, для разрешения которых разработчиком пришлось все–таки внести определенные изменения в конструкцию прибора.

При переходе к очередным проектным нормам уменьшение длины канала транзисторов происходит быстрее, чем снижение рабочего напряжения на стоке, поэтому напряженность электрического поля в канале вблизи стока увеличивается. В сильных электрических полях часть горячих электронов может приобрести энергию, достаточную для инжекции в подзатворный окисел через потенциальный барьер (~3.5 эВ). Как следствие, происходит неконтролируемое изменение порогового напряжения и возрастание подпорогового тока в запертом транзисторе, а также уменьшение со временем тока стока открытого транзистора. Все это приводит к долговременной нестабильности характеристик и снижению надежности ИС.

Еще один нежелательный эффект в сильных продольных полях связан с генерацией электронно–дырочных пар в *p*–*n*–переходе стока в результате лавинной ударной ионизации. В результате вблизи истока возникает дополнительный положительный заряд, снижающий потенциальный барьер истокового *p*–*n*–перехода, который начинает работать как эмиттер биполярного транзистора. Это приводит к дополнительной паразитной утечке между истоком и стоком.

Для борьбы с перечисленными эффектами следует уменьшать напряженность продольного электрического поля в транзисторе, т. е. расширять области пространственного заряда *p*–*n*–переходов. С этой целью в модифицированной конструкции МОП–транзистора области истока и стока были расширены путем создания менее легированных участков, которые удлиняют их в сторону канала. В модифицированную структуру был добавлен еще ряд элементов, отсутствовавших в классической схеме и обеспечивающих изоляцию соседних транзисторов.

Еще одно ограничение связано с напряжением питания, величина которого с введением каждой топологической нормы приближается к максимальному пределу, определяемому электрическим пробоем в кремнии. В частности, и по этой причине корпорация Intel в 2011 г. при введении проектной технологической нормы 22 нм впервые внедрила принципиально новую трехмерную (3D) структуру.

---

1. Moore, G.E. Cramming more components onto integrated circuits // Electronics. – 1965. – Vol. 38, № 8. – P. 114–117.

2. http://www.intel.com/museum/archives/history_docs/mooreslaw.htm

3. Design of ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions / R.H. Dennard [et al.] // The IEEE Journal of Solid-State Circuits. – 1974. – Vol. 9, № 5. – P. 256-268.

4. Филимонов, А.В. Специальные вопросы микро- и нанотехнологий: учебное пособие / А.В. Филимонов, А.Н. Андронов, А.Б. Устинов. – СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2019. – 237 с.

УКД 546.02

ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ МИКРОСФЕР ОКСИДА АЛЮМИНИЯ, ИНДУЦИРОВАННЫЕ ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ

Ю.В. Юрина, В.В. Нещименко
Амурский государственный университет (г. Благовещенск)
viktoriay-09@mail.ru

COLOR CENTERS OF ALUMINUM OXIDE MICROSPHERES INDUCED BY EFFECT OF ELECTRONS

Yu.V. Yurina, V.V. Neshchimenko
Amur State University (Blagoveshchensk)
viktoriay-09@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.108-110

Исследуется возможность применение микросфер (полых частиц) для создания терморегулирующих покрытий (ТРП) класса «солнечные отражатели» с высокой радиационной стойкостью [1-3]. Среди пигментов покрытий этого класса ZnO, TiO_2, ZrO_2, Zn_2TiO_4 порошки оксида алюминия могут найти свой диапазон применения, поскольку обладают большой запрещенной зоной от 5,13 [4] до 7 эВ [5] и хорошей прозрачностью в диапазоне длин волн от 0,2 до 6 мкм [6]. Так они могут найти большие перспективы их применения как пигменты для ТРП, так и в других областях промышленности.

Целью данной работы было исследование образование центров окраски в полых, микро- и наночастицах оксида алюминия по данным УФ-/видимой/ближней ИК- и спектов наведенного поглощения после взаимодействия электронами.

Синтезирование полых сфер проводилось при помощи шаблонного метода, в качестве шаблона использовались полистирольные шарики [3]. Этот метод рассматривается как простой, универсальный и эффективный метод для получения полых частиц.

Спектры диффузного отражения регистрировали в области 200-2500 нм спектрофотометром Perkin Elmer Lambda 950, диаметр интегрирующей сферы 150 мм, шаг 5 нм/с. Рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФЭС) были получены на установке ESCALAB 250Xi, источник излучения Al-Kα. Морфология поверхности была проанализирована на растровом электроном микроскопе (РЭМ) Helios NanoLab 600i. Рентгенофазовый анализ (РФА) проводился на Philips X'Pert PRO MRD. Облучение образцов осуществляли электронами энергией 100 кэВ, флюенсом $5 \cdot 10^{15}$ $см^{-2}$, исходный вакуум составлял $5 \cdot 10^{-5}$ Па, температура образцов при облучении составляла 25°С.

РЭМ было выявлено, что синтезированные полые сферы оксида алюминия имеют сферическую форму со средним размером от 500 до 3000 нм (рис. 1.а), микрочастицы – до 4000 нм. Площадь удельной поверхности полых частиц, измеренная БЭТ методом, составила 20,4±0,8 $м^2/г$, микрочастиц – 4,6±1,3 $м^2/г$, наночастиц – 65,4±5,2 $м^2/г$.

Рентгенофазовым анализом установлено (рис. 1.б), что полые, микро- и наночастицы Al_2O_3 имеют симметрию кристаллической решетки корунда (R3(-)c), с параметрами решетки: a=b=4,75±0,02 Å, c=12,982±0,02 Å, для наночастиц a=b=4,78 Å, c=13,01 Å, для микросфер a=b=4,76 Å, c=12,99 Å.

Из спектров диффузного отражения (рис.2.а) видно, что для всех видов частиц при 250-350 нм наблюдается характерный «провал» – уменьшение коэффициента отражения (ρ) до 65-75%. В этой

области проявляются отдельные полосы поглощения, которые могут быть связаны с различными типами собственных дефектов. В ближней инфракрасной области коэффициент отражения на 20-30% меньше у микросфер и наночастиц по сравнению с микрочастицами. Разница может быть связана с более высокой концентрацией хемосорбированных газов (группы CO, CO_2, O_2 и OH) на поверхности наноструктурированных частиц и высокой интенсивностью полос поглощения этих газов, расположенных в этой области спектра.

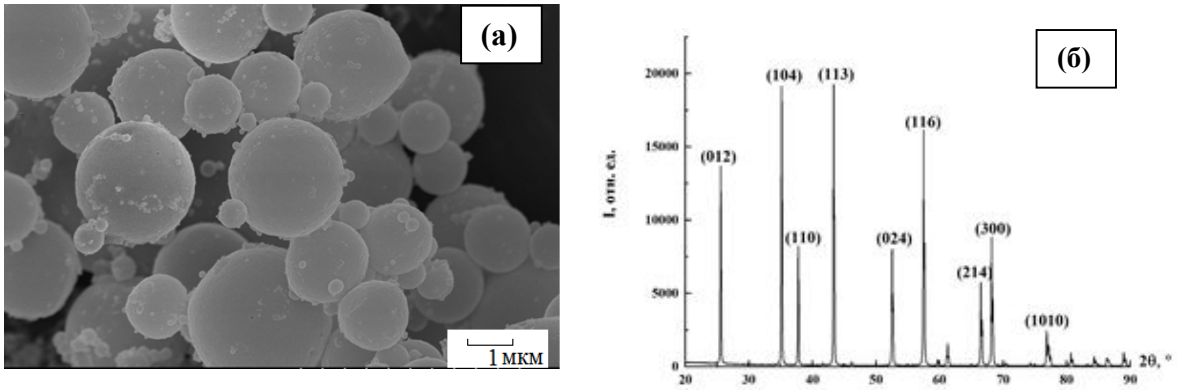


Рис. 1. РЭМ (а) и РФА полых частиц оксида алюминия (б).

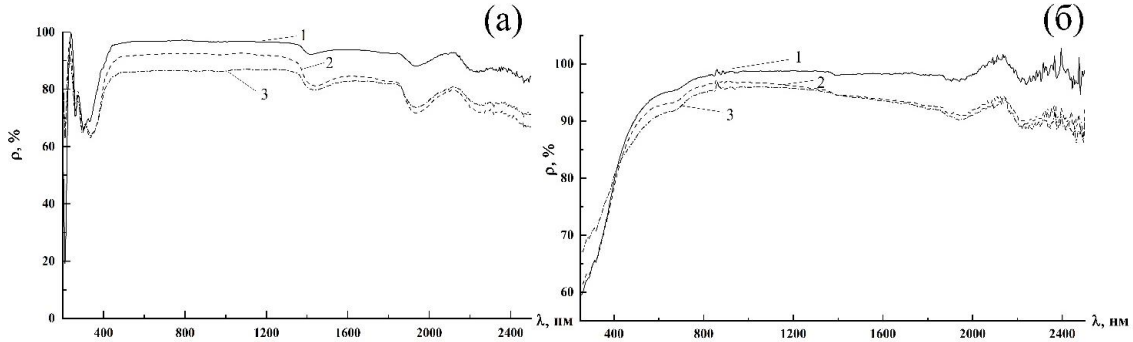


Рис. 2. Спектры диффузного отражения: 1 – микрочастиц Al_2O_3; 2 – наночастиц Al_2O_3; 3 – полых частиц Al_2O_3 до облучения (а), после облучения электронами (б).

Таким образом, отражательная способность микрочастиц Al_2O_3 выше по сравнению с полыми и наночастицами во всем спектральном диапазоне. Разница в поглощении в ультрафиолетовой и видимой областях спектра полых, микро-, наночастиц обусловлена различной концентрацией собственных центров поглощения оксида алюминия: F-центров и междоузельных ионов Ali в различном зарядовом состоянии. В спектрах диффузного отражения Al_2O_3 после облучения электронами (рис. 2.б), произошло увеличение коэффициента отражения только в ближней ИК-области спектра на 10 %, для полых и наночастиц Al_2O_3.

Облучения электронами (рис. 3) приводят к образованию спектров наведенного поглощения, наиболее интенсивная часть которых находится в области энергий от 2,5 до 5,5 эВ, обусловленных образованием центров окраски.

Интенсивность полос поглощения полых частиц практически в 3 раза меньше, чем у микрочастиц, что свидетельствует о малой концентрации радиационных дефектов в полых частицах Al_2O_3.

Различные моды ОН-групп и хемосорбированных газов определяют поглощение в ближней ИК-области спектров. В спектрах после воздействия ионизирующим излучением наблюдается отрицательная интенсивность. Возникновение этого эффект может быть связано с радиационным отбеливанием порошков и процессах десорбции молекул газов.

Таким образом, отражательная способность полых частиц практически во всей спектральной области, начиная с края основного поглощения и до 3 эВ, меньше, чем для микропорошков. Причиной этого является большая удельная поверхность полых частиц, что приводит к большой концен-

трации ненасыщенных связей и поверхностных дефектов, являющихся центрами поглощения квантов света в ближней инфракрасной области.

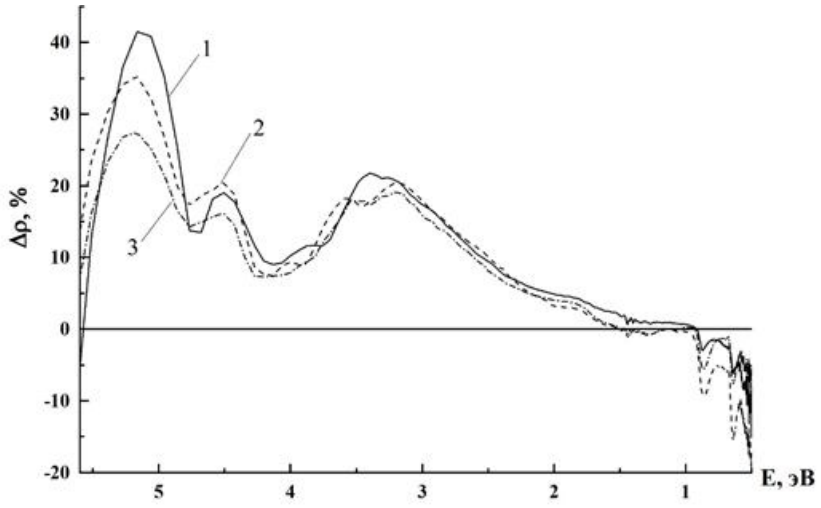


Рис. 3. Спектры наведенного поглощения: 1 – микрочастиц Al_2O_3; 2 – наночастиц Al_2O_3; 3 – полых частиц Al_2O_3, после облучения электронами с энергией 100 кэВ, флюенсом $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$.

В результате исследования установлено, что отражательная способность полых частиц Al_2O_3 меньше по сравнению с микро- и наночастицами во всем спектральном диапазоне. Однако из полученных спектров $\Delta\rho_E$ следует, что при воздействии электронами с энергией 100 кэВ флюенсом $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$ в полых частицах Al_2O_3 образуется меньше радиационных дефектов, чем в микро- и наночастицах.

1. Neshchimenko, V.V. Optical radiation stability of ZnO hollow particles / V.V. Neshchimenko, C. Li, M. Mikhailov,, J. Lv // Nanoscale. – 2018. – V. 47. – P. 22335.22347.

2. Mikhailov, M.M. Thermal control coatings based on pigments modified with Al_2O_3 nanoparticles / M.M. Mikhailov, V.V. Neshchimenko, A.N. Sokolovskiy, V.Y. Yurina // Progress in Organic Coatings. – 2019. – V. 131. – P. 340-345.

3. Yurina, V.I. Color centers induced by proton exposure in aluminum oxide hollow particles / V.I. Yurina, V.V. Neshchimenko, M.M. Mikhailov, C. Li // AIP Conference Proceedings. – 2017. – P. 2051, 020108.

6. Batra, I.P. // J. Phys. C: Solid State Phys. –1982. – V. 15. – P. 5399.

7. Mo, S.-D. Electronic and Structural Properties of Bulk γ-Al_2O_3 / S.-D. Mo, Y.-N. Xu, W.-Y. Xu // J. Am. Ceram. Soc. – 1997. – V. 80. – P. 1193.

8. Anthony, J.W., Bideaux, R.A., Bladh, K.W., Nichois, M.C. // Handbook of Mineralogy. – 1997. – V. III. – P. 628.

Секция 3
Материаловедение

УДК 539.422.52

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ СИГНАЛОВ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ АНАЛИЗЕ КИНЕТИКИ РАЗРУШЕНИЯ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

А.А. Брянский, О.В. Башков, А.Е. Проценко, О.Г. Шакирова
Комсомольский-на-Амуре государственный университет (г. Комсомольск-на-Амуре)
bryansky.aa@yandex.ru

CLUSTERING OF ACOUSTIC EMISSION SIGNALS AT THE ANALYSIS OF THE KINETICS OF DESTRUCTION OF POLYMERIC COMPOSITE MATERIAL

A.A. Bryansky, O.V. Bashkov, A.E. Protsenko, O.G. Shakirova
Komsomolsk-on-Amur State University (Komsomolsk-on-Amur)
bryansky.aa@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.111-112

Обнаружение образующихся дефектов и повреждений в полимерных композиционных материалах (ПКМ) является важной задачей при исследовании и проектировании изделий из них. Один из методов неразрушающего контроля, позволяющий получать информацию о протекающих структурных изменениях в материале, является акустическая эмиссия (АЭ). Анализируя частотные составляющие сигналов АЭ можно получить информацию о природе протекающих процессов и выделить характерные группы образующихся повреждений. Анализ форм спектров регистрируемых сигналов АЭ возможен самоорганизующейся картой Кохонена [1].

Ранее авторами были апробированы методы анализа на основе нескольких параметров сигналов АЭ [2], однако, такой подход не всегда обеспечивает понимание всей картины протекающих процессов.

Объектом исследования выступил образец стеклопластика, полученный методом вакуумной инфузии с использованием связующего DION 9300 FR и 46 слоёв стеклоткани Т-11-ГВС9, уложенной в одном направлении. Механическое испытание выполнялось методом трехточечного статического изгиба. Регистрация АЭ производилась на разработанном в КнАГТУ программно-аппаратном комплексе [3]. С целью более точного выделения протекающих в материале процессов скорость нагружения была взята в 10 раз меньше рассчитанной по стандарту. Для каждого сигнала определялся спектр Фурье, который урезался до информативного диапазона 20 - 650 кГц. Далее сигналы использовались для обучения нейросети и последующей кластеризации.

При анализе данных в качестве типовых спектров сигналов рассматривались центроиды кластеров. На рис. 1 слева в порядке сверху вниз указаны полученные центроиды спектров, характерные для растрескивания матрицы (40 - 78 кГц), выскальзывания волокон (90 -150 кГц), нарушения адгезии между матрицей и волокнами (200 - 270 кГц), излома волокон (350 - 410 кГц) и смешанного разрушения.

Начиная с 720 и до 760 с происходит нарушение адгезии предварительно нагруженной части стеклянных волокон, их излом и небольшое повреждение матрицы. С 760 по 800 с происходит смешанное разрушение. С 800 по 820 с процесс разрушения временно замедляется и с 820 по 840 с происходит скачкообразное нарушение адгезии между матрицей и волокном, что приводит к смешанному типу разрушений. С 840 по 900 с происходит критическое нарушение адгезии между волокнами и матрицей, приводящее к выскальзыванию волокон и смешанному разрушению, а также к образованию трещин в матрице. Момент разрушения образца (после 900 с) характеризуется интенсивным разрушением, образованием трещин и изломом образца.

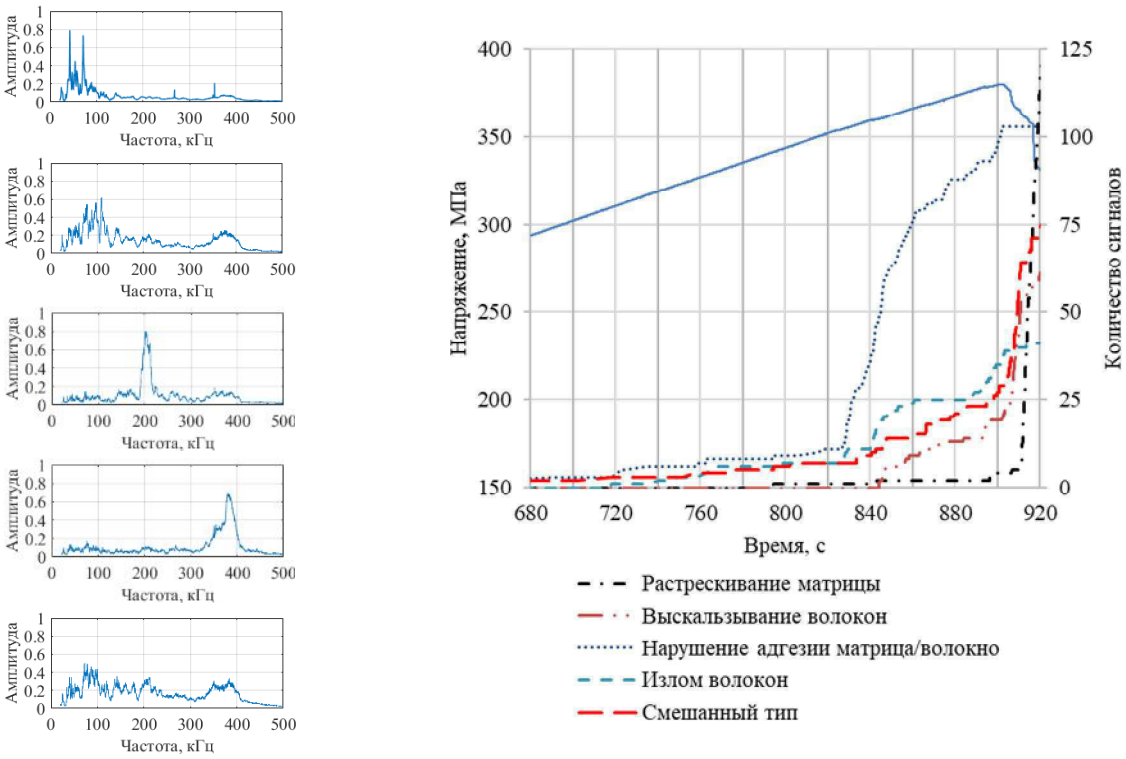


Рис. 1. Графики спектров типовых сигналов (слева) и накопление сигналов в кластерах по времени (справа).

Результаты описания процесса разрушения образца стеклопластика достаточно схожи с результатами, полученными авторами ранее [4]. Использование метода кластеризации сигналов АЭ по их спектрам позволило получить более полную картину протекающих процессов в материале под нагрузкой.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект №16-19-10149).

1. Li, X. Q. et al. Pattern recognition of fiber-reinforced plastic failure mechanism using computational intelligence techniques //2008 IEEE International Joint Conference on Neural Networks (IEEE World Congress on Computational Intelligence). – IEEE, 2008. – P. 2340-2345.

2.Bashkov, O.V. Bryansky, A.A., Khon, H., Panin, S.V. Damage evaluation criteria based on acoustic emission parameters for polymer composite materials //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing. – 2018. – Т. 2051. – №. 1. – P. 020027.

3. Bashkov, O.V., Parfenov, E.E., Bashkova, T.I. A Soft Hardware Complex for Recording and Processing of Acoustic Signal and for Location and Identification of Their Sources // Instrument and Experimental Techniques. – 2010. – V. 53. – № 5. – P. 682-687.

4. Bashkov, O.V. et al. Investigation of the Stages of Damage Accumulation in Polymer Composite Materials // Materials Science Forum. – Trans Tech Publications. – 2019. – Т. 945. – С. 515-521.

УДК 621.762; 537.523.4

ЭЛЕКТРОИСКРОВЫЕ Fe-Al-C-MoS_2 ПОКРЫТИЯ НА НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ AISI 304

А.А. Бурков, П.Г. Чигрин, М.А. Кулик
Институт материаловедения Хабаровского НЦ ДВО РАН (г. Хабаровск)
burkovalex@mail.ru

ELECTRIC SPARK Fe-Al-C-MoS_2 COATINGS ON AISI 304 STAINLESS STEEL

A.A. Burkov, P.G. Chigrin, M.A. Kulik
Federal State Budgetary Institution of Science Institute of Materials Science, Khabarovsk Scientific Center, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
burkovalex@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.113-116

Трибологические явления играют существенную роль в безопасности, надежности и эффективности практически всех инженерных конструкций, машин и агрегатов. Для трибологических взаимодействий только скорость износа является параметром, который в отличие от твердости, вязкости, модуля упругости и т.д., не является неотъемлемым свойством материалов. Улучшение триботехнических свойств нержавеющих сталей может быть достигнуто путем создания защитных покрытий с повышенной твердостью, а также введением в структуру покрытия антифрикционных соединений. Недостатком первого способа является образование абразивных частиц в области трения, приводящее к повышенному износу контртел. Внедрение в структуру покрытия сухих смазок позволяет избежать эффекта абразивного износа. В настоящее время наибольшее распространение получили сухие смазки на основе MoS_2 в силу его низкой стоимости и высокой устойчивости к окислению. Так в работе [1] Cu/Cu-MoS_2 покрытия были получены электроискровым осаждением на быстрорежущей стали при использовании в качестве электрода медной трубки заполненной MoS_2. Другим подходом для формирования антифрикционных покрытий на сплавах является создание развитой поверхности, которая заполняется частицами MoS_2. Для этого используют лазерное текстурирование или нанесение пористого керамического оксидного слоя на металле. Лазерное текстурирование поверхности сплава с последующим нанесением MoS_2 и графеноподобного углерода полировочной тканью было выполнено в статье [2]. В работе [3] керамическое покрытие наносили на стальную подложку методом плазменного напыления. Пористый керамический слой заполняли дисульфидом молибдена методом гидротермального синтеза. При этом частицы дисульфида молибдена формируются непосредственно в порах из маточного раствора, что обеспечивает высокую заполняемость смазки в покрытии. Общим недостатком использования керамического слоя является плохая адгезия керамики с металлом и образование абразивных керамических частиц в процессе трения, что вызывает повышенный износ контртел.

В настоящей работе впервые предложен метод повышения площади поверхности нержавеющей стали посредством селективного травления электроискрового интерметаллидного Fe-Al покрытия в растворе щелочи. Нанесение C/MoS_2 в пористую структуру осуществлялось in situ гидротермальным синтезом в растворе прекурсоров из глюкозы, тиомочевины и молибдата натрия.

Приготовление интерметаллидных Fe-Al покрытий осуществлялось методом электроискровой обработки в смеси гранул из железа и алюминия. Гранулы были изготовлены в форме цилиндров длиной 4±1 мм из прутков алюминиевого сплава 1188 и стали 3 диаметром 4±0,5 мм. Из этих гранул

были сформированы пять смесей с разной концентрацией металлов (табл. 1). Покрытия осаждали на образцы в форме цилиндров диаметром 12 мм и высотой 10 мм из нержавеющей стали AISI 304. Установка и режимы осаждения покрытий в среде гранул подробно описана в работе [4]. Покрытия осаждались в течение 10 минут. Фазовый состав полученных покрытий изучали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-Kα излучении. В целях идентификации линий рентгенограмм применялся программный пакет PDWin (НПП «Буревестник»).

Травление образцов выполнялось в 20% растворе гидроксида калия в течение 3 часов. Гидротермальный синтез аморфного углерода и дисульфида молибдена проводился в два этапа по известной методике [3]. Образцы помещались в гидротермальную бомбу из нержавеющей стали с фторопластовой вставкой и заливались 10% раствором глюкозы. Синтез проводился при температуре 160°С в течение 6 часов. Образцы и реактор промывались в дистилированной воде, высушивали и заливали 2% раствором молибдата натрия и 3,5% тиомочевины. Синтез проводился при температуре 220°С в течение 48 часов. Структура покрытий исследовалась при помощи растрового электронного микроскопа (СЭМ) Sigma 300 VP, оснащенного микрорентгеноспектральным анализатором (МРА) INCA Energy.

Таблица 1

Состав смесей гранул и обозначение образцов

Обозначение образцов	Содержание, at. %	
	Al	Fe
A20	20	80
A40	40	60
A60	60	40
A80	80	20
A100	100	0

Износостойкость покрытий согласно стандарту ASTM G99 – 04 исследовалась при сухом трении скольжения с применением контртел в виде дисков из быстрорежущей стали Р6М5 на скорости 0,47 м/с при нагрузке 10 Н. Время испытания составляло 600 с. Износ измерялся по изменению массы образцов с чувствительностью 0,1 мг.

Результаты и обсуждение

МРС анализ покрытий показал, что изменение состава Fe – Al смеси гранул позволяет изменять состав покрытий (рис. 1). Так, повышение содержания алюминия в смеси гранул с 20 до 100 ат.% приводит к его увеличению в составе покрытий с 32 до 74 ат.%. При этом содержание железа сокращается в три раза. Отклонения состава покрытий от состава смеси гранул объясняется более высокой электроискровой эрозией алюминиевых гранул по сравнению с железными из-за различия в температурах плавления. С другой стороны, когда используются только алюминиевые гранулы, железо подожки неизбежно участвует в формировании покрытия. Кроме того, как показали наши предыдущие исследования материал стального контейнера также может вносить железо на поверхность гранул и подложки до 4 ат.%. Результаты рентгенофазового анализа Fe-Al покрытий показывают преобладание интерметаллидов Fe-Al (рис. 1б). Причем с ростом содержания алюминия в смеси гранул состав интерметаллидов изменяется в сторону обогащения алюминием от FeAl до $Fe_{14}Al_{86}$ и даже свободного алюминия.

В процессе травления образцов с интерметаллидными покрытиями в растворе KOH происходило удаление алюминия согласно реакции:

$$2KOH + 2Al + 6H_2O = 2K[Al(OH)_4] + 3H_2$$

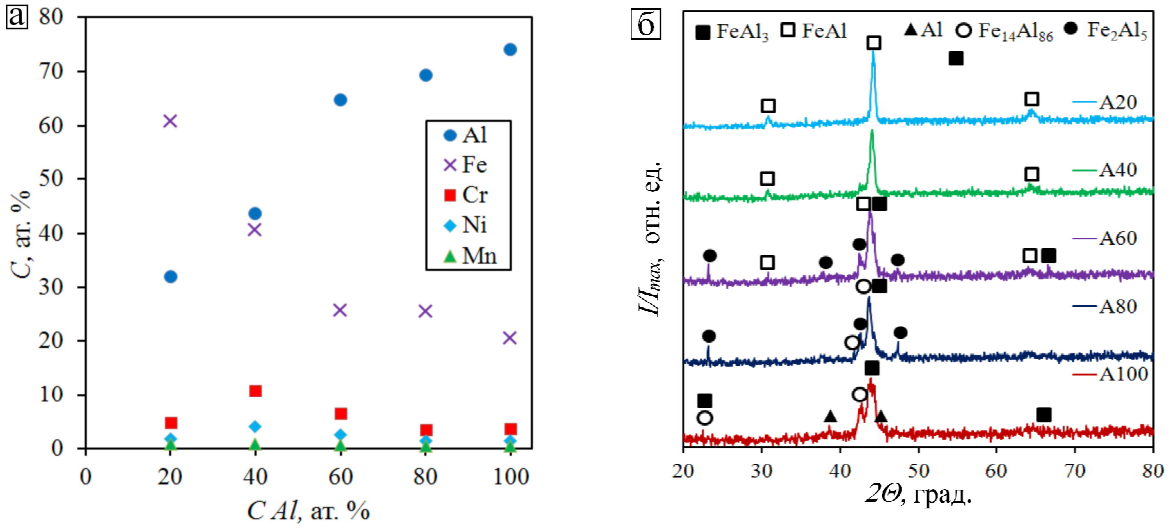


Рис. 1. Состав покрытий: *а* – по данным МРС анализа; *б* – результаты рентгенофазового анализа в зависимости от концентрации алюминия в смеси гранул.

В связи с этим, алюминий из интерметаллидов переходит в раствор в виде тетрагидроксоалюмината калия, частично покидая покрытие. Поэтому вполне ожидаемо, что с ростом содержания алюминия в покрытиях снижалась масса образцов в результате их травления (рис. 2). СЭМ изображение поперечного сечения покрытия А100 показано на рис. 3. На нем отчетливо виден слой из интерметаллидов Fe-Al (табл. 2) с поперечными трещинами, доходящими до подложки и пустотами.

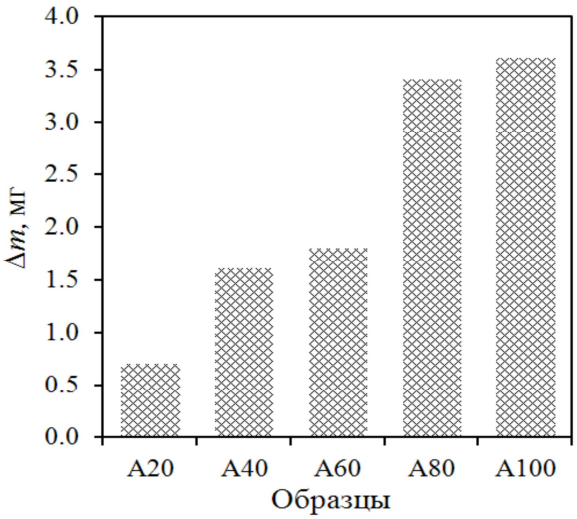


Рис. 2. Уменьшение массы образцов в результате травления в растворе гидроксида калия.

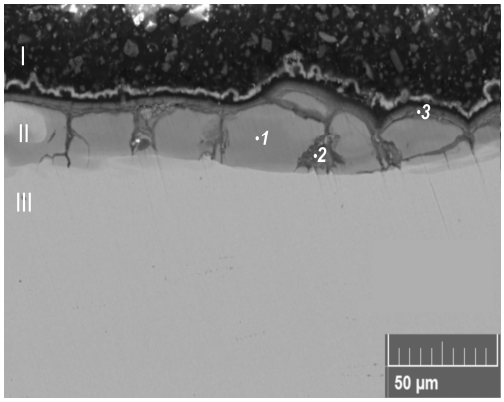


Рис. 3. Типичное СЭМ изображение покрытия А100 после нанесения: C/MoS_2. I – эпоксидная смола; II– Fe-Al покрытие; III - подложка. Точками обозначены места МРС сканирования.

Таблица 2

Результаты МРС анализа областей сканирования покрытия А100, согласно рис. 3

Место сканирования	Концентрация, ат. %								
	C	O	Al	S	Cr	Fe	Mo	Mn	Ni
1	—	—	74.13	—	3.69	20.43	—	0.42	1.33
2	27.94	29.56	12.54	12.23	1.08	8.23	8.43	—	—
3	33.44	26.59	3.7	16.05	1.07	8.42	10.38	—	0.35

Пустоты и трещины с повышенной шириной возникли в результате травления интерметаллидного покрытия. Трещины служили основными каналами, посредством которых электролит проникал вглубь покрытия. При этом наибольшее скопление пустот и наиболее широкие трещины наблюдаются на наиболее темных участках покрытия, имеющих повышенное содержание алюминия.

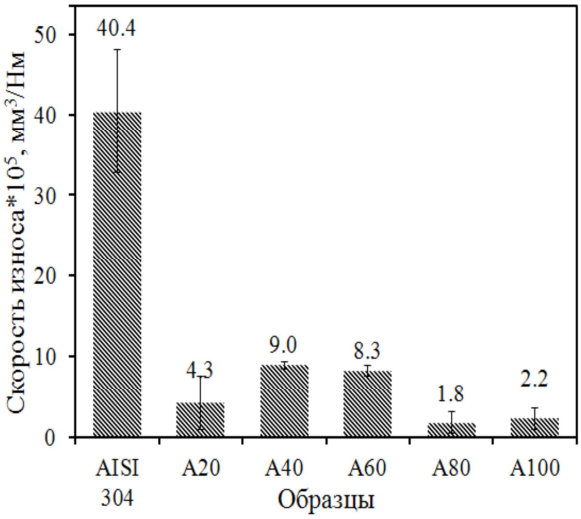


Рис. 4. Скорость изнашивания Fe-Al-C-MoS_2 покрытий по сравнению с нержавеющей сталью AISI 304 при нагрузке 10 Н.

После гидротермального синтеза трещины и пустоты заполнились аморфным углеродом и сульфидом молибдена. Серый слой на поверхности интерметаллидного покрытия толщиной 5-10 мкм также состоит из C/MoS_2. В составе серого слоя также наблюдаются: алюминий, железо, кислород и хром. Кислород указывает на формирование оксидов железа алюминия и хрома в результате травления и автоклавирования. С другой стороны, в качестве побочного продукты синтеза MoS_2 возможно формирование сульфидов железа.

Результаты испытания Fe-Al-C-MoS_2 покрытий и нержавеющей стали AISI 304 на износ в условиях сухого скольжения показаны на рис. 4.

Скорость износа образцов с покрытиями находилась в пределах от 1,8 до 9×10^{-5} $мм^3$/Нм. Это меньше, чем у стали AISI 304, в 4,5 – 22,5 раза.

Лучшие свойства ожидаемо продемонстрировали покрытия, приготовленные в среде гранул с наибольшим содержанием алюминия, которые после травления щелочью обладали наибольшей пористостью и, как следствие, содержащие больше компонента C-MoS_2.

Благодарности

Работа выполнена за счет средств гранта Правительства Хабаровского края (распоряжение от 10 июня 2019 г. № 476-рп).

1. Cao, T. The friction and wear behavior of Cu/Cu-MoS_2 self-lubricating coating prepared by electrospark deposition / T. Cao, S. Lei, M. Zhang // Surface and Coatings Technology. – 2015. – V. 270. – P. 24-32.

2. Arenas, M.A. Tribological behaviour of laser textured Ti6Al4V alloy coated with MoS_2 and graphene. / M.A. Arenas, J.I. Ahuir-Torres, I. García, H. Carvajal, J. de Damborenea // Tribology International. – 2018. – V. 128. – P. 240-247.

3. Li, S. YSZ/MoS_2 self-lubricating coating fabricated by thermal spraying and hydrothermal reaction. / S. Li, X. Zhao, Y. An, D. Liu, H. Zhou, J. Chen // Ceramics International. – 2018. – V. 44. – P. 17864-17872.

4. Burkov, A.A. Formation of WC-Co coating by a novel technique of electrospark granules deposition / A.A. Burkov, S.A. Pyachin // Materials and Design. – 2015. – V. 80. – P. 109–115.

УДК 621.762

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВ ТВЕРДОГО СПЛАВА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОЭРОЗИОННОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ В РАЗНЫХ СРЕДАХ

М.И. Дворник, Е.А. Михайленко
Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г. Хабаровск)
mea80@list.ru

PREPARATION OF POWDERS OF A SOLID ALLOY BY THE METHOD OF ELECTRO-EROSION DISPERSION IN DIFFERENT MEDIA

M.I. Dvornik, E.A. Mikhailenko
Federal State Budgetary Institution Institute of Materials Science, Kola Scientific Center FEB RAS (Khabarovsk). mea80@list.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.117-119

Вольфрамокобальтовые твердые сплавы были и остаются наиболее распространенным материалом металлорежущих инструментов. Вольфрамокобальтовые сплавы изготавливают методами порошковой металлургии. Порошки для спекания твердых сплавов получают разными способами. В данной работе использован метод электроэрозионного диспергирования (ЭЭД), который является способом получения порошка твердого сплава преимущественно сферической формы с размером от нескольких нм до сотен мкм [1, 2]. ЭЭД WC-Co сплавов является способом получения порошков наноструктурного и ультрамелкозернистого твердого сплава с высокой производительностью, низкими затратами и высокой экологичностью [3]. В основе ЭЭД находится действие искрового разряда между анодом и катодом, при котором приповерхностные слои эродируют в жидкой, паровой и твердой фазах. Химический состав получаемого порошка изменяется из-за реагирования с рабочей жидкостью, в которой происходит диспергирование. В качестве рабочей жидкости для диспергирования в данной работе применяли дистиллированную воду и трансформаторное масло (производитель Foxy, ТУ 38.1011025-85). Диспергирование проводили в насыпном слое, так как это единственный способ промышленного получения порошков. Рабочая жидкость без замены многократно проходила через зону разрядов. Такая рециркуляция приводит к тому, что частицы подвергаются разряду неоднократно и средний размер их уменьшается. Проведены комплексные исследования состава порошков после ЭЭД твердых сплавов с различным содержанием кобальта (WC-8% Co, WC-10% Co, WC-15%Co) в насыпном слое в воде и масле.

Порошки, полученные электроэрозионным диспергированием в дистиллированной воде и трансформаторном масле, обладают разным содержанием углерода. ЭЭД в воде приводит к потерям углерода за счет окисления продуктов эрозии твердого сплава, а диспергирование в масле приводит к повышению содержания углерода в образующемся порошке за счет взаимодействия с продуктами пиролиза масла. Содержание углерода в полученном порошке измеряли с помощью анализатора EMIA-320V2. Отжиг производился в вакуумной трубчатой печи Carbolit STF при температуре 1000°C в вакууме и при температуре 900°C. в атмосфере CO для порошков полученных в воде и атмосфере CO_2 для порошков, полученных в трансформаторном масле.

Гранулометрический анализ показал, что методом ЭЭД в насыпном слое получаются порошки достаточно однородные по размеру (рис. 1). Наночастицы образованные кристаллизацией паровой

фазы и другие мелкие частицами циркулируют в рабочей жидкости, повторно попадая в зону разряда и многократно подвергаясь термохимическому воздействию. Средний размер частиц порошка уменьшается при увеличении доли кобальта в используемых электродах, что связано с более низкой температурой плавления кобальта (рис. 2).

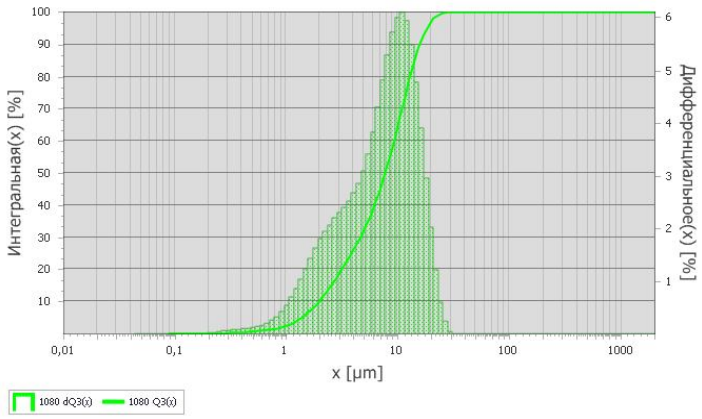


Рис. 1. Гранулометрический состав порошка, полученного ЭЭД сплава WC-15Co в масле до отжига при 900°C (d=8.4 мкм).

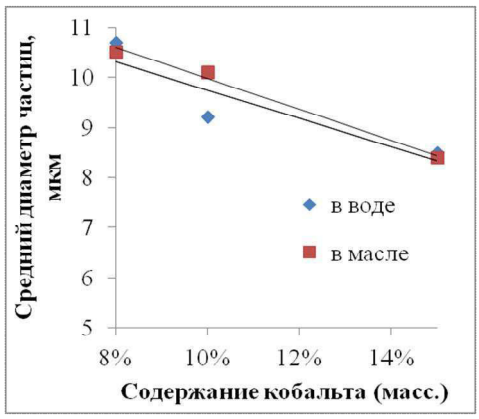


Рис. 2. Зависимость среднего диаметра частиц от содержания кобальта.

При ЭЭД в дистиллированной воде происходит окисление поверхности и получаемых частиц порошка. Потеря углерода при отжиге в вакууме значительнее в порошках, полученных из электродов с большим содержанием кобальта. (рис. 3). Такого содержания (менее 1%) недостаточно для создания сплавов с необходимыми эксплуатационными свойствами.

Для предотвращения обезуглероживания отжиг порошков, полученных в воде проводили в атмосфере газа CO в течение 30 минут при температуре 900°C, при этом содержание углерода изменилось с 2,8% до 4,2%. Порошок с таким содержанием углерода уже можно использовать для создания градиентных твердых сплавов, в качестве слоя с недостатком углерода.

При ЭЭД в масле из-за деструкции масла под действием разрядов образуется свободный углерод. Содержание углерода в полученных порошках не зависит от содержания кобальта в исходных электродах и составляет примерно 9%. Изменение содержания углерода после отжига в вакууме при 1000°C находится в пределах погрешности (рис. 4).

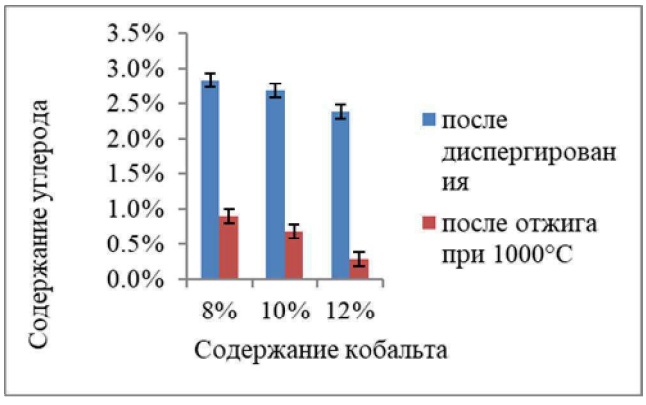


Рис. 3. Содержание углерода в порошках, полученных ЭЭД в воде до и после отжига в вакууме.

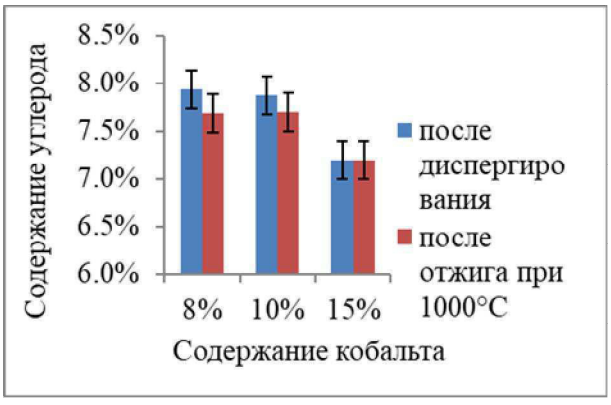


Рис. 4. Содержание углерода в порошках, полученных ЭЭД в масле до и после отжига в вакууме.

Отжиг в атмосфере CO_2 приводит к уменьшению содержания углерода в порошках, полученных в масле. Причем конечное содержание углерода в порошках зависит от времени обезуглероживания.

Таким образом, отжиг в атмосфере оксидов углерода приводит к уменьшению разницы в содержании углерода в порошках, полученных в разных средах.

Ренгенофазовый состав порошков сильно зависит от среды диспергирования (рис. 5). В воде преимущественно образуется вольфрам W и карбид W_2C. В масле образуется карбид вольфрама WC и значительное количество графита. Из порошков, полученных ЭЭД, прошедших отжиг в атмосфере CO или CO_2, можно изготавливать твердые сплавы с необходимыми эксплуатационными свойствами [4].

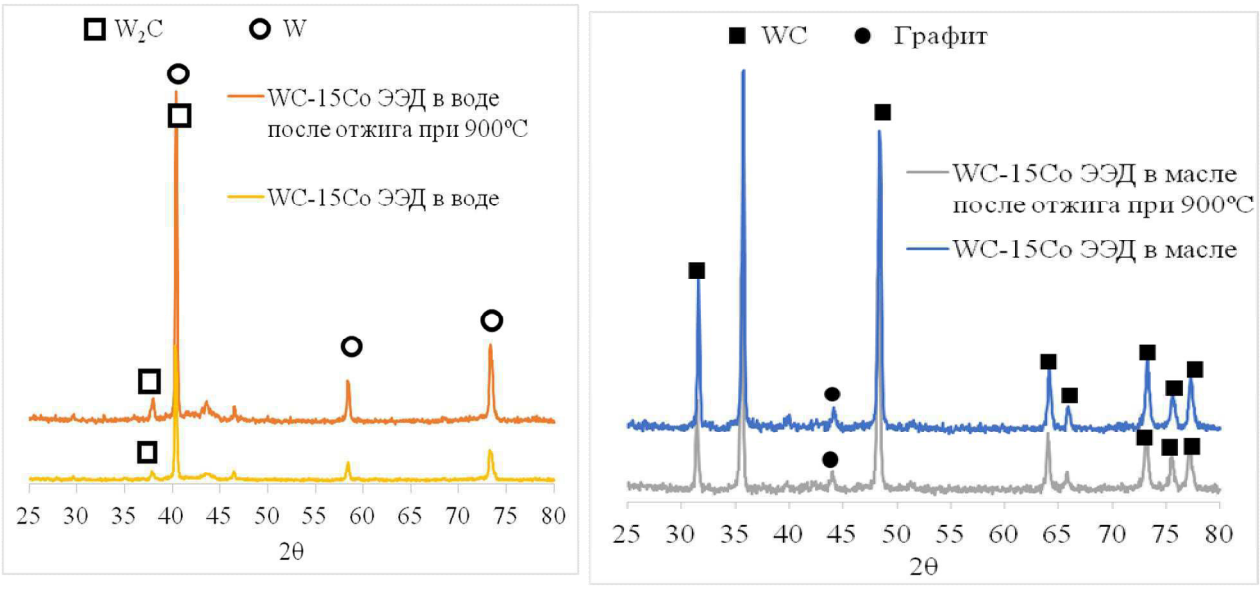


Рис. 5. Фазовый состав порошков, полученных в воде и в масле.

Выводы

ЭЭД в ограниченном объеме рециркулируемой жидкости приводит к значительному изменению состава получаемых порошков, формированию устойчивых фаз (α-W или α-WC). Крупные частицы, образованные хрупким разрушением, не выносятся из зоны диспергирования. Полученные порошки преимущественно состоят из сферических частиц образованных кристаллизацией из жидкого состояния.

При диспергировании твердого сплава WC-15Co в воде содержание углерода снижается с 5.2% до 2.4%. После отжига в вакууме при 1000°C содержание углерода снижается до 0.3% в результате восстановления оксидов. При уменьшении содержания кобальта количество сохранившегося углерода увеличивается. Полученные порошки состоят преимущественно из вольфрама (α-W) с небольшим содержанием W_2C

При диспергировании твердого сплава WC-15Co в масле содержание углерода увеличивается с 5.2% до 8.4%. После отжига содержание углерода не изменяется. При уменьшении содержания кобальта количество углерода увеличивается. Фазовый анализ показал наличие лишь α-WC.

1. Панов, В.С. Технология и свойства спеченных твердых сплавов и изделий из них/ В.С. Панов, А.М. Чувилин. – М.: МИСИС. 2001. – С. 452.

2. Третьяков, В.И. Основы металловедения и технологии производства спеченных твердых сплавов. – М.: Металлургия. 1976. – С. 512.

2. Dvornik, M., Mikhailenko, E. Control of carbon content in ultrafine cemented carbide by heat treatment in reducing atmospheres containing carbon oxides // Journal of Materials Engineering and Performance. – 2018. – Vol. 27, № 7. – P. 3610-3618.

3. Dvornik, M., Mikhailenko, E. Fabrication of Nanostructured Gradient Tungsten-Cobalt Alloy Using Carbon Deficiency Powder // Defect and Diffusion Forum. – 2018. – Vol. 386. – P. 370-376.

УДК 542.06:546.87

ПОЛУЧЕНИЕ β-Bi_2O_3 МЕТОДОМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПИРОЛИТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

О.И. Каминский, К.С. Макаревич, Е.А. Кириченко, К.С. Зайцев, С.А. Пячин
Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г. Хабаровск)
infarest@infarest.khv.ru

OBTAINING β-Bi_2O_3 BY THE METHOD OF LOW-TEMPERATURE PYROLYTIC SYNTHESIS AND STUDY BY ITS OPTICAL METHODS.

O.I. Kaminsky, K.S. Makarevich, E.A. Kirichenko, K.S. Zaitsev, S.A. Pyachin
Institute of Material Science, Kola Science Center, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)

DOI: 10.2250/PFARE.2019.120-123

Введение

Как известно оксид висмута (III) Bi_2O_3 имеет четыре модификации одна из которых (α-Bi_2O_3), термодинамически стабильна до 736°C, а остальные (β-γ-δ-Bi_2O_3) являются метастабильными высокотемпературными модификациями оксида.

Для стабилизации бета оксида висмута при высоких температурах (более >400°C) используется оксид церия, который при образовании твердого раствора не изменяет параметры кристаллической решетки [2].

Бета-оксид висмута обладает уникальной туннельной кристаллической структурой и он находит широкое применение, как катод топливных элементов и варисторов, а так же благодаря большой области поглащения в видимом диапазоне спектра может использоваться, как эффективный сенсабилизатор узкозонных полупроводников к видимому свету. Создаваемые на основе таких гетероструктур фотокатализаторы применяются для очистки воды и генерации водорода [3].

Методика и материалы

Все исследованные образцы β-Bi_2O_3 были получены путем «мягкого» низкотемпературного синтеза. Использование органоминерального комплекса висмута с сорбитом в качестве прекурсора для такого синтеза предложено впервые и ранее в литературе не описано. Органоминеральный комплекс был получен из $Bi(NO_3)_2 \cdot 5H_2O$ и $C_6H_{14}O_6$ путем перетирания обоих реагентов до образования однородного прозрачного раствора только за счет собственной воды кристаллогидрата. Затем проводилось разложение прекурсорного комплекса до полного удаления органической составляющей прекурсора. Процесс пиролиза инициировался нагреванием прекурсорной смеси, после чего протекал самопроизвольно за счет выделяющегося тепла. Далее полученный промежуточный продукт подвергался изотермическому отжигу при температурах от 200 до 700°C, при этом полученные при различных температурах образцы характеризовались различным фазовом составом, параметрами кристаллической структуры и морфологией.

Результаты и их обсуждение

Первая серия полученных образцов была синтезирована из прекурсорной смеси, в которой соотношение $Bi(NO_3)_2 \cdot 5H_2O$ к $C_6H_{14}O_6$ составляло 6:1. Результаты РФА анализа образцов этой серии представлены на рис. 1а.

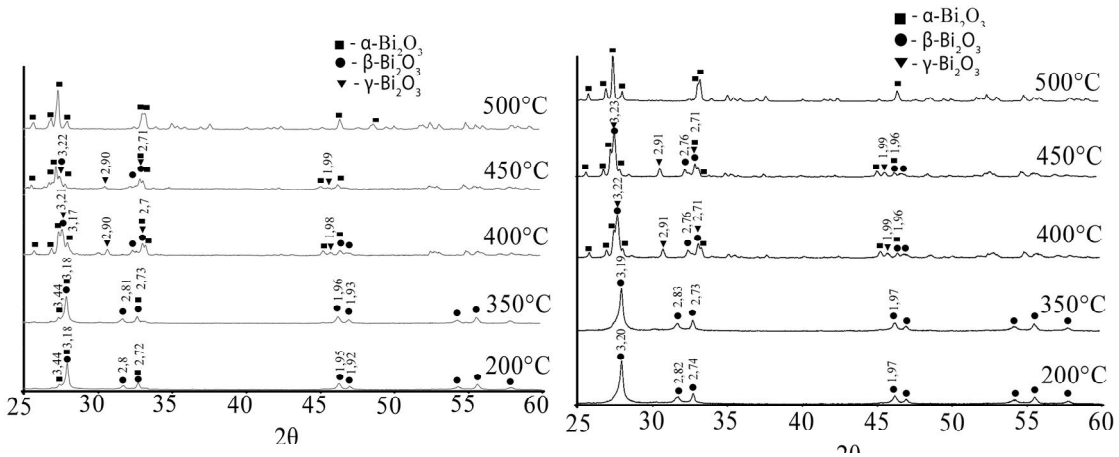


Рис. 1. Результаты РФА анализа образцов, полученных пиролизом органоминерального комплекса висмута с сорбитом при соотношении висмут/комплексон 6:1 и 7:1.

Анализ дифрактограмм показывает, что образцы, полученные при температурах синтеза 200, 350°С, представляют собой β-Bi_2O_3 с примесью α-Bi_2O_3. При температуре 500°С регистрируются рефлексы, принадлежащие только α-Bi_2O_3. При соотношении 7:1 α-Bi_2O_3 при температурах 200, 350°С не наблюдается (рис. 1б). В интервале температур в обоих соотношениях при 400-450°С регистрируется наличие метастабильной (интеркалярной) фазы рентгеноструктурные характеристики которой не присущи ни β-Bi_2O_3 ни α-Bi_2O_3 и не могут являться характеристиками механической смеси этих фаз.

Согласно данным СДО (рис. 2) для соотношения 7:1, полученная интеркалярная фаза (400-450°С) имеет индивидуальные оптические характеристики, отличные от α-Bi_2O_3 и β-Bi_2O_3.

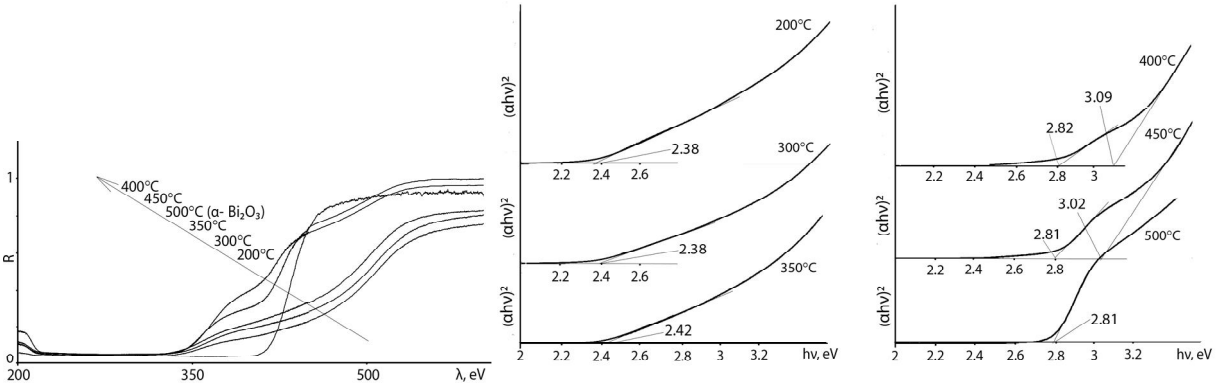


Рис. 2. СДО образцов (а), полученных пиролизом органоминерального комплекса висмута с сорбитом при соотношении висмут/комплексон 7:1 и обработанные СДО по формуле $(\alpha h\upsilon)^2$.

Как видно из рис. 2а, кривая интеркалярной фазы не является суперпозицией спектров альфа- и бета-фаз, что говорит об ее собственной зонной структуре и согласуется с данными РФА. Из полученных данных можно предположить, что перестройка в α-Bi_2O_3 проходит через γ фазу.

В температурном интервале 200-350°С значения параметров решетки и размеров кристаллитов составляют: 200°С: a=7.742 Å, c= 5.646 Å, D=23нм, 350°С: a=7.742 Å, c=5.655 Å, D=25нм.

Для стабилизации беты при температурах больше 350°С был введен CeO_2. Его выбор в качестве стабилизирующего допанта был обусловлен тем, что он при используемом количестве не образует твердый раствор с Bi_2O_3, но способен затормаживать перестройку β-Bi_2O_3 в α-Bi_2O_3, располагаясь по границам зерен β-Bi_2O_3 в виде индивидуальной фазы CeO_2 [2]. Из данных РФА видно (рис. 3), что бета фаза продолжает существовать вплоть до 650°С. ТГ показвает, что переход в α фазу происходит только при температуре 656°С.

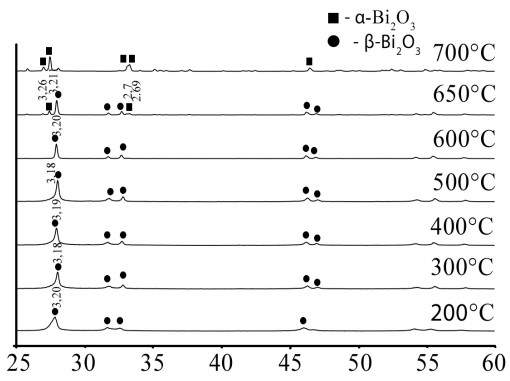


Рис. 3. Результаты РФА анализа образцов, полученные пиролизом органоминерального комплекса висмута с сорбитом при соотношении висмут/комплексон 7:1 с CeO_2.

При этом на всем исследованном температурном интервале образование пиков интерколярной фазы, регистрируемых в предыдущих сериях образцов не отмечалось. Наблюдается прямой перед в α- Bi_2O_3.

В таблице приведены параметры решетки для образцов различной температуры и средние размеры кристаллитов. С увеличение температуры решетка стабилизируется до размеров стандартной бета фазы (ICDD-27-50), размеры же кристаллитов растут с увеличением температуры синтеза.

Кривые СДО показывают, что оптический диапазон поглощения допированной фазы при этом расширяется в видимую область спектра на 32нм, а ширина запрещенной зоны составляет 2,28 эВ, что на 0,14 эВ меньше, чем у недопированного β-Bi_2O_3 (рис. 4).

Результаты исследования структурных и морфологических параметров образцов с CeO_2

Температура синтеза, °С	Параметры ячейки, Å			Средний размер кристаллитов (D), нм
	a	c	V	
200	7.79	5.657	343.2	18
300	7.734	5.63	337.8	27
400	7.74	5.65	338.5	30
500	7.75	5.649	339.3	32
600	7.754	5.646	339.5	69
650	7.75	5.642	338.9	80

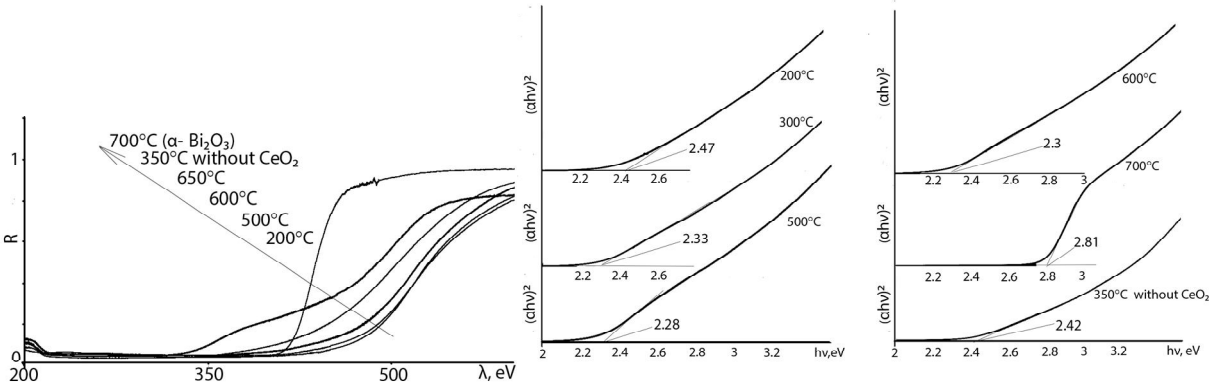


Рис. 4. СДО образцов, полученных пиролизом органоминерального комплекса висмута с сорбитом при соотношении висмут/комплексон 7:1 с допированием CeO_2 и (б), обработанные СДО по формуле $(\alpha h\upsilon)^2$.

Выводы

1. Управление оптическими, электрофизическими, структурными и морфологическими характеристиками β-Bi_2O_3 возможно путем варьирования условий его пиролитического синтеза из органоминерального комплекса висмута с сорбитом.

2. Полученный β-Bi_2O_3 темодинамически стабилен вплоть до 350°С. При температуре более 500°С происходит превращение в фазу α-Bi_2O_3. В интервале температур 350-500°С регистрируется наличие метастабильной (интеркалярной) фазы рентгеноструктурные и оптические характеристики

которой не присущи ни β-Bi_2O_3, ни α-Bi_2O_3 и не могут являться характеристиками механической смеси этих фаз.

3. Допирование церием (CeO_2 5%, ат.) позволяет стабилизировать структуру β-Bi_2O_3 до 650°С при этом сохранить параметры кристаллической. Оптический диапазон поглощения допированной фазы при этом расширяется в видимую область спектра на 32нм, а ширина запрещенной зоны составляет 2,28эВ, что на 0,14эВ меньше, чем у недопированного β-Bi_2O_3. Таким образом, полученный бета-оксид висмута может быть эффективным сенсабилизатором узкозонных полупроводников к видимому свету, благодаря большой области поглащения в видимом диапазоне спектра, для создания на его основе гетероструктурных композиционных материалов для фотокатализа и генерации водорода.

4. Варьирование температурными параметрами синтеза позволяет получать β-Bi_2O_3 с требуемой дисперсностью и размером микрокристалитов от 18 до 80 нм.

1. Юхин, Ю.М., Михайлов, Ю.И. Химия висмутовых соединений и материалов // Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. – 360 с.

2. Chen, X. L., Eysel, W. Letter to the editor The Stebilisation of β-Bi2O3 by CeO_2 // Journal of stolid start cheminstry. – 1996. – V. 127. – P. 128-130.

3. Wang, Y.J, He, Y.M. Li, T. T., Cai, J., Luo, M.F., Zhao, L.H. Photocatalytic degradation of methylene blue on $CaBi_6O_{10}/Bi_2O_3$ composites under visible-light // Chemical Engineering Journal. – 2012. - Vol. 189–190. P. 473-481.

УДК 621.375.826

ИМПУЛЬСНОЕ ЛАЗЕРНОЕ УПРОЧНЕНИЕ КОНСТРУКЦИОННЫХ СТАЛЕЙ

В.А. Ким, Аунг Нгве Тэйн, А.А. Афанасьева
Комсомольский-на-Амуре государственный университет (г. Комсомольск-на-Амуре)
sinerg@mail.ru

PULSE LASER STRENGTHENING OF STRUCTURAL STEELS

V.A. Kim, Aung Ngwe Thain, A.A. Afanasyeva
Komsomolsk-on-Amur State University (Komsomolsk-on-Amur)
sinerg@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.123-125

Структурные превращения в поверхностных слоях под действием лазерного излучения протекают в неравновесных условиях взаимодействия материала с высококонцентрированным потоком энергии и развиваются по синергетическому алгоритму. В результате в поверхностных слоях образуются динамические диссипативные структуры, обладающие высокой разномасштабной упорядоченностью и сопротивляемостью к внешнему энергетическому воздействию. В таких структурах возникают активные каналы отвода поглощенной энергии в виде теплового и массового потока [1-4].

После прекращения лазерного воздействия диссипативные структуры перерождаются в статические, наследственно сохраняя строение и свойства динамического состояния. Поэтом структура, сформированная под действием лазерной обработки, характеризуется неравновесностью, повышенной плотностью дефектов кристаллического строения и упорядоченностью на нано-, микро- и мезомасштабном уровнях. В процессе эксплуатации упрочненная поверхностная структура подвергается

различным видам воздействий, как правило, контактно-фрикционным или локально силовым, которые можно представить как энергетические потоки, определенной плотности мощности, инициированные режимами работы изделия. Под действием этих потоков формируются рабочие диссипативные структуры, которые также минимизируют влияние внешних энергетических воздействий, обеспечивают максимальную сопротивляемость к структурной деградации, повышенную надежность материала и изделия в процессе эксплуатации. Диссипация в этом случае также связана с функционированием зон трансформации подводимой энергии в тепло и развитием активных каналов повышенной тепловой проводимости.

Сопротивляемость материала структурной деградации обеспечивается стабильностью и устойчивостью дефектов кристаллического строения, в том числе, межзеренных границ. Эти же микроструктурные составляющие трансформируют подводимую энергию в тепло за счет работы внутреннего трения, а их упорядоченные комбинации являются активными каналами тепловой проводимости. Пластическая деформация связана с динамикой скольжения дислокаций, а упрочнение металлов и сплавов вызвано торможением дислокаций различными дефектами кристаллического строения. Наиболее активная блокировка скользящих дислокаций осуществляется внутренними границами раздела субзерен, зерен и отдельных фаз. Следовательно, диссипативные свойства поверхностных структур и степень их упрочнения определяется одними и теми же микроструктурными показателями [5].

Степень развитости внутренних границ можно количественно оценить по средней плотности границ микроструктурных объектов

$$p_{ср} = \frac{1}{F_ф} \sum_{i=1}^{N} P_i,$$

где P_i – периметр i-го микроструктурного объекта; N – количество микроструктурных объектов на изображении; $F_ф$ – площадь поверхности микрошлифа, зафиксированных на изображении.

Количественные показатели структурной организации материалов, в том числе, и среднюю плотность границ можно определить с помощью компьютерных программ обработки изображений металлографических структур, таких как Image.Pro.Plus.5.1 (США), SIAM (Россия) и других [6, 7, 8].

Поверхностная структура, сформированная под действием лазерного излучения, имеет слоистое строение. Самый верхний слой образуется из жидкофазного расплава в результате высокоскоростной кристаллизации и закалки. Далее следует зона термического влияния, в которой можно выделить области твердофазной закалки и отпуска. Каждый микроструктурный слой характеризуется своей средней плотностью границ [9, 10].

На рис. 1 показано распределение средней плотности границ по глубине упрочненного слоя при импульсной лазерной обработке стали 25ХМ на различных режимах излучения.

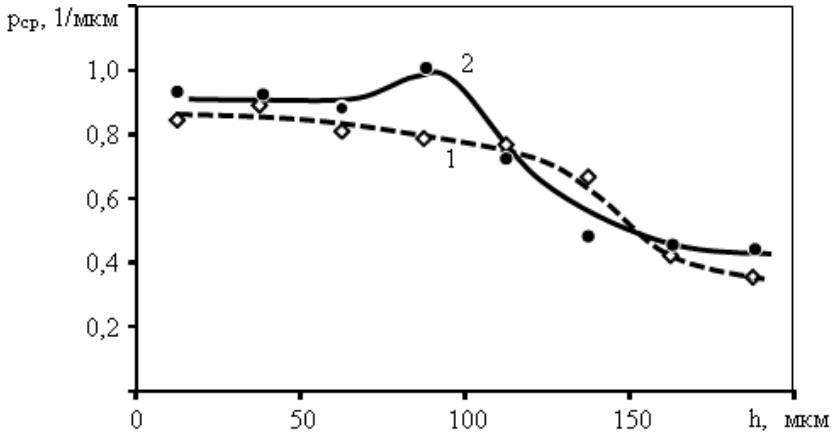


Рис. 1. Распределение средней плотности границ по глубине упрочненного слоя стали 25ХМ.

Аналогичный характер распределения имеет место при лазерной обработке углеродистых и инструментальных сталей, а также титановых сплавов. Исходная структура характеризуется $p_{ср}$ = 0,4…0,55 1/мкм, а упрочненная 0,8…1,1 1/мкм. Наибольшая средняя плотность границ наблюдается в зоне термического влияния в области твердофазной закалки. С появлением оплавленного слоя средняя плотность границ незначительно снижается, оставаясь на высоком уровне по сравнению с исходным состоянием.

1 – E = 1051 Дж/см^2; 2 – E = 773 Дж/см^2

Характер распределения микротвердости по глубине упрочненного слоя адекватен распределению средней плотности границ

1. Прохоров, А.М., Конов, В.И., Урсу, И., Михэилеску, И.Н. Взаимодействие лазерного излучения с металлами. – М.: Наука, 1988. – 537 с.

2. Чудина, О.В. Комбинированные методы поверхностного упрочнения с применением лазерного нагрева. Теория и технология. – М.: МАДИ (ГТУ), 2003. – 248 с.

3. Заветовская, И.Н., Игошин, В.И., Шишковский, И.В. Моделирование лазерной закалки сталей с учетом тепловых, кинетических и диффузионных процессов // Физика и химия обработки материалов. – 1989. – № 5. – С. 50-57.

4. Либенсон, М.Н., Яковлев, Е.Б., Шандыбина, Г.Д. Взаимодействие лазерного излучения с веществом (силовая оптика). Конспект лекций. – Ч. I,. Поглощение лазерного излучения в веществе / под общ. ред. В.П. Вейко. – СПб: СПб ГУ ИТМО, 2008. – 141 с.

5. Балахонов, Р.Р., Болеста, А.В., Бондарб, М.П и др. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах /отв. ред. В.Е. Панин. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. – 520 с.

6 Ким, В.А., Белова, И.В., Золоторева, С.В. Количественные показатели структурной организации поликристаллических материалов / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2014. – Т.80, № 4. – С. 43-46.

7. Kim, V.A., Belova, I.V., Boutin, A.V. Kinetics of structural of hardened steel 15H5M during tempering // Modern materials and technologies. – 2013. – № 1. - С. 126-131.

8. Ким, В.А., Евдокимова, Р.В., Золоторева, С.В., Попкова, А.А., Йошида, М. Статистическая оценка количественной металлографии // Ученые записки КнАГТУ. – 2013. – № II-1 (14). – С. 76-82.

9. Ким, В.А., Матарыкина, А.С., Матарыкина, С.С., Назаренко, Л.О. Лазерное упрочнение углеродистой стали У10 // Ученые записки КнАГТУ. – 2018. – № II-1(34). – С. 75-82.

10. Ким, В.А., Катунцева, Н.Л. Упрочнение коррозионно-стойкой стали 12Х18Н10Т лазерной цементацией // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2016. – № 9. – С. 3-8.

УДК 542.06:546.87

ПОЛУЧЕНИЕ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЛ-ОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ α-Bi_2O_3/Bi С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ВИСМУТА

Е.А. Кириченко, О.И. Каминский, А.В. Зайцев, С.А. Пячин, К.С. Макаревич
Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН, (г. Хабаровск)
himicc@mail.ru

PRODUCTION AND PHOTOCATALYTIC CHARACTERISTICS OF METAL-OXIDE COMPOSITES α-Bi_2O_3 / Bi WITH VARIOUS BISMUTH CONTENT

E.A. Kirichenko, O.I. Kaminsky, A.V. Zaitsev, S.A. Pyachin, K.S. Makarevich
Federal State Budgetary Institution Institute of Materials Science, Kola Scientific Center FEB RAS (Khabarovsk)
himicc@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.126-129

В данной работе предлагается препаративно простой метод получения композиции α-Bi_2O_3/Bi сорбит-нитратным синтезом, отличительной особенностью которого является совместное фазообразование металлического Bi и оксида α-Bi_2O_3 из органоминерального прекурсорного комплекса. Проведено исследование фотокаталитической активности композитных фотокатализаторов α-Bi_2O_3/Bi, содержащих различное количество висмута и имеющих разную степень дефектности кристаллической решетки α-Bi_2O_3. Показано, что изотермический отжиг композиций α-Bi_2O_3/Bi на воздухе в интервале 400–550°C приводит к закономерному росту каталитической активности, однако, дальнейшее повышение температуры отжига вызывает разрушение гетероструктуры металл-оксид ввиду окисления висмута и приводит к снижению каталитической активности.

Экспериментальная часть

Получение фотокатализаторов α-Bi_2O_3/Bi осуществлялось сорбит-нитратным синтезом, с последующей изотермической выдержкой при 450, 500, 550, 600°C, далее они именуются ВОВ-X, где X – температура синтеза.

Рентгенофазовый анализ синтезированных металл-оксидных систем проводили на дифрактометре ДРОН-7 ($Cu_{K\alpha}$-излучение). Морфологические особенности и элементный состав катализаторов изучены посредством сканирующей электронной микроскопии (Vega 3 LMH, Tescan), оснащенный энергодисперсионным детектором X-Max 80.

Фотокаталитическое окисление красителя метиленового синего (МС), исследовали с помощью автоматизированной установки описанной нами ранее [1, 2] на основе лазерного модуля HLM1230 с длиной волны 650 нм и фотодатчика VT90N2 в качестве элемента измерительной системы.

Спектры диффузного отражения в УФ и видимом диапазонах получены с использованием спектрофотометрического комплекса на базе монохроматора МДР-41. Содержание висмута, входящего в состав катализаторов, оценивали на основании дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), по эндоэффекту его плавления.

Результаты и обсуждение

Для получения фотокатализаторов видимого света состава α-Bi_2O_3/Bi использовался органо-минеральный комплекс нитрата висмута с сорбитом в котором соотношение нитрат висмута/сорбит составляло 3,4:1. Как известно [3], для металл-оксидных фотокатализаторов оптимальное содержание металла составляет не более 0,5-1,5 масс.%. Выбранное соотношение 3,4:1 является оптимальным, поскольку характер пиролитической атмосферы в момент термодеструкции в этом случае обеспечивает только частичное восстановление висмута и формирование в матрице α-Bi_2O_3 включений из частиц металлического Bi.

Основные рефлексы металлического висмута и его оксида 3.28, 2.37, 1.87 Å образуют суперпозицию, что затрудняет их индивидуальную идентификацию при совместном присутствии. В смеси с оксидом идентификация металлического висмута возможна по характерному для него рефлексу 2.27 Å, а количественное определение возможно по данным ДСК. Результаты расчета содержания металлического компонента фотокатализатора приведены в таблице. Управление содержанием металлического Bi в составе композиции α-Bi_2O_3/Bi и степенью дефектности кристаллической структуры α-Bi_2O_3 проводилось путем изотермического отжига образцов.

Оптические свойства полученных фотокатализаторов

Светопоглощение полученных фотокатализаторов было исследовано методом СДО. Энергия запрещенной зоны (Eg) рассчитывалась по методу Таука: $\alpha h\nu = A\,(h\nu - Eg)^{n/2}$. Значение Eg определялось по экстраполяции прямолинейного участка графика $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ к оси hν [4, 5]. Для образцов ВОВ-500 и ВОВ-550 характерно смещение спектра α-Bi_2O_3 в ультрафиолетовую область вероятно за счет высокой дисперсности частиц и дефектности кристаллической решетки, что хорошо согласуется с данными РФА (см. таблицу).

Зависимость изменения объема кристаллической решетки и содержания металлического висмута в композициях ВОВ-Х от температуры изотермической выдержки

Образец	Т изотермической выдержки, °С	Масс.% Bi	$_{\Delta}V_{ячейки}$ α-Bi_2O_3, %
ВОВ-450	450	1,6	-1,82
ВОВ-500	500	0,9	-1,52
ВОВ-550	550	0,3	-0,91
ВОВ-600	600	0	-0,024

Ширина запрещенной зоны для этих образцов составляет соответственно 2,82; 2,81эВ (рис. 1). Таким образом, по мере отжига дефектов отмечается постепенное смещение спектра ДО α-Bi_2O_3 в видимую область и для образца ВОВ-600 с наименьшим сжатием элементарной ячейки ширина запрещенной зоны составляет 2,79 эВ.

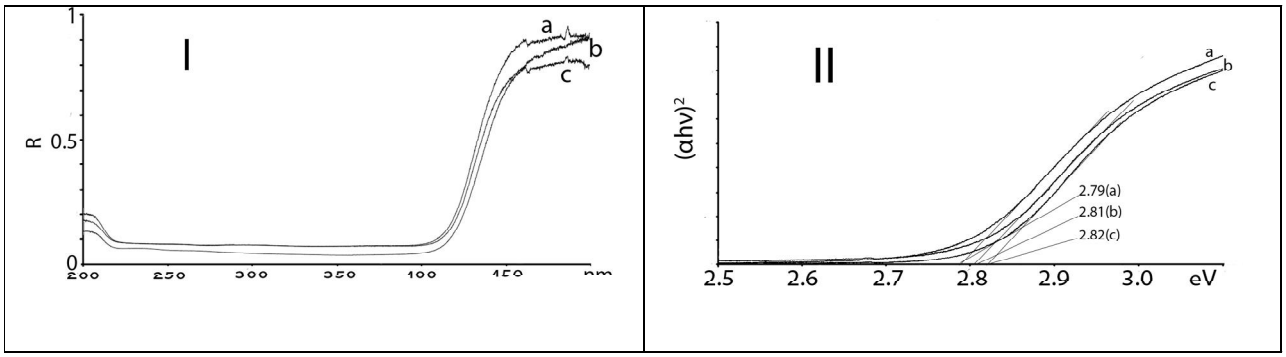


Рис. 1. I – спектры диффузного отражения образцов (a) ВОВ-500, (*b*) ВОВ-550, (c) ВОВ-600; II – эти же спектры диффузного отражения, обработанные в координатах $(\alpha h\nu)^2$ для поиска ширины запрещенной зоны.

Фотокаталитические свойства α-Bi_2O_3/Bi

Фотокаталитическую активность композитных фотокатализаторов α-Bi_2O_3/Bi оценивали по сравнению с некаталитическим разложением МС в нейтральной среде при облучении видимым светом. Как показано на рис. 2, при максимальном времени экспозиции в течение 250 минут МС подвергается незначительному фотолизу 5%.

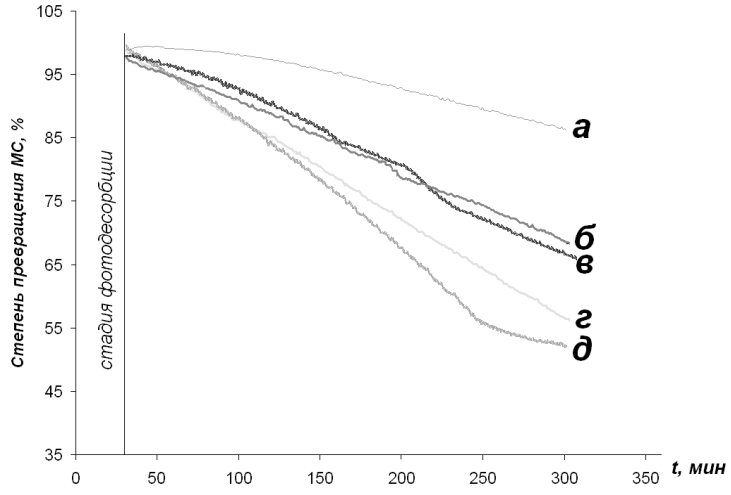


Рис. 2. Фотокаталитическая активность композиций BOB-X в процессе разложения метиленового синего.

Все исследованные системы обладают фотокаталитической активностью. Среди них наилучший результат показывает образец BOB-550. Меньшую активность остальных образцов можно объяснить тем, что для них характерно наличие большого количества дефектов в структуре α-Bi_2O_3. Такие дефекты могут выступать как центры рекомбинации электронно-дырочных пар и сокращать время их существования. Из-за этого количество реакционно-способных радикальных частиц, возникающих в момент фотолиза, снижается. Низкую активность образца BOB-600, несмотря на бездефектную кристаллическую структуру можно объяснить отсутствием Bi^0 в его составе.

Визуализация СЭМ изображения (рис. 3) образца BOB-550 подтверждает наличие дисперсного металлического висмута в его структуре. Анализ СЭМ-изображений, полученных в режимах детектирования вторичных электронов и элементного картирования, показывают, что данный образец обладает высокопористой структурой присущей α-Bi_2O_3 и содержит включения металлического висмута в виде частиц сферической и пластинчатой формы.

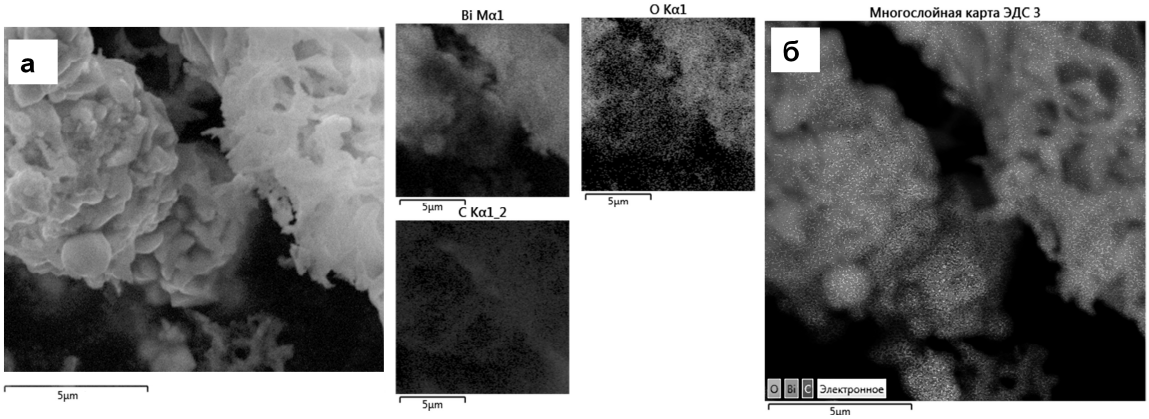


Рис. 3. СЭМ-изображение образца BOB-550 – а; распределение элементов по поверхности – б.

Заключение

Показано, что изотермический отжиг при 450-600°C позволяет управлять содержанием металлического Bi в составе композиции α-Bi_2O_3/Bi и степенью дефектности кристаллической структуры α-Bi_2O_3. Варьирование концентрационных соотношений сорбит : нитрат висмута в весовых соотношениях от 1:1 до 1:10 позволяет получать как металлический висмут, так и рентгенаморфный Bi_2O_3; в концентрационном диапазоне 1:3 – 1:3,4 наблюдается частичное восстановление оксида вис-

мута до металла, приводящее к формированию гетероструктурной композиции α-Bi_2O_3/Bi, содержащей 1,6%, масс. Bi.

1. Пячин, С.А. Гидротермальный синтез и фотокаталитическая активность анатаза, допированного оксидом вольфрама / С.А. Пячин, Н.Ф. Карпович, А.В. Зайцев, А.А. Бурков, О.И. Каминский, М.А. Ермаков // Фундаментальные исследования. – 2017. – № 10-2. – С. 261-266.

2. Зайцев, А.В. Автоматизированный комплекс для исследования сорбционной и фотокаталитической активности с объединенной реакционной и измерительной частью /А.В. Зайцев, О.И. Каминский, К.С. Макаревич, С.А. Пячин // Бюллетень научных сообщений. – 2017. – № 22. – С.57-63.

3. Крюков, А.И., Строюк, А.Л., Кучмий, С.Я., Походенко, В.Д. Нанофотокатализ. – Киев: Академпериодика, 2013. – 618 с.

4. Уханов, Ю.И. Оптические свойства полупроводников. – М.: Наука, 1977. – 368 с.

5. Петросян, П.Г. Исследование поведения структурных дефектов в нанокристаллах $CdSe_xS1_{-x}$ / П.Г. Петросян, Л.Н. Григорян // ЖТФ. – 2017. – Т. 87. – С. 443-447.

УДК 532.137(088.8)

КОЭФФИЦИЕНТ ВЯЗКОСТИ ИСТИННОГО ТЕЧЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ КАК ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР ПЕРЕРАБОТКИ ПОЛИМЕРА В ИЗДЕЛИЯ

О.А. Одинокова
Тихоокеанский государственный университет» (г. Хабаровск)
Odi37@mail.ru

VISCOSITY COEFFICIENT OF TRUE POLYMER FLOW AS A TECHNOLOGICAL PARAMETER OF POLYMER PROCESSING IN PRODUCTS

O.A. Odinokova
Pacific State University (Khabarovsk)
Odi37@mail.ru

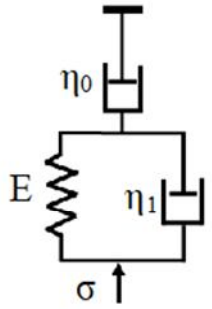
DOI: 10.2250/PFARE.2019.129-133

При решении задач проектирования и расчета несущих конструкций с использованием пластмасс необходимо иметь исходные экспериментальные данные, на основе которых строится теория. Основными характеристиками материалов являются модуль упругости, числовые значения параметров прочности и деформативности материала. Изменение рецептуры, технологии изготовления и методов обработки, влияние внешних факторов и сроков хранения определяют состояние материала, особенно полимерного, и находят отражение в его физико-механических характеристиках. При этом в зависимости от свойств материала, термической и механической обработки деталей величины этих характеристик меняются.

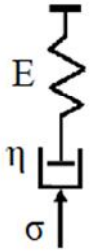
Известные способы оценки вязкости твердых материалов при различных воздействиях постоянных и переменных, статических и динамических нагрузок позволяют определить вязкость разрушения материалов. Поэтому на основе известных методов не представляется возможным разделение ее на сегментальную вязкость и вязкость течения.

Соотношение составляющих вязкого течения и сегментальной вязкости высокополимеров сложным образом зависит от температуры и напряжения, при которых испытывается образец. От ве-

личины сегментальной вязкости зависит интенсивность развития обратимой запаздывающей части деформации, которая сказывается отрицательно при эксплуатации изделий из пластмасс в условиях переменных температур. Чтобы качественно изготовить полимерное изделие методом прессования, необходимо обеспечить условия, в которых величина деформации вязкого течения становится значительно больше суммарной упругой и высокоэластической составляющих. Точность определения вязкости течения особенно низка в области высокоэластического состояния полимера. Поэтому очень важно выделить вязкость течения, имеющую большое практическое значение.



Модель класса Д, тип а



Модель Максвелла

Рис. 1. Модели метода механических аналогий.

Анализ кривых прямой и обратной ползучести полимерных материалов позволил предложить новый способ определения коэффициента вязкости [1, 2], имеющий целью выделить истинное течение полимера, показав, что коэффициент вязкости можно определить в опытах на растяжение (сжатие), замерив деформации при фиксированных значениях времени в процессе нагружения и «отдыха». При этом использовалось уравнение феноменологической двухпараметрической модели Максвелла (рис. 1), которое имеет вид:

$$\frac{d\sigma}{dt}+\frac{E}{\eta}\sigma=E\frac{d\varepsilon}{dt}. \qquad (1)$$

При постоянном напряжении оно принимает следующее выражение:

$$\varepsilon(t)=\frac{\sigma_0}{\eta}\cdot t+\varepsilon_0, \qquad (2)$$

где ε_0 – обратимая часть деформации; $\frac{\sigma_0}{\eta}\cdot t$ – необратимая (остаточная) часть деформации.

Следовательно, если в процессе термомеханических испытаний выделить величину $\varepsilon_{ост}$, то коэффициент вязкости истинного течения можно определить по разработанной нами методике следующим образом.

Испытываемый полимерный образец нагружают и выдерживают при постоянном напряжении σ в течение времени t. Время выдержки должно быть достаточным, чтобы остаточные деформации при выбранном уровне напряжений могли развиться и стать доступными для измерения с заданной точностью. С ростом температуры или напряжения время выдержки образца под нагрузкой можно сократить. По истечении времени t образец разгружают, выдерживают в разгруженном состоянии до исчезновения обратимых запаздывающих деформаций, затем измеряют величину остаточных деформаций, и коэффициент вязкости течения определяют по формуле:

$$\eta=\frac{\sigma}{\varepsilon_{ост}}\cdot t. \qquad (3)$$

Операция разгрузки образца позволяет подразделить обратимые и остаточные деформации, которые возникают в совокупности во время нагружения, и тем самым повышает точность выявления вязкости течения материалов.

С целью увеличения производительности процесса выявления вязкости истинного течения материалов, образец после разгрузки термостатируют при температуре большей, чем температура периода нагружения. Операция термостатирования при повышенной температуре сокращает время

исчезновения обратимых высокоэластических деформаций, что приводит к увеличению производительности процесса по определению коэффициента вязкости течения. Если учесть, что обратимые высокоэластические деформации исчезают бесконечно долго без прогревания образца, а время выдержки его без нагрузки в любом случае конечно, то степень обратимости размеров образца без термического воздействия на него остается далеко не полной. Термостатирование не только позволяет уменьшить время выдержки образца после разгрузки, но и увеличивает степень обратимости запаздывающих деформаций, а значит, приводит и к повышению точности определения $\varepsilon_{ост}$ и, следовательно, коэффициента вязкости истинного течения полимерных материалов.

Предложенным способом можно определять коэффициент вязкости при растяжении, сжатии, кручении (сдвиге), изгибе. При этом в зависимости от вида деформирования, коэффициент вязкости принимает различные значения.

Необходимо отметить, что формование полимера в зоне вязкотекучего состояния характеризуется незначительными упругими деформациями, процесс происходит за счет пластических деформаций. Для описания такого процесса модель должна в основном состоять из вязких элементов, их количество должно превышать количество упругих элементов [3]. И.И. Гольберг [4] отмечает, что реологические модели, имеющие до четырех элементов включительно, исчерпывают все разнообразие механического поведения материала. Увеличение числа элементов модели не дает качественного изменения ее поведения.

Явление вязкотекучего состояния достаточно хорошо описывается моделью из последовательно соединенного вязкого элемента с моделью Кельвина – Фойхта (модель класса Д, тип а, рис. 1) [3], в которой преобладает остаточная деформация. Тогда деформация механической модели процесса переработки полимера будет описываться уравнением:

$$\varepsilon(t)=\frac{\sigma_0}{\eta}\cdot t+\frac{\sigma_0}{E}(1-e^{-\frac{E}{\eta}\cdot t}), \qquad (4)$$

анализ которого показывает, что упругая мгновенная деформация отсутствует, так как при t=0 $\varepsilon(t)=0$.

Реально упругая деформация существует, но в вязкотекучем состоянии доля ее в полной деформации формования незначительна. После снятия нагрузки ($\sigma_0 = 0$ при $t = t_1$) деформация не исчезает, оставаясь постоянной в ньютоновском элементе и сокращаясь в модели Кельвина – Фойхта за счет гуковского элемента. Следует обратить внимание на то, что при определении коэффициента вязкости истинного течения может быть определена путем исключения обратимых упругих и запаздывающих деформаций, поэтому определение η с использованием любой приведенной выше модели приведет к одному результату.

При использовании известных способов усилия прессования получают заниженными, что сказывается на качестве изделий не лучшим образом, так как с повышением температуры вязкость течения убывает медленнее, чем сегментальная вязкость.

В условиях осевого растяжения испытывались образцы ударопрочного винипласта (УПВ), вырезанные из листа толщиной около 3 мм. Площадь каждого образца вычислялась по результатам измерений размеров его поперечного сечения, так как толщина листа не оставалась постоянной.

Образцы нагружались четырьмя уровнями напряжений в течение 2 минут, что обычно превышает длительность формования пластиковых деталей. Затем образцы разгружались и термостатировались при температуре, превышающей температуру периода нагружения на 10°. Во время разгрузки замерялись деформации образца.

Время «отдыха» определялась стабильностью величины остаточных деформаций. Испытания прекращались, как только три последних замера деформаций в период разгрузки, произведенных с интервалом 2 мин., показывали одинаковые результаты. Практически время «отдыха» образца со-

ставляло 16-20 мин. Образцы испытывались на растяжной машине настольного типа, снабженной термокамерой и системой регулирования температуры.

При напряжениях σ=9,11 МПа и температуре Т=293 К относительные остаточные деформации составляли $\varepsilon_{ост}$=0,00211 и коэффициент вязкости течения определялся по формуле:

$$\eta = \frac{\sigma}{\varepsilon_{ост}} \cdot t = \frac{9{,}11 \cdot 10^6}{0{,}00211} \cdot 120 = 0{,}519 \cdot 10^{12}\ Па \cdot с\ . \qquad (4)$$

Значения коэффициента вязкости истинного течения помещены в таблицу. Следует отметить, что при обработке эксперимента не было выявлено выраженной зависимости η от напряжения, поэтому он подсчитывался как среднее результатов для всех уровней напряжений при фиксированном значении температуры.

Значения коэффициентов вязкости течения η для УПВ

Температура	Напряжения	Остаточные деформации	Коэффициент вязкости истинного течения, η	Осредненное значение коэффициента вязкости течения, η
К	МПа	-	**Па·с**	Па·с
293	9, 11 14, 73 28, 58 35, 58	0, 00211 0, 00349 0, 00710 0, 00505	$0, 519 \cdot 10^{12}$ $0, 507 \cdot 10^{12}$ $0, 483 \cdot 10^{12}$ $0, 845 \cdot 10^{12}$	$0, 5885 \cdot 10^{12}$
303	9, 11 14, 73 28, 58 35, 58	0, 00329 0, 00388 0, 00691 0, 00547	$0, 332 \cdot 10^{12}$ $0, 456 \cdot 10^{12}$ $0, 496 \cdot 10^{12}$ $0, 780 \cdot 10^{12}$	$0, 516 \cdot 10^{12}$
313	9, 11 14, 73 28, 58 33, 92	0, 00431 0, 00454 0, 00632 0, 00776	$0, 254 \cdot 10^{12}$ $0, 389 \cdot 10^{12}$ $0, 547 \cdot 10^{12}$ $0, 537 \cdot 10^{12}$	$0, 432 \cdot 10^{12}$

Температурная зависимость модуля упругости и коэффициента вязкости истинного течения представлена на рис. 2.

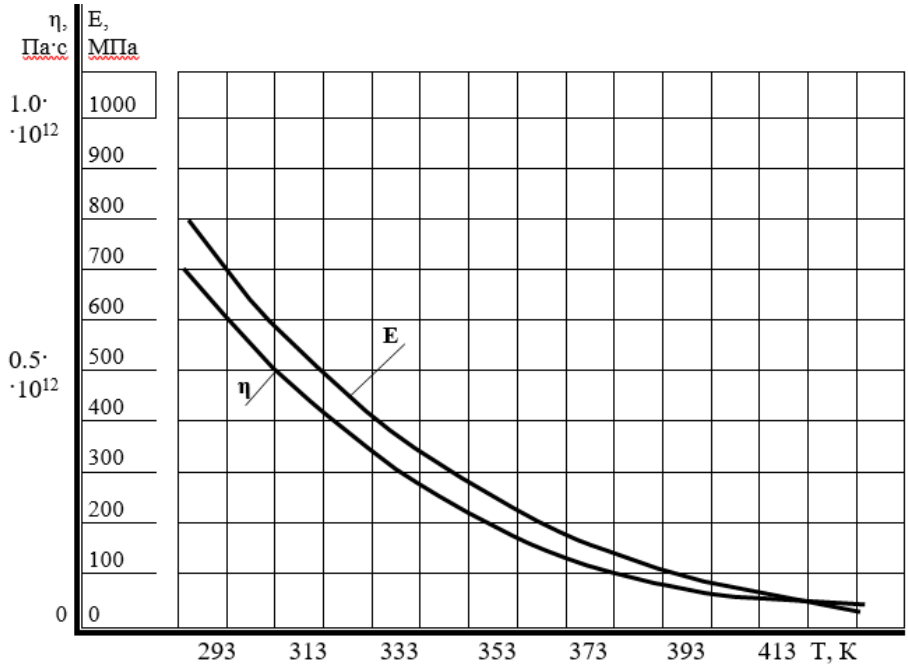


Рис 2. Температурная зависимость Е и η для ударопрочного винипласта.

Заключение

На уровне изобретения предложен метод определения вязкости полимерных материалов, который позволяет подразделить сегментальную вязкость и вязкость истинного течения. Именно последняя обуславливает качество пластмассовых деталей, изготавливаемых методом горячего формования, так как сегментальная вязкость зависит от обратимой высокоэластической деформации и при работе изделий в условиях нестационарного температурного поля приводит к их короблению. Поэтому коэффициент вязкости истинного течения полимерных материалов является важнейшим технологическим параметром.

1. А.с.1226164 СССР, МКИ G 01 N 11/00. Способ определения вязкости конструкционных материалов / О.А. Одинокова, А.В. Одиноков, Т.П. Чернова, Г.И. Назарова (СССР). – 1986. – Бюл. № 15. 3 с.

2. Одинокова, О.А., Одиноков, А.В. Пути повышения надежности конструкций с использованием пластмасс через контроль физико-механических свойств исходного материала // Совершенствование строительных конструкций для условий Дальнего Востока. – Хабаровск: ХПИ, 1991. – С.62-67.

3. Слесарев, М.И. Применение ударопрочного винипласта в конструкции воздуховодов судовой вентиляции: Дис. …канд. техн. наук. – Хабаровск, 1988. – 207 с.

4. Гольберг, И.И. Механическое поведение полимерных материалов. – М.: Химия,1970.

УДК 537.523.4

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ЭЛЕКТРОИСКРОВОМ ЛЕГИРОВАНИИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗМЕРОВ АНОДА

С.А. Пячин[1,2], А.В. Беля[2], О.И. Каминский[1,2]

[1]Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г.Хабаровск)

[2]Тихоокеанский государственный университет (г.Хабаровск)

pyachin@mail.ru

CALCULATION OF MASS TRANSFER PARAMETERS FOR ELECTRIC SPARK DOPING DEPENDING ON ANODE SIZES

S.A. Pyachin[1,2], A.V. Belya[2], O.I. Kaminsky[1,2]

[1]Institute of Materials Science, Kola Science Center, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)

[2]Pacific State University (Khabarovsk)

pyachin@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.133-136

Электроискровое легирование (ЭИЛ) – это метод модификации физико-механических свойств поверхностей металлов и сплавов за счет воздействия коротких разрядных импульсов. Протекание таких разрядов сопровождается электрической эрозией, которая заключается в разрушении поверхности электродов и выбросом вещества из зоны воздействия разрядов. Часть продуктов электриче-

ской эрозии после пролета межэлектродного промежутка осаждается на электродах. При ЭИЛ вещество переносится преимущественно с анода на катод, в результате на поверхности катода формируется покрытие из анодного материала.

Эффективность электроискрового легирования оценивают по величине коэффициента массопереноса $K_M = \Delta M_к / |\Delta M_a|$, где $\Delta M_к$ – привес катода; ΔM_a – потери массы анода. Чем меньше потери вещества при массопереносе с анода на катод, тем коэффициент K_M выше. Он зависит от многих факторов: теплофизических свойств материалов электродов, мощности и длительности разрядных импульсов, частоты их повторения, состава и давления газа. Кроме того, на него могут оказывать влияние геометрические и кинематические параметры, такие как размеры электродов, длина межэлектродного промежутка, траектория и скорость перемещения анода. Целью работы является установление влияния размеров анода на изменение масс электродов и коэффициент массопереноса при электроискровом легировании при условии, что электроды имеют квадратные сечения.

Модель переноса вещества при ЭИЛ с электродами квадратного сечения подробно описана в работе [1]. Количество металла, выбрасываемого из зоны разряда и осаждаемого на поверхность электрода, оценено из условия равномерного распространения потока эродированного материала в окружающее пространство из точки возникновения разряда [2]. Для электродов с квадратными сечениями коэффициент осаждения металла, равный вероятности попадания эродированного во время единичного разряда материала на поверхность противолежащего электрода, рассчитан как

$$p = \frac{1}{2\pi}\left[2(\varphi_4-\varphi_2) + Arc\sin\left(\frac{L\ \sin\varphi_1}{\sqrt{\left(x_p-0{,}5b\right)^2+L^2}}\right) - Arc\sin\left(\frac{L\ \sin\varphi_4}{\sqrt{\left(x_p-0{,}5b\right)^2+L^2}}\right)\right] +$$
$$+R^2\left[-Arc\sin\left(\frac{L\ \cos\varphi_2}{\sqrt{\left(y_p-0{,}5b\right)^2+L^2}}\right) + Arc\sin\left(\frac{L\ \cos\varphi_1}{\sqrt{\left(y_p-0{,}5b\right)^2+L^2}}\right) - Arc\sin\left(\frac{L\ \sin\varphi_3}{\sqrt{\left(x_p+0{,}5b\right)^2+L^2}}\right)\right] + \quad (1)$$
$$+R^2\left[-Arc\sin\left(\frac{L\ \sin\varphi_2}{\sqrt{\left(x_p+0{,}5b\right)^2+L^2}}\right) + Arc\sin\left(\frac{L\ \cos\varphi_4}{\sqrt{\left(y_p+0{,}5b\right)^2+L^2}}\right) - Arc\sin\left(\frac{L\ \cos\varphi_3}{\sqrt{\left(y_p+0{,}5b\right)^2+L^2}}\right)\right],$$

где L – длина межэлектродного промежутка; x_p, y_p – координаты места возникновения разряда (точка отчета – центр катода); φ_1, φ_2, φ_3, φ_4 – углы наклона отрезков, соединяющих место разряда на поверхности одного электрода с вершинами основания противоположного электрода с длиной стороны b.

Поскольку место возникновения разрядов невозможно контролировать, поэтому были рассчитаны эффективные коэффициенты осаждения металлов на электроды с учетом положения анода относительно катода. Они были определены как средние значения p на площади области перекрытия электродов S_{ov}, которая зависит от координат центра анода x_a и y_a, а также геометрических размеров электродов:

$$\widetilde{p}_a(x_a,y_a) = \frac{1}{S_{ov}(x_a,y_a)}\int\limits_{S_{ov}(x_a,y_a)} p_a\,ds, \quad \widetilde{p}_к(x_a,y_a) = \frac{1}{S_{ov}(x_a,y_a)}\int\limits_{S_{ov}(x_a,y_a)} p_к\,ds. \quad (2)$$

Из-за разницы в размерах электродов, очевидно, что $\widetilde{p}_к < \widetilde{p}_a$, поэтому интенсивность потока вещества с анода на катод выше, чем в обратном направлении. Координаты центра анода в момент возникновения i-го разряда определяются траекторией и скоростью перемещения анода. При приближении анода к краю катода коэффициент осаждения вещества на катод уменьшается.

Масса катода во время каждого i разряда уменьшается из-за электрической эрозии ($-m_к$) и возрастает за счет поступления материала с противоположного электрода – анода $m_a\widetilde{p}_a$. Аналогичные явления происходят на аноде. Масса анода во время каждого разряда уменьшается из-за электрической эрозии ($-m_a$) и возрастает за счет поступления материала с катода $m_{\hat{e}}\widetilde{p}_{\hat{e}}$. Если длительность и частота разрядов в процессе ЭИЛ не изменяются, то можно предположить, что величины m_a и $m_к$ по-

стоянны. Используя отношение масс эродирующего вещества анода и катода за один разряд, $\alpha = \frac{m_a}{m_к} = const$, выражение для коэффициента массопереноса K_m по истечении N разрядов можно записать следующим образом

$$K_M = \frac{\Delta M_к}{\Delta M_a} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(\alpha\ \tilde{p}_a(x_{ai}, y_{ai}) - 1\right)}{\sum_{i=1}^{N}\left(\tilde{p}_к(x_{ai}, y_{ai}) - \alpha\right)}. \qquad (3)$$

Суммарное число разрядов N определяется частотой следования импульсов f и общим временем осаждения t как произведение $N = ft$. Продолжительность осаждения должна быть достаточна для хотя бы одного прохода вдоль всей поверхности катода.

Были рассчитаны коэффициенты массопереноса в условиях электроискрового легирования, когда анод и катод имели одновременно форму прямой призмы с квадратным основанием или цилиндрическую форму. Длина стороны основания призмы или диаметр цилиндра равны 2, 3, 4, 5, 6 мм. Моделировали осаждение покрытия на катод в форме квадратной пластины с поперечным размером 30 мм. При этом частота разрядов – 10 Гц, длина межэлектродного промежутка L = 0,5 мм. Константу α задавали равной 1,5, 2, 3, 5, сохраняя постоянным значение $m_к$ = 0,0001 г. Анод с квадратным сечением перемещался вдоль поверхности катода по меандробразной траектории от одного его края до другого с линейной скоростью 10 мм/с. Шаг смещения по оси y – 3 мм, что соответствует половине стороны анода с значением 6 мм. Количество проходов анода вдоль поверхности катода – 3.

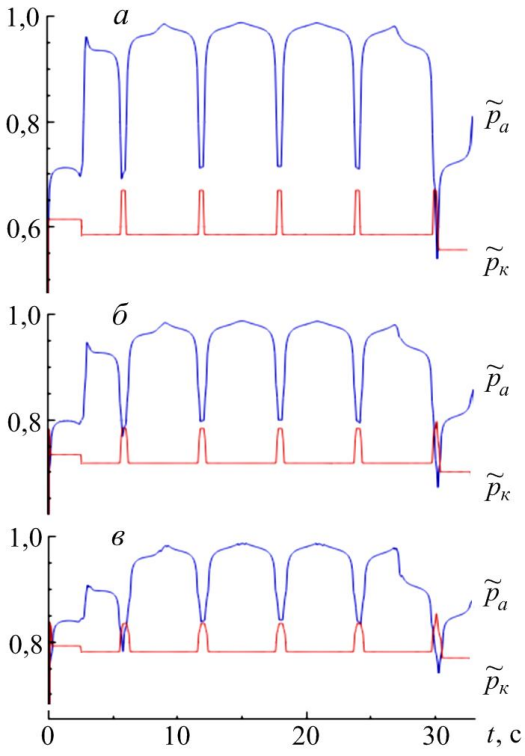


Рис. 1. Коэффициенты осаждения материала анода и катода за время одного прохода по поверхности катода ($b_к$ = 30 мм): а) b_a = 2 мм; б) b_a = 4 мм; в) b_a = 6 мм.

Результаты вычислений показывают, что графические зависимости коэффициентов осаждения от времени легирования имеют волнообразный вид (рис. 1).

Коэффициент $\tilde{p}_a$ имеет максимальное значение, близкое к 1, когда анод располагается в центре катода. При приближении анода к краю катода вероятность попадания эродированного во время разряда металла анода снижается. С уменьшением размеров анода с 6 до 2 мм глубина провалов линий $\tilde{p}_a$ возрастает с 20 до30 %. Коэффициент осаждения металла катода на анод $\tilde{p}_ê$ изменяется противофазно $\tilde{p}_a$: при приближении анода к краю катода, он возрастает незначительно, на 5-10%.

Кинетические зависимости изменения масс анода и катода имеют вид практически прямых линий (рис. 2). С ростом продолжительности электроискрового легирования масса анода уменьшается, а масса катода возрастает. Увеличение размеров анода сопровождается повышением величины эрозии анода и снижением приращения массы катода. Однако эти изменения незначительны (менее 10%), по сравнению с влиянием отношения масс эрозии анода и катода за один разряд. Рост соотношения $\alpha = \frac{m_a}{m_ê}$ от 1,5 до 5 приводит к десятикратному увеличению привеса катода.

Коэффициент массопереноса значительно возрастает в начальный период времени осаждения электроискрового покрытия, а затем, после трех проходов анода вдоль поверхности катода, его значения не претерпевают больших изменений (рис. 3).

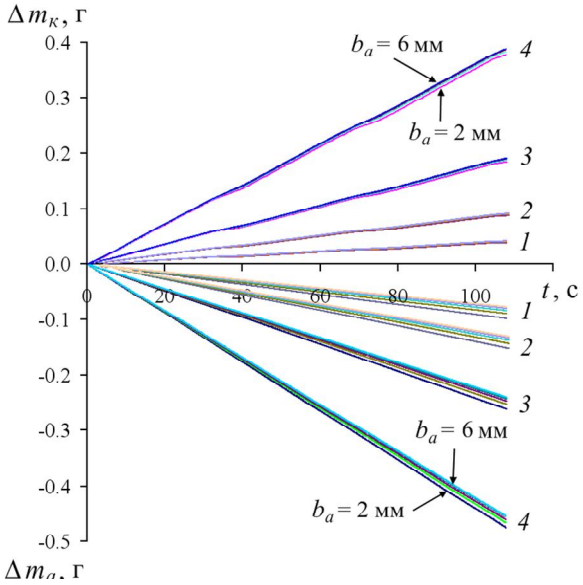


Рис. 2. Изменение массы катода (положительные значения) и массы анода (отрицательные значения) за три прохода по поверхности катода ($b_к$ = 30 мм). Длина стороны сечения анода b_a – от 2 до 6 мм. Соотношение m_a / $m_к$: 1) α = 1,5; 2) α = 2; 3) α = 3; 4) α = 5.

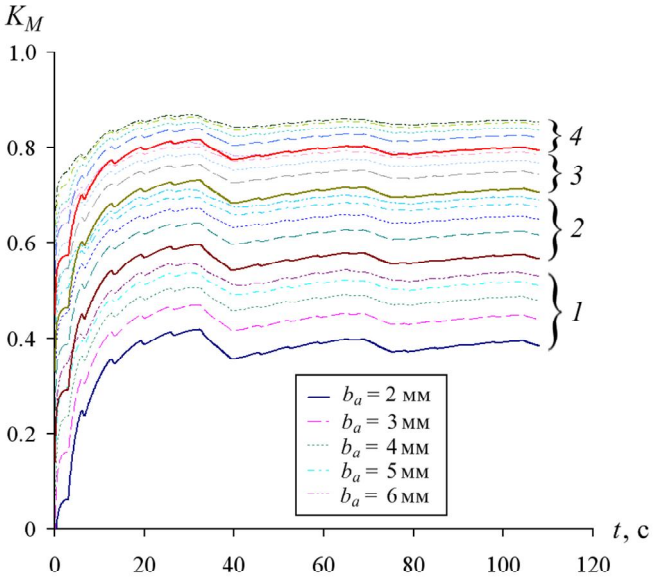


Рис. 3. Коэффициент массопереноса за три прохода анода вдоль поверхности катода ($b_к$ = 30 мм) при разных размерах анода. Соотношение m_a / $m_к$: 1) α = 1,5; 2) α = 2; 3) α = 3; 4) α =5.

Следует отметить, что увеличение размеров анода b_a до 6 мм и соотношения α до 5 вызывает рост коэффициента переноса массы с анода на катод до 86%. Таким образом, чтобы повысить скорости осаждения электроискровых покрытий следует использовать электроды с большей площадью поперечного сечения и применять режимы разрядного воздействия, обеспечивающие более высокие скорости эрозии металла анода по сравнению с разрушением материала катода.

---

1. Пячин, С.А. Влияние размеров и расположения электродов на перенос металлов при электроискровом легировании// Физика и химия обработки материалов. – 2017. – № 1. – С. 17-28.

2. Пячин, С.А. Оценка толщины покрытия, осажденного на поверхность катода при однократном разряде / С.А. Пячин, М.А. Пугачевский // Физика и химия обработки материалов. – 2008. – № 3. – С. 61–66.

УДК 537.226

ФОРМИРОВАНИЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ ПОКРЫТИЙ МЕХАНИЧЕСКИМ ЛЕГИРОВАНИЕМ

С.А. Пячин[1], Н.М. Власова[1], М.А.Кулик[1], О.И. Каминский[1], А.М. Фролов[2], В.В. Ткачев[2], В.О. Крутикова[3]

[1]*Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г.Хабаровск)*

[2]*Дальневосточный федеральный университет (г. Владивосток)*

[3]*Институт тектоники и геофизики им. Ю. А. Косыгина (г. Хабаровск)*

pyachin@mail.ru

FORMATION OF INTERMETALLIC COATINGS BY MECHANICAL ALLOYING

S.A. Pyachin[1], N.M. Vlasova[1], M.A. Kulik[1], O.I. Kaminsky[1], A.M. Frolov[2], V.V. Tkachev[2], V.O. Krutikova[3]

[1]*Institute of Materials Science, Kola Science Center, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)*

[2] *Far Eastern Federal University (Vladivostok)*

[3]*Institute of Tectonics and Geophysics Yu. A. Kosygina (Khabarovsk)*

pyachin@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.137-140

Интерметаллические соединения переходных металлов на основе титана и алюминия являются перспективными материалами нового поколения. Они относятся к жаропрочным системам с низкой плотностью, высокими механическими и хорошими антикоррозионными свойствами [1]. Интерметаллидные сплавы находят все большое применение в качестве защитных покрытий. Методы осаждения таких покрытий весьма разнообразны. В данной работе Ti-Al покрытия нанесены методом механического легирования, который основан на использовании энергии удара движущихся шаров. Частицы металлического порошка, попадая между подложкой и шарами, последовательно привариваются к поверхности подложки. Этот метод практически не имеет ограничений по парам наносимого и основного металлов, не требует специальной подготовки поверхности образцов, имеет относительно небольшие энергетические затраты, позволяет наносить на подложки достаточно толстые и плотные слои. Формированию покрытий из алюминидов титана методом механического синтеза посвящены работы [2-4]. Проведенные нами исследования были направлены на создание поверхностных слоев тройной системы Ti-Al-M механическим сплавлением и изучение их структурных характеристик и фазового состава.

Покрытия были получены в планетарной шаровой мельнице РМ 400. Предварительно в контейнер объемом 250 мл из оксида алюминия засыпали порошки титана и алюминия в одинаковых мольных долях, а затем в эту смесь добавляли третий компонент - порошки молибдена и ниобия в количестве 5 или 10 вес.%. Подложками служили пластинки толщиной 2 мм из титанового сплава ВТ1-0. Для механосинтеза использовали шары из оксида алюминия диаметром 10-20 мм. Весовое соотношение между шарами и смесью металлических порошков – 11:1. Механическое сплавление осу-

ществляли при скорости вращения контейнера 300 об/мин в течение 1 часа в среде аргона. Чтобы улучшить адгезию и однородность структуры осажденных слоев, полученные образцы отжигали в вакуумной печи при температуре 700 °С в течение 1 часа.

Количество вещества, нанесенного на подложку, измеряли на весах Vibra HT с точностью 10^{-4} г. Фазовый состав полученных покрытий изучали с помощью рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-Kα излучении. Для идентификации линий рентгенограмм использовали программный пакет PDWin (НПП «Буревестник») и база рентгенодифракционных данных PDF-2. Микроструктуру покрытий изучали с применением оптического микроскопа Altami и сканирующего электронного микроскопа Carl Zeiss Ultra 55+ с приставкой для элементного анализ от Oxford Instruments и Sigma 300 VP со спектральным энергоанализатором INCA Energy. Съемку проводили во вторичных электронах, при ускоряющем напряжении 20 кВ с предварительной калибровкой интенсивностей линий на кобальтовом эталоне.

Результаты исследований показали, что привес титановой подложки за счет механического сплавления металлических порошков с ее поверхностью составляет в среднем $5{,}5 \cdot 10^{-4}$ г/мм^2 в течение 1 часа. Толщина полученных покрытий неоднородна. Рельеф осажденных слоев имеют вид чередующихся выступов высотой до 500 мкм. Средняя толщина покрытий для разных образцов лежит в диапазоне 120-200 мкм.

На рис. 1 показана микроструктура осажденных поверхностных слоев без термической обработки. Она представляет собой скопление микрозерен с распределенными по их границам порами. В поверхностном слое, полученном из титана и алюминия без добавок, кристаллиты имеют в основном форму, вытянутую вдоль границы раздела между покрытием и подложкой. Такое преимущественное направление обусловлено ударным воздействием шаров на частицы. В случаях осаждения, когда смесь порошков содержат дополнительно ниобий и молибден, форма образующихся в покрытиях зерен более изоморфна. Кристаллиты в поверхностном слое из TiAl-10%Nb механической смеси более крупные по сравнению с другими образцами. Размеры зерен в поперечном сечении этого покрытия достигают 50 мкм.

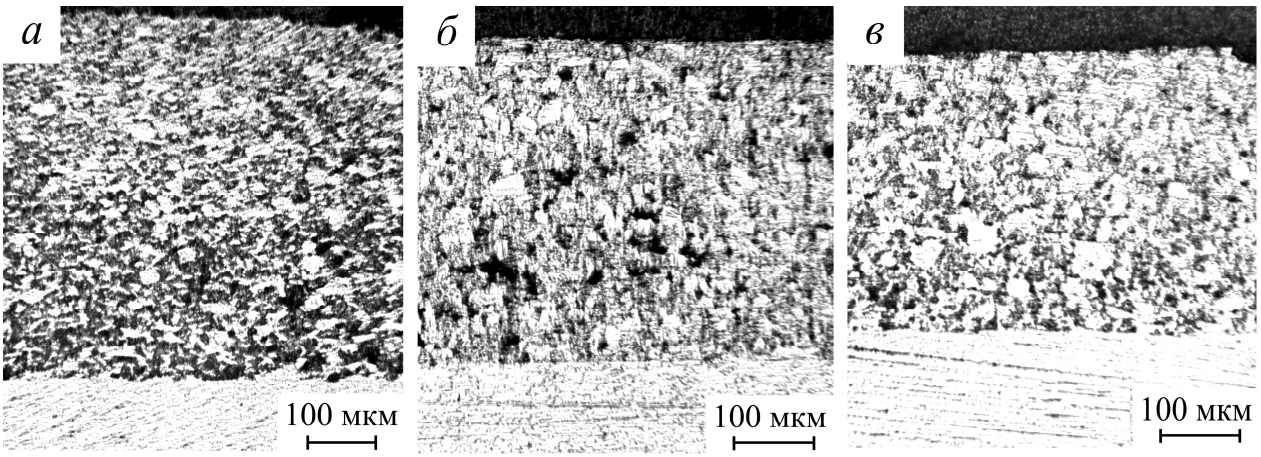


Рис. 1. Микроструктура (а) TiAl, (б) TiAl-10%Mo и (б) TiAl-10%Nb покрытий на сплаве ВТ1-0.

На рис. 2. изображены графики распределения основных элементов в TiAl покрытии. Они представляют собой волнообразные линии с периодом 5 мкм, при этом изменение концентрации титана по глубине происходит противофазно концентрации алюминия. Тем не менее, средний уровень концентраций Ti и Al близок к 50 ат.%., что соответствует соотношению этих металлов в исходной порошковой смеси. Анализируя профили распределения, можно заключить, что в процессе механического сплавления происходит лишь пластическая деформация частиц порошков без значительного проникновения металлов в объем этих частиц.

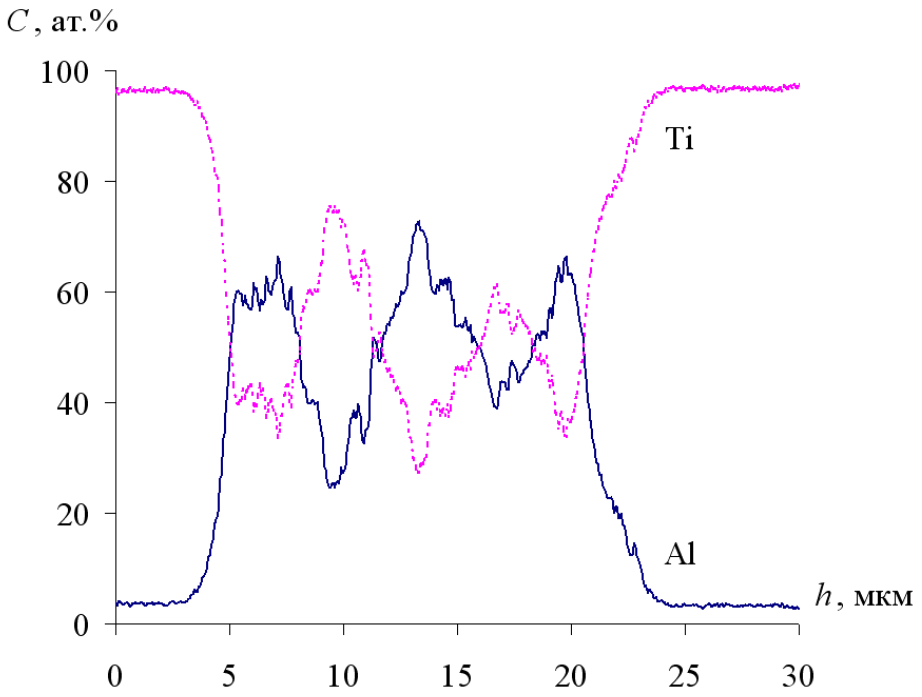


Рис. 2. Профили распределения титана и алюминия по глубине TiAl покрытия без термической обработки.

Рентгенодифракционный анализ полученных покрытий показал, что после механического легирования на поверхности титанового сплава формируются слои, состоящие из титана и алюминия (рис. 3 а,б,в), а также ниобия и молибдена, которые добавляли в исходную смесь порошков металлов.

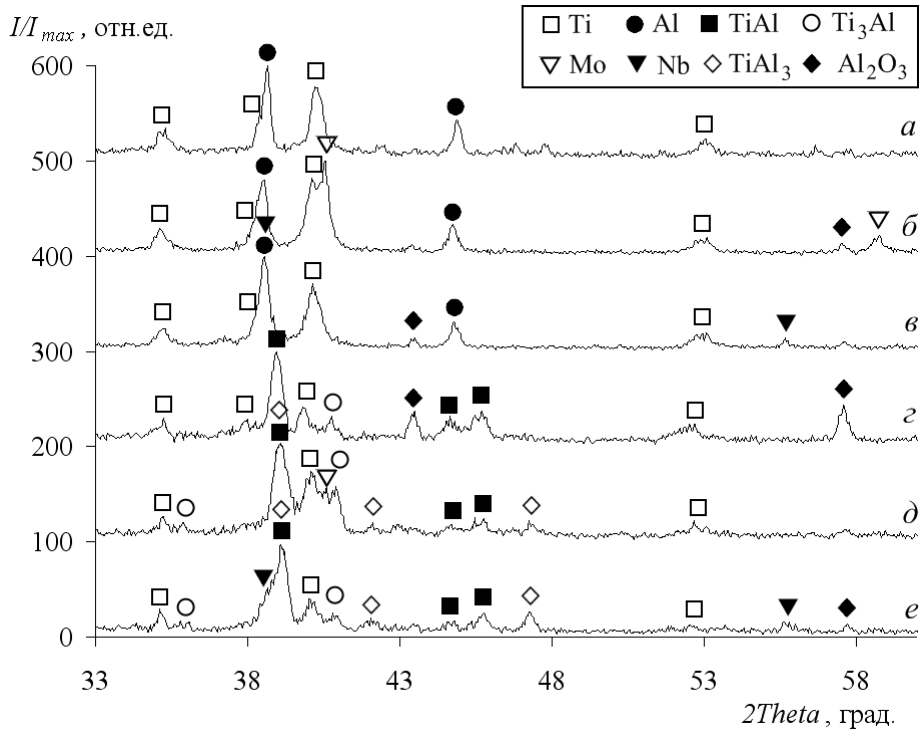


Рис. 3. Рентгеновские дифрактограммы образцов с покрытиями (а, г) TiAl, (б, д) TiAl-10%Mo и (в,е) TiAl-10%Nb, полученными механическим сплавлением, до (а, б, в) и после (г, д, е) изотермического нагрева при T = 700°C в течение 1 ч в вакууме.

Интерметаллидные фазы в этих поверхностных слоях не были обнаружены. Отжиг образцов при при T = 700 °C в течение 1 ч в вакууме привел к тому, что в покрытиях из смеси титана и алюминия без добавок образовался алюминид титана γ-TiAl (рис. 3 г). Кроме того присутствует α-Ti, дифракционные линии которого смещены в стороны больших углов 2Θ, что свидетельствует об увели-

чении межплоскостных расстояний кристаллической решетки титана в процессе отжига. В подвергшихся термической обработке TiAl-10%Mo и TiAl-10%Nb покрытиях, кроме интерметаллида γ-TiAl, в небольшом количестве присутствуют две другие интерметаллидные модификации $TiAl_3$ и Ti_3Al. В поверхностных слоях некоторых образцов содержится оксид алюминия, который перенесся на титановый сплав при истирании измельчающих корундовых шаров.

Таким образом, в ходе проведенных исследований показано, что методом механического сплавления металлических порошков титана, алюминия, ниобия и молибдена с последующим изотермическим отжигом можно получить интерметаллидные покрытия толщиной до 0,5 мм.

1. Клопотов, А.А. Кристаллогеометрические и кристаллохимические закономерности образования бинарных и тройных соединений на основе титана и никеля: монография / А.А. Клопотов, А.И. Потекаев, Э.В. Козлов, Ю.И. Тюрин, К.П. Арефьев, Н.О. Солоницина, В.Д. Клопотов; под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во Томского политехн. Ун-та, 2011. – 312 с.

2. Romankov, S. Structural evolution of the Ti–Al coatings produced by mechanical alloying technique / S. Romankov, S.D. Kaloshkin, Y. Hayasaka, Zh. Sagdoldina, S.V. Komarov, N. Hayashi, E. Kasai // Journal of Alloys and Compounds. – 2009. – V. 483, № 1. – P. 386-388.

3. Romankov, S. Fabrication of Ti–Al coatings by mechanical alloying method / S. Romankov, W. Sha, S.D. Kaloshkin, K. Kaevitser // Surface and Coatings Technology. – 2006. – V. 201, № 6. – P. 3235-3245.

4. Shahzad, A. Deposition of the Ti-Al coatings on different metallic substrates by mechanical alloying and subsequent laser treatment / Shahzad, A., V. Yu. Zadorozhnyy, M. D. Pavlov, M. V. Zheleznyi, A. M. Chirkov, D. S. Zagrebin, D. V. Semenov, R. S. Khasenova, and S. D. Kaloshkin // Journal of Alloys and Compounds. – 2018. – V. 731. – P. 1295–1302.

Секция 4

Оптика и лазерная физика

УДК 535.5

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ МОДУЛЯЦИИ ШИРОКОПОЛОСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ГАУССОВЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ АМПЛИТУДЫ

П.С. Гончарова, В.В. Криштоп, Ю.М. Карпец, Н.М. Киреева, А.В. Попова, Д.С. Савич, В.Г. Ефременко

Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

krishtop@list.ru

APPLICATION OF THE ELECTRO-OPTICAL EFFECT FOR MODULATION OF WIDTH BAND RADIATION WITH A GAUSSIAN AMPLITUDE DISTRIBUTION

P.S. Goncharova, V.V. Krishtop, Yu.M. Karpets, N.M. Kireeva, A.V. Popova, D.S. Savich V.G. Efremenko

Far Eastern State Transport University, Khabarovsk

krishtop@list.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.141-144

Электрооптические модуляторы (ЭОМ) используются для адаптации оптических каналов к передаче информации, такой как телефонные звонки и цифровые электронные данные, по волоконно-оптическим линиям связи [1]. В области сетей связи и телекоммуникаций существует потребность в увеличении пропускной способности передачи данных. Электрооптический модулятор широкополосного излучения [2, 3] позволяет преобразовывать широкий спектр длин волн, что приводит к увеличению пропускной способности канала связи.

Электрооптический модулятор широкополосного излучения с гауссовым распределением амплитуды (рис. 1) состоит из источника, поляризатора П, двух идентичных кристаллов ниобата лития K_1 и K_2, анализаторов A_1 и A_2, генератора электрического поля Г, приложенного ко второму кристаллу. Излучение направлено вдоль кристаллографических осей y и перпендикулярно оптической оси кристаллов z. Оси пропускания поляризатора П и анализаторов A_1 и A_2 параллельны друг другу и расположены под углом $\pi/4$ к оптическим осям кристаллов z.

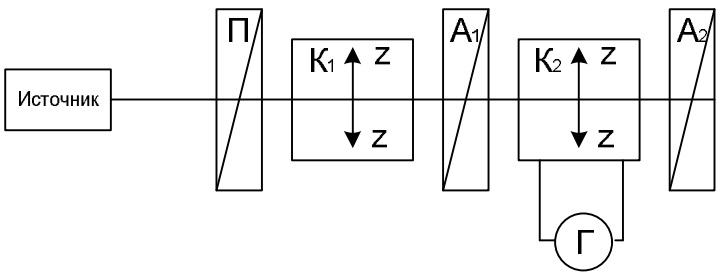


Рис. 1. Схема электрооптического модулятора.

Излучение, проходя через поляризатор П, становится линейно-поляризованным под углом $\alpha = 45°$ к оптической оси кристалла K_1. Вектор напряженности имеет значение E_0 (рис.2, а).

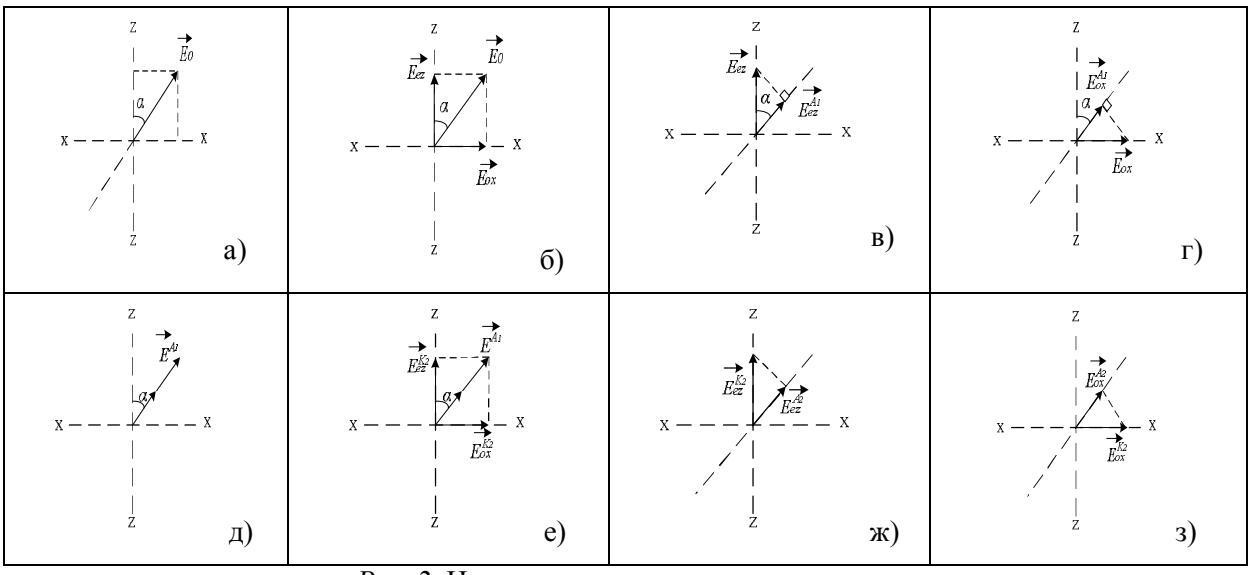


Рис. 2. Направления векторов напряженности.

При входе в кристалл $К_1$, излучения на каждой длине волны разбивается на два луча с взаимно ортогональными поляризациями – необыкновенный $E_{ez} = E_0 \cos\alpha$ и $E_{ox} = E_0 sin\alpha$ обыкновенный. Причем значения векторов напряженности для них равны (рис. 2, б).

Обыкновенный и необыкновенный лучи при прохождении через кристалл $К_1$ длиной d_1 приобретают дополнительный фазовый сдвиг. На выходе из кристалла значения векторов напряженности для них равны:

$$\begin{aligned} E_{ez} &= E_0 \cos\alpha \cos\left(-k_e d_1\right), \\ E_{oz} &= E_0 \sin\alpha \cos\left(-k_o d_1\right), \end{aligned} \tag{1}$$

где k_e, k_o – волновой вектор необыкновенного и обыкновенного лучей для длины волны λ_i; n_o, n_e – показатель преломления обыкновенного и необыкновенного луча: $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_i} n_e$; $k_o = \frac{2\pi}{\lambda_i} n_o$. Затем обыкновенные и необыкновенные лучи каждой длины волны проходят через анализатор А1, происходит проекция их векторов напряженности на направление пропускания анализатора (рис.2, в, г):

$$\begin{aligned} E_{ez}^{A_1} &= E_0 \cos^2\left(-k_e d_1\right), \\ E_{ox}^{A_1} &= E_0 \sin^2\alpha cos\left(-k_o d_1\right). \end{aligned} \tag{2}$$

На выходе из анализатора $А_1$ происходит интерференция этих лучей:

$$\begin{aligned} \left(E^{A_1}\right)^2 &= A_2^1 + A_2^2 + 2A_1 A_2 \cos\left(\varphi_1 - \varphi_2\right) = \\ &= E_0^2 \left\{\cos^4\alpha + \sin^4\alpha + 2\cos^2\alpha \sin^2\alpha cos\left[d_1\left(k_o - k_e\right)\right]\right\}. \end{aligned} \tag{3}$$

Теперь из (3) и с учетом α =45° имеем

$$\left(E^{A_1}\right)^2 = \frac{1}{4} E_0^2 \left\{2 + 2\cos\left[d_1\left(k_o - k_e\right)\right]\right\} = \frac{1}{2} E_0^2 \left\{1 + \cos\left[d_1\left(k_o - k_e\right)\right]\right\}. \tag{4}$$

Таким образом, получаем излучение с напряженностью E^{A1} (рис.2, д). При входе этого излучения в кристалл К2, он разбивается на два луча с взаимно ортогональными поляризациями для каждой длины волны. В результате в К2 распространяются опять обыкновенные и необыкновенные лучи с напряженностями (рис.2, е):

$$\begin{aligned} E_{ez}^{K_2} &= \sqrt{\frac{1}{2} E_0^2 \left\{1 + \cos\left[d_1\left(k_o - k_e\right)\right]\right\}} cos\alpha, \\ E_{oz}^{K_2} &= \sqrt{\frac{1}{2} E_0^2 \left\{1 + \cos\left[d_1\left(k_o - k_e\right)\right]\right\}} \sin\alpha. \end{aligned} \tag{5}$$

Проходя через кристалл $К_2$ длиной d_2 все лучи приобрели соответствующий их поляризации дополнительный фазовый сдвиг. На выходе из кристалла значения векторов напряженности, с учетом (5) равны:

$$E_{ez}^{K_2} = \sqrt{\frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_1\right)\right]\right\}}cos\alpha cos\left(-k_e d_2\right),$$
$$E_{ox}^{K_2} = \sqrt{\frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}}sin\alpha cos\left(-k_1 d_2\right). \quad (6)$$

Затем лучи проходят через анализатор $А_2$, происходит проекция векторов напряженности на направление пропускания анализатора (рис.2, в, г).

На выходе из анализатора $А_2$ происходит интерференция этих лучей, с учетом (6) и $\alpha = 45°$ получим:

$$\left(E^{A_2}\right)^2 = B_1^2 + B_2^2 + 2B_1B_2\cos\left(\gamma_1-\gamma_2\right) = \frac{1}{4}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}\left\{2+2\cos\left[d_2\left(k_o-k_e\right)\right]\right\} =$$
$$= \frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}\left\{1+\cos\left[d_2\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}. \quad (7)$$

Если кристаллы $К_1$ и $К_2$ равны по толщине $d_1=d_2=d$, то напряженность выходного излучения равна:

$$\left(E^{A_2}\right)^2 = \frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\left[d\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}^2. \quad (8)$$

При приложении к кристаллу $К_2$ электрического поля показатели преломления обыкновенного и необыкновенного лучей изменяются [4], что приводит к сдвигу фаз за счет напряжения δ_{eu} и δ_{ou}. Тогда на выходе из кристалла $К_2$ значения векторов напряженности будут равны:

$$E_{ez}^{K_2} = \sqrt{\frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}}cos\alpha cos\left(-k_e d_2+\delta_{eu}\right),$$
$$E_{ox}^{K_2} = \sqrt{\frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}}cos\alpha cos\left(-k_o d_2+\delta_{eo}\right). \quad (9)$$

В анализаторе $А_2$, происходит проекция векторов напряженности на направление пропускания анализатора и так как $\alpha = 45°$:

$$E_{ez}^{A_2} = \sqrt{\frac{1}{4}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}}\cos\left(-k_e d_2+\delta_{eu}\right),$$
$$E_{ox}^{A_2} = \sqrt{\frac{1}{4}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}}\cos\left(-k_o d_2+\delta_{eo}\right). \quad (10)$$

На выходе из анализатора $А_2$ лучи интерферируют:

$$\left(E^{A_2}\right)^2 = C_1^2 + C_2^2 + 2C_1C_2\cos\left(\theta_1-\theta_2\right) = \frac{1}{4}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}\left\{2+2\cos\left[d_2\left(k_o-k_e\right)+\delta_{eu}-\delta_{ou}\right]\right\}$$
$$= \frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d_1\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}\left\{1+\cos\left[d_2\left(k_o-k_e\right)+\delta_{eu}-\delta_{ou}\right]\right\}. \quad (11)$$

Для кристаллов равной толщины:

$$\left(E^{A_2}\right)^2 = \frac{1}{2}E_0^2\left\{1+\cos\left[d\left(k_o-k_e\right)\right]\right\}\left\{1+\cos\left[d\left(k_o-k_e\right)+\delta_{eu}-\delta_{ou}\right]\right\}. \quad (12)$$

Таким образом, изменение электрического поля приводит к изменению напряженности электрического поля излучения, следовательно, и к изменению интенсивности излучения, про-ходящего через ЭОМ [5-7].

Можно сделать вывод, что линейный электрооптический эффект применим для создания устройств модуляции излучения как с узким, так и с широким спектральным составом. Нужно отме-

тить, что при конструировании реальных устройств необходимо учитывать конфигурацию и форму электродов, так как неоднородное поле формирует разные значения наведенного двулучепреломления [8].

1. Криштоп, В.В. Электрооптический модулятор для волоконно-оптических линий связи / В.В. Криштоп, П.С. Лопатина // Изв. вузов. Приборостроение. – 2009. – Т.5, № 12. – С.67- 71.

2. Толстов, Е.В. Электрооптический модулятор // Е.В. Толстов, В.И. Строганов, В.В. Криштоп, М.Н. Литвинова, И.В. Рапопорт, А.В. Сюй. – Патент на изобретение G02F1/00 № 2267802 приоритет 25.05.04. Зарегистрировано 10.01.2006 г.

3. Байбородин, Ю.В. Электрооптический эффект в кристаллах // Ю.В. Байбородин, С.А. Гаража. – М.: Машиностроение, 1967.

4. Сонин, А.С. Электрооптические кристалл / А.С. Сонин, А.С. Василевская. – М.: Атомиздат, 1971.

5. Мустель, Е.П. Методы модуляции и сканирования света / Е.П. Мустель, В.Н. Парыгин. – М.: Наука, 1970.

6. Гончарова, П.С. Электрооптическое управление немонохроматическим светом в системе из двух анизотропных кристаллов / П.С. Гончарова, В.В. Криштоп, А.В. Сюй, Е.В. Толстов, О.Ю. Пикуль // НТВ СПбГПУ. – 2012. – Т. 141, № 1. – С. 82-85 (из перечня ВАК РФ).

7. Goncharova, P.S. Electro-optic modulation of broadband radiation for the infrared spectral range / P.S. Goncharova, A.V. Syuy, V.V. Krishtop // Proc. SPIE 10176, Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics. – 101761G (December 14, 2016); doi:10.1117/12.2268240.

8. Лопатина, П.С., Криштоп, В.В. Распределение индуцированного двулучепреломления в кристалле ниобата лития в неоднородном внешнем электрическом поле // Оптический журнал – 2010. – Т. 77, № 6. – С. 61-63.

УДК 535.51:535.215:540.0

ОПТИЧЕСКИЙ ФИЛЬТР НА ОСНОВЕ ГЛУБОКОЙ РЕЛЬЕФНОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРЕМЕННОЙ ГЛУБИНЫ

И.С. Долгополов[1], М.С. Петрова[1], А.В. Сюй[1, 2], А.В. Штарева[1,3]

[1] Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

[2] Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

[1]Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина Дальневосточного отделения Российской академии наук (г. Хабаровск)

alsyuy271@gmail.com

OPTICAL FILTER BASED ON DEEP RELIEF STRUCTURE OF VARIABLE DEPTH

I.S. Dolgopolov[1], M.S. Petrova[1], A.V. Xu[1], 2, A.V. Stareva[1,3]

[1]Far Eastern State University of Railway Engineering (Khabarovsk)

[2]Pacific State University (Khabarovsk)

[3]Institute of Tectonics and Geophysics Yu.A. Kosygin, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)

alsyuy271@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.144-147

В настоящее время при создании измерительных приборов и оптических устройств используются различные виды фильтров для подавления части спектра электромагнитного излучения. Фильтры различаются по своим свойствам, значению и способу изготовления. При использовании фильтров на установках всегда стоит проблема оптимизации работы с фильтрами в ходе эксперимен-

тов. При работе с различными установками и далее при изготовлении приборов высокой точности очень важно упростить процессы работы с установкой и снятия результатов экспериментов.

Для этого был предложен оптический фильтр, который построен на основе отражающей глубокой рельефной структуры (ГРС) переменной глубины, допускающей изменение частотных характеристик в достаточно широком диапазоне с помощью калибровки угла падения входного излучения и переменной глубины профиля. Фильтр с применением глубокой рельефной структуры с изменением угла падения входного луча был описан в статьях [1, 2]. Однако в них рассматривалась идея работы оптического фильтра на основе ГРС с постоянной глубиной рельефа и настройка фильтра осуществляется только за счет изменения угла падения излучения. Такое ограничение накладывает определенные трудности при настройке фильтра на определенные частоты, т.е. приходится подбирать ГРС с другой глубиной рельефа. В нашей работе предлагается исключить такой недостаток, изготовив ГРС переменной глубины. Схема оптического фильтра на основе ГРС переменной глубины изображена на рис 1.

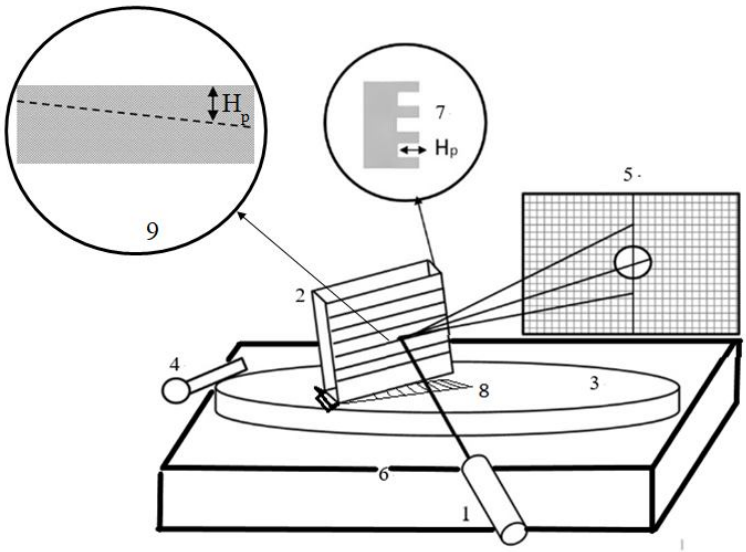


Рис. 1. Схема оптического фильтра на основе ГРС:
1 — источник излучения; 2 — ГРС; 3 — поворотная платформа для регулировки угла падения входного пучка; 4 — механизм поворота платформы; 5 — пространственный фильтр; 6 — основание; 7 — форма профиля ГРС; 8 — механизм для движения ГРС; 9 — вид на ГРС сбоку.

Входной пучок излучения направлен под углом падения θ на ГРС с прямоугольным профилем типа меандрового типа с глубиной рельефа $H_р$. Плоскость падения параллельна линиям рельефа ГРС. От периода ГРС частотные характеристики фильтра не зависят, зависят только габариты устройства. Например, если учесть что $\Lambda_р >> \lambda$, $D_п > (2…3)\Lambda_р$, где $D_п$ – диаметр пучка, то при $D_п$ =1 мм, $\Lambda_р$ = 50 мкм расстояние до диафрагмы составит 200-300 мм. При увеличении периода ГРС расстояние до диафрагмы будет возрастать.

После отражения от ГРС на выходе нулевой порядок дифракции выделяется с помощью простого пространственного фильтра — диафрагмы, которая расположена на расстоянии $L_ф$ от ГРС, достаточном для разделения в пространстве пучков излучений нулевого и первого порядков дифракции. Зависимость мощности излучения P в нулевом порядке дифракции от глубины $H_р$ отражающей дифракционной структуры и от угла падения входного оптического пучка θ определяется формулой (1):

$$P = P_{BX} R \cos^2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) H_p \cos\theta = P_{ЭФ}\left(\frac{1}{2} + \frac{\cos\left(\frac{4\pi}{\lambda}\right) H_p \cos\theta}{2}\right), \qquad (1)$$

где P_{BX} — мощность излучения, падающего на ГРС; R — коэффициент отражения поверхности ГРС; $P_{эф} = P_{BX}R$ — эффективная мощность излучения.

Как видно из зависимостей P(θ), приведенных на рис. 2 и 3, мощность излучения в нулевом дифракционном порядке изменяется в диапазоне от нулевой величины $P_0 = 0$ до максимальной величины, которая равна: $P^{(max)} = P_{BX}R = P_{эф}$.

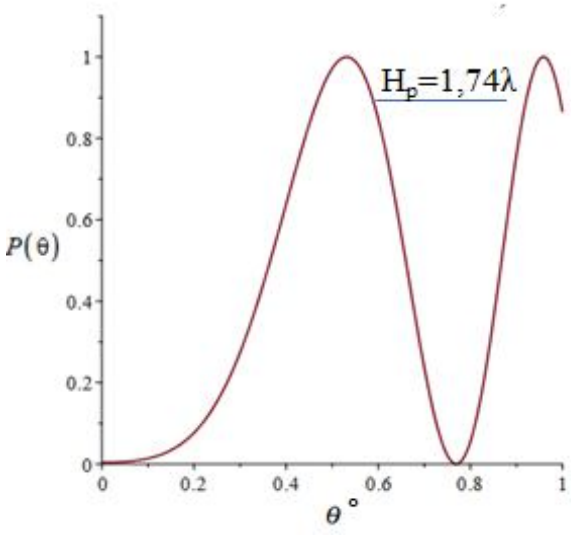


Рис. 2. График зависимостей мощности излучения от угла P(θ) при Hр=1.74λ.

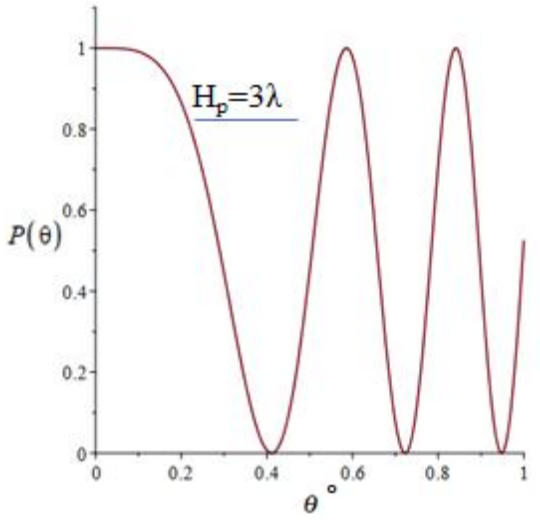


Рис. 3. График зависимостей мощности излучения от угла P(θ) при Hр=3λ

Зависимость коэффициента передачи мощности излучения k_p с входа на выход устройства от глубины рельефной структуры выражена в формуле (2).

$$k_p = \frac{P_0}{P_{BX}R} = \cos^2\left[\left(\frac{2\pi H_p}{\lambda}\right)\cos\theta\right], \qquad 2)$$

На рис. 4 приведено семейство расчетных зависимостей $k_p(H_p)$ при различных значениях параметра угла падения светового пучка на рельефную структуру. За λ были взяты значения 0,476 мкм, 0,488 мкм и 0,5145 мкм, так как данные линии аргонового лазера имеют наиболее сильную интенсивность.

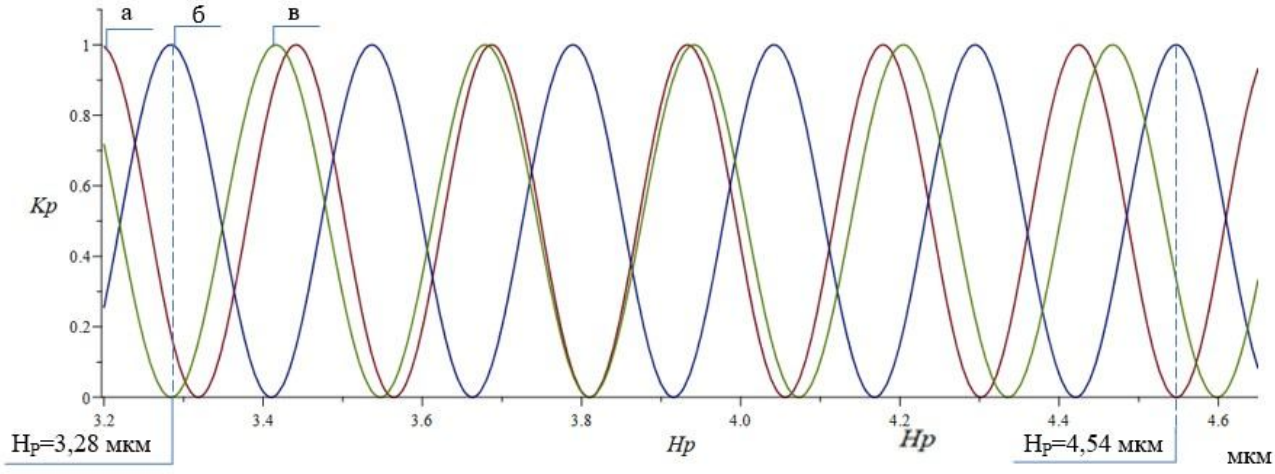


Рис.4. Зависимости нормированного коэффициента передачи, от глубины ГРС фильтра, рассчитанные при различных характеристиках установки: а) λ = 0,476 мкм, θ = 12°; б) λ = 0,488 мкм, θ = 15°; в) λ = 0,5145 мкм, θ = 14°

Как следует из графиков, приведенных на рис. 4, фильтр на основе ГРС можно настроить на подавление излучения с любой длиной волны в широком диапазоне. Если излучение с некоторой длиной волны подавлено и не проходит на выход в нулевой порядок, то оно передаётся в первые и в высшие порядки дифракции.

Фильтры, построенные на основе ГРС, могут быть изготовлены как для видимого, так и для ближнего инфракрасного диапазона длин волн. При этом технология их изготовления достаточно проста, а материалы для их изготовления — самые обычные: стекло, металлы. Рельефная структура может быть сформирована не только на поверхности стекла, но и на поверхности таких металлов, как алюминий, медь, серебро. Фильтры этого типа имеют гладкие зависимости коэффициента передачи мощности от длины волны.

Интересной для практики особенностью фильтра данного типа является возможность перестройки частотной характеристики в широких пределах путём изменения не только угла падения входного пучка излучения, но и глубины профиля, что на основе проведённых математических расчётов и экспериментальных исследований является довольно эффективным решением при разработке высокоточных датчиков и устройств.

1. Комоцкий, В.А. Оптоэлектронные дифракционные датчики малых линейных перемещений / В.А. Комоцкий, Ю.М. Соколов, В.И. Корольков // Фотоника. – 2011. – Т. 25, № 1. – С. 16-19.

2. Комоцкий, В.А. Исследование оптоэлектронного датчика угловых смещений и колебаний на основе глубокой отражательной фазовой дифракционной решетки / В.А. Комоцкий, Ю.М. Соколов, А.Н. Алексеев, Е.В. Басистый // Вестник РУДН. – 2009. – № 4. – С. 95-101.

УДК 5375.211

ЭЛЕКТРОСТРИКЦИОННАЯ ЛИНЗА В НАНОСУСПЕНЗИИ

Г.Д. Иванова, А.В. Мяготин, В.И. Иванов

Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

valivi@mail.ru

ELECTROSTRICTION LENS IN NANOSUSPENSION

G.D. Ivanova, A.V. Myagotin, V.I. Ivanov

Far Eastern State Transport University, Khabarovsk

valivi@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.147-149

Термолинзовый метод широко используется для исследования нелинейных сред [1]. В двухкомпонентных жидкостях термолинзовый отклик имеет свои особенности из-за наличия концентрационной нелинейности [2]. В микрогетерогенной среде с различными показателями преломления компонентов на микрочастицы в электромагнитном поле действуют электрострикционные силы, которые могут быть причиной возникновения концентрационных потоков [3]. При малых интенсивностях излучения отклик среды соответствует кубичной нелинейности, поскольку изменение концентрации частиц (и, соответственно, эффективного показателя преломления среды) пропорционально

интенсивности излучения [4]. Для высокой интенсивности излучения анализ приводит к так называемой экспоненциальной модели, когда изменение концентрации наночастиц нелинейно (экспоненциально) зависит от интенсивности излучения [5].

Целью данной работы является анализ концентрационной светоиндуцированной линзы пучка в прозрачной дисперсной среде при больших интенсивностях излучения с учетом взаимодействия (отталкивания) наночастиц.

Мы рассматриваем жидкофазную среду с наночастицами (дисперсная фаза), находящуюся под воздействием лазерного излучения с гауссовым профилем интенсивности [3].

Пусть распределение интенсивности падающего излучения в плоскости слоя среды имеет гауссов вид $I = I_0 \exp(-r^2/r_0^2)$, где $I_0 -$ интенсивность световой волны в центре пучка, r_0 – радиус гауссова пучка.

Балансное уравнение, описывающее динамику концентрации наночастиц в жидкофазной среде с учётом диффузионного и электрострикционного потоков ($J_{el} = \gamma C \nabla I$ _ электрострикционный поток), можно записать в виде [4]:

$$dC/dt = -\mathrm{div}(-D\nabla C + \gamma C(1-\nu C)\nabla I). \quad (1)$$

Здесь приняты следующие обозначения: $C(r,t)$ – объемная концентрация дисперсных частиц; D – коэффициент диффузии; $\gamma = b\mu$, $b = \dfrac{4\pi\beta D}{c_0 nkT}$; $\mu = (6\pi\eta a)^{-1}$ – подвижность наночастицы; a – радиус наночастицы; η – вязкость жидкости; β – поляризуемость частицы; k – постоянная Больцмана; T – температура среды; c_0 – скорость света в вакууме; n – эффективный показатель преломления среды; ν – константа, учитывающая взаимодействие (отталкивание) наночастиц [5].

В стационарном режиме выражение (1) упрощается:

$$-D\nabla C + \gamma C(1-\nu C)\nabla I = 0. \quad (2)$$

Решение уравнения (2):

$$C_{\mathrm{st}} = (f_0 + \exp\{-\alpha\exp(-r^2/r_0^2)\})^{-1}, \quad (3)$$

где $\alpha = I_0 / I_{th}$ – безразмерный параметр интенсивности; $I_{th} = D\gamma^{-1}$ –характерная интенсивность излучения, при превышении которой изменение концентрации наночастиц становится больше начального значения; $f = 4\pi a^3 C/3$ - начальная объемная доля наночастиц; a – радиус наночастицы; $\nu = 1$ в простейшей модели жестких сфер.

Для оптической силы концентрационной линзы получаем из (2) выражение [1]:

$$D_{nl} = d(\partial n/\partial C)(\partial^2 C/\partial r^2), \quad (4)$$

где d – толщина слоя наносуспензии.

Для частиц с радиусом, много меньшим длины волны излучения λ, показатель преломления среды пропорционален концентрации частиц [1]:

$$n = n_1(1 + f\delta), \quad (5)$$

где $\delta = (n_2 - n_1)/n_1$; n_1 и n_2 – показатели преломления вещества дисперсионной среды и дисперсной фазы соответственно.

Используя выражения (3-5), получаем окончательно:

$$D_{nl} = 2d\delta f_0 e^{-\alpha}(f_0 + e^{-\alpha})^{-2}/r_0^2. \quad (6)$$

На рис. 1 показаны зависимости оптической силы нелинейной линзы от интенсивности излучения для разных концентраций наночастиц.

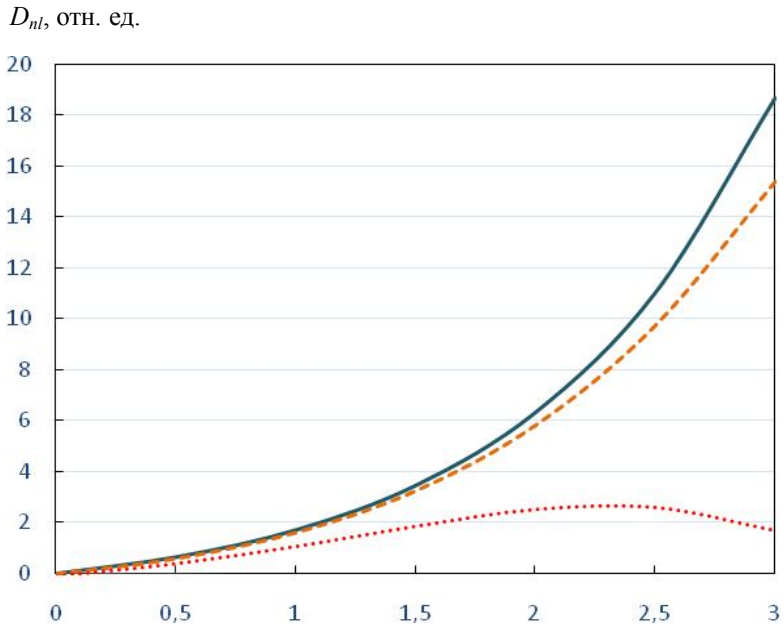


Рис. 1. Зависимость оптической силы нелинейной линзы от интенсивности излучения: для идеального газа наночастиц (——); для неидеального газа ($v=1$) в случае низкой.

Таким образом, в работе получено выражение для светолинзового отклика прозрачной наносуспензии. Проведенный анализ дает возможность определять по светолинзовому отклику не только концентрацию наночастиц, но и коэффициент диффузии частиц.

Полученные результаты актуальны для оптической диагностики дисперсных жидкофазных сред [3], а также для нелинейной оптики таких сред [4].

---

1. Иванов, В.И. Термоиндуцированные механизмы записи динамических голограмм: монография. − Владивосток: Дальнаука, 2006. − 142 с.

2. Vicary, L. Pump-probe detection of optical nonlinearity in water-in-oil microemulsion // Philosoph. Mag. B. – 2002. – Vol. 82. – № 4. – P. 447-452.

3. Lee, W. M. Nonlinear optical response of colloidal suspensions/ W.M., Lee, R. El-Ganainy, D.N. Christodoulides, K. Dholakia, E.M. Wright // Opt. Express. – 2009. – Vol. 17, № 12. – P. 10277-10289.

4. Иванов, В.И. Термоиндуцированное самовоздействие гауссова пучка излучения в жидкой дисперсной среде / В.И. Иванов, А.А Кузин, А.И. Ливашвили // Вестник Новосибирского гос. ун-та. Серия «Физика». – 2010. – Т. 5, № 1. – С. 5-8.

УДК 621.373

СПОСОБЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОДУКТОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МИНЕРАЛЬНЫЕ ОБРАЗЦЫ

С.И. Кравченко[1], Г.Г. Капустина[1], Н.А. Леоненко[2]
[1]Тихоокеанский государственный университет (г.Хабаровск)
[2]Институт горного дела ДВО РАН (г.Хабаровск)
g.kapustina@mail.ru

METHODS FOR RESEARCHING PRODUCTS OF INFLUENCE OF LASER RADIATION ON MINERAL SAMPLES

S.I. Kravchenko[1], G.G. Kapustina[1], N.A. Leonenko[2]
[1]Pacific State University (Khabarovsk)
[2]Mining Institute, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
g.kapustina@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.150-153

В последнее время много внимания уделяется развитию нанонаук, основой которых является изучение зависимости свойств вещества от его размеров. Свойства нанообразований отличаются от свойств их макроскопических аналогов.

Достижения современной лазерной физики широко используются и в области фундаментальных исследований, и при решении многих прикладных задач. Лазерное излучение позволяет обеспечивать большие скорости локальных изменений температуры в веществе порядка 10^{10} К·с$^{-1}$ и градиенты температуры до 10^{7} К·см$^{-1}$, что приводит к сильному взаимодействию тепловых, концентрационных, зарядовых и других потоков.

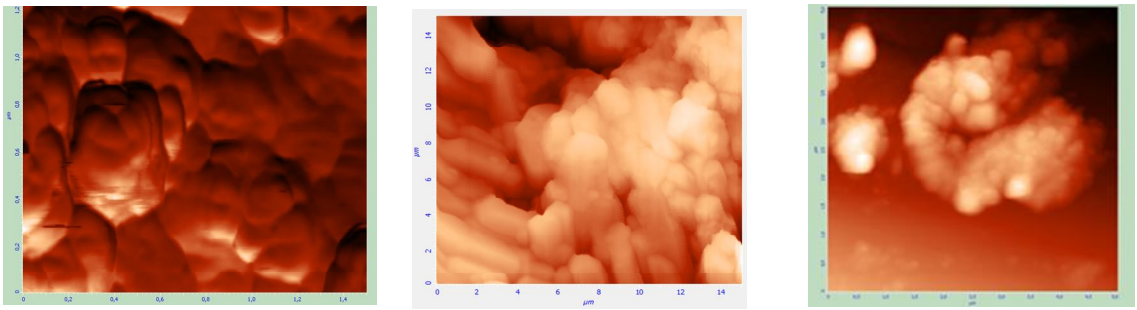
В нашей работе изучены результаты экспериментов по воздействию лазерного излучения на золотосодержащие минералогические образцы с месторождения «Кремень» ОАО старателей «Дальневосточные ресурсы» и с глубокозалегающей россыпи месторождения руч. Гайфон. Для изучения свойств были применены атомно-силовая и электронная микроскопия, проведен рентгеноспектральный микроанализ. Образы исследованы до лазерной обработки и после нее.

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) позволяет получать информацию о строении поверхности, определять деформационные, прочностные и релаксационные свойства индивидуальных макромолекул. Принцип работы АСМ заключается в силовом взаимодействии специального зонда (кантилевера) и исследуемой поверхностью. Атомно-силовой микроскоп снабжен оптической видеосистемой (с ПЗС-матрицей), что позволяет с субмикронной точностью осуществлять выбор участка сканирования.

Для исследования структурных особенностей строения золотосодержащих минералогических образцов использовался сканирующий зондовый микроскоп Интегра Прима, с применением полуконтактных методов сканирования кантилевера типа NSG11 с максимальным разрешением 20-30 нм при резонансной частоте колебаний 226 кГц.

Контактным методом АСМ изучены рельефы поверхностей, измерены отдельные структуры и положения границ раздела в исходных образцах. С использованием метода определения локальной жесткости образцов была измерена среднеарифметическая шероховатость образований золота по всей поверхности сканирования, что позволило установить их кластерное строение. Топографические

изображения указывают на различие кластеров по размерам и по форме, которая может быть как шарообразной, так и эллипсоидальной (рис. 1).



а б в

Рис. 1. Сканограммы поверхностей золотосодержащих образцов: а – россыпь ручья Феникс; б – тонкопластинчатое золото; в – глина с россыпи реки Гайфон с добавлением коллоидного золота.

Выявлены на масштабе нанометров рельефные и структурные особенности кластерного строения микронных частиц золота, соответствующих различным природным образованиям, характерным для каждого месторождения.

Выявлено, что характерные размеры кластеров колеблются от 10 нм до 400 нм (рис. 2).

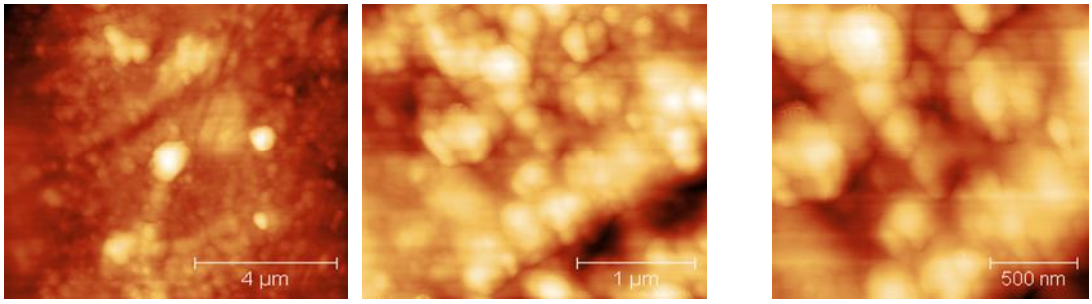
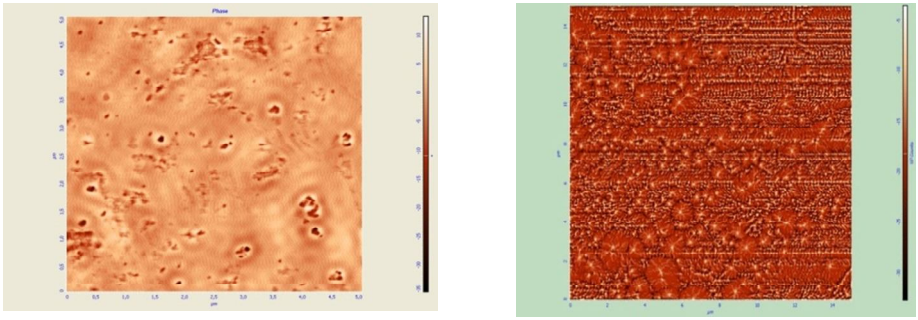


Рис. 2. Изображения микроскопических форм золота, полученные атомно-силовой микроскопией.

С помощью АСМ были получены снимки фазового контраста и кластерной структуры поверхности модельного алюмосиликатного золотосодержащего образца с искусственно введенным коллоидно-ионным золотом после лазерной обработки (рис. 3).



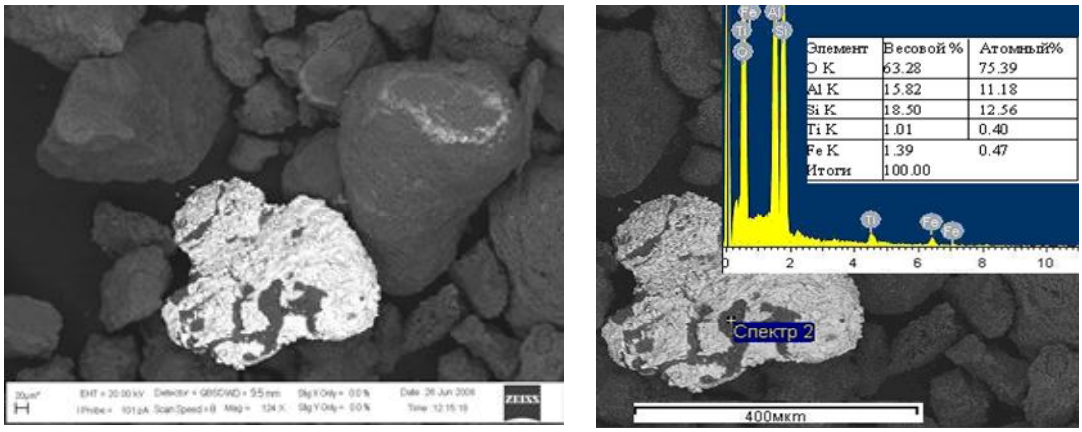
а б

Рис. 3. Изображение фазового контраста и кластерной структуры поверхности спека модельного золотосодержащего образца.

При исследовании площади сканирования (5×5 мкм) обнаружены группы агломераций с центрами вокруг точечных пиков. При этом центры ячеек совпадают с центрами на снимках фазового контраста. Установленная связь, таким образом, свидетельствует о самоорганизации золота. Размеры кластеров варьируются от 0,4 мкм до 1,4 мкм в диаметре. Это вполне закономерно, учитывая неоднородное воздействие лазерного излучения. Во время лазерной обработки кластерная структура в исходных образцах разрушается, а затем образуется новая.

Элементный анализ минералов, входящих в исходные составы исследуемых образцов, изучение структурных и элементных химических изменений при лазерных воздействиях проведено на растровом электронном микроскопе «LEO EVO 40HV» (Карл Цейс, Германия), оснащенном ЭДС «INCA-ENERGY». При съемке изучаемых объектов использовался детектор вторичных электронов (SE-детектор), позволяющий получить информацию о топографии образца. Дополнительно к SE-детектору использован детектор обратно рассеянных электронов (QBS-детектор). Информация о качественном и количественном распределении химических элементов в исследуемых минералогических объектах получена локализацией зондирующего пучка электронов в область диаметром 20 ~ 30 нм с глубиной проникновения ~ 1 мкм.

С помощью электронного микроскопа были получены микрофотографии поверхностей исходных образцов (рис. 4а) и выполнен элементный анализ этих образцов (рис. 4б).



а б

Рис. 4. Электронная микрофотография: а – поверхности исходного минерального образца; б – структура исходного образца.

Основу исследуемых минеральных ассоциаций составляют силикаты с незначительными примесями других веществ: железо, титан, ртуть, алюминий. В образцах присутствует значительная доля циркона – минерала-спутника золота.

После лазерной обработки образцы представляли собой силикатные спеки с неоднородной поверхностью (рис. 5).

При исследовании элементного состава спеков было установлено, что в обработанных образцах золото содержалось в виде шарообразных образований размером до 100 мкм без примесей на поверхности (рис. 6). Это позволяет сделать вывод, что при воздействии лазерного излучения на исследуемые минеральные ассоциации, происходит объединение частиц золота в шарообразные агломераты с типичными размерами до 100 мкм.

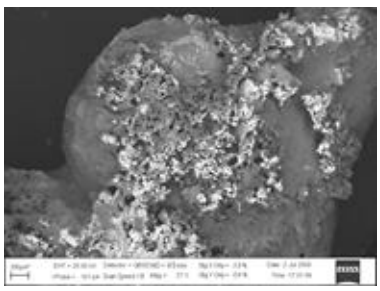


Рис. 5. Электронная микрофотография силикатных спеков.

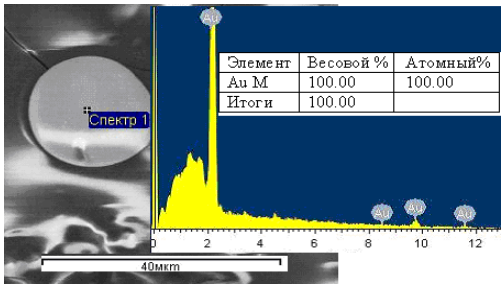


Рис. 6. Электронная микрофотография структуры силикатного спека.

Кроме микроскопических методов исследования проведены исследования образцов рентгенофазовым методом при различных мощностях лазерного воздействия. В основе рентгеноструктур-

ного анализа (РСА) лежит дифракция рентгеновских лучей от серии атомных плоскостей кристаллической решетки исследуемого материала. Рентгенодифракционный спектр (положение рефлексов по углу дифракции и их интенсивность) являются индивидуальными для каждого кристаллического вещества, следовательно, этот метод является надежным способом идентификации поликристаллических веществ.

В нашем случае рентгеноструктурные исследования поверхности образцов проводились с помощью дифрактометра ДРОН-7 (НПП «Буревестник). Напряжение трубки – 40 кВ, ток накала катода – 20 мА. В дифрактометре ДРОН-7 сигналы обрабатываются в автоматическом режиме, и спектр выводится через компьютер на монитор. Диапазон углов (2θ) составляет от -100° до +165°. Минимальный угол поворота образца и детектора – 0,005°. Площадь поверхности, освещаемой рентгеновским излучением, изменяется в зависимости от угла поворота образца и составляет порядка 0,1 $см^2$ (на больших углах) – 1 (на малых углах) $см^2$.

Исследование проводилось с исходными минеральными образцами и спеками, полученными после лазерной обработки с разной мощностью (60, 90, 120 Вт). При исследовании дифрактограмм, видно, что в исходном образце основные пики соответствуют кварцу SiO_2, в небольшом количестве присутствуют сложные оксиды алюминия, кальция, железа и кремния (рис. 7а);

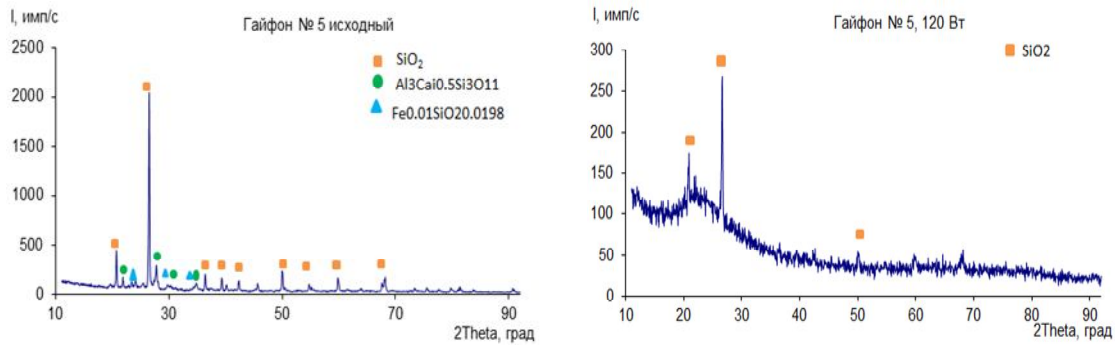


Рис. 7. Дифрактограмма: а – исходного образца; б – спека после лазерного воздействия мощностью 120 Вт.

После лазерной обработки при мощности излучения, интенсивность пиков уменьшается и часть пиков исчезает, базисная линия становится шире (рис.7б).

Изучение направленного изменения свойств природных дисперсных золотосодержащих минеральных объектов при лазерной термоактивации методами электронной, атомно-силовой микроскопии, а также рентгенофазового анализа показало, что по мере увеличения мощности энергетического лазерного воздействия образуются поверхностно неоднородные минеральные структуры достаточно правильной сферической формы из глинистых, алюмосиликатных частиц. Выявленные изменения позволяют предположить, что лазерную обработку можно применять в качестве предварительного этапа обогащения золотоносной руды, которая ранее была непригодной для использования.

Электронная микроскопия, АСМ и РСА необходимы для исследования структуры исходных образцов и для исследования быстропротекающих процессов, происходящих в минералогических образцах в результате воздействия на них мощного лазерного излучения.

---

1. Капустина, Г.Г. Исследование нелинейных эффектов при взаимодействии лазерного излучения с горными породами и минеральными средами / Г.Г. Капустина, Н.Л. Швец, Н.А. Леоненко // Вестник Тверского гос. ун-та. Серия «Физика». – 2013. – Вып. 19. – С. 22-30.

2. Ванина, Е.А. Исследование процессов лазерной агломерации ультрадисперсного и коллоидно-ионного золота / Е.А. Ванина, А.А. Гальцов, Н.А. Леоненко, Г.Г. Капустина // Перспективные материалы. Спецвыпуск (13) 2011. Материалы XI Российско-Китайского Симпозиума «Новые материалы и технологии». – Т. 1. – 10-14 октября 2011 г. – СПб.: Интерконтакт Наука; М.: Россия. – С. 144-148.

УДК 535.015

ОПТИЧЕСКИЙ МЕТОД КОНТРОЛЯ ТОЛЩИНЫ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ДЛЯ НЕПРОЗРАЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Е.А. Мазур[1], Е.А. Жуков[1], В.И. Жукова[2]
[1]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
[2]Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
000158@pnu.edu.ru

OPTICAL SURFACE LAYER THICKNESS CONTROL METHOD FOR Opaque materials

E.A. Mazur[1], E.A. Zhukov[1], V.I. Zhukova[2]
[1] Pacific State University, Khabarovsk
[2] Far Eastern State Transport University, Khabarovsk
000158@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.154-155

Возможность локализации лазерного излучения в пространстве и времени расширяет область его применения не только для изменения состава и свойств материалов, но и для их исследования. Важное значение при исследовании процессов взаимодействия излучения с различными материалами отводится их контролю. Большинство существующих способов [1-3] основывается на измерении параметров, определяемых магнитными, упругими или другими свойствами.

При воздействии интенсивного лазерного излучения на поверхности материала возникает деформация из-за неоднородного нагрева. В настоящей работе рассмотрен оптический метод контроля толщины наносимого слоя на подложку, основанный на времени релаксации деформации при воздействии на материал импульсов излучения с регулируемыми поперечными размерами лазерного луча. Для его реализации необходимо отличие теплофизических свойств поверхностного слоя и подложки, которые могут быть и непрозрачными для излучения. Такие условия характерны для покрытий толщиной l, небольшой, по сравнению с толщиной подложки l_0: $l << l_0$.

Скорость развития и время релаксации термодеформаций на поверхности однородного материала при нагреве от источника небольшой мощности определяются коэффициентом температуропроводности χ, характерным масштабом неоднородности, роль которой будет играть радиус луча r_0 и длительностью импульса лазерного излучения при условиях $r_0 << l$. или $l << r_0 << l_0$. Измерение традиционными оптическими методами времени релаксации деформации, обусловленной тепловым расширением среды, может позволить определить коэффициенты температуропроводности поверхностного слоя и основы. Зависимость времени релаксации от радиуса луча при этом будет содержать информацию о толщине поверхностного слоя.

Для однородного образца изменение температуры вблизи обрабатываемой поверхности за время $t > t_u$ изменение температуры δT под действием лазерного излучения с гауссовым распределением интенсивности определяется выражением:

$$\delta T(x,y,z,t) = \frac{A r_0^2 I_0}{\rho c_p \chi} \int_{t-t_u}^{t} \frac{\exp\left(-\frac{(x^2+y^2)}{\left(r_0^2+4\chi t'\right)} - \frac{z^2}{4\chi t'} \right)}{\left(r_0^2+4\chi t'\right)\sqrt{4\chi t'}} dt' \quad , \tag{1}$$

где A – поглощательная способность поверхности; I_0 – интенсивность излучения; ρ – плотность; c_p – теплоемкость; x, y – поперечные координаты; z – координата, направленная вглубь поверхности.

Деформацию поверхности $\delta h(x, y)$ при небольшом изменении температуры изменении δT можно найти следующим образом:

$$\delta h(x,y,t) \approx \beta \int_0^{+\infty} \delta T(x,y,z,t)d\ z, \tag{2}$$

где β – коэффициент объемного расширения, а распределение деформации поверхности, соответственно, пропорционально

$$\delta h(x,y,t) \quad \propto \quad \frac{Ar_0^2 \beta I_0}{\rho c_p \chi} \int_{t-t_u}^{t} \frac{\exp\left(-\dfrac{x^2+y^2}{r_0^2+4\chi t'}\right)}{(r_0^2+4\chi t')}dt', \tag{3}$$

и в центре пучка ($x = y = 0$):

$$\delta h_0(t) \quad \propto \quad \frac{Ar_0^2 \beta I_0}{\rho c_p \chi}\left[arctg\left(\frac{4\chi t}{r_0^2}\right) - arctg\left(\frac{4\chi(t-t_u)}{r_0^2}\right)\right]. \tag{4}$$

Численный анализ выражения (4) показал, что при длительности импульсов $t_u < r_0^2/\chi$ время релаксации τ, за которое квадрат амплитуды термодеформации уменьшался в два раза от максимального значения с точностью до нескольких процентов, может быть представлена зависимостью:

$$\tau(r_0, t_u) = t_u + r_0^2/10\chi. \tag{5}$$

При небольшом радиусе луча $r_0 << l$ можно пренебречь влиянием подложки, а при $l << r_0 << l_0$ в свою очередь мало влияние поверхностного слоя. В обоих случаях величина деформации и время её релаксации будут соответствовать выражениям(4, 5), где в первом случае $\chi = \chi 1$, а во втором $\chi = \chi 2$. Здесь $\chi 1$, $\chi 2$ – коэффициенты температуропроводности поверхностного слоя и подложки соответственно.

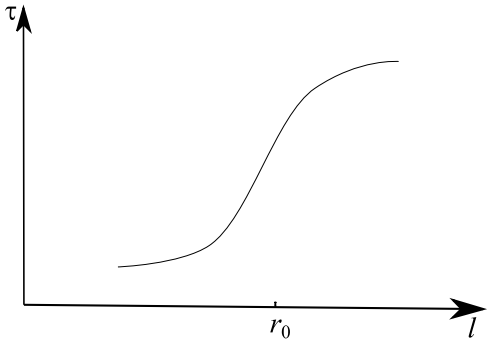


Рис. 1. Зависимость времени релаксации деформации от толщины поверхностного слоя.

При фиксируемом радиусе луча время релаксации начнет изменяться при толщине поверхностного слоя, сопоставимого с ним (рис. 1)

Измерение амплитуды термодеформации в этом случае можно проводить традиционными оптическими методами [4].

Таким образом, этот бесконтактный динамический метод позволяет контролировать толщину формируемого поверхностного слоя.

1. А.с. №1603271. СССР, МКИ5. G01 №25/18. Способ определения теплофизических свойств веществ / А.Д. Ивлев и др. – 5 с.

2. Комина, О.Ю., Жуков, Е.А., Каминский, А.В. Измерение магнитного поля катушек Гельмгольца малого размера по смещению доменной границы // Вестник ТОГУ. – 2016. – № 4 (43). – С. 39-44.

3. Адамова, М.Е., Жуков, Е.А., Каминский, А.В. Исследование обратного магнитоэлектрического эффекта в композитах на основе $FeBO_3$ с использованием оптических методов // Известия вузов. Приборостроение. – 2019. – Т. 62. – № 3. – С. 261-265.

4. Дмитриев, В.Г., Тарасов, Л.В. Прикладная нелинейная оптика. – Изд. 2-е, перераб. и доп. –М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. –512 с.

УДК 535.347

ОСОБЕННОСТИ ДИХРОИЗМА В ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

В.А. Максименко

Дальневосточный государственный университет сообщения (г. Хабаровск)

mva30@mail.ru

CHARACTERISTICS OF DICHROISM IN DOPED LITHIUM NIOBATE CRYSTALS

V.A. Maksimenko

Far Eastern State University of Transport (Khabarovsk)

mva30@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.156-158

Фоторефрактивные свойства кристаллов ниобата лития сильно зависят от рода легирующей примеси [1-3]. В данной работе обсуждаются результаты экспериментального исследования спектров пропускания поляризованного света в кристаллах ниобата лития с добавками Fe, Rh, Fe+Rh. В кристалле $LiNbO_3$:Fe содержание железа – 0,3%, в кристалле $LiNbO_3$:Rh содержание родия – 0,01%, в кристалле $LiNbO_3$:(Fe+Rh) содержание железа – 0,3%, родия – 0,01%. Во всех случаях содержание примеси дается в процентах от общей массы образца. Образцы представляли собой плоскопараллельные пластинки *x*-срезов, толщиной 1-1,5 мм.

Известно, что легированные кристаллы ниобата лития обладают дихроизмом (анизотропией поглощения) [4]. Нами обнаружено, что дихроизм кристаллов ниобата лития заметно зависит от рода легирующей примеси [5]. Были получены спектры пропускания кристаллов ниобата лития для света поляризованного либо параллельно (необыкновенный луч), либо перпендикулярно оптической оси кристаллов (обыкновенный луч). Измерение пропускания кристаллов проводилось на спектрфотометре СФ-46. Монохроматическое излучение спектрофотометра пропускалось через поляризатор. Спектральный диапазон измерений – от 340 нм до 800 нм, пропускание кристаллов измерялось через каждые 10 нм. Коэффициент пропускания определялся как отношение интенсивности падающего на кристалл излучения к интенсивности прошедшего. Расчет спектров пропускания кристаллов сделан с учетом спектров пропускания поляризатора и отражения от граней кристаллов.

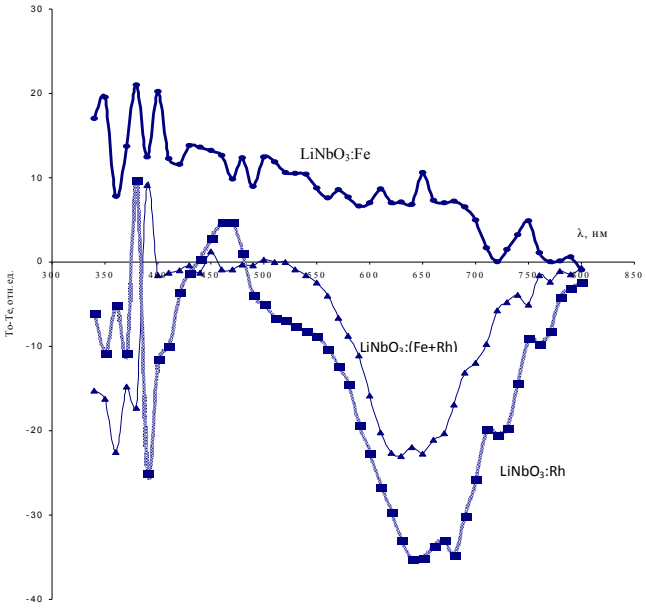


Рис. 1. Спектры анизотропии пропускания для кристаллов $iNbO_3$:Fe, $LiNbO_3$:(Fe+Rh), $LiNbO_3$:Rh.

На рис. 1 представлены спектры анизотропии пропускания для вышеуказанных кристаллов. Под анизотропией пропускания здесь понимается разность коэффициентов пропускания для обыкновенного и необыкновенного лучей: To –Te.

Из анализа представленных на рис. 1 зависимостей следует, что примесь родия в большей степени влияет на дихроизм кристаллов ниобата лития, чем примесь железа. Видно, что в общих чертах спектр анизотропии пропускания кристалла $LiNbO_3$:(Fe+Rh) повторяет аналогичный спектр для кристалла $LiNbO_3$:Rh. Максимальная анизотропия пропускания для кристалла $LiNbO_3$:(Fe+Rh) меньше, чем для кристалла $LiNbO_3$:Rh, что, вероятно, связано с влиянием атомов железа – анизотропия пропускания кристалла $LiNbO_3$:Fe почти во всем исследуемом спектральном диапазоне отличается по знаку.

Отметим, что с практической точки зрения наиболее важной характеристикой поляризационной анизотропии поглощения является разность коэффициентов поглощения $\Delta\alpha = \alpha_e - \alpha_o$ необыкновенного луча и обыкновенного луча. Действительно, соотношение интенсивностей необыкновенного и обыкновенного лучей на выходе из кристалла (при равных интенсивностях падающих на кристалл лучей – например, обыкновенная и необыкновенная компоненты в неполяризованном гауссовом пучке) определяется именно разностью $\Delta\alpha$. Это следует из выражения (1):

$$\frac{I_e}{I_o} = \frac{I\exp(-\alpha_e L)}{I\exp(-\alpha_o L)} = \exp(-\Delta\alpha L), \qquad (1)$$

где L – толщина кристалла.

С другой стороны отношение I_e/I_o равно отношению коэффициентов пропускания T_e/T_o, которые определяются из эксперимента. На рис. 2 приведены графики анизотропии поглощения для исследуемых кристаллов.

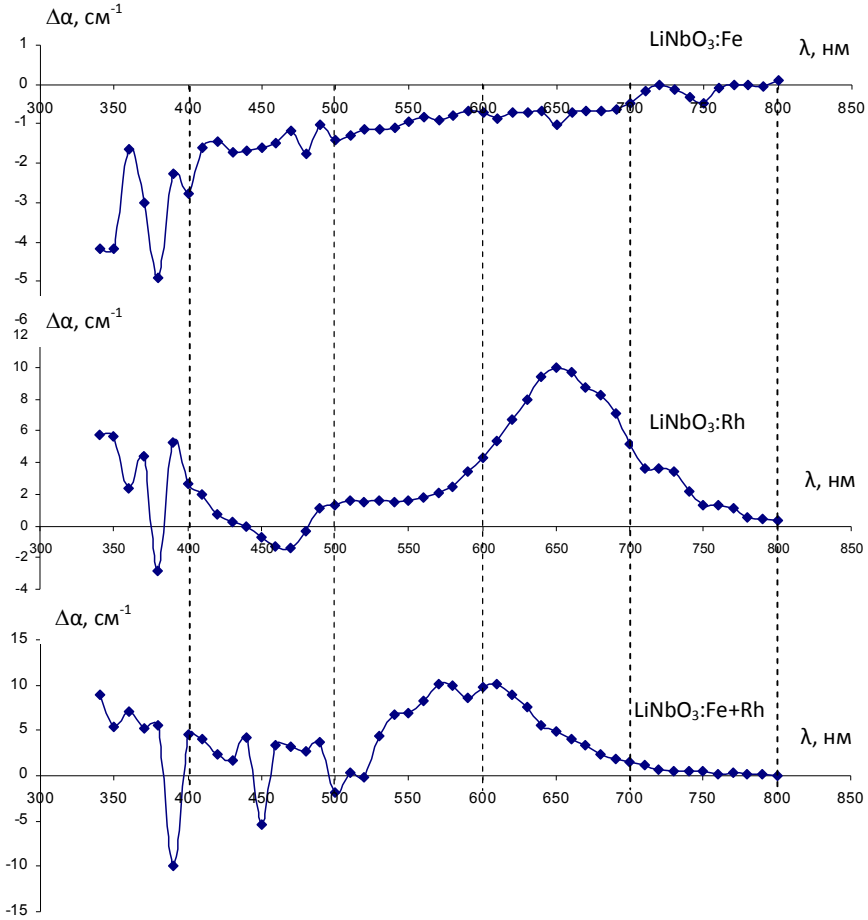


Рис.2. Поляризационная анизотропия коэффициента поглощения в легированных кристаллах ниобата лития.

Причины различия в характере дихроизма в исследуемых кристаллах, вероятно, связаны с особенностями того, как атом той или иной примеси встраивается в кристаллическую решетку. Кри-

сталлы ниобата лития являются сегнетоэлектриками, их макроскопическая поляризация приводит к асимметрии потенциалов примесных центров [6]. Вероятно, атомы железа и родия, имеющие различные размеры, по-разному встраиваются в решетку, и ориентация их асимметричных потенциалов относительно направления спонтанной поляризации также различна.

Обнаруженные особенности дихроизма необходимо учитывать при проведении экспериментов с легированными кристаллами ниобата лития, а также при использовании данных кристаллов в оптическом приборостроении.

1. Кузьминов, Ю.С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. – М.: Наука, 1987. – 264 с.

2. Buse, K. Light-induced charge processes in photorefractive crystals II: Materials // Appl. Phys. – 1997. – Vol. 64. – P. 391-407.

3. Максименко, В.А. Фотоиндуцированные процессы в кристаллах ниобата лития / В.А. Максименко, А.В. Сюй, Ю.М. Карпец. – М.: Физматлит, 2008. – 96 с.

4. Сидоров, Н.В. Ниобат лития: дефекты, фоторефракция, колебательный спектр, поляритоны / Н.В. Сидоров, Т.Р. Волк, Б.Н. Маврин, В.Т. Калинников. – М.: Наука, 2003. – 255 с.

5. Максименко, В.А. Анизотропное поглощение в кристаллах ниобата лития. – Бюллетень научных сообщений № 18. – Хабаровск: Изд-во ДВГУПС, 2013. – С. 20-24.

6. Фридкин, В.М. Фотосегнетоэлектрики. – М.: Наука, 1979. – 264 с.

УДК 534.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ВОДЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СФОКУСИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.В. Михеенко, А.И. Андреев

Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

serg.50@bk.ru

NUMERICAL MODELING OF WATER HEATING UNDER THE ACTION OF FOCUSED LASER RADIATION

A.V. Mikheenko, A.I. Andreev

Pacific State University (Khabarovsk)

serg.50@bk.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.158-161

Мощное лазерное излучение достаточно часто применяется для различного воздействия на вещество. Сфокусированное лазерное излучение применялось, например: для получения оптического пробоя в воде, для взрывного вскипания и испарения воды, для генерации звука в воде [1, 2, 3]. Во всех этих процессах происходит нагрев воды, который может сопровождаться изменением состояния и состава воды.

В данной работе рассматривается задача о численном моделировании нагрева воды под действием сфокусированного лазерного излучения до температуры, близкой к температуре кипения воды.

Для решения задачи рассмотрим следующую теоретическую модель, согласно которой. сфокусированный лазерный пучок с гауссовым профилем падает перпендикулярно поверхности воды.

Ось *z* совпадает с осью лазерного пучка и направлена от поверхности вглубь воды, а оси *x, y* совпадают с поверхностью воды.

В основе теоретической модели лежит уравнение теплопроводности (1) с объемным источником тепла G(x,y,z,t), которое создается за счет поглощения лазерного излучения.

$$\frac{\partial T(x,y,z,t)}{\partial t} = a\,\Delta T(x,y,z,t) + G(x,y,z,t), \qquad (1)$$

где *a* — коэффициент температуропроводности.

В данной задаче имеется цилиндрическая симметрия. С учетом этого, и используя цилиндрическую систему координат, это уравнение можно записать в виде:

$$\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t} = a\left(\frac{\partial^2 T(r,z,t)}{\partial r^2} + \frac{\partial T(r,z,t)}{r\partial r} + \frac{\partial^2 T(r,z,t)}{\partial z^2}\right) + G(x,y,z,t), \qquad (2)$$

где объемный источник тепла имеет вид:

$$G(r,z,t) = \frac{q(1-K)f(t)\left(\exp-\frac{r^2}{r_0^2}\right)\left(\exp-\frac{z}{\delta}\right)}{\delta\times\rho\times C}, \qquad (3)$$

где ρ – плотность среды; $\delta = \frac{1}{\alpha}$ – величина, обратная коэффициенту поглощения α; C – удельная изохорная теплоемкость воды; функция $f(t)$ определяет зависимость плотности мощности (4). В этом выражении учитывается, что плотность мощности падающего излучения описывается распределением Гаусса, а также предполагается, что при прохождении через воду ослабление интенсивности плотности падающего потока описывается законом Бугера-Ламберта.

При моделировании данной задачи будем считать, что условия, которые здесь используются, близки к тем, которые были на практике использованы в работе [4]. Излучение лазера фокусировалось с помощью линзы на поверхность воды. Длина волны излучения λ= 1,075 мкм. Минимальный радиус лазерного пучка $r_0 = 2\ 10^{-5}$ м. Величина r_0, в общем случае, зависит от координаты z распространения лазерного пучка в глубину, но в области фокусировки эта зависимость не велика, и при моделировании ей можно пренебречь.

В этом случае фокальную область можно рассматривать в виде цилиндра, радиус которого равен r_0, верхнее основание которого находится при z = 0, а нижнее находится при z = L, где L – длина фокальной области (дифракционная длина). Оценки показывают, что дифракционная длинна L в условиях данной задачи примерно в 100 раз больше, чем минимальный радиус лазерного пучка r_0. Это означает, что потоками тепла по оси z через основания цилиндра можно пренебречь. Коэффициент поглощения α для длинны волны излучения, которое рассматривается в данной задаче, достаточно мал, так что можно пренебречь изменением интенсивностью излучения по оси z в выбранном цилиндре. Коэффициент отражения излучения от поверхности воды К достаточно мал, им также можно пренебречь. В этом случае уравнение теплопроводности можно записать в вид

$$\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = a\left(\frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial r^2} + \frac{\partial T(r,t)}{r\partial r}\right) + \frac{q\times f(t)\times\left(\exp-\frac{r^2}{r_0^2}\right)}{\delta\times\rho\times C}. \qquad (4)$$

Функция $f(t)$ определяет зависимость плотности мощности излучения q от времени. В данной работе она моделируется ступенчатой функцией Хевисайда; $f(t) = 1$, если $t \le \tau$, и ; $f(t) = 0$, если $t > \tau$.

Будем считать, что температура воды в начальный момент времени везде одинакова $T(r,0) = T_н$. Границу для координаты r = b выберем достаточно далеко от оси пучка, так, чтобы температуру на этой границе можно считать неизменной, и $T(b,0) = T_н$ в любой момент времени, а также можно

пренебречь потоком тепла через эту границу, что определяется условием $\frac{\partial T(b,t)}{\partial r} = 0$. Из условий нашей задачи следует, что температура на оси пучка должна быть максимальной. Отсюда следует условие $\frac{\partial T(0,t)}{\partial r} = 0$.

Численное решение краевой задачи (4), с учетом граничных и начальных условий проводилось с использованием следующих параметров; плотность мощности излучения в центре лазерного пучка $q = J_0 = 4{,}5\ 10^{10}$ Вт / м^2, длительность лазерного импульса $\tau = 0.001$ с, коэффициент поглощения $\alpha = 12$ м$^{-1}$, плотность воды $\rho = 1000$ кг/м^3, теплоемкость С = 4200 Дж/(Кг К), граница для координаты $r = b = 10^{-4}$ м, минимальный радиус лазерного пучка $r_0 = 2\ 10^{-5}$м, начальная температура $T_н$ = 300 К, коэффициент температуропроводности $a = 1.43\ 10^{-7}$м^2/с

На рис. 1 приводятся результаты расчетов зависимости температуры воды от расстояния до оси лазерного пучка в различные моменты времени; кривая 1 – t = 0, кривая 2 – t = τ/15, кривая 3 – t = τ/10, кривая 4 – t = τ/5, кривая 5 – t = 0.3 τ, кривая 6 – t = τ, кривая 7 – 1.5 τ, кривая 8 – 3 τ. Максимальная температура воды достигается к концу лазерного импульса(t = τ)

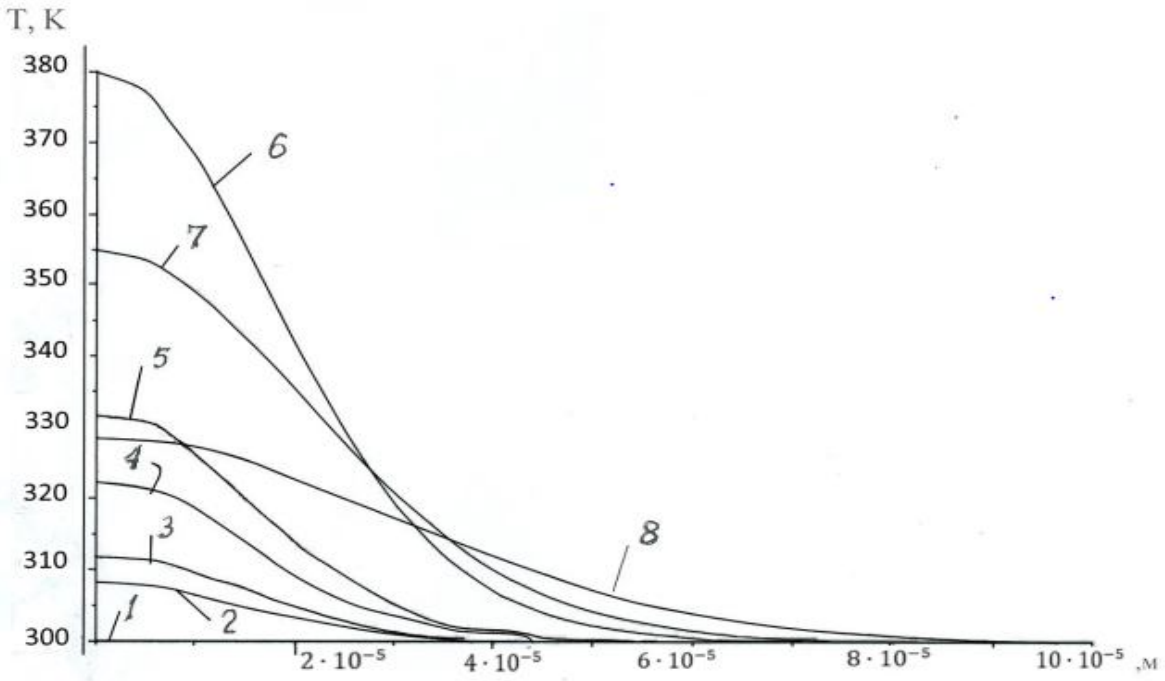


Рис. 1. Зависимость температуры воды от расстояния до оси лазерного пучка в различные моменты времени

Процесс теплообмена происходит внутри источника тепла и за его пределами. Согласно рассматриваемой модели, источником тепла является лазерное излучение, которое поглощается в фокальной области лазерного пучка за время длительности лазерного импульса τ. Тепло отводится через боковые поверхности фокальной области во время действия τ лазерного импульса и после прекращения этого действия.

На рис.2 приводятся результаты расчетов температуры воды в центре лазерного пучка в различные моменты времени.

Максимальная температура, близкая к температуре кипения, достигается к концу лазерного импульса. За время в четыре раз большее, чем лазерный импульс, температура уменьшается примерно в четыре раза.

Полученные результаты расчетов соответствуют оценкам и результатам наблюдений нагрева воды в аналогичных условиях лазерным излучением.

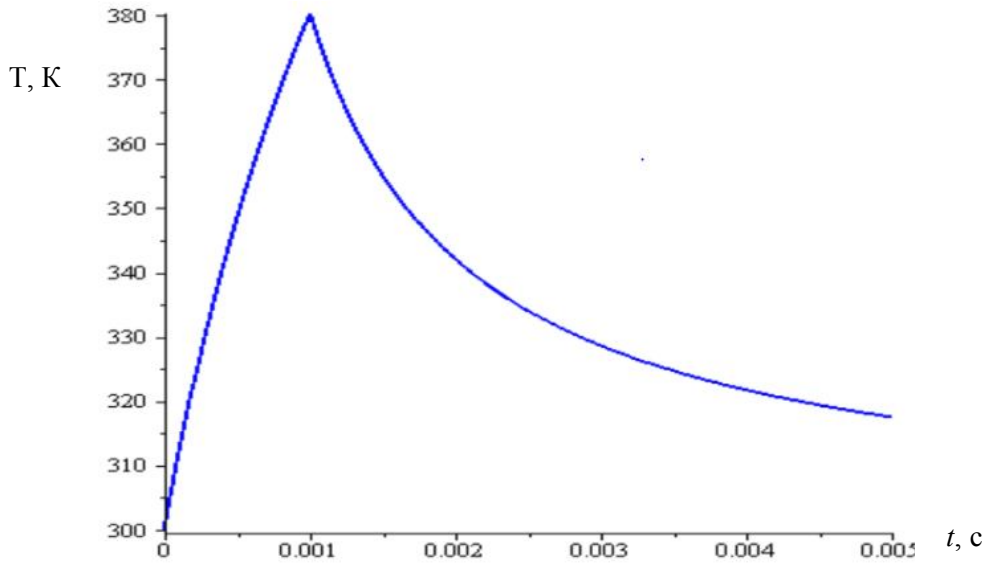


Рис. 2. Зависимость температуры воды на оси лазерного пучка от времени

1. Бункин, Ф.В., Трибельский, М.И. Нерезонансное взаимодействие мощного оптического излучения с жидкостью // УФН. – – 1980. – Т. 130, № 2. – С. 193-240.

2. Лямшев, Л.М. Лазеры в акустике // УФН. – 1987. – Т. 151. –С. 479-527.

3. Михеенко, А.В.. Оптический пробой в воде под действием непрерывного лазерного излучения // Вестник Тихоокеанского гос. ун-таа. – 2015. – № 4. – С. 41-48.

4 Михеенко, А.В. Силютин, И.В. Генерация звука в воде под действием периодической последовательности лазерных импульсов и непрерывным лазерным излучением // Вестник Тихоокеанского гос. ун-та. – 2015. – № 3. – С. 17-22.

УДК 535.349

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ЭНЕРГИИ УРБАХА ВИСМУТАТА СТРОНЦИЯ $Sr_3Bi_2O_6$

Е.О. Нащочин [1], Д.С. Штарев [2], А.В. Штарева [1], А.В. Сюй [1]

[1]Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г Хабаровск)

[2]Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина ДВО РАН (г. Хабаровск)

nashchochin@gmail.com

TEMPERATURE EVOLUTION OF ENERGY OF URBACH OF STRONTIUM BISMUTATE $Sr_3Bi_2O_6$

E.O. Nashchochin[1], D.S. Shtarev[2], A.V. Shtareva [1], A.V. Xu [1]

[1]Far Eastern State Transport University, Khabarovsk, Russia

[2]Institute of Tectonics and Geophysics Yu.A. Kosygina FEB RAS, Khabarovsk, Russia

nashchochin@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.161-163

Висмутаты стронция являются фотоактивными материалами и их использованиев разных отраслях открывает перспективы. Висмутаты стронция могут быть основой для фотокатализаторов для очистки воды и воздуха от органических и неорганических загрязнителей [1], могут быть использованы для фотокаталитического разложения воды и производства водорода и т.д. Теоретические ис-

следования [2] показывают, что висмутаты стронция, в катионной подрешетке которых количество атомов стронция превышает количество атомов висмута являются наиболее перспективными составами для описанных целей. Речь идет о висмутатах стронция, расположенных в области от 50 до 100 мол.% на фазовой диаграмме [3]. Практическое применение висмутатов стронция в значительной мере ограничивает относительно большое значение ширины запрещенной зоны. Так, для висмутата стронция Sr2Bi2O5 ширина запрещенной зоны составляет 3,2 эВ [4]. Такая ширина запрещенной зоны не позволяет активировать его излучением видимого диапазона. Тем не менее, известно, что полупроводниковые фотоактивные материалы могут быть активированы излучением с энергией фотонов меньшей, чем ширина запрещенной зоны. Такое поглощение излучения в несобственной области является результатом электрон-фононного взаимодействия и описывается правилом Урбаха (1).

$$\alpha = \alpha_0 \cdot e^{-\frac{h\upsilon}{E_U}}, \tag{1}$$

где α – коэффициент поглощения; E_U – энергия Урбаха.

В представленной работе оценивается температурные зависимости энергии Урбаха для висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$.

Синтез висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$ осуществлялся твердофазным методом из оксида висмута и нитрата стронция. Твердофазный синтез производился в два этапа: на первом этапе прекурсоры спекались при 645°C с течение 2 часов, на втором –при 775°C в течение 72 часов.

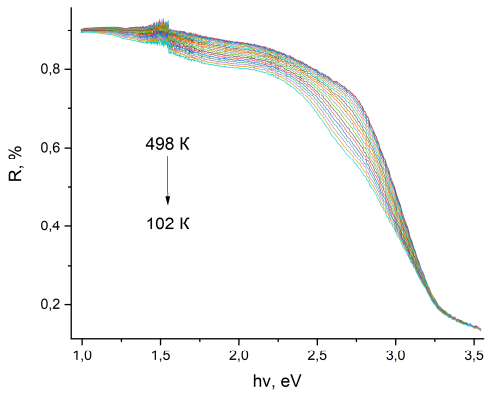


Рис. 1. Эволюция спектров диффузного отражения висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$ при нагреве.

Для расчета энергии Урбаха были сняты спектры диффузного отражения висмутата стронция Sr3Bi2O6 в диапазоне температур от 102 К до 498 К (рис. 1). При регистрации спектров диффузного отражения для прецизионного контроля температуры образца использовалась приставка к спектрофотометру [5].

Для расчета энергии Урбаха (1) необходим коэффициент поглощения, однако на практике определение истинного коэффициента поглощения полупроводника является нетривиальной задачей, поэтому в расчетах вместо α используют функцию Кубелки-Мунка (2).

$$F = \frac{(1-R)^2}{2R}, \tag{2}$$

где R – коэффициент отражения.

График показывает, что повышение температуры образца сопровождается смещением края собственного поглощения.

Проведем замену коэффициента поглощения на функцию Кубелки-Мунка и прологарифмируем выражение (1):

$$\ln(F) = \ln(F_0) - \frac{h\nu}{E_U}. \tag{3}$$

На рис. 2 представлены результаты расчетов, выполненных по формуле (3).

На графиках ln(F) на рис. 2 можно выделить три линейных участка: 1,6-2 эВ (первый участок), 2,2-2,7 эВ (второй участок) и 2,9-3,2 эВ (третий участок), а выражение (3) показывает, что энергия E_U может быть найдена, если области вблизи собственного поглощения на рис. 2 описать линейной функцией. Результаты подобного анализа приведены на рис. 3.

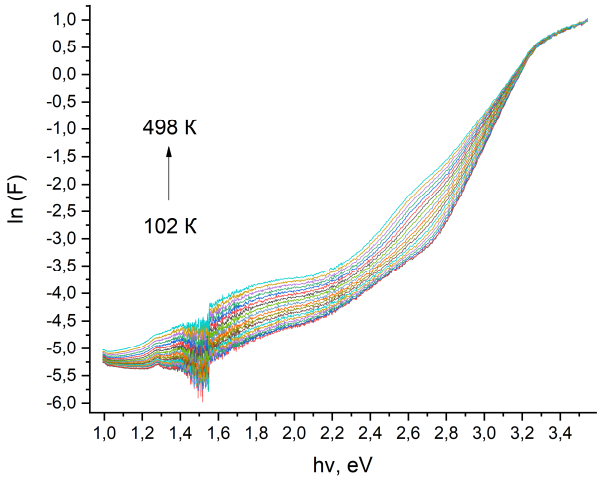


Рис. 2. Преобразование Кубелки-Мунка для спектров диффузного отражения висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$ при различных температурах.

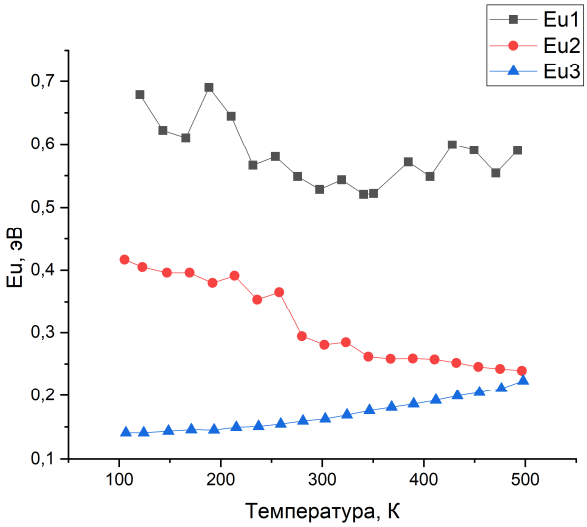


Рис. 3. Температурная зависимость энергии Урбаха висмутата стронция $Sr_2Bi_2O_5$

Энергия Урбаха для второго участка (Eu2) снижается с ростом температуры. в то время как энергия Урбаха для третьего участка (Eu3) при температуре до 200 К не испытывает значительных изменений, а при дальнейшем увеличении температуры возрастает практически линейно. Авторы предполагают, что энергия Eu2 характеризует электрон-фононное взаимодействие, а энергия Eu3 – ширину запрещенной зоны.

Исследования выполнены при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-10013).

1. Shtarev, D.S., Karpovich, N.F., Shtareva, A.V., Blokh, A.I., Nashchochin, E.O. Solid-phase synthesis and photo-catalytic activity of strontium bismuthates $Sr_xBi_yO_z$ (x>y) // Bulletin of FEB RAS. 198 (2018) 237-247 (in Russia).

2. Shtarev, D.S., Blokh, A.I., Nashchochin, E.O., Shtareva, A.V. The dependence of the conduction band edge of the alkali earth metal bismuthates on their composition. // Optical and Quantum Electronics. – 2018. – V. 50. – P. 228.

3. Hallstedt, B., Gaucklerb, L.J. Revision of the thermodynamic descriptions of the Cu–O, Ag–O, Ag–Cu–O, Bi–Sr–O, Bi–Ca–O, Bi–Cu–O, Sr–Cu–O, Ca–Cu–O and Sr–Ca–Cu–O systems // Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry. – 2003. – V. 27. – P. 177-191.

4. Obukuro, Y., Matsushima, S., Obata, K., Suzuki, T., Arai, M., Asato, E., Okuyama, Y., Matsunaga, N., Sakai. G. Effects of La doping on structural, optical, electronic properties of $Sr_2Bi_2O_5$ photocatalyst. // Journal of Alloys and Compounds. – 2016. – V. 658. – P 139-146.

5. Kuznetsov, V.N., Glazkova, N.I., Mikhaylov, R.V., Serpone, N. In situ study of photo- and thermo-induced color centers in photochromic rutile TiO_2 in the temperature range 90–720 K // Photochemical & Photobiological Sciences. – 2016. – V. 15. – P. 1289-1298.

УДК 535.51:535.215:540.0

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ГЛУБОКОЙ РЕЛЬЕФНОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРЕМЕННОЙ ГЛУБИНЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОПТИЧЕСКОМ ФИЛЬТРЕ

М.С. Петрова[1], И.С. Долгополов[1], А.В. Сюй[1, 2], А.Ю. Жижченко[3]

[1] *Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)*

[2] *Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)*

[3] *Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток)*

PRODUCTION OF DEEP RELIEF STRUCTURE OF VARIABLE DEPTH FOR OPTICAL FILTER APPLICATION

M.S. Petrova[1], I.S. Dolgopolov[1], A.V. Xu[1,2], A.Yu. Zhizhchenko[3]

[1] *Far Eastern State Transport University (Khabarovsk)*

[2] *Pacific State University (Khabarovsk)*

[3] *Institute of Automation and Control Processes FEB RAS (Vladivostok)*

marina-l-p@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.164-166

Оптические фильтры находят широкое применение в разработках наноразмерных технологий для космоса, астрономии, геологии, транспорта, связи, микробиологии, биомедицины, энергетики, оружия и компьютерной техники. Фильтры подразделяют на интерференционные, абсорбционные, дифракционные, поляризационные и дисперсные. При работе с лабораторным и аналитическим оборудованием и при изготовлении оптических устройств имеет большое значение возможность тонкой настройки и высокая точность прибора. Для этого в работах [1, 2] было предложено использовать глубокие рельефные структуры (ГРС). Фильтры на основе ГРС просты в изготовлении и могут быть применены для фильтрации как в видимом, так и в инфракрасном диапазонах излучения.

В целях решения проблемы необходимости изготовления большого количества ГРС разной глубины рельефа в работе [3] впервые был предложен оптический фильтр, построенный на основе отражающей глубокой рельефной структуры переменной глубины, допускающей изменение частотных характеристик в достаточно широком диапазоне с помощью изменения глубины профиля в совокупности с калибровкой угла падения входного излучения.

Изготовление ГРС переменной глубины методом химического травления поверхности стекла через маску из фоторезиста технологически трудно, поэтому мы предлагаем подход к изготовлению ГРС переменной глубины, основанный на травлении стекла, модифицированного фемтосекундным (ФС) лазерным излучением. При воздействии сфокусированного ФС излучения, происходит локальное изменение структуры или химическая модификация стекла, которая приводит к изменению его стойкости к травлению в водном растворе плавиковой кислоты. При этом за счёт вариации энергии лазерных импульсов и средней дозы облучения можно изменять скорость травления стекла, что хорошо позволяет настраивать глубину экспонированных областей конечной дифракционной структуры.

Схемы ГРС переменной глубины, созданной с помощью облучения фемтосекундным лазером, изображены на рис. 1, 2.

ГРС поделена на 4 зоны шириной по 3мм, в каждой из которых по 30 рельефных полос. При этом в каждой зоне глубина Нр отражающей дифракционной структуры различна. Таким образом в

процессе работы можно быстро настроить глубину рельефа Hp, от которой зависит коэффициент передачи мощности излучения kp. Таким образом, в различных приборах и фильтрах на основе отражающей периодической структуры переменной глубины можно будет с высокой точностью изменять мощность излучения и осуществлять полное подавление любой выбранной длины волны, перестраивая угол падения входного луча и глубину рельефа без замены дифракционной структуры.

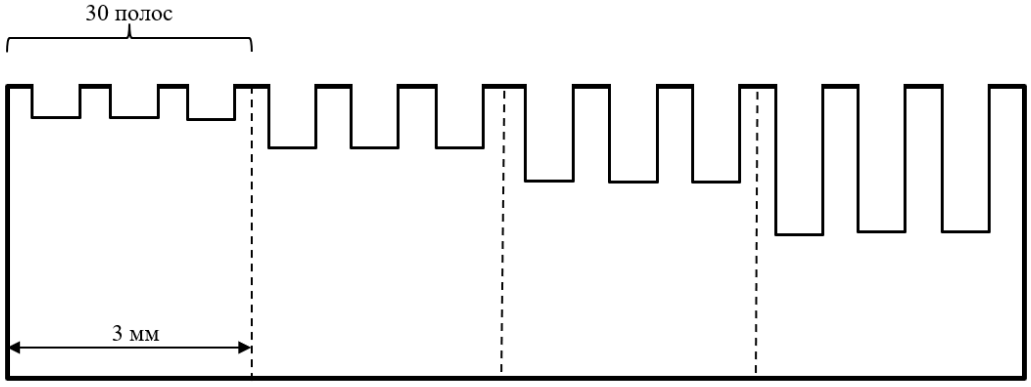


Рис. 1. Схема оптической ГРС переменной глубины, вид в профиль.

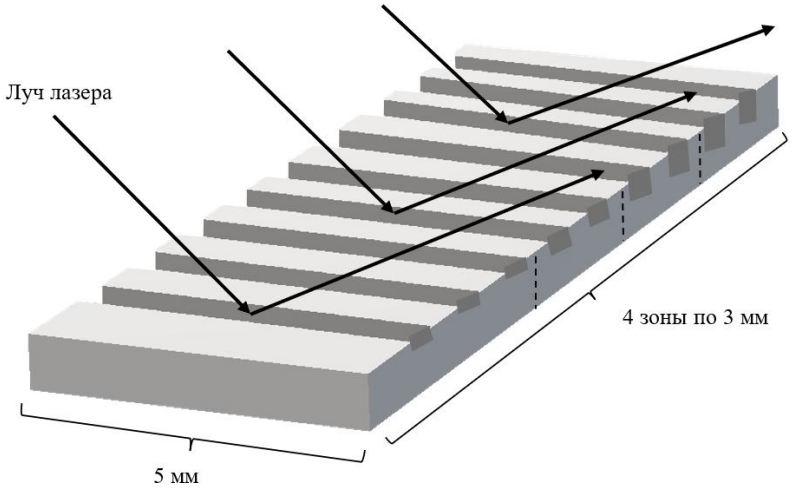


Рис.2. Схема оптической ГРС переменной глубины.

На рис. 3-5 представлены изображения, полученные с помощью электронного микроскопа, на которых показан результат экспонированного фемтосекундным лазерным излучением при разной энергии в импульсе. Рельеф экспонированных участков определяется условием экспонирования. На рис. 3-4 показаны кратеры, полученные в результате травления периодически расположенных (период 10 мкм) точечных экспонированных областей, каждая из которых сделана единичным лазерным импульсом. Стекло аблировалось в импульсном режиме при сканировании сфокусированным лазерным пучком (диаметр по полуширине 3-5 мкм) по поверхности стекла в вертикальном направлении (относительно изображений). Шаг сканирования 1 мкм (в горизонтальном направлении), расстояние между импульсами 0.25 мкм (в вертикальном направлении). После абляции стекло очищалось в деионизированной воде с ультразвуком.

В результате прямой лазерной абляции получается углубление с сильно шероховатой поверхностью, что видно на рис. 5. Шероховатость травленных участков стекла (как экспонированных, так и нет) зависит от концентрации кислоты и времени травления, а также определяется маркой стекла. Глубина травления увеличивается с повышением энергии в лазерном импульсе.

При энергии импульсов меньше порога абляции поверхность стекла остаётся гладкой, но происходит его фотомодификация (облученные области темнеют). Скорость травления данных областей отличается от неэкспонированного стекла. Также при травлении происходит сглаживание поверхности аблированных участков. После травления на поверхность рельефа дифракционной структуры производится напыление металлической плёнки с высоким коэффициентом отражения (алюминий) для достижения высокой эффективности устройства.

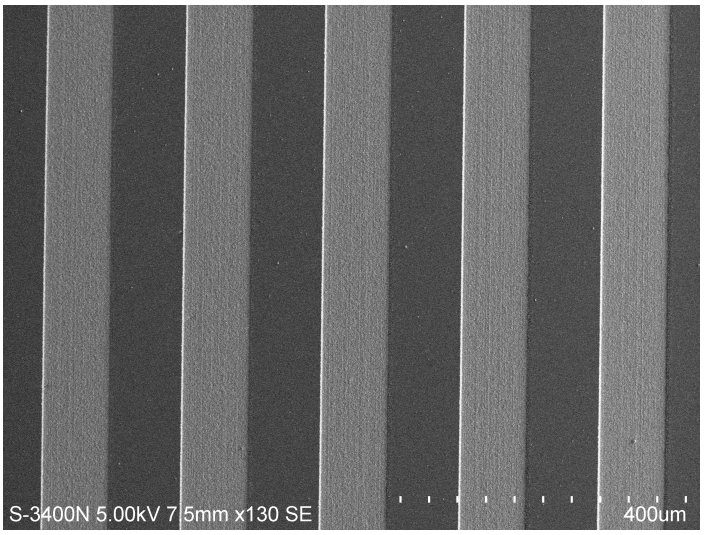


Рис.3. Изображение участка ГРС с увеличением x130.

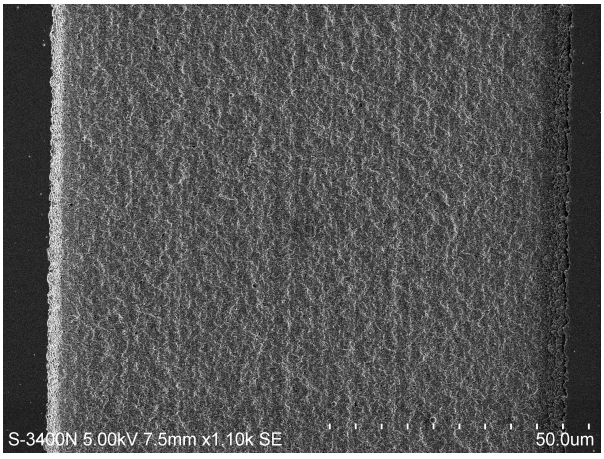


Рис. 4. Изображение участка ГРС с увеличением x1.10k.

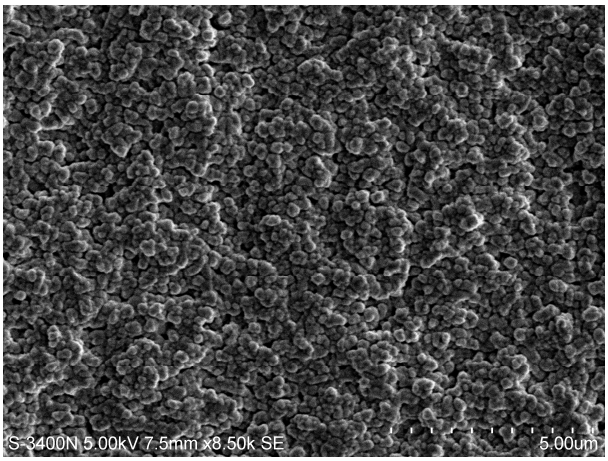


Рис. 5. Изображение участка ГРС с увеличением x8.50k

В данной работе предложена модель глубокой рельефной структуры переменной глубины, удобная для применения в оптическом фильтре, и описан эффективный метод её изготовления, основанный на модификации стекла фемтосекундным лазерным излучением.

1. Комоцкий, В.А. Оптический фильтр, построенный с применением глубокой периодической отражающей рельефной структуры / В.А. Комоцкий, Ю.М. Соколов, Н.В. Суетин // HOLOEXPO 2018: Тезисы докладов. – 2018. – С. 165-169.

2. Комоцкий, В.А. Оптоэлектронные дифракционные датчики малых линейных перемещений / В.А. Комоцкий, Ю.М. Соколов, В.И. Корольков // Фотоника. – 2011. – Т. 25, № 1. – С. 16-19.

3. Долгополов, И.С. Оптический фильтр на основе глубокой рельефной структуры переменной глубины / И.С. Долгополов, М.С. Петрова, А.В. Сюй // Тезисы докладов 77-й Межвузовской студенческой научно-практической конференции. – 2019. – Т. 2. – С. 92.

УДК 535:361:456.34:882

АНОМАЛЬНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ ДВУОСНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ $LiNbO_3$ С ДВОЙНЫМ ЛЕГИРОВАНИЕМ КАТИОНАМИ Ta И Mg

О.Ю. Пикуль[1], Н.В. Сидоров[2], М.Н.Палатников[2]

[1]Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
[2] Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского научного центра РАН, (г. Апатиты)
pikoul2008@gmail.com

ANOMALOUS OPTICAL DUALITY OF LiNbO3 CRYSTALS WITH DOUBLE DOPING OF TA AND Mg CATION

O.Yu. Pikul[1], N.V. Sidorov[2], M.N. Palatnikov[2]

[1]Far Eastern State Transport University, (Khabarovsk)
[2] Institute of Chemistry and Technology of Rare Elements and Mineral Raw Materials named after I.V. Tananaev of the Kola Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, (Apatity)
pikoul2008@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.167-169

Обнаружение и исследование аномальной оптической двуосности, тонких особенностей структурных и ростовых искажений, микро- и наноструктур, обязательно присутствующих в легированных монокристаллах вследствие неравномерного вхождения легирующей примеси в структуру, более доступны методу лазерной коноскопии, позволяющей выявить изменения оптических характеристик кристалла при его легировании, по сравнению с исследованиями при помощи поляризационного микроскопа [1], т.к. значительный размер изображения позволяет выполнить детальный анализ тонких особенностей структурных искажений в кристаллах, как в центре поля зрения, так и на периферийной области коноскопических картин. Методика коноскопического эксперимента подробно описана в работах [2–4].

Кристаллы выращивались по единой методике в воздушной атмосфере методом Чохральского на установке «Кристалл-2». Для исследований оптической однородности образцов $LiNbO_3$ с двойным легированием катионами Ta и Mg в различной концентрации, цилиндрическая часть монокристаллических буль, выращенных в разных условиях в направлении оси Z (полярная ось кристалла), разрезалась на поперечные диски. Для сравнительных исследований образцы выбирались из разных сегментов цилиндрических дисков в виде параллелепипедов размерами ~ 8x6x4,7 мм^3. В экспериментах использовалось излучение He-Ne лазера (λ=632,8 нм) мощностью не более 1 мВт на образце с тем, чтобы максимально уменьшить возможное влияние фоторефрактивного эффекта на коноскопические картины. Более подробно методика выращивания монокристаллов и приготовление шихты описаны в работе [5].

Внешний осмотр образцов показывает наличие внутренней «мозаичной» структуры, для которой характерно увеличение размерности фрагментов с ростом концентрации катионов Ta и Mg. Для всех наблюдаемых коноскопических картин характерны некоторая размытость изображения, снижение резкости и контраста, а также заметная спекл-структура изображения.

Кристалл ниобата лития в идеальных условиях является одноосным, но под действием напряжений, возникающих при легировании и термической предыстории получения монокристалла, в плоскости, перпендикулярной его оптической оси, может приобретаться аномальная двуосность, которая проявляется при наблюдении в сходящемся поляризованном излучении в виде искажения формы изохром и расхождения изогир на угол 2V, который характеризует деформацию оптической индикатрисы [6]. Расстояние b между выходами оптических осей, измеренное на экране (рис. 1, б), позволяет с учетом геометрии эксперимента, расстояния L от выходной грани кристалла до экрана и закона преломления определить угол 2V в кристалле между аномальными оптическими осями [6].

В случае отсутствия внутренних дефектов коноскопическая картина монокристалла ниобата лития в каждой точке входной грани представляет собой систему концентрических черных и светлых колец-изохром с центром на оси системы с черным «мальтийским крестом», состоящим из двух ветвей-изогир. При постоянном радиусе каждого кольца-изохромы коноскопической картины и отсутствии просветления в центре черного «мальтийского креста» делают вывод об оптической однородности кристалла в данной точке входной грани в направлении просвечивания и отсутствии аномального двулучепреломления [1].

Для образцов монокристаллов $LiNbO_3$ с содержанием Ta [1,13 мас.%] и Mg [0,01 мас.%] при сканировании по плоскости входной грани наблюдаемые коноскопические картины соответствовали как одноосному кристаллу (рис. 1, а), так и двуосному кристаллу (рис. 1, б).

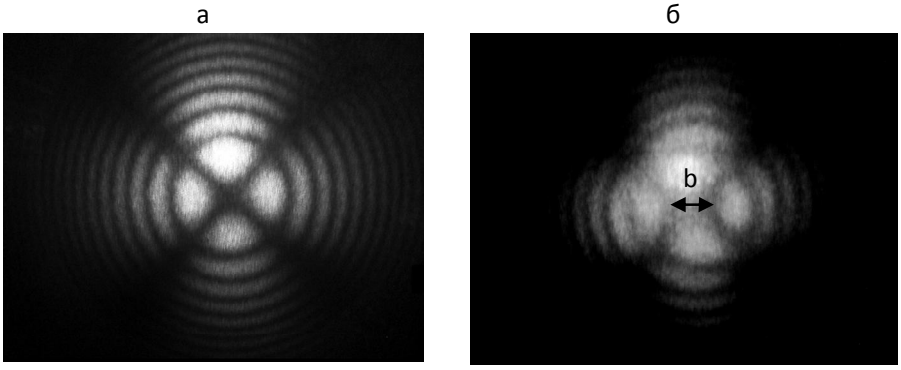


Рис. 1. Коноскопические картины монокристалла $LiNbO_3$: Ta [1,13 мас.%]; Mg [0,01 мас.%].

Коноскопическая картина кристалла (рис. 1, а) соответствует одноосному кристаллу в пределах всего поля зрения. Коноскопическая картина (рис. 1, б) имеет признаки, характерные для возникающей аномальной оптической двуосности: приобретение изохромами эллиптической формы, разрыв черного «мальтийского креста» на две части с просветлением в центре поля зрения в пределах угла наведенных оптических осей $2V \approx 20'$.

Для монокристаллических образцов $LiNbO_3$ с увеличенной концентрацией катионов Ta [2,18 мас.%] и Mg [0,08 мас.%] все наблюдаемые коноскопические картины имеют отступления от коноскопических картин одноосных кристаллов (рис. 2, а, б, в, г), в том числе и слабые признаки аномальной двуосности.

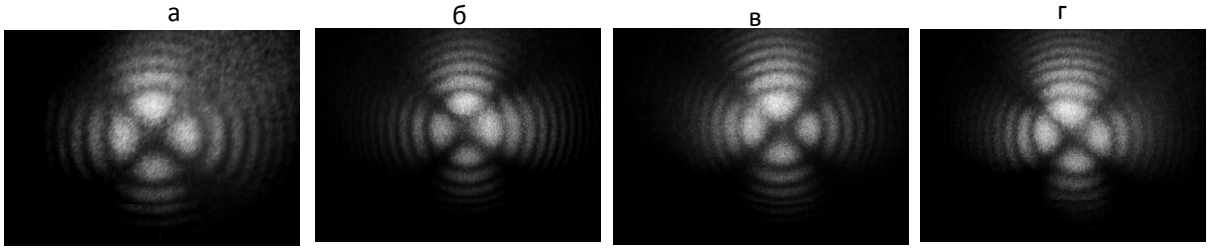


Рис. 2. Коноскопические картины монокристалла LiNbO3: Ta [2,18 мас.%]; Mg [0,008 мас.%].

Для монокристаллических образцов $LiNbO_3$ с самой большой концентрацией примесей Ta [4,00 мас.%] и Mg [0,80 мас.%] все наблюдаемые коноскопической картины имеют искажения и признаки аномальной двуосности (рис. 3).

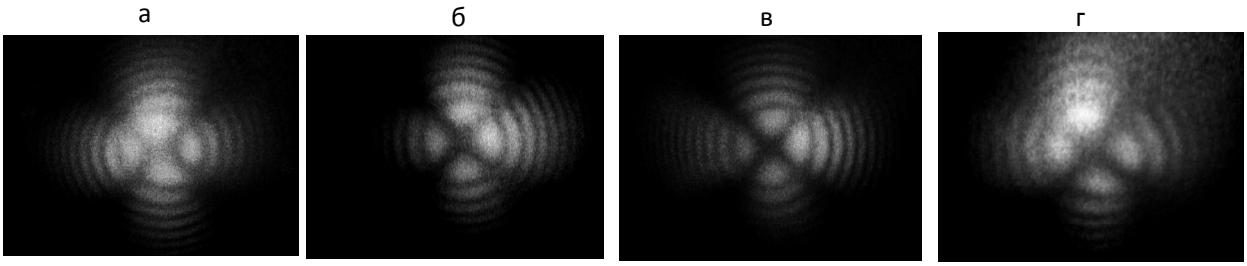


Рис. 3. Коноскопические картины монокристалла LiNbO3: Ta [4,00 мас.%]; Mg [0,80 мас.%].

На коноскопических картинах (рис. 3, а) изохромы в целом имеют вид эллипсов с большой осью, ориентированной в направлении одной из ветвей «мальтийского креста», но фрагменты изохром в пределах каждого квадранта имеют отступления от правильной эллиптической формы. Изображение «мальтийского креста» в целом имеет размытый вид, а его верхний левый фрагмент практически отсутствует. На коноскопических картинах (рис. 3, б, в) в одном случае черный «мальтийский крест» слабо деформирован без просветления в центре, а углы между его ветвями отличаются от прямых, в другом случае черный «мальтийский крест» имеет просветление в центре поля зрения со сдвигом фрагментов в горизонтальном направлении от центра (рис. 3, г). Изохромы на всех коноскопических картинах данного образца имеют эллиптическую форму с разной степенью эллиптичности и некоторыми искажениями при переходе через ветви «мальтийского креста».

Методом лазерной коноскопии исследована оптическая однородность легированных катионами Ta и Mg монокристаллов $LiNbO_3$. Изменения в коноскопических картинах связаны с неравномерным распределением дефектов в объеме кристалла и неравномерным вхождением катионов Ta и Mg в решетку. Это приводит к появлению в кристалле локальных изменений его упругих характеристик и к появлению механических напряжений, локально искажающих оптическую индикатрису и, соответственно, коноскопическую картину.

---

1. Меланхолин, Н.М. Методы исследования оптических свойств кристаллов. – М.: Наука, 1970. – 155 с.

2. Пикуль, О.Ю. Особенности оптической системы для создания коноскопических фигур больших размеров / О.Ю. Пикуль и др. // ИВУЗ. Приборостроение. – 2004. – № 12. – С. 53.55.

3. Palatnikov, M. Conoscopic studies of optical homogeneity of the $LiNbO_3$:Mg crystals / M. Palatnikov, O. Pikoul, N. Sidorov, O. Makarova, K. Bormanis // Ferroelectrics. – 2012. – V. 436. – № 1. – P. 19-28.

4. Pikoul, O.Y. The laser conoscopy of lithium niobate crystals of different composition / O.Y. Pikoul, N.V. Sidorov, N.A. Teplyakova, M.N. Palatnikov // Proc. SPIE Aisa-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics. – 2016. – № 101761R.

5. Палатников, М.Н. Материалы электронной техники на основе сегнетоэлектрических монокристаллов и керамических твердых растворов ниобатов-танталатов щелочных металлов с микро- и наноструктурами: Дис. …д-ра техн. наук. – Апатиты, 2010. – 488 с.

6. Сиротин, Ю.И., Шаскольская, М.П. Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1979. – 640 с.

УДК 535.514.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННО-ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФИЛЬТРА ШОЛЬЦА НА ПРИМЕРЕ СПЕКТРА АБСОЛЮТНО ЧЕРНОГО ТЕЛА

Д.Е. Савич, А.В. Попова
Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
savichdmitrii@mail.ru

D.E. Savich, A.V. Popova

MODELING THE WORK OF THE SCHOLZ INTERFERENCE-POLARIZATION FILTER ON THE EXAMPLE OF THE ABSOLUTELY BLACK BODY SPECTRUM

Far Eastern State Transport University, Khabarovsk
savichdmitrii@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.170-173

При описании различного рода задач на определение состояния поляризации оптического излучения встает вопрос об унификации математического аппарата вне зависимости от вида анизотропной системы, а также характеристик самого излучения. Иными словами, процесс формализации, а также непосредственные и/или опосредованные вычисления сводятся к постановке и решению *прямой трансформативной задачи* – задачи о преобразовании состояния поляризации последовательностью анизотропных элементов (оптическим трактом). В последнее время в роли оптического тракта выступают интерференционно-поляризационные фильтры (ИПФ) Лио, Шольца и Вуда, применяемые как в фундаментальных, так и прикладных исследованиях.

Целью работы является анализ работы модели ИПФ Шольца, состоящего из поляризатора, анализатора и двух анизотропных пластинок, вырезанных из двулучепреломляющих одноосных кристаллов ниобата лития ($LiNbO_3$). Использование специального векторно-матричного аппарата Стокса-Мюллера направлено на рассмотрение состояния выходного оптического излучения абсолютно черного тела при известном состоянии поляризации входного излучения и характеристиках каждого элемента оптического тракта.

Актуальность работы обусловлена все большей распространенностью подобных оптических трактов в системах волоконно-оптической связи, основанных на волновом (WDM или DWDM) или пространственном (SDM) мультиплексировании. Следовательно, описание принципов работы оптических устройств, содержащих в себе анизотропные составляющие, является важной задачей при построении и описании оптических приборов, регистрирующих разнородность распространения обыкновенного и необыкновенного лучей в одноосных и многоосных кристаллах.

При описании состояния полностью неполяризованного входного излучения наибольшее распространение получил *метод Стокса-Мюллера* ввиду относительной простоты расчетов, представленных в векторно-матричной форме. Родственный ему метод Джонса также часто применяется при решении прямой трансформативной задачи, однако его применяют только при наличии во входном световом пучке поляризованной составляющей [2].

Согласно методу Стокса-Мюллера для определения состояния поляризации выходного оптического излучения необходимо располагать всеми матрицами Мюллера M_i составляющих фильтр Шольца оптических элементов. Схема такого устройства представлена на рис. 1.

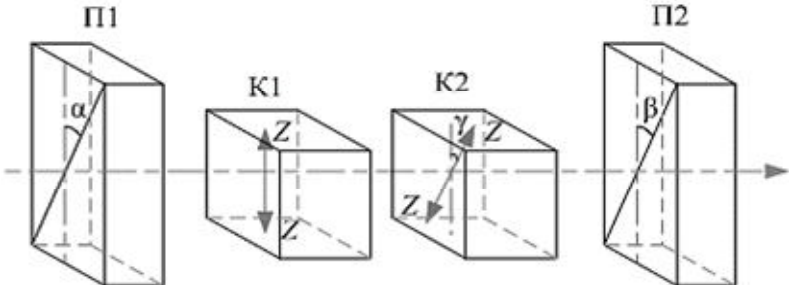


Рис. 1. Схема ИПФ Шольца с указанием ориентацией оптических осей поляризаторов П1 и П2 и кристаллов К1 и К2

Из рис. 1 видно, что главные оптические оси поляризатора П1, кристалла К2 и поляризатора П2 (анализатора) находятся под углами α, γ и β соответственно по отношению к главной оптической оси кристалла К1 против часовой стрелки. Взаимная ориентация всех четырех элементов сильно влияет на интенсивность выходного излучения, что и используется при построении ИПФ Шольца [3, 4].

Если излучение последовательно проходит ряд из N оптических элементов, матрицы которых $M_1, M_2, ..., M_{N-1}, M_N$, то суммарная матрица M вычисляется как произведение соответствующих частных матриц, причем порядок перемножения обратен порядку прохождения излучением системы оптических элементов:

$$M = \prod_{i=N}^{i=1} M_i. \tag{1}$$

В то же время входное излучение можно представить в виде вектора Стокса S, который для полностью неполяризованного излучения имеет следующий вид:

$$S = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $I = I(\lambda, T)$ – интенсивность абсолютно черного тела, зависящая только от длины волны λ и его температуры T [5]:

$$I = I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/\lambda KT} - 1}, \tag{3}$$

где $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ *Дж*$\cdot c$ – постоянная Планка; $c = 3 \cdot 10^8$ *м*$/c$ – скорость света в вакууме; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ *Дж*$/K$ – постоянная Больцмана.

Как итог, рассматриваемый оптический тракт осуществляет преобразование вида: $S \to S'$, которое записывается в компактной векторно-матричной форме:

$$S' = M \times S, \tag{4}$$

где вектор $S' = I'$ представляет собой представление выходного поляризованного излучения в следующей форме, а компоненты A, B и C не представляют практической ценности для дальнейших вычислений:

$$S' = \begin{pmatrix} S_0' \\ S_1' \\ S_2' \\ S_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I' \\ A \\ B \\ C \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Для удобства распишем матрицы Мюллера согласно порядку, описанному в формуле (1).

Матрица Мюллера M_4 поляризатора П2 с главными энергетическими коэффициентами τ_3 и τ_4 ($\tau_3 \geq \tau_4, 0 \leq \tau_3 \leq 1,\ 0 \leq \tau_4 \leq 1$) представляет собой следующее выражение:

$$M_4(\tau_{p2}, Q_2, \beta) = \tau_{p2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & Q_2 C_2 & Q_2 S_2 & 0 \\ Q_2 C_2 & C_2^2 + R_2 S_2^2 & (1-R_2) S_2 C_2 & 0 \\ Q_2 S_2 & (1-R_2) S_2 C_2 & S_2^2 + R_2 C_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_2 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

в котором приняты следующие обозначения: $\tau_{p2} = 0,5(\tau_3 + \tau_4)$ – полный коэффициент пропускания поляризатора П2; $Q_2 = (\tau_3 - \tau_4)/(\tau_3 + \tau_4)$ – показатель качества поляризатора П2; $S_2 = \sin 2\beta$; $C_2 = \cos 2\beta$; $R_2 = \sqrt{1 - Q_2^2}$.

Матрица Мюллера M_3 кристалла К2, представляющего собой анизотропную пластинку с фазовым сдвигом $\delta_2 = 2\pi(n_{ei} - n_{0i}) d_2 / \lambda_i$, где n_e и n_o – показатели преломления для необыкновенного и обыкновенного лучей соответственно на длине волны λ_i; d_2 – толщина кристалла К2 в направлении прохождения излучения, представлена ниже:

$$M_3(\delta_2, \gamma) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right)\cos(4\gamma) & \sin^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right)\sin(4\gamma) & \sin\delta_2 \sin(2\gamma) \\ 0 & \sin^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right)\sin(4\gamma) & \cos^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\delta_2}{2}\right)\cos(4\gamma) & \sin\delta_2 \cos(2\gamma) \\ 0 & \sin\delta_2 \sin(2\gamma) & -\sin\delta_2 \cos(2\gamma) & \cos\delta_2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Матрица Мюллера M_2 кристалла К1, представляющего собой анизотропную пластинку с фазовым сдвигом $\delta_1 = 2\pi(n_{ei} - n_{0i}) d_1 / \lambda_i$, где d_1 – толщина кристалла К1 в направлении прохождения излучения, представлена ниже [4]:

$$M_2(\delta_1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\delta_1 & \sin\delta_1 \\ 0 & 0 & -\sin\delta_1 & \cos\delta_1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Показатели преломления n_e и n_o зависят от длины волны λ и температуры кристалла $T_{кр}$, из которого изготовлена анизотропная пластинка, согласно следующим эмпирическим формулам [1]:

$$n_0 = \sqrt{4,913 + \frac{0,1173 + 1,65 \cdot 10^{-8} \cdot T_{кр}^2}{\lambda^2 - (0,212 + 2,7 \cdot 10^{-8} \cdot T_{кр}^2)^2} - 2,78 \cdot 10^{-2} \cdot \lambda^2}; \quad (9)$$

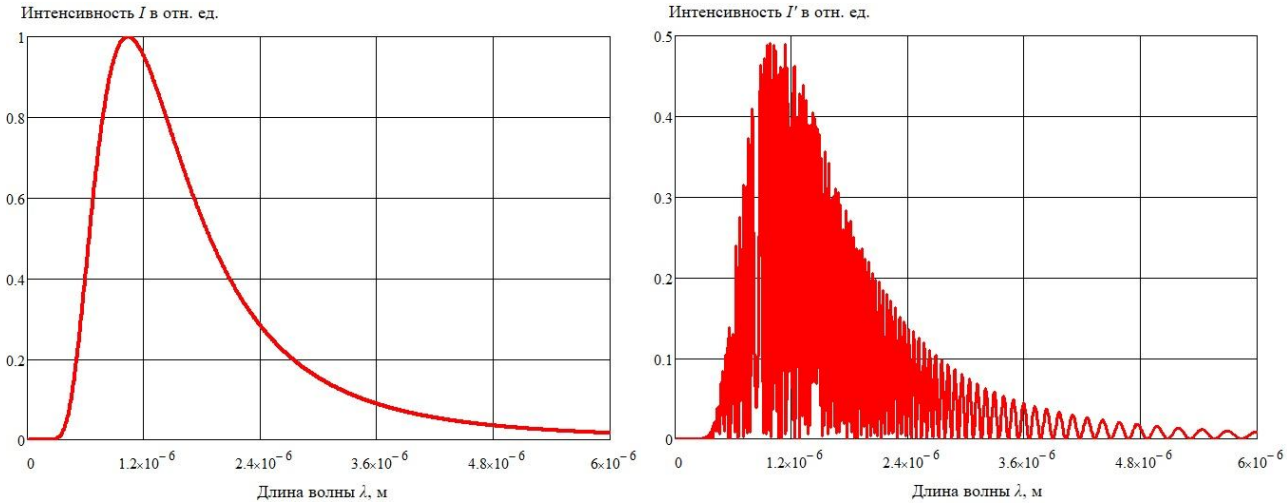
$$n_e = \sqrt{4,5567 + 2,605 \cdot 10^{-7} \cdot T_{кр}^2 + \frac{0,97 + 2,7 \cdot 10^{-8} \cdot T_{кр}^2}{\lambda^2 - (0,201 + 5,4 \cdot 10^{-8} \cdot T_{кр}^2)^2} - 0,0224 \cdot \lambda^2}. \quad (10)$$

Матрица Мюллера M_1 поляризатора П1 с главными энергетическими коэффициентами τ_1 и τ_2 ($\tau_1 \geq \tau_2, 0 \leq \tau_1 \leq 1,\ 0 \leq \tau_2 \leq 1$) представляет собой следующее выражение:

$$M_1(\tau_{p1}, Q_1, \alpha) = \tau_{p1} \cdot \begin{pmatrix} 1 & Q_1 C_1 & Q_1 S_1 & 0 \\ Q_1 C_1 & C_1^2 + R_1 S_1^2 & (1-R_1) S_1 C_1 & 0 \\ Q_1 S_1 & (1-R_1) S_1 C_1 & S_1^2 + R_1 C_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_1 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где по аналогии с (6): $\tau_{p1} = 0,5(\tau_1 + \tau_2)$ – полный коэффициент пропускания поляризатора П1; $Q_1 = (\tau_1 - \tau_2)/(\tau_1 + \tau_2)$ – показатель качества поляризатора П1; $S_1 = \sin 2\alpha$; $C_1 = \cos 2\alpha$; $R_1 = \sqrt{1 - Q_1^2}$.

Моделирование полученного по формуле (4) спектра проводилось при известных толщинах анизотропных пластинок $d_1 \approx d_2 = 1,8$ мм, которые могут незначительно отличаться друг от друга и влиять на состояние поляризации выходного излучения, температуре абсолютно черного тела $T = 2800K$, что сопоставимо с температурой вольфрамовой нити в современных лампах накаливания и температуре анизотропных кристаллов $T_{кр} = 293K$, что соответствует допустимым средним значениям комнатной температуры для жилых помещений. Результаты проведенных экспериментов при значениях углов $\alpha = -\pi/4$, $\gamma = 0$ и $\beta = \pi/4$ указаны на рис. 2, что соответствует суммарной эквивалентной толщине двух пластинок при скрещенных поляризаторах [4].



а) б)

Рис. 2. Полученные спектры смоделированного фильтра Шольца:
а) входное излучение; б) выходное излучение при $\tau_1 = \tau_3 = 1; \tau_2 = \tau_4 = 0$ (гребенчатый спектр);

Заключение. В результате проведенного моделирования работы ИПФ Шольца было установлено, что положения поляризаторов и фазовых пластинок друг относительно друга значительно влияют на спектр выходного излучения, в частности на интенсивность и глубину модуляции излучения, что также может быть использовано при построении фильтров, состоящих только из оптических компонентов [3]. Направление дальнейших исследований ориентировано на определение отклонений от идентичности толщин анизотропных пластинок, что может быть использовано при изготовлении четверть- и полуволновых фазовых пластинок.

1. Дмитриев, В.Г., Тарасов, Л.В. Прикладная нелинейная оптика. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 512 с.

2. Ищенко, Е.Ф., Соколов, А.Л. Поляризационная оптика. – Изд. 2-е, испр. и доп. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. – 456 с.

3. Константинова, А.Ф., Гречушников, Б.Ф., Бокуть, Б.В., Валяшко, Е.Г. Оптические свойства кристаллов. – Минск: Наука и техника, 1995. – 302 с.

4. Сюй, А.В., Кравцова, Н.А., Строганов, В.И., Криштоп, В.В. Ориентационная зависимость пропускания системы поляризатор-кристалл-кристалл-анализатор // Оптический журнал – 2007. – Т. 74, № 7. – С. 33-36.

5. Элементарный учебник физики: учеб. пособие в 3 т. – Т. 3. Колебания и волны. Оптика. Атомная и ядерная физика / под ред. Г.С. Ландсберга. – Изд. 13-е. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 656 с.

УДК 622.765

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА МИНЕРАЛЬНЫЕ НАНОМАСШТАБНЫЕ СРЕДЫ

Р.Э. Шарыпов[1], Г.Г. Капустина[1], Н.А. Леоненко[2]
[1]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
[2]Институт горного дела ДВО РАН (г. Хабаровск)
g.kapustina@mail.ru

STUDYING THE PROCESS OF INFLUENCE OF LASER RADIATION ON MINERAL NANO-SCALE ENVIRONMENTS

R. E. Sharypov[1], G.G. Kapustin[1], N.A. Leonenko[2]
[1]Pacific State University (Khabarovsk)
[2]Mining Institute, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)
g.kapustina@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.174-177

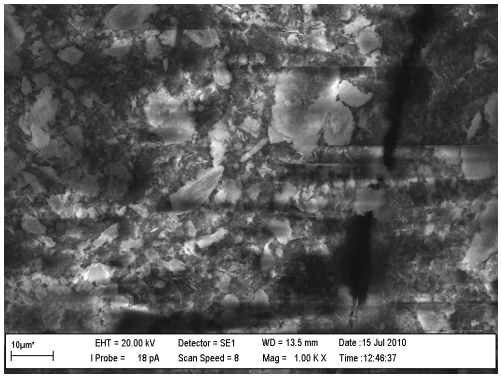
В наши дни золотопромышленность наравне с нефте- и газодобычей занимает одно из важнейших мест в экономике России. В процессе разработки россыпей, являющихся россыпными месторождениями, весомая часть ценных минералов уходит в хвосты переработки, создаются техногенные россыпи промышленной переработки. Вполне логично, что проблемой техногенных месторождений можно назвать определение и в дальнейшем извлечении драгоценных металлов, в том числе, золота. Говоря про драгоценные металлы, подразумевается мелкий (0,25-0,1 мм) и тонкий (<0,1 мм) металлы. Большая часть тонкодисперсных частиц золота, которые трудно извлечь, в техногенных россыпях по внешним признакам имеют чешуйчатую, пластинчатую или игольчатую форму. Пользуясь традиционным гравитационным, методом добыть эти частицы не представляется возможным.

В наши дни изобретение новых, более эффективных технологий и методов для извлечения полезных компонентов из первоначального сырья и продуктов его переработки, является достаточно важной задачей. Ныне исследуются способы для разложения, разделения материалов, содержащих золото, основанные на не совсем привычных нам энергетических воздействиях, например, электрохимическое окисление, сверхвысокочастотный нагрев, облучение ускоренными электронами и мощными электромагнитными импульсами [1]. Так же, еще одним из видов данных воздействий можно выделить взаимодействие лазерного излучения (ЛИ) с минеральными средами. В его основе - способность создания на небольшом участке поверхности с повышенной плотностью потока тепла, коего достаточно для плавления, нагрева, или испарения практически любого материала. Причиной этому является термический эффект поглощения излучения непрозрачными твердыми телами.

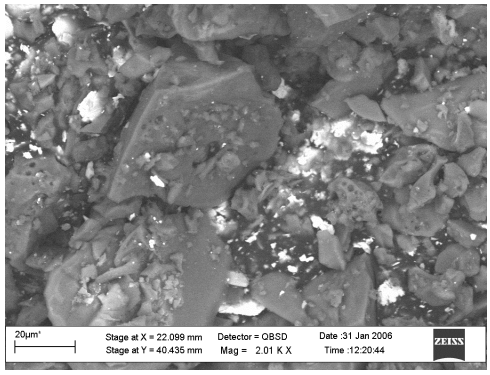
Для исследования были использованы минеральные алюмосиликатные среды, такие как высокоглинистые пески с россыпей Дальнего Востока и модельные образцы с наличием коллоидного золота. В сравнении с силикатными, сульфидными и другими минералами, входящими в состав образцов, золото обладает существенно отличающимися физическими и химическими свойствами, к примеру, достаточно низкой температурой плавления (1336,15K) и высокой температурой кипения (3080K), что дает надежду на их различную реакцию при воздействии лазерного излучения на минеральные объекты, содержащие золото. Электронные изображения с различным увеличением представлены на рис. 1, элементный состав минералов, составляющих основу исходных образцов, полу-

чены с помощью электронного микроскопа «LEOEVO40HV» (Карл Цейс, Германия), оснащенном энергодисперсионным анализатором «INCA-ENERGY».

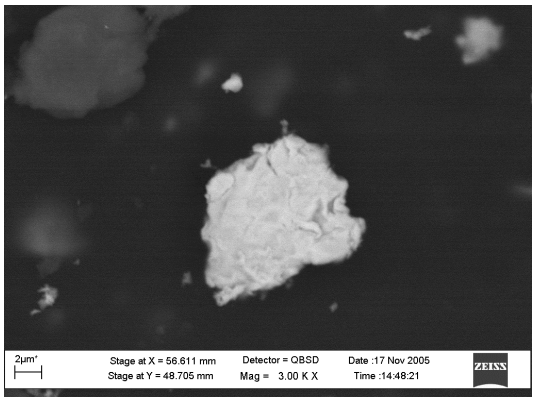
В результате исследования минералогических объектов при использовании детектора вторичных электронов (SE-детектор), удалось получить информацию о рельефе образцов. В дополнение к детектору вторичных электронов (SE-детектор) был так же применен детектор обратно рассеянных электронов (QBS-детектор), дающий возможность получить информацию о фазе образца. Фазы с более высоким средним атомным числом при получении изображений отражаются в контрасте более ярко по сравнению с фазами с меньшим атомным числом. Разность атомных чисел золота и минералов, которые содержатся в исследуемых минералогических образцах велика, а это значит, что получается более контрастное изображение. Это, в свою очередь, позволяет визуально выявлять золото.



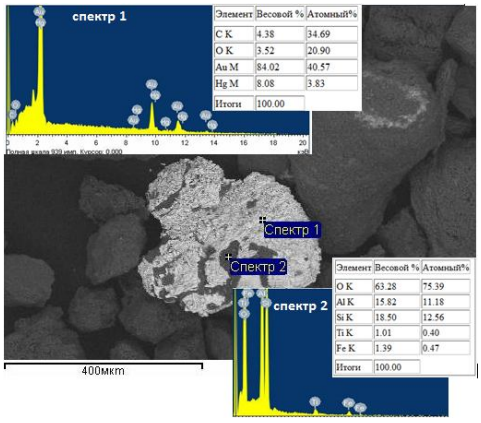
а – 1000^{x}



б – 2000^{x}



в – 3000^{x}



г – 124^{x}

Рис. 1. Электронные изображения минеральных образцов:
а – алюмосиликатная глина; *б, в* – модельные образцы с внесенным коллоидным и ионным золотом; *г* – данные элементного анализа.

В качестве источника мощного потока энергии был использован иттербиевый оптоволоконный лазер ЛС-06 непрерывного действия, с длиной волны λ = 1070 [нм] и мощностью излучения 600 [Вт]. По ходу эксперимента мощность излучения изменялась от 60 до 300 [Вт].

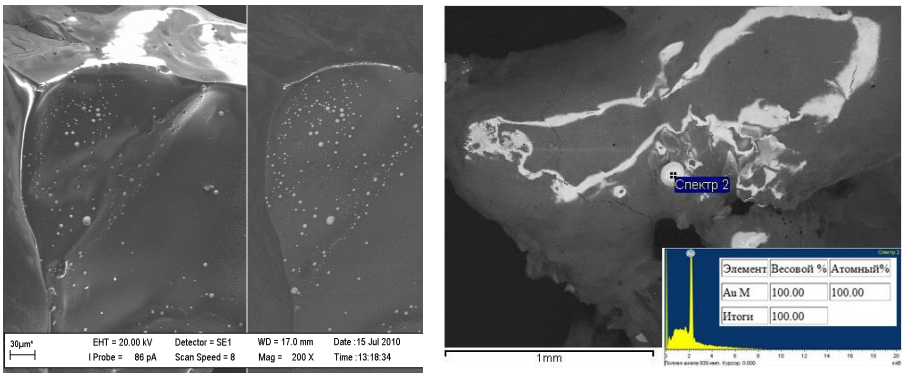
Для проведения исследований высокоглинистые алюмосиликатные образцы, содержащие золото, в рассыпном виде, с толщиной слоя 2-3 [мм], были расположены на специальнойподложке из графита. Над графитовой подложкой же размещалась оптическая головка лазера, посредством которой можно былоустанавливать параметры расфокусированного излучения. Лазерное излучение, прошедшее по иттербиевому оптоволокну и через оптическую головку, которая была размещена вертикально и прочно закреплена на штативе, попадало на исследуемые образцы. Движение подложки осуществлялось со скоростью 1 [мм/с]. Диаметр расфокусированного излучения подбирался эмпирически и составлял 5- 7 мм [4].

Процесс лазерного воздействия на минеральные среды состоитиз нескольких стадий. На первойстадиимы можем проследить оплавление наиболее легкоплавких минеральных продуктов с появ-

лением неоднородных силикатных спеков. На их поверхности можно наблюдать обожженные агломераты, состоящие из глинистых и алюмосиликатных частиц. Размер агломерата, в свою очередь, зависит не только от толщины насыпного слоя минерального образца, но и от диаметра расфокусированного лазерного пятна.

На второй стадии идет плавление ультрадисперсных частиц золота. Расплавленное золото в процессе охлаждения оседает в виде капель на поверхности алюмосиликатных спеков. Образование наночастиц золота на алюмосиликатных спеках после лазерного излучения представлены на рис. 2.

Опираясь на результаты электронно-дисперсионого и атомно-силового анализов, можно прийти к выводу, что размер частиц в исходных образцах меньше, чем размер оплавленных частиц.



а *б*

Рис. 2. Изображения алюмосиликатных спеков после лазерного излучения:
а – модельного образца с внесенным коллоидным золотом; *б* – алюмосиликатной глины с данными элементного состава.

В процессе теоретических и экспериментальных исследований [5, 6] была выявлена возможность увеличения частиц благородных металлов посредством обработки лазерным излучением, учитывая, при этом, свойства золотосодержащих дисперсных образцов.

Тепловое воздействие лазерного излучения определяет эффективность процесса лазерной агломерации субмикронного золота. Под действием ЛИ температура материала может превысить температуру возможных фазовых превращений. Это, в свою очередь, приведет к изменению его структурно-фазового состояния. Температурное поле, котороеформируется в минеральной среде в процессе лазерного облучения, можно оценить с учетом условий теплопередачи в твердых телах за счет теплопроводности. Определить температуру объекта воздействия, скорость ее изменения, самые оптимальные режимы лазерного воздействия для получения частиц золота максимального размера, позволяет решение уравнения теплопроводности с заданными начальными и граничными условиями. Этосможет облегчить их дальнейшее извлечение.

Процесс агломерации дисперсного золота из минеральных сред под действием лазерного излучения может иметь практическое применение. На основе обнаруженного эффекта могут быть предложены эффективные и экологически чистые методы предварительной концентрации благородных металлов для дальнейшего их извлечения традиционными гравитационными методами.

1. Чантурия, В.А. Вскрытие упорных золотосодержащих руд при воздействии мощных электромагнитных импульсов / В.А. Чантурия, Ю.В. Гуляев, В.Д. Лунин и др. // ДАН. – 1999. – Т.366,-№ 5. – С.680-683.

2. Вейко, В.П. Опорный конспект лекций по курсу «Физико-технические основы лазерных технологий». Раздел: Технологические лазеры и лазерное излучение. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2007. – С. 52

3. Панченко, В.Я. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / под ред. В.Я. Панченко. – М.: Физматлит, 2009. – С. 664.

4. Леоненко, Н.А. Лазерная термоактивация ультрадисперсного золота и математическое описание процессов взаимодействия лазерного излучения с минеральными средами / Н.А. Леоненко, Е.А. Ванина, А.А. Гальцов, Г.Г. Капустина // Проблемы комплексного освоения георесурсов: материалы IV Всероссийской научной конференции. – Хабаровск: ИГД ДВО РАН. – 2011. – Т. 1. – С.348-352.

5. Леоненко, Н.А. Терморадиационная активация и формирование упорядоченных структур в дисперсных минеральных средах при лазерном воздействии/ Н.А. Леоненко, Е.А. Ванина, А.А. Гальцов, Г.Г. Капустина, В.И. Селютин // Физика и химия обработки материалов. – 2011. – № 2 – С. 23-26.

6. Леоненко, Н.А. Пат. 2413779 Российская Федерация, МПК С 22 В 11/02, В 22 F 1/00. Способ извлечения дисперсного золота из золотосодержащего высокоглинистого минерального сырья / Н.А. Леоненко, А.П. Кузьменко, И.В. Силютин, И.Ю. Рассказов, Г.В. Секисов, М.А. Гурман, Г.Г. Капустина, Н.Л. Швец // заявитель и патентообладатель Институт горного дела ДВО РАН, Тихоокеанский государственный университет. – № 2010113683/02 ;заявл. 07.04.10; опубл. 10.03.11. Бюл. № 7.

УДК 542.913:546.43-034.73

ОБ АНОМАЛЬНОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ГЕТЕРОСТРУКТУР $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$

А.В. Штарева[1,2], А.В. Сюй[2], Д.С. Штарев[1,2], Е.О. Нащочин[2]

[1] Институт тектоники и геофизики им. Ю.А. Косыгина ДВО РАН (г. Хабаровск)

[2] Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)

nashchochin@gmail.com

ABOUT ANOMALOUS LUMINESCENCE OF $Sr^3Bi^2O^6$ / $SrCO^3$ HETEROSTRUCTURES

A.V. Shtareva[1,2], A.V. Xu[2], D.S. Shtarev[1,2], E.O. Nashchachin[2]

[1]Institute of Tectonics and Geophysics Yu.A. Kosygina FEB RAS (Khabarovsk)

[2] Far Eastern State Transport Universit (Khabarovsk)

nishporka@inbox.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.177-180

Широкие возможности практического применения полупроводниковых фотокатализаторов обусловливают высокий интерес к исследованию их фотофизических свойств. В первую очередь – это потенциальная возможность таких материалов помочь в решении энергетических и связанных с потреблением и получением энергии экологических проблем. Данная цель может быть достигнута как в ходе фотокаталитеческих процессов, в которых энергия видимого солнечного света преобразуется в энергию газообразного топлива – O_2 и H_2 (путем разложения воды, например) [1]; так и синтезом органических соединений, путем восстановления CO_2 до CO и их совместное с H_2O преобразование в углеводороды [2,3]. Помимо этого, чрезвычайно перспективны фотокаталитические процессы очистки воды и воздуха от органических примесей путем их глубокого окисления [4,5]. Фотокатализаторы можно использовать и для дезинфекции, воздействием на микроорганизмы активного кислорода и радикальных частиц, генерируемых при фотооблучении дисперсных твердых тел [6].

На сегодняшний день разработано немало фотокатализаторов, наиболее популярным среди них является диоксид титана и соединения на его основе [7]. Но основным его недостатком является активация ультрафиолетовым излучение, что ведет как к удорожанию, так и к усложнению конструктивных решений на его основе. В связи с чем, активно разрабатываются фотокаталитические композиции, чувствительные к видимому свету, в частности на основе висмутатов щелочноземельных металлов [8-11].

Значительно повысить эффективность фотокатальзаторов можно созданием гетерогенных композиций, при этом улучшается эффективность разделения электрон-дырочных пар, образующихся при фотоактивации, и, следовательно, повышается квантовый выход таких каталитических компо-

зиций. Например, в [12] сокатализатором для висмутатов стронция был выбран карбонат стронция, что позволило повысить эффективность фотокатальзатора в 4 раза. Но данный эффект наблюдался в узком диапазоне соотношения компонентов, поэтому исследование и обьяснение этого эффекта важно с точки зрения фундаментальной науки.

Цель данного исследования - исследовать люминесценцию гетероструктур $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ и с ее помощью объяснить каталитические свойствами исследуемых соединений.

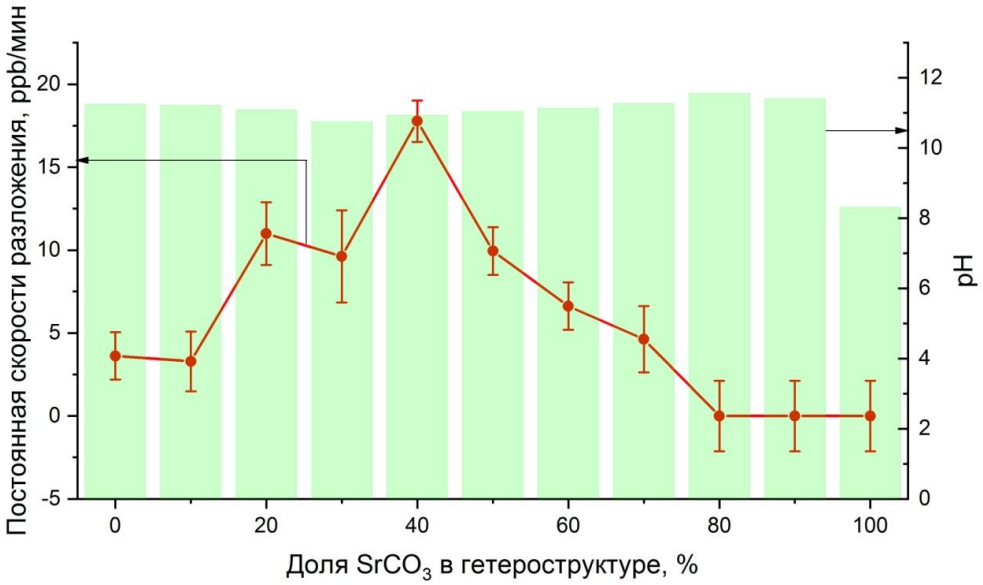
Синтез гетероструктур $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ осуществлялся из чистых висмутатной и карбонатной фаз. В соответствии с [03] чистая фаза висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$ получалась перетиранием в агатовой ступке оксида висмута Bi_2O_3 и нитрата стронция $Sr(NO_3)_2$ с добавлением абсолютного этанола. Полученная смесь прекурсоров поэтапно прокаливалась в муфельной печи: 24 часа при 650^0C, затем 72 часа при 825^0C.

Непосредственный синтез гетероструктур $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ производился в соответствии с [14] с использованием химически чистого карбоната стронция. Образцы получались перетиранием соответствующего количества $Sr_3Bi_2O_6$ и $SrCO_3$ с шагом в 10% с последующим спеканием при температуре 825^0C в течение 72 часов.

Активность исследуемых фотокатализаторов оценивалась по скорости разложения фенола в водном растворе под действием видимого излучения, при исходной концентрации 100 мг/л. Источником оптического излучения послужила ксеноновая лампа мощностью 150 Вт, отсутствие УФ-спектра в излучении достигалось светофильтром ЖС-11. В реактор с зеркальным внутренним покрытием помещались 300 мл модельного раствора фенола и 300 мг фотокатализатора, облучение происходило в течение 8 часов. Концентрация фенола определялась на жидкостном хроматографе Agilent 1200 Infinity. Зависимости скоростей разложения фенола от доли карбоната в гетеростуктуре представлены на рис. 1, где 0% - это чистый $Sr_3Bi_2O_6$, а 100% - чистый $SrCO_3$.

Рис. 1. Зависимости скоростей разложения фенола от доли карбоната в $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$.

На рис. 1 видно, что фотоактивность $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ при определенных количествах $SrCO_3$ превосходит $Sr_3Bi_2O_6$, максимальное этот эффект проявляется в гетероструктуре с составом 40%



$SrCO_3$ и 60% $Sr_3Bi_2O_6$. Для обьяснения этого явления была исследована люминесценция этих образцов.

Люминесценция гетероструктур $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ определялась на спектрофлуориметре Fluorolog 3 (Horiba) при комнатной температуре и температуре азота (рис. 2).

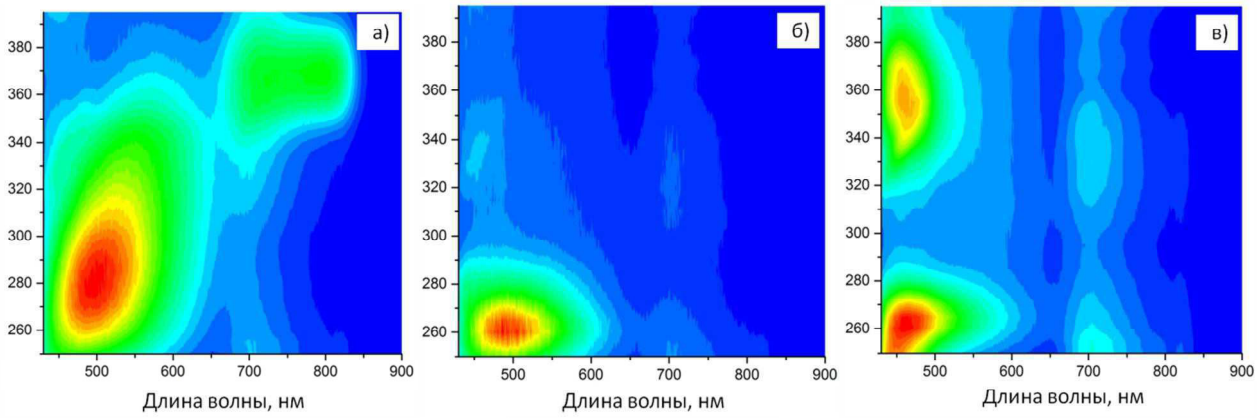


Рис. 2. Спектры люминесценции: а) $Sr_3Bi_2O_6$ при температуре азота (77°К); б) $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ при температуре азота (77°К); в) $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ при комнатной температуре (298°К).

На спектрах люминесценции отснятых по общепринятой методике при температуре азота (рис.2 а и б), мы наблюдаем по одной области люминесценции как у $Sr_3Bi_2O_6$, так и у $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$, что не объясняет увеличения каталитической активности в гетероструктуре. Но т.к. все эксперименты по разложению фенола проводились при комнатной температуре, для гетероструктуры был отснят спект люминесценции и при комнатной температуре (рис.2, в). При 298^0К у $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ появляется дополнительная область люминесценции, на той же длине волны, что и первая – 458нм. Появление дополнительной люминесценции подтверждает повышение активности гетероструктуры.

Методами спектроскопии диффузного отражения и рентгеновской фотоэлетронной спектроскопии (с использованием спектрографа Agilent Cary 5000) была определена структурная зона $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$.

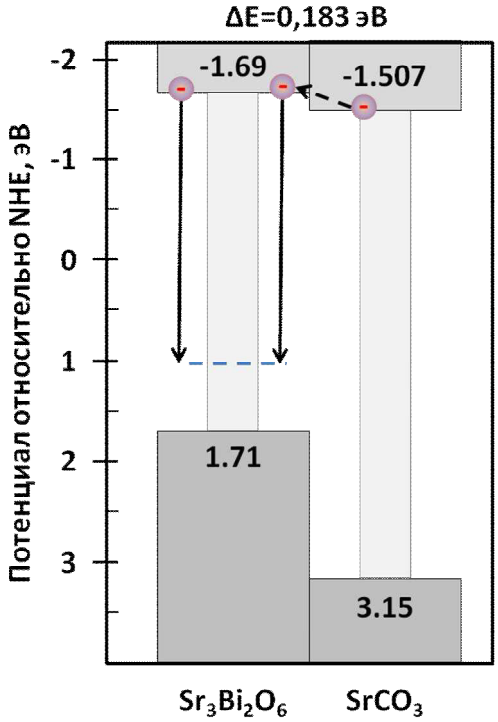


Рис. 3. Зонная структура $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$.

Полученные результаты по люминесценции при комнатной температуре можно объяснить выходом электрона из зоны проводимости $SrCO_3$ в зону проводимости $Sr_3Bi_2O_6$, и последующей его

миграцией в запрещенную зону $Sr_3Bi_2O_6$. При температуре азота этого не наблюдается, поскольку электрону не хватает энергии для такого перехода. Возможность таких переходов в обоих направлениях может объяснять и появление дополнительной фотокаталитической активности гетероструктур, поскольку при этом не только увеличивается срок жизни электрон-дырочных пар, но и пространственно разносятся реакции с их участием.

Исследования выполнены при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 17-73-00007).

1. Jafari, T., Moharreri, E., Amin, A. Shirazi, Miao, R., Song, W., Suib, S.L.. Photocatalytic Water Splitting – The Untamed Dream: A Review of Recent Advances. // Molecules. – 2016. – 21, 900. – P. 2-29.

2. Sahara, Go, Ishitani, Osamu. Efficient Photocatalysts for CO_2 Reduction, Inorg. // Chem. – 2015, 54. – P. 5096-5104.

3. Kim, Wooyul, McClure, Beth Anne, Edri, Eran, Frei, Heinz. Coupling carbon dioxide reduction with water oxidation in nanoscale photocatalytic assemblies // Chem. Soc. Rev. – 2016, DOI: 10.1039/c6cs00062b. – 24 pages.

4. Zhang, Zhixiang, Jiang, Zheng, Shangguan, Wenfeng. Low-temperature catalysis for VOCs removal in technology and application: A state-of-the-art review// Catalysis Today. – 2016, 264. – P. 270–278.

5. Zangeneh, H., Zinatizadeh, A.A.L., Habibi, M., Akia, M. M., Isa, Hasnain. Photocatalytic oxidation of organic dyes and pollutants in wastewater using different modified titanium dioxides: A comparative review, J. Industr. Engin. Chem. 26, 2015, p. 1–36.

6. Fagan, Rachel, McCormack, Declan E., Dionysiou, Dionysios D., Pillai, Suresh C. A review of solar and visible light active TiO_2 photocatalysis for treating bacteria, cyanotoxins and contaminants of emerging concern Materials Science in Semiconductor // Processing. – 2016, 42. P. 2.14.

7. Fujishima, Akira, Zhang, Xintong, Tryk, Donald A. TiO_2 photocatalysis and related surface phenomena // Surface Science Reports. – 2008. – 63. – P. 515-582.

8. Wang, Yongjiao, He, Yiming, Li, Tingting, Cai, Jun, Luo, Mengfei, Zhao, Leihong. Photocatalytic degradation of methylene blue on $CaBi_6O_{10}/Bi_2O_3$ composites under visible light // Chemical Engineering Journal. – 2012. – V.189–190. – P. 473-481.

9. Shan, Zhichao, Xia, Yujuan, Yang, Yuxiang, Ding, Hanming, Huang, Fuqiang. Preparation and photocatalytic activity of novel efficient photocatalyst $Sr_2Bi_2O_5$ //Materials Letters. – 2009. – Vol. 63, № 1. – P. 75-77.

10. Hu, Chun, Hu, Xuexiang, Guo Jian, Qu, Jiuhui. Efficient Destruction of Pathogenic Bacteria with NiO/SrBi2O4 under Visible Light Irradiation // Envir. Science & Technology. – 2006. –Vol. 40, № 17. – P. 5508-5513.

11. Shtarev, D. S. Shtareva, A. V. Photocatalytic Degradation of the Diesel Fuel by Using the Calcium Bismuthate - Bismuth Oxide Photocatalyst Composition // Applied Mechanics and Materials. – 2013. –Vol. 377. – P. 204-208.

12. Штарев, Д.С., Карпович, Н.Ф., Штарева, А.В., Блох, А.И., Нащочин, Е.О.. Твердофазный синтез и фотокаталитическая активность висмутатов стронция SrxBiyOz (X>Y) // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. – 2018. – Т. 2 (198). – С. 237-247.

13. Shtarev, D.S., Shtareva, A.V., Ryabchuk, V.K., Rudakova, A.V., Murzin, P.D., Molokeev, M.S., Koroleva, A.V., Blokh, A.I., Serpone, Nick. Solid-State Synthesis, Characterization, UV-Induced Coloration and Photocatalytic Activity – The $Sr_6Bi_2O_{11}$, $Sr_3Bi_2O_6$ and $Sr_2Bi_2O_5$ /// Bismuthates. Catalysis Today. – 2018. – DOI: 10.1016/ j.cattod. 09.035.

14. Shtarev, D.S., Shtareva, A.V., Mikhailovski, V.Ju., Nashchochin, E.O. On the influence of strontium carbonate on improving the photo-catalytic activity of strontium bismuthate $Sr_6Bi_2O_{11}$. // Catalysis Today. – 2019. – DOI: 10.1016/j.cattod.02.016.

Секция 5
Техническая физика

УДК 53.087.4

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕГИСТРАЦИИ ЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

А.А. Антонов, С.В. Барышников
Благовещенский государственный педагогический университет, (г. Благовещенск).
antonov.lit@bgpu.ru

AUTOMATION OF PARALLEL REGISTRATION OF LINEAR AND NONLINEAR DIELECTRIC PROPERTIES OF FERROELECTRICIANS

A.A. Antonov, S.V. Baryshnikov
Blagoveshchensk State Pedagogical University, (Blagoveshchensk).
antonov.lit@bgpu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.181-183

Неотъемлемой частью современных научных исследований являются системы автоматизированного сбора информации. К основным достоинствам подобных систем можно отнести: возможность регистрации нескольких параллельных процессов, снижение нагрузки на оператора, точная запись быстроизменяющихся зависимостей, формирование графиков и диаграмм в режиме реального времени. Использование систем с обратной связью позволяет проводить эксперимент практически полностью в автономном режиме. В данной статье приводится описание установки для параллельной регистрации линейных и нелинейных диэлектрических свойств, на базе ЦАП-АЦП ZET 230 и измерителя иммитанса Е7-25. Суть метода нелинейной диэлектрической спектроскопии (НДС) заключается в генерации гармоник второго и более высоких порядков. Анализируя зависимости гармоник от температуры, можно определить тип фазового перехода, моменты появления и исчезновения спонтанной поляризации, рассчитывать коэффициенты разложения Ландау – Гинзбурга [1-3].

Общая схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Режим нагрева и охлаждения задается программно и осуществлялся через управляемый блок питания Instek GPD-Series, который подключался по интерфейсу USB 2.0 [4]. Измерение и расчет диэлектрических свойств и коэффициентов гармоник производится по очереди в соответствии с управляющей программой, которая, кроме того, задает частоты и временные интервалы измерительных процессов. Сигнал с образца поочередно подаётся на АЦП ZED 230 и измеритель Е7-25. Переключение сигнала производится реле обозначенной цифрой 4 на рис. 1.

Для управления реле используется ЦАП ZET 230. Модуль АЦП/ЦАП ZET 230 подключается к ПЭВМ по интерфейсу Ethernet 10/100 Wi-Fi или (в нашем случае) USB 2.0 [5]. Он имеет несколько способов интеграции с измерительными системами: средства разработки ZetView и ZetStudio, пакет программ ZetLab, динамическая библиотека доступа к сигнальному процессору ЦАП/АЦП – zadc.dll. В

нашем случае используется собственная реализация цифровой обработки сигналов и управления ЦАП посредством DLL библиотек. Для диэлектрических исследований применялся измеритель иммитанса E7-25 с частотным диапазоном 25 – 10^6 Гц, подключенный через серийный порт ввода-вывода по бинарному протоколу, который описан производителем оборудования [6].

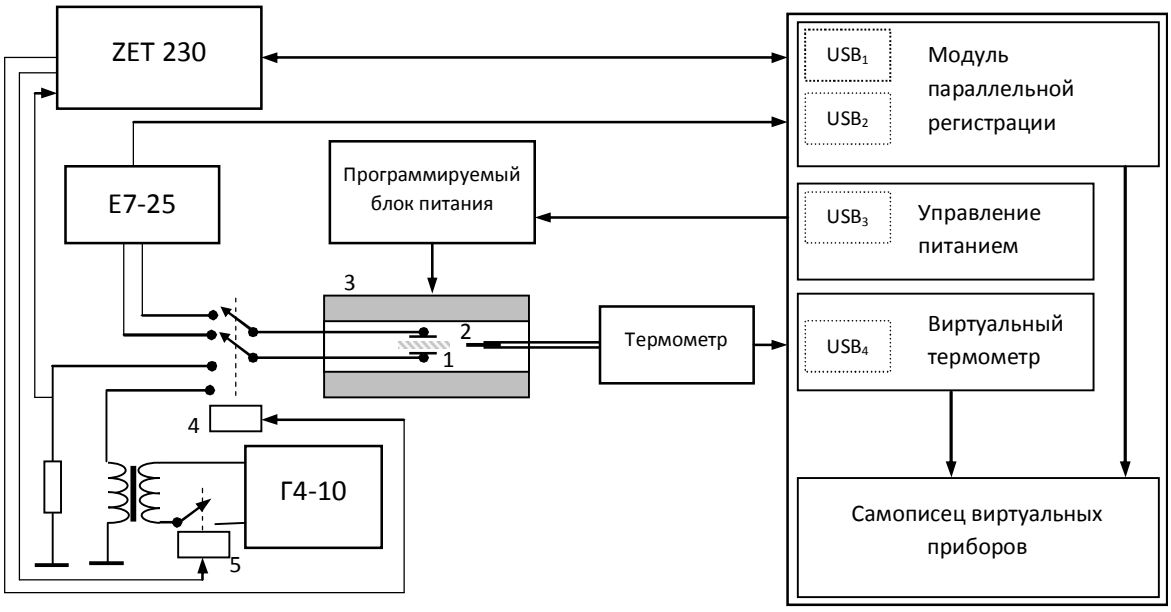


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для исследования нелинейного диэлектрического отклика: 1 – исследуемый образец, 2 – термопара, 3 – термостат, 4 – реле изменения режима измерения, 5 – реле включения-отключения генератора.

Система исследования нелинейных свойств включает генератор Г4-10 с максимальным выходным напряжением 10 В. Для получения более высоких напряжений используется трансформатор, позволяющий повышать напряжение до 300 В. В момент измерения диэлектрических свойств для уменьшения помех генератор отключается с помощью реле 5 на рис. 1. Управление им производится по одному из разрядов параллельного порта.

Сигналы гармоник снимаются с резистора включенного последовательно с образцом и подаются на АЦП ZET 230. После АЦП цифровой сигнал обрабатывается программно путем применения быстрого преобразования Фурье. В процессе анализа полученного спектра определяются: опорный сигнал, гармоники и их коэффициенты. Рассчитанные показания диэлектрических параметров и коэффициентов гармоник передаются на самописец виртуальных приборов [7], который собирает все экспериментальные данные, строит графики по различным зависимостям и формирует файлы отчетов. Общее управление процессом измерения и обработки данных производилась на основе модуля сетевого взаимодействия виртуальных измерительных приборов [8].

В качестве примера на рис. 2 представлены температурные зависимости диэлектрической проницаемости и амплитуды 2, 3 и 5 гармоник для монокристалла триглицинсульфата (TGS) при нагреве и охлаждении.

TGS представляет собой классический сегнетоэлектрик с фазовым переходом второго рода и уже в течение долгого времени является объектом активных теоретических и экспериментальных исследований. Выше температуры Кюри (T_c = 49°C) кристалл TGS имеет моноклинную симметрию и принадлежит к центросимметричному классу 2/m. [9].

Приведенные графики для $\varepsilon'(T)$ и коэффициентов гармоник $\gamma_2(T)$, $\gamma_3(T)$, $\gamma_5(T)$, показывают, что для монокристалла TGS при приложении переменного поля вдоль P_s максимум $\varepsilon'(T)$ совпадает с температурой фазового перехода (при 49,3°C), а амплитуды третьей и пятой гармоник имеет максимумы несколько ниже T_o (при 47°C) и обращается в ноль при в точке фазового перехода To. Такое поведение нечетных гармоник в целом согласуется с теоретическими соотношениями [1].

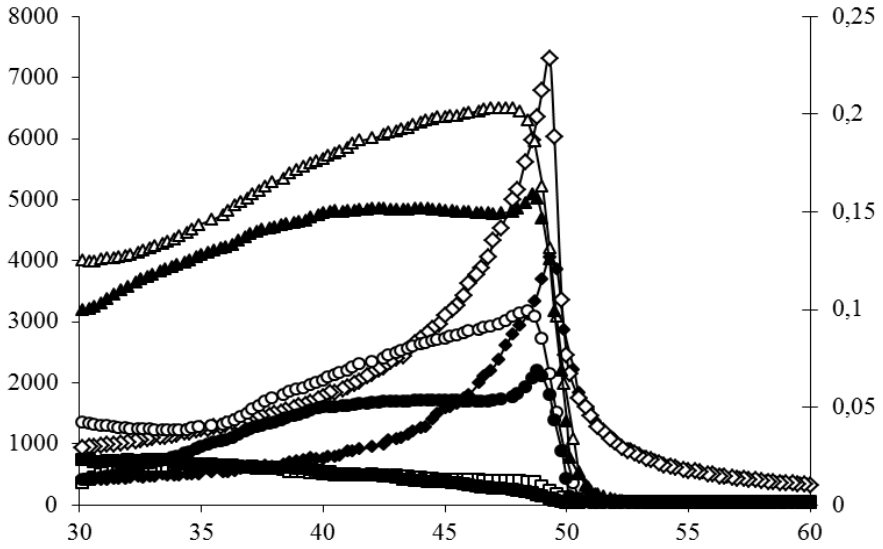


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' (◇) и коэффициентов гармоник γ (□ – $\gamma_{2\omega}$, Δ – $\gamma_{3\omega}$, ○ – $\gamma_{5\omega}$) для монокристаллического образца TGS.
Темные символы соответствуют нагреву, светлые – охлаждению.

Четные гармоники в классических сегнетоэлектриках имеют значительно меньшую амплитуду по сравнению нечетными и в экспериментальных исследованиях используются редко. Метод НДС хорошо зарекомендовал себя при исследовании наноразмерных матриц заполненных сегнетоэлектриками, где другими методами трудно определить область существования сегнетоэлектрического состояния [10-12].

---

1. Ikeda, S. Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene / S. Ikeda, H. Kominami, K. Koyama, Y. Wada // J. Appl. Phys. – 1987. – V. 62, № 8. – P. 3339-3342.

2. Wei, X. Reversible dielectric nonlinearity and mechanism of electrical tunability for ferroelectric ceramics / X. Wei, X. Yao // Int. J. Mod. Phys. B. – 2006. – V.20. – P. 2977-2998.

3. Leont'ev, I.N. Nonlinear properties of barium titanate in the electric field range $0 \le E \le 5.5\times10^7$ V/m / I.N. Leont'ev, A. Leiderman, V.Yu. Topolov, O.E. Fesenko // Phys. Solid State. – 2003. – V. 45. – P. 1128-1130.

4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018618173 «Модуль управления программируемыми блоками питания «Instek GPD-Series». Авторы: Антонов А.А., Милинский А.Ю. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10 июля 2018 г.

5. Модуль АЦП-ЦАП ZET 230. Паспорт. Инструкция по эксплуатации. – М., 2008. – 19 с.

6. Измеритель иммитанса Е7-25. Руководство по эксплуатации. – Минск, 2017. – 30 с.

7. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018618172 «Модуль автоматизации регистрации показаний высокоточных измерительных приборов». Авторы: Антонов А.А., Милинский А.Ю. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10 июля 2018 г.

8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации сетевой передачи показаний высокоточных измерительных приборов». Авторы: Антонов А.А., Милинский А.Ю. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 06 июня 2017 г.

9. Иона, Ф. Сегнетоэлекрические кристаллы / Ф. Иона, Д. Ширане // пер. с англ. под ред. Л.А. Шувалова. – М.: Мир, 1965. – 555 с.

10. Барышников, С.В. Влияние ограниченной геометрии на линейные и нелинейные диэлектрические свойства триглицинсульфата вблизи фазового перехода / С.В. Барышников, Е.В. Чарная, Ю.А. Шацкая, А.Ю. Милинский, М.И. Самойлович // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, № 6. – С. 1146-1149.

11. Stukova, E.V. Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO3)_{1-x}$–$(BATIO3)_x$ composites / E.V. Stukova, S.V. Baryshnikov // Inorganic Materials: Applied Research. – 2011. – V. 2. № 5. – P. 434-438.

12. Стукова, Е.В. Диэлектрические свойства сегнетоэлектрических композитов на основе KNO_3-$BaTiO_3$ и KNO_3-$LiNBO_3$ / Е.В. Стукова, В.В. Маслов, С.В. Барышников // Известия Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена. – 2011. – № 138. – С. 58-65.

УДК 533.9.01

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ЕМКОСТНОМ ВЫСОКОЧАСТОТНОМ РАЗРЯДЕ НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ

Т.В. Бондарева, М.С. Круглов
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
kruglov_maxim@mail.ru

RESEARCH OF ELECTRON BEAM EFFECTS IN CAPACITY HIGH FREQUENCY DISCHARGE OF LOW PRESSURE

T.V. Bondareva, M.S. Kruglov
Pacific State University (Khabarovsk)
kruglov_maxim@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.184-186

В работе рассмотрены частотные зависимости вольт-амперных характеристик (ВАХ) ассиметричного емкостного высокочастотного разряда (АЕВЧР) как его комплексная характеристика в неоне при давлениях 0,1 – 0,5 Тор. Также представлена осциллограмма разрядного ВЧ тока в неоне, отражающая в себе временной ход физических процессов в разрядном промежутке внутри каждого периода ВЧ поля.

В соответствии с требованиями научно-технического прогресса остается актуальным создание новых видов источников плазмы с более широким диапазоном изменения параметров и, в особенности, возможностью их прецизионного регулирования.

В настоящей работе исследовался ассиметричный емкостной высокочастотный разряд при давлениях 0,1 – 0,5 Тор в неоне. Использовались стеклянные разрядные трубки диаметром 60 мм. Напряжение от ВЧ генератора подавалось на электрод диаметром 5 мм (активный электрод), второй газоразрядный электрод диаметром 60 мм был заземлен (заземленный электрод). Такая асимметрия газоразрядной системы значительно повышала плотность приэлектродных электронных пучков (ПЭП) [1] в ЕВЧР, что позволяло исследовать их физические свойства. При этом эффекты собственных пучков в разряде проявлялись особенно ярко.

Проводились измерения ВАХ ЕВЧР с внешними электродами, в зависимости от частоты внешнего ВЧ поля и давления газа, которые представлены на рис. 1 и рис. 2.

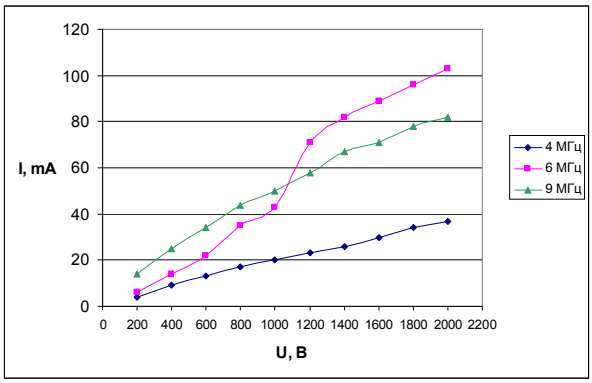


Рис. 1. Частотная зависимость ВАХ АЕВЧР в неоне при P = 0,5 Тор. Диаметр активного электрода 5 мм. Диаметр заземленного электрода 60 мм.

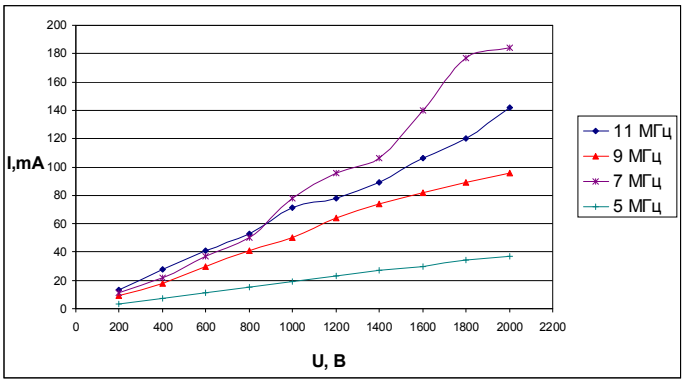


Рис. 2. Частотная зависимость ВАХ АЕВЧР в неоне при P = 0,51 Тор. Диаметр активного электрода 5 мм. Диаметр заземленного электрода 60 мм.

На рис. 1 видно, что при $V_{\sim} > 1000B$ ВАХ с частотой 6 МГц проходит выше ВАХ, соответствующей частоте 9 МГц. Таким образом, в области повышенных напряжений $V_{\sim}$, соответствующих γ-разряду, ход ВАХ с пониженной частотой f может «обгонять» ВАХ, соответствующую более высокой частоте.

В случае α-разряда основным поддерживающим разряд фактором является ВЧ поле, а в γ-разряде – приэлектродные электронные пучки. Причем, существенное значение здесь имеет то обстоятельство, что пучки являются импульсными с длительностью импульса порядка 1/*f*. Следовательно, с ростом частоты поля время существования пучков τ_{eb} уменьшается. С другой стороны, с увеличение частоты f замедляется уход зарядов из разрядного промежутка и при приближении к выполнению условий $\omega \approx \nu_{en}$ (ν_{en} - частота столкновения электронов с атомами) увеличивается энерговклад поля в плазму и увеличивается плотность зарядов n_e плазмы [2].

Похожая картина наблюдается и с ВАХ, полученными в неоне при давлении 0,1 Тор.

Видно, что в области повышенных напряжений ($V_{\sim} > 1000B$) АХ соответствующая частоте 7 МГц уверенно обгоняет ВАХ соответствующую 11 МГц. Следует заметить, что частотный обгон начинается при меньших напряжениях, чем на рис. 1. Также видно, что в данном случае основное внимание на себя обращает кривая, соответствующая 7 МГц. Такое поведение кривых можно объяснить, что с понижением давления газа уменьшается частота столкновения электронных пучков с атомами газа, в результате чего ПЭП начинают себя проявлять при меньших значениях приложенного к электродам ВЧ напряжения.

Естественно, что для каждого конкретного набора параметров условий эксперимента существует своя оптимальная частота ВЧ поля, обеспечивающая поддержание ЕВЧР, что отражается в характере хода соответствующей ВАХ, по сравнению с поведением ВАХ на других частотах.

В процессе описываемых исследований получались осциллограммы разрядного тока $I_{\sim}(t)$, одна из которых представлена на рис. 3.

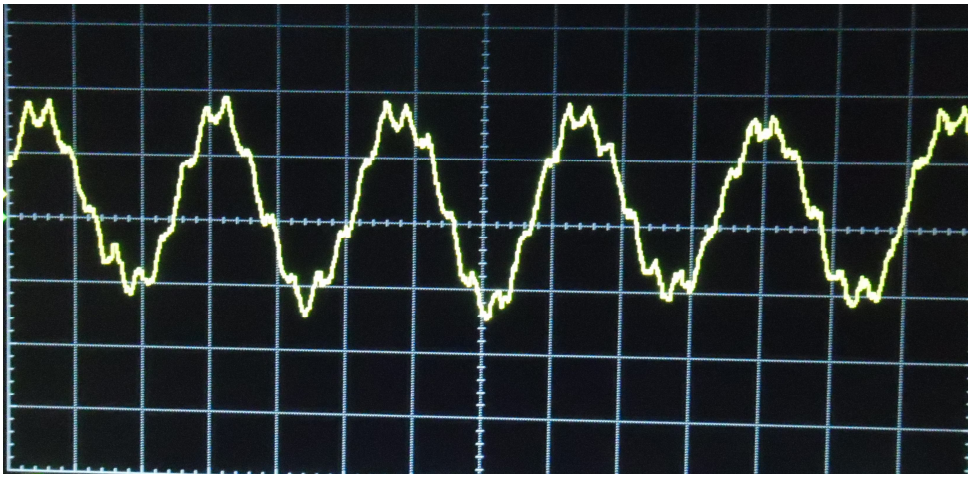


Рис. 3. Осциллограмма разрядного тока ЕВЧР в неоне при $p = 0{,}1\,Top$, $V_{\sim} = 1500B$, $f = 7\,МГц$.

В условиях резко асимметричного ЕВЧР с высокими ВЧ напряжениями разрядный ток отличается значительным ангармонизмом, обусловленным эффектами собственных приэлектродных импульсных электронных пучков. Пики малой длительности на осциллограммах объясняются «вспышками» возбуждения пучково-плазменной неустойчивости (ППН), природа которых аналогична наблюдавшимся ранее в экспериментах с импульсными пучками электронных пушек в работе [3]. ППН сопровождается генерацией высокоинтенсивных СВЧ полей, нагревающих электроны плазмы до температур $T_e \sim 10^6 - 10^7\,K$ и резко усиливающих ионизационные процессы.

Естественно, что параметры условий возбуждения и протекания процессов ППН в условиях ЕВЧР зависят от частоты поля, поскольку от этой частоты в значительной степени зависят параметры

приэлектродных пучков и газоразрядной плазмы [1], а также от давления внутри газоразрядного промежутка и его геометрии.

1. Ковалевский, В.Л., Савинов, В.П. // Физика плазмы. –1994. – Т. 20, № 3. – С. 322-335.
2. Гинзбург, В.Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. – М.: ГИФМЛ, 1960. – 552 с.
3. Левитский, С.М. Прерывистая генерация СВЧ колебаний при плазменно-пучковом взаимодействии / С.М. Левитский, В.З. Шаповал // Радиотехн. и электрон. – 1972. – № 7. – С.1146- 1451.

УДК 57.084, 54.084, 544.47

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ БИО-ИНДИФФЕРЕНТНОСТИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ ВИДИМОГО СВЕТА

А.В. Зайцев, О.И. Каминский, Е.А. Кириченко, К.С. Макаревич, С.А. Пячин
Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН (г. Хабаровск)
alex-im@mail.ru

METHODOLOGY FOR ASSESSING BIO-INDIFERENCE OF PROSPECTIVE PHOTOCATALIZERS OF VISIBLE LIGHT

A.V. Zaitsev, O.I. Kaminsky, E.A. Kirichenko, K.S. Makarevich, S.A. Pyachin
Institute of Materials Science, Kola Scientific Center FEB RAS (Khabarovsk)
alex-im@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.186-190

Органические соединения не редко являются основным токсичными компонентами сточных вод промышленных предприятий, поэтому проблема по их окислительной деструкции без привлечения дополнительных химических реагентов является актуальной и перспективной как с экологической, так и экономической стороны вопроса. Решением данной проблемы может быть поиск перспективных фотокатализаторов видимого света в двух параллельных направлениях:

1) поиск стабильных фотокатализаторов способных эффективно разрушать органические загрязнители под действием солнечного света;

2) оценка био-индифферентности как синтезированных перспективных фотокатализаторов видимого света, так и оценка био-индифферентности загрязнителя, разрушенного под действием фотокатализатора.

Одними из эффективных сенсибилизаторов фотокаталитических систем к солнечному свету являются добавки Cu, Ni[1], Cd [2], Zn [3] и другие тяжёлые металлы. Однако такие катализаторы сами могут являться источниками опасного загрязнения сточных вод вследствие постепенной деструкции фотокатализатора и перехода ионов биотоксичных металлов в воду. В этой связи, перспективны фотокатализаторы на основе висмута, тяжёлого металла, но безопасного для живых организмов. В настоящей работе в качестве фотокатализаторов, сенсибилизированных к видимому свету, использованы нанопорошки висмутатов щелочноземельных металлов, синтезированных по авторской методике [4].

Таким образом для эффективного решения описанных проблем необходимо детальное исследование, как основных стадий, так и индивидуальных особенностей фотокаталитического процесса с одной стороны и проверка отсутствия токсического воздействия фотокатализатора на биологические объекты с другой стороны. Подобные исследования должны содержать представительный массив данных т.е. возникает необходимость в проведении большого числа измерений с минимальной дискретностью, которое на практике возможно осуществить только в автоматическом режиме.

Наиболее распространенные из существующих методов оценки загрязнения водных объектов в большинстве случаев основаны на оценке роста колоний микроорганизмов от условий токсического воздействия [5]. Также известны методы выращивания высших растений на зараженных токсином субстратах с последующей оценкой наличия токсинов в различных вегетативных частях растения [6] . Однако процесс оценки числа и размеров колоний микроорганизмов или наличия токсичных соединений в тестируемом биообъекте требует значительных трудозатрат исследовательского персонала, что приводит к накоплению субъективных ошибок и наличию малопредставительного массива экспериментальных данных. В связи с этим актуальным направлением в области исследования биоиндиффирентности может быть автоматизация процесса с использованием в качестве биологического объекта высшего водного растение с максимальной редуцированностью вегетативных органов в условиях «*In Situ*». В качестве такого биообъекта может выступать представитель высших цветковых растений рода Ароидные – ряска малая (*Lémna mínor*), имеющая хороший отклик на наличие токсинов, быструю культивацию и значительную редуцированность вегетативных органов [7].

Целью данной работы является оценка био-индиффирентности фотокатализаторов, с использованием водного растения в автоматизированном режиме.

Методика исследования

Экспериментальная установка по исследованию био-индифферентности включает в себя фотофиксирующие устройство и 4 кюветные отделения для культивации ряски малой в контролируемых условиях. Блок схема и компоненты одного кюветного отделения показаны на рис 1 а.

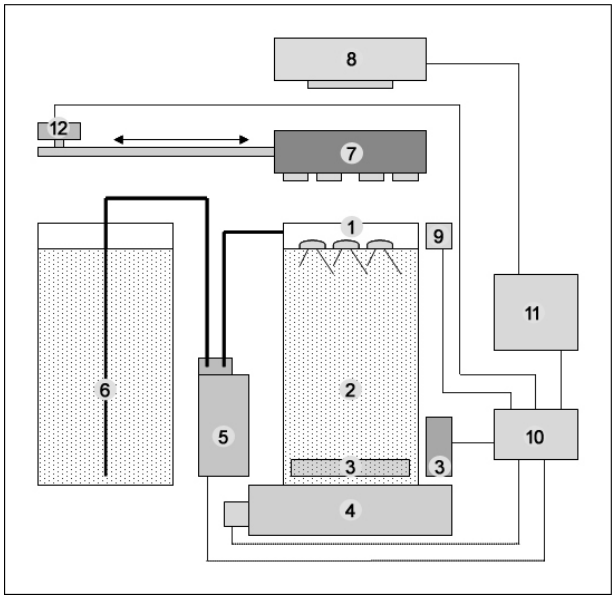


Рис. 1. А) Блок схема экспериментальной установки:

1 – Ряска малая; 2 – Инертный стакан с водным раствором фотокатализатора (модельного загрязнителя); 3 – Колебательная магнитная система перемешивания; 4 – Система поддержания оптимальной температуры водного раствора; 5 – Перистальтический насос для поддержания постоянного уровня водной среды; 6 – Емкость с исходным раствором; 7 – Система облучения (светодиоды фитоспектра); 8 – Фотофиксирующее устройство; 9 – Датчик температуры-влажности воздуха; 10 – Контроллер автоматизации; 11 – Персональный компьютер; 12 – Поворотный механизм системы светодиодов.

Подготовительный этап

Культивация маточной культуры ряски малой производится в разработанной экспериментальной установке в стерильных условиях на питательной среде при температуре воды 25 ±1°С. В описанных условиях удвоение биомассы ряски малой достигается за 3-4 суток.

Этап градуировки

После внесения ряски малой в стакан производится градуировка установки на общую площадь водной поверхности каждого стакана и расчет исходной площади зеленой биомассы в них посредством ПО.

Для более точной оценки площади биомассы ряски малой в разработанном ПО реализовано два алгоритма обработки фотоизображения.

Первый алгоритм (А1) преобразует фотоизображение в черно-белый формат и производит расчет общего количества черных пикселей, которые соответствуют общей площади надводной части ряски малой. Второй алгоритм (А2) производит расчет только количества зеленых пикселей разной интенсивности в исходном фотоизображении.

Алгоритм А1 эффективно оценивает увеличение площади ряски малой, в то время как при деструкции листовых пластин в ответ на воздействие токсина, данный алгоритм имеет большую погрешность.

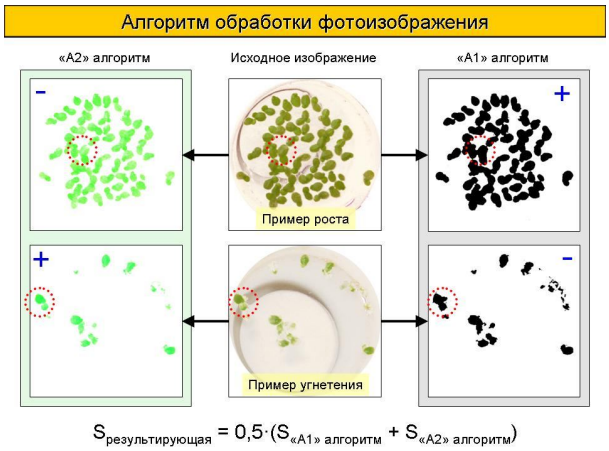


Рис. 2. Пример работы алгоритмов по оценке площади прироста\угнетения биомассы ряски малой.

В момент деструкции зеленая листовая пластина ряски малой окрашивается в желтые цвета различной интенсивности, которые алгоритмом А1 преобразовываются в черные пиксели, тем самым завышая значение текущей площади.

Для учета данной погрешности в условиях убыли площади биомассы ряски малой используется алгоритм А2. Однако алгоритм А2 так же имеет погрешность когда ряска малая покрывает большую часть поверхности водной среды. За счет взаимного отражения ряски в поверхности водной среды промежутки раствора между растениями приобретают слабые оттенки зеленого цвета тем самым происходит завышение общей площади при работе алгоритма. Результирующая площадь после единичной фотофиксации является средним арифметическим между рассчитанными площадями биомассы ряски малой по алгоритмам А1 и А2 (рис. 2).

Этап измерения

После завершения градуировки посредством интерфейса ПО выбирается температура водной среды (25°С), периодичность фотофиксации, периодичность перемешивания водной среды (через каждые 5 минут в течении 30 секунд), периодичность освещения (непрерывное), добавляются исследуемые фотокатализаторы или модельные загрязнители в необходимых количествах и запускается автоматизированное измерение. Измерение в экспериментальной установке проводится в течении 2-4 суток вне зависимости от подключения к персональному компьютеру.

Воспроизводимость по приросту площади биомассы ряски малой при одинаковых условиях во всех кюветных отделениях в отсутствии фотокатализаторов и токсинов показана на рис 3 А. Воспроизводимость по убыли площади биомассы ряски малой при одинаковых условиях во всех кюветных отделениях в присутствии нитрата кобальта при концентрации 10 мг/л показана на рис 3 Б.

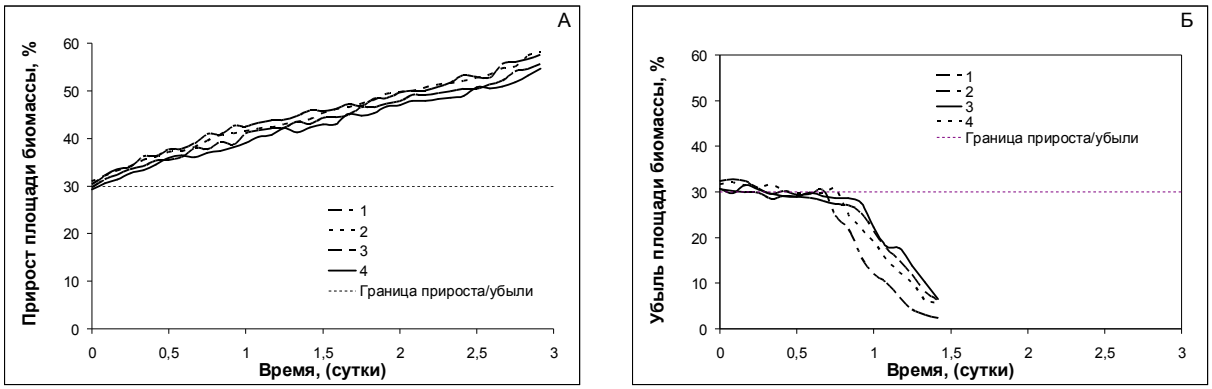


Рис. 3. А) – график прироста площади биомассы ряски малой в присутствии питательной среды; Б) – график убыли площади биомассы ряски малой в присутствии нитрата кобальта

Результаты оценки био-индифферентности

Проведенные исследования фотокаталитической активности соединений висмута в видимом свете выявили перспективные составы основанные на висмутатах щелочноземельных металлов. Наиболее перспективны фотокатализаторы на основе твердого раствора висмутатов стронция с соотношением стронция к висмуту 1:2, 1:4, 1:8 . Однако предварительные исследования по оценке pH, показали нестабильность в водной среде соединений с большим содержанием стронция. Висмутаты стронция с содержание стронция менее 1:8 подвергаются гидролизу и способны к выделению катионов стронция и висмута в водную среду, что может впоследствии негативно отразится на экологической безопасности систем водоочистки основанных на данных фотокатализаторах. Проведенные исследования по влиянию висмутатов стронция при концентрации 400 мг/л состава Sr:Bi - 1:2, 1:4, и 1:8 на скорость прироста/убыли площади биомассы ряски малой в сравнение с холостым опытом представлены на рис 4.

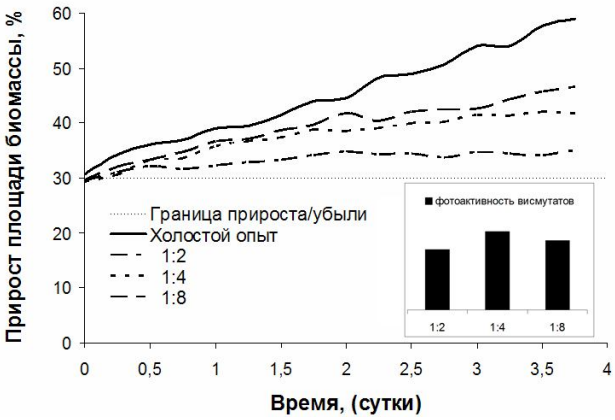


Рис. 4. График прироста площади биомассы ряски малой в присутствии висмутатов стронция при соотношение стронция к висмуту 1:2, 1:4, 1:8.

Показано, что соединения с соотношением Sr:Bi 1:4, и 1:8 не оказывают значительного влияния на скорость прироста площади биомассы Ряски малой и удовлетворительно повторяют кинетическую кривую холостого опыта в течении первых 2 суток.

В свою очередь соединение с соотношением Sr:Bi 1:2 вызывает заметное замедление скорости прироста площади биомассы ряски малой в сравнении с холостым опытом, что может быть вызвано смещением pH баланса в сторону щелочной среды за счет катионов стронция.

Заключение

Предложена и опробована методика исследования экологической безопасности перспективных висмутовых фотокатализаторов в водной среде, на основе анализа прироста\убыли площади зеленой биомассы ряски малой, в процессе периодической фотофиксации.

Косвенно подтверждена гидролитическая неустойчивость висмутатов стронция с соотношением стронция к висмуту 1:2 и 1:4 по замедлению скорости роста биомассы ряски малой в их присут-

ствии. Время гидролитической устойчивости в водной среде при температуре 25°С составляет порядка 2 суток.

Работа выполнена при поддержке гранта 26С/2019 от 28.06.2019.

1. Riaz, Nadia, Bustam, Mohamad Azmi, Chong, Fai Kait, Man, Zakaria B., Khan, Muhammad Saqib, Shariff, Azmi M. Photocatalytic Degradation of DIPA Using Bimetallic Cu-Ni/TiO2 Photocatalyst under Visible Light Irradiation // Scientific World Journal. – 2014. – Vol. – 3. 342020. – 8 pages.

2. He, Y.M., Wu, Y., Sheng, T.L., Wu, X.T. Photodegradation of acetone over V–Cd–O composite catalysts under visible-light // J. Hazard. Mater. – 2010. Vol. 180. – P. 675-682.

3. Bak, Sol-A., Song, Myong-Shin, Nam, In-Tak, Lee, Woong-Geol. Photocatalytic Oxidation of Trichloroethylene in Water Using a Porous Ball of Nano-ZnO and Nanoclay Composite // Journal of Nanomaterials. – 2015. – Vol. 160212. – 8 pages.

4. Makarevich, K.S., Zaitsev, A.V., Kaminsky, O.I., Kirichenko, E.A., Astapov, I.A. catalytic activity of a composition based on strontium bismuthate and bismuth carbonate at the exposure to the light of the visible range //International Journal of Chemical Engineering. – 2018. – Vol. 2018. – P. 4715629.

5. Кондратьева, Л.М., Фишер Н.К., Бардюк, В.В. Биоидикация трансграничного загрязнения реки Амур ароматическими углеводородами после техногенной аварии в Китае // Сибирский экологический журнал. – 2012. – Т. 19, № 2. – С. 245-252.

6. Nalewajko, C., Olaveson, M. M. Ecophysiological Considerations in Microalgal Toxicity Tests // Microscale Testing in Aquatic Toxicology: Advances, Techniques, and Practice / eds. P.G. Wells, K. Lee, C. Blaise. – CRC Press, Boca Raton, FL, 1998. – P. 289-307

7. ГОСТ 32426-2013 Методы испытаний химической продукции, представляющей опасность для окружающей среды. Испытание ряски на угнетение. – М. Стандартинформ, 2014. – С. 24

УДК 621.311.25

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОЛНЕЧНЫХ МОДУЛЕЙ

И.С. Зиссер, А. Васильева, Д.С. Фалеев
Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)
irinazisser@gmail.com

DETERMINATION OF ELECTROPHYSICAL CHARACTERISTICS OF SOLAR MODULES

I.S. Zisser, A. Vasiliev, D.S. Faleev
Far Eastern State Transport University, Khabarovsk
irinazisser@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.190-194

В настоящее время все более широкое применение находят альтернативные источники электрической энергии, например, такие как солнечные батареи. За два последних десятилетия мощность наземных солнечных батарей увеличилась от 1 кВт до сотен киловатт, а их КПД увеличился по средним показателям до 20%. Стоимость солнечных батарей быстро снижается, в результате чего электроэнергия, полученная с их помощью, становится более доступной и экономически выгодной, особенно в районах, удаленных от сетей централизованного электроснабжения.

Солнечная батарея собирается путем параллельного подключения солнечных модулей - фотоэлектрическихпреобразователей солнечной энергии в электрическую. Каждый солнечный модуль со-

стоит из последовательно соединенных солнечных элементов [1]. Перспективность применения солнечной батареи оценивается исходя из ее электрофизических параметров, таких как ток короткого замыкания, напряжение холостого хода, коэффициент полезного действия (КПД), максимальная полезная мощность и др. В данной работе электрофизические характеристики солнечного модуля оцениваются по результатам исследования вольтамперной характеристики, полученной путем измерения тока и напряжения, при освещении солнечного модуля светом от мощной лампы.

На данном этапе исследований перед нами стояла задача:

- построить вольтамперные характеристики солнечной батареи при разных мощностях потока излучения лампы;

- по графикам вольтамперных характеристик солнечного модуля определить величины напряжения холостого хода и ток короткого замыкания;

- определить последовательное сопротивление нагрузки $\boldsymbol{R_н}$;

- определить величины напряжения и тока, соответствующие максимальной полезной мощности, а также саму максимальную полезную мощность $\boldsymbol{P_{max}}$;

- определить коэффициент полезного действия (КПД) солнечного модуля $\boldsymbol{\eta}$;

- построить зависимости напряжения холостого хода ($\boldsymbol{Uxx}$) и тока короткого замыкания ($\boldsymbol{I_{кз}}$) от плотности потока светового излучения лампы ($\boldsymbol{G}$).

Для проведения эксперимента была собрана установка, которая состоит из оптической скамьи длиной около 1 м, на которой размещен фотоэлектрический модуль типа ФСМ, который может перемещаться по скамье. Солнечный модуль освещается светом, идущим от лампы типа ДГК-2,0 мощностью соответственно 2000. Лампа запитана от сети с напряжением 220 В, 50 Гц. На солнечном модуле имеются клеммы выходного фототока, обозначена полярность контактов. Кроме этого в комплект установки входят нагрузочное сопротивление $\boldsymbol{R_н}$, которое измеряется ступенями от 1 до 12, и два измерительных цифровых мультиметра типа АМ-1118. В ходе эксперимента солнечный модуль имеет тенденцию чрезмерно нагреваться, от этого его электрофизические характеристики ухудшаются. Для того чтобы на некоторое время закрыть солнечный модуль от светового потока лампы на него закрепляется съемная шторка, имеющая белый цвет. Кроме того, для контроля температуры поверхности солнечного модуля в ходе эксперимента, к установке прилагается термометр типа АТ-2520.Для охлаждения поверхности солнечного модуля при чрезмерном нагревеиспользуется настольный вентилятор, который необходимо использовать при повышении температуры поверхности солнечного модуля выше 40° С.

Принципиальная электрическая схема экспериментальной установки приведена на рис. 1.

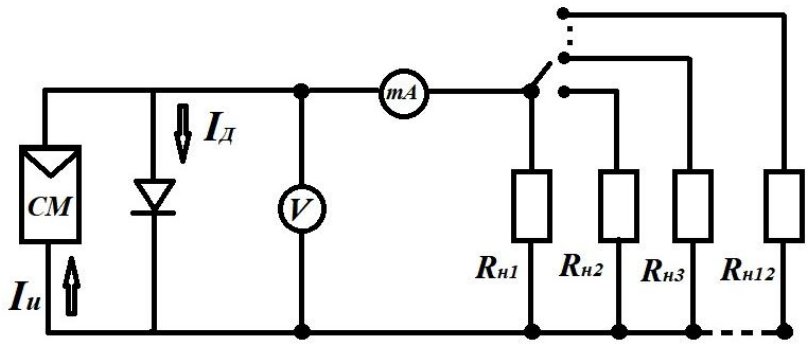


Рис. 1. Принципиальная электрическая схема установки для измерения некоторых параметров солнечного модуля.

На рис. 1 показаны следующие элементы: $\boldsymbol{I_и}$– источник постоянного тока (солнечный модуль), параллельно ему подключен диод и изображено внутреннее сопротивление модуля $\boldsymbol{R_B}$, включенного последовательно с нагрузкой $\boldsymbol{R_н}$, которая может изменяться почти до нуля.Источник тока

под воздействием солнечного излучения образует ток I_u, равный сумме двух токов: $I_д$ – ток диода или обратный ток и $I_н$ – ток нагрузки.

В ходе эксперимента меняли положение осветительной лампы на скамье, тем самым меняя интенсивность падающего на фотоэлектрический модуль излучения (G, Вт/м^2). Для каждого значения интенсивности (G = 100 Вт/м^2, 200 Вт/м^2, 400 Вт/м^2, 800 Вт/м^2), подключив последовательно с нагрузочным сопротивлением $R_н$ миллиамперметр, измеряли ток и напряжение для различных значений нагрузочного сопротивления. В результате этих измерений было получено семейство вольтамперных характеристик для данного солнечного модуля, освещаемого светом различной интенсивности. Вольтамперные характеристики приведены на рис. 2.

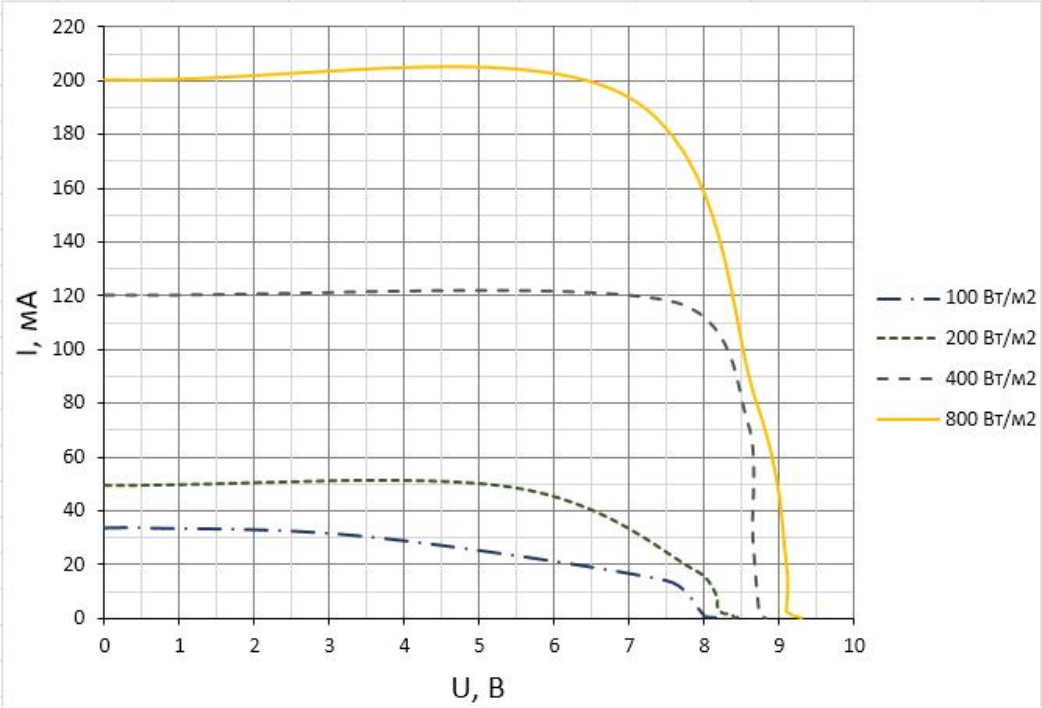
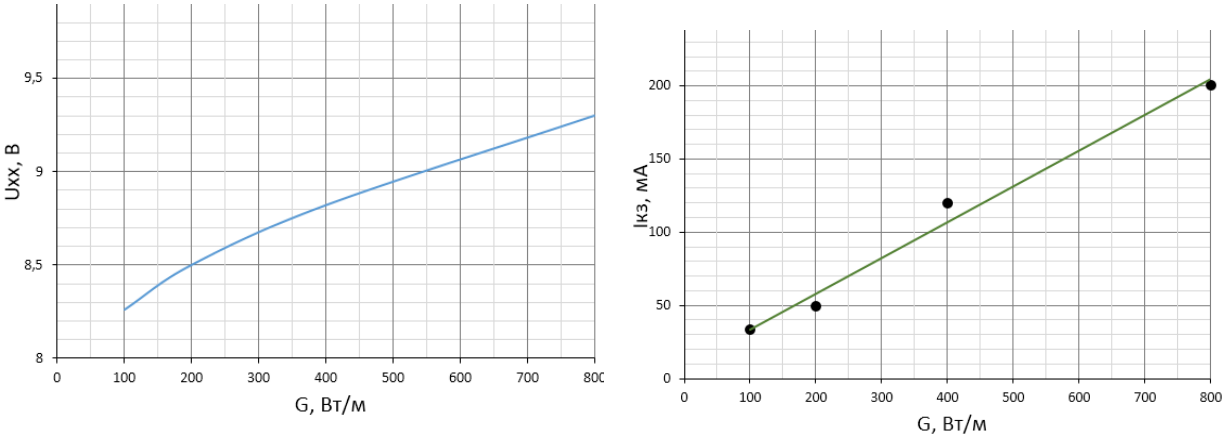


Рис. 2. Вольтамперные характеристики солнечного модуля при различных интенсивностях значений освещающего его света (G = 100 Вт/м^2, 200 Вт/м^2, 400 Вт/м^2, 800 Вт/м^2).

Далее, экстраполируя графики до пересечения с осями напряжения и тока, определили напряжение холостого хода U_{xx} и ток короткого замыкания $I_{кз}$. Ниже на рис. 3(а) и 3(б) приведены зависимости напряжения холостого хода и тока короткого замыкания от интенсивности излучения, освещающего исследуемый солнечный модуль.



(а) (б)

Рис. 3. Зависимость напряжения холостого хода U_{xx}(а) и тока короткого замыкания $I_{кз}$(б) от интенсивности излучения, освещающего исследуемый солнечный модуль G.

С помощью построенных и приведенных выше вольтамперных характеристик (рис. 2) определили такие фотоэлектрические характеристики исследуемого солнечного модуля, как последовательное сопротивление и коэффициент полезного действия (КПД).

Последовательное сопротивлениеR_nвычисляется с помощью соотношения[1, 2]:

$$R_n = \frac{\Delta U_{XX}}{\Delta I_{кз}} \quad (1)$$

В формуле (1) ΔU_{XX} и $\Delta I_{кз}$ определяются как разница положений точек пересечения графиков с осями напряжения и тока для двух последовательно расположенных на координатной плоскости вольтамперных характеристик при различных значениях интенсивности света (***G***), падающего на фотоэлемент. Результаты расчетов последовательного сопротивления солнечного модуля приведены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты расчетов последовательного сопротивления R_n солнечного модуля

ΔU_{XX}, В	0,14	0,42	0,48
$\Delta I_{кз}$, mA	0.016	0,071	0,082
, Ом	8,75	5,9	8,85

Коэффициент полезного действия определяли исходя из соотношения[2]:

$$\eta = \frac{P_{CM}(I)}{P(G)} \cdot 100\% \quad (2)$$

В формуле (2) $P_{CM}(I)$, Вт – электрическая мощность, снимаемая с солнечного модуля; $P(G)$, Вт – мощность падающего на солнечный модуль излучения.

За мощность, снимаемую с солнечного модуля $P_{CM}(I)$, принимали его максимальную полезную мощность P_{max}, которую рассчитали по формуле[1]:

$$P_{CM}(I) = P_{\max} = I_{\max} \cdot U_{\max} \quad (3)$$

Значения токаI_{max}, А и напряжения U_{max}, В, соответствующие точке максимальной мощности несложно определить графическим путем[2], сопоставляя нижеприведенную схематическую вольтамперную характеристику (рис. 4), характерную для фотоэлектрических элементов, освещаемых светом, и экспериментально полученные вольтамперные характеристики, приведенные на рис. 2.

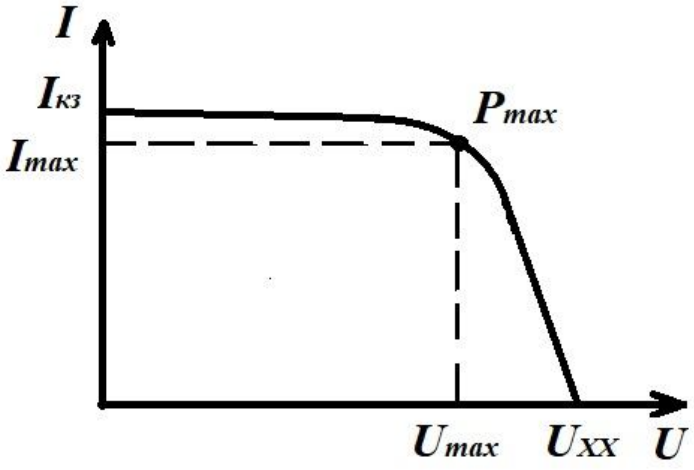


Рис. 4. Вольтамперная характеристика фотоэлемента с указанной на ней точкой максимальной мощности P_{max}.

Мощность падающего на солнечный модуль излучения***P(G)*** определяли из соотношения[1]:

$$P(G) = G \cdot S \cdot K_{зап} \cdot K_{проп}, \quad (4)$$

где ***G*** – мощность излучения лампы, Вт/м^2, приходящаяся на плоскую площадку модуля общей площадью ***S*** = 0,022 м^2, и имеющая защитный слой с коэффициентом пропускания$K_{проп}$ = 0,7 для данного устройства, о.е.;$K_{зап}$– коэффициент заполнения солнечного элемента, имеющий величину 0,98 для исследуемого солнечного модуля.

Результаты расчетов коэффициента полезного действия КПД солнечного модуля приведены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты расчетов КПД солнечного модуля

G, Вт/м2	100	200	400	800
$P_{СМ}(I)$, Вт	0,102	0,196	0,795	0,905
КПД (η), %	6,75	6,49	7,2	7,49

Полученные электрофизические характеристики свойственны исследуемому солнечному модулю и свидетельствуют об его эффективности в качестве составного элемента для солнечной батареи. Все параметры солнечного элемента изменяются с изменением температуры, интенсивности освещения и степени радиационного повреждения, а также сильно зависят от типа фотоэлементов, составляющих солнечный модуль.

1. Фалеев, Д.С. Возобновляемые и ресурсосберегающие источники энергии. учебное пособие для студентов вузов ж.-д. транспорта. – Изд. 5-е. – Хабаровск: Изд-во ДВГУПС, 2016.

2. да Роза, А. Возобновляемые источники энергии. Физико-технические основы / пер. с англ. – М.: ИД «Интеллект»; МЭИ, 2010.

УДК 621.9:519.8

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛН АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ РАЗЛИЧНЫМИ ТИПАМИ ИСТОЧНИКОВ В ПЛАСТИНЕ

Х.Х. Кхун, О.В. Башков, Зо Хейн

Комсомольский-на-Амуре государственный университет (г. Комсомольск-на-Амуре)

khonhanhtooaung@gmail.com

RESEARCH OF ACOUSTIC EMISSION WAVES GENERATED BY VARIOUS TYPES OF SOURCES IN A PLATE

Khun.H.X., O.V. Bashkov, Zo Hein

Komsomolsk-on-Amur State University (Komsomolsk-on-Amur)

khonhanhtooaung@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.194-198

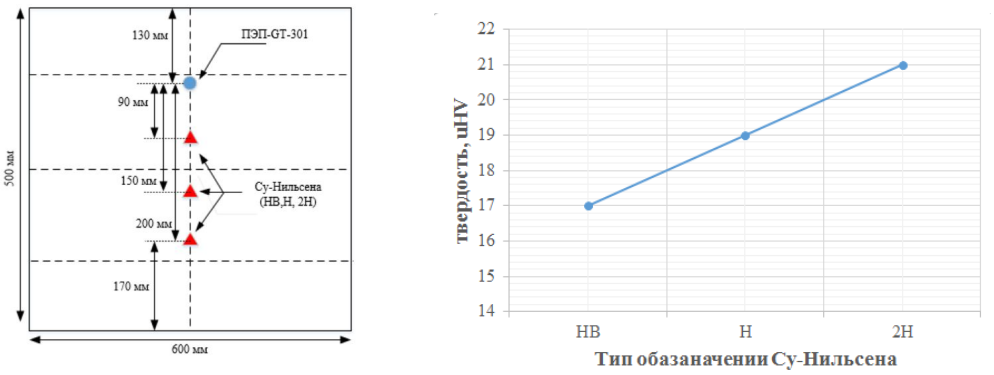
В данной работе представлены результаты анализа сигналов акустической эмиссии, регистрируемых при распространении акустических волн в тонкой металлической пластине. Источники возбуждаются разрушением механического карандаша (Су-Нильсен) с различной твердостью для моде-

лирования различных видов трещин. Для исследования и идентификации различных типов трещин в образце, в данном исследовании используется анализ на основе метода вейвлет-декомпозиции. Эти результаты могут быть использованы для установления связи между характеристиками акустических сигналов и параметрами разрушения структуры материала.

Благодаря развитию в области физики твердого тела, математики, технологий распознавания, сбора и обработки сигналов, появилась возможность изучать физико-механические свойства материалов, не разрушая его структура и состояние. При постоянно возрастающих требованиях к изделиям при строительстве трубопроводов, авиастроении, актуальным вопросом становится применение современных методов неразрушающего контроля для прогнозирования ресурса. Одним из эффективных методов является метод акустической эмиссии (АЭ). Метод АЭ использует информацию, в которой упругие волны генерируются энергией, выделяемой от локализованных источников или из-за микроструктурных изменений при эксплуатации или испытании объекта [1]. Зарегистрированные сигналы АЭ содержат значительный объем информации об источнике образования, среде распространения упругих волн и местоположении источника. Поэтому задачей АЭ становится извлечение полезной информации о типах источников и особенностях разрушения. Одним из решений является использование методов вейвлет-декомпозиции [2], которые позволяют идентифицировать различные типы трещин и особенности распространения упругих волн в образце. В работе [3] выполняется анализ основной моды антисимметричной и симметричной волны Лэмба для сигналов АЭ, зарегистрированных при распространения акустических волн в пластине из алюминиевого сплава Д16. Волны возбуждались единичным источником Су-Нильсена, при изломе карандаша твердостью НВ и 2Н.

Для проведения исследований была изготовлена пластина из алюминиевого сплава Д16. Размер пластины 500 мм×600 мм×1,8 мм. Излом грифеля карандаша (источник Су-Нильсена) на поверхности материала является стандартным инструментом, используемым в экспериментах как источник АЭ [4,5]. В работе [6] Г.Р. Маркус сообщил о важности понимания того, как различия в механических свойствах грифеля карандаша и его диаметра могут влиять на характер регистрируемых тестовых сигналов.

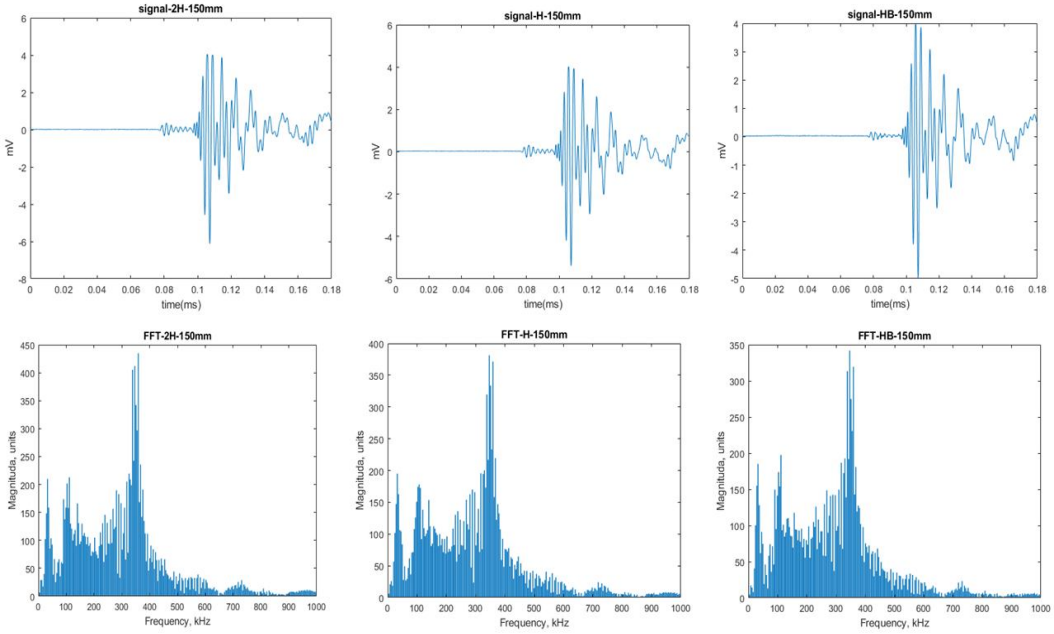
В этой работе разрушение грифеля карандаша различной твердости на поверхности материала используются с целью моделирования развития трещин различного происхождения в различных местах пластины. Для регистрации использовался пьезоэлектрический датчик (ПЭП-GT-301), который является специализированным широкополосным датчиком в диапазоне 50-550 кГц. Датчик был подключен к АЭ системе через предусилитель с коэффициентом усиления 40 дБ. Положения датчика и источников АЭ на поверхности пластины и зависимость твердости грифелей карандаша от их обозначений показаны на рис. 1.



а) б)

Рис. 1. Методика исследования: а) – схема расположения датчика и источников АЭ в пластине Д16; б) – зависимость твердости грифелей карандаша от их обозначений.

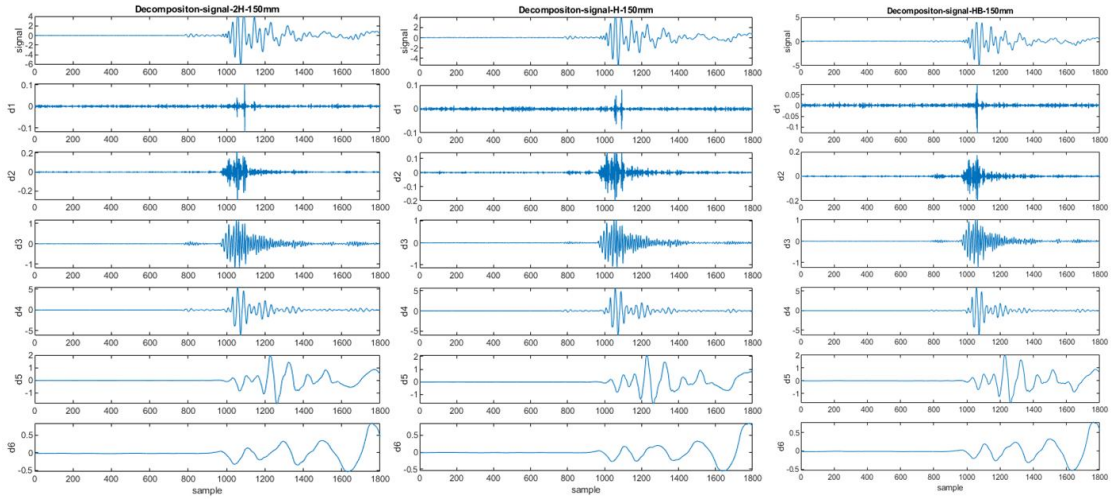
Сигнал и Фурье-спектр для источников АЭ, генерируемых при изломе карандашей с различной твердостью на расстоянии 150 мм, приведены на рис. 2.



(а) (б) (в)

Рис. 2. Регистрация сигналов АЭ 150 мм от датчиков с различной твердостью соответственно: а) – твердость 2Н; б) – твердость Н; в) – твердость НВ.

Из диаграмм можно отметить, что форма сигналов и спектры Фурье не очень отличаются друг от друга. Поэтому можно использовать метод вейвлет-декомпозиции для идентификации различных типов источников на основе энергии сигналов. Шесть уровней разложения на рис. 3.



(а) (б) (в)

Рис. 3. Вейвлет разложение сигнала АЭ, зарегистрированных на расстоянии 150 мм при изломе карандаша различной твердости: a) – 2H; b) – H; c) – HB.

Из декомпозиции сигнала рис. 3, декомпозиция второго уровня и третьего уровня сигналов более значимы, так как декомпозиции с большим значениям уровня разложения практически не различаются между собой. Декомпозиции второго и третьего уровня разложения имеют диапазон частот 750-1500 кГц. С целью классификации зарегистрированных источников, различающихся твердостью зоны разрушения, выполнили расчет энергии для декомпозиций второго и третьего уровня по формуле уравнения (1).

$$E_{АЭ} = \frac{1}{f_S}\sum x_i^2, . \qquad (1)$$

где $E_{АЭ}$ – энергия сигнала; f_S – частота дискретизации; x_i – индекс разложенного сигнала.

В результате расчета энергии декомпозиции сигналов АЭ для второго и третьего уровней разложения были построены диаграммы зависимости энергии от твердости источник разрушения для сигналов, зарегистрированных на различных расстояниях от источника (90мм, 150мм и 200мм) на рис.4.

(а) (б)

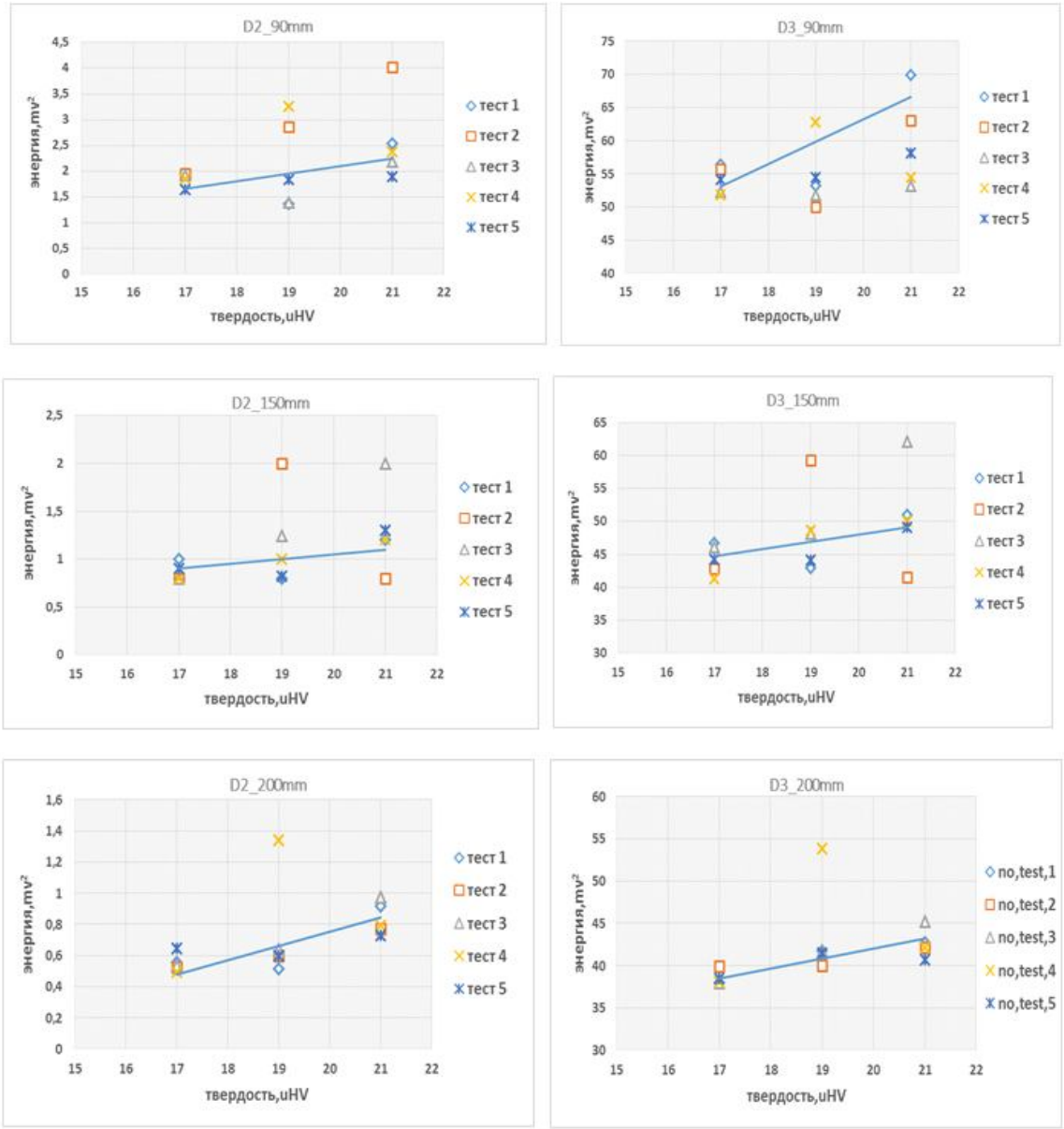


Рис. 4. Энергия разлагаемого сигнала АЭ с различными источниками:
(а) – разложение 2-го уровня; (б) – разложение 3-го уровня

При анализе было установлено, что с увеличением расстояния энергии каждой декомпозиции зарегистрированных сигналов снижается, увеличения твердости источника разрушения приводит к повышению энергии каждой декомпозиции.

Таким образом, при регистрации сигналов АЭ в пластине с целью идентификации различных типов источников можно использовать выделение отдельных частотных компонент сигнала при его вейвлет-декомпозиции.

В зависимости от размера пластины и вероятных типов источников могут быть выбраны декомпозиции сигналов АЭ с наибольшей информативностью в исследуемом частотном диапазоне. Для проведённого модельного эксперимента с источниками Су-Нильсена твердостью НВ, Н, 2Н на рас-

стояниях 90мм, 150мм, 200мм были установлены зависимости энергии декомпозиций для второго и третьего уровней вейвлет разложения.

1. Башков, О.В., Муравьёв, В.И., Лончаков, С.З., Фролов, А.В. Исследование дефектов-концентраторов напряжений по параметрам акустической эмиссии в процессе развития повреждений // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. – 2015. – Т. 58, № 12. – С. 912-918.

2. Воробьев, В.И., Грибунин, В.Г. Теория и практика вейвлет-преобразования.– С.Пб.: Изд-во Военного университета связи, 1999. – 206 с.

3. Khon, H., Bashkov, O.V., Zolotareva, S.V., Solovev, D.B. Modeling the propagation of elastic ultrasonic waves in isotropic and anisotropic materials when excited by various sources // Materials Science Forum. – 2018. – V. 945. – P. 926-931.

4. Nielsen. Acoustic Emission Source based on Pencil Lead Breaking // The Danish Welding Institute Publication: Copenhagen, Danmark. – 1980. – P. 15-18.

5. Hamstad, M.A. Acoustic Emission Signals Generated By Monopole (Pencil-Lead Break Versus Dipole Sources: Finite Element Modelling And Experiments // J. Acoustic Emission, – 2007. – V. 25. – P. 92-392.

6. Sause, G.R Markus. Investigation of Pencil-lead Breaks As Acoutic Emission Sources // J. Acoustic Emission. – 2011. – V. 29. – P. 184-196.

УДК 621.371/.372

О ВЛИЯНИИ СОЛНЕЧНОЙ АКТИВНОСТИ НА ФАЗУ ОНЧ СИГНАЛА. ТРАССА ЯПОНИЯ – ХАБАРОВСК

В.И. Нестеров

Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)

vinestor@mail.ru

ABOUT THE INFLUENCE OF SOLAR ACTIVITY ON THE VLF SIGNAL PHASE. ROAD JAPAN - KHABAROVSK

V.I. Nesterov

Pacific State University (Khabarovsk)

vinestor@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.198-201

Нижняя ионосфера (*D*-область на высотах 60-90 км) представляет наибольший интерес из всех слоев верхней атмосферы, поскольку в ней наблюдается большое число различных физических явлений. Проблема измерений электронной концентрации *N(h)* в данной области связана с большими техническими трудностями [1]. Этим объясняется существующими до сих пор противоречиями как на абсолютные величины концентрации электронов, так и на характер их вариаций в зависимости от солнечной активности. В этой же работе указано на противоречивость о знаке эффекта солнечной активности в нижней области *D*. В работе [2] указано, что амплитуда сигналов радиостанций на частоте 14.9 кГц определяется уровнем солнечной активности.

Одним из индикаторов солнечной активности является изменение числа солнечных пятен. На рис. 1 представлено изменение числа солнечных пятен за 1976-1990 гг., которые соответствуют

21-му циклу солнечной активности (начало в июне 1976 г. – конец сентябрь 1986 г.) и до максимума (июль 1989 г.) 22-го цикла (усредненные на месячном интервале). По оси абсцисс отложено число дней, начиная с 1 января 1976 года. Данные взяты из [3].

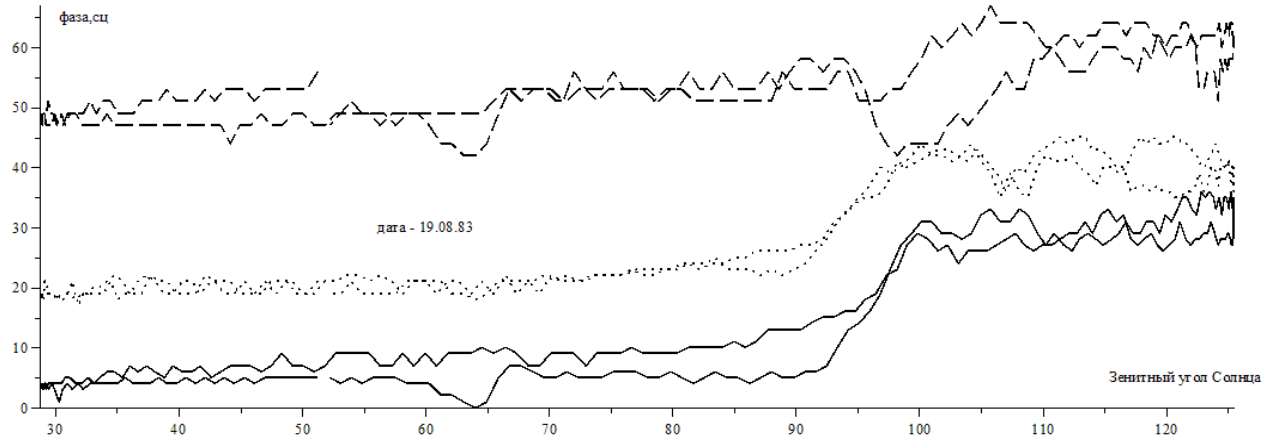


Рис. 1. Изменение числа солнечных пятен со временем.

В работах [4-6] отмечается о существовании в ионосфере слоя *С*, который создается галактическими космическими лучами (ГКЛ), модулируемыми солнечной активностью. Механизм модуляции объясняется ослаблением космических лучей солнечным ветром. В максимуме солнечной активности, когда средний поток солнечного ветра максимален, ГКЛ наиболее ослаблены. Поэтому концентрация электронов в «хвосте» слоя *С* наименьшая, а дальнее ОНЧ поле достигает максимума [4].

Анализу подвергались результаты приема фазы ОНЧ сигнала на трассе Япония – Хабаровск (длина – 1600 км, азимут – 14.9°) (изменение фазы для послевосходного всплеска также усреднены на месячном интервале). Азимут трассы показывает, что распространение сигнала радиоволн происходит с юга на север и происходит смена освещенности передающего и приемного пункта в различное время года.

На рис .2 представлено изменение фазы принимаемого сигнала от зенитного угла Солнца в средней точке трассы для 19 августа 1983 г. Как видно из рис .2, послевосходный всплеск фазы наблюдается в окрестностях солнечного угла Солнца 88°.

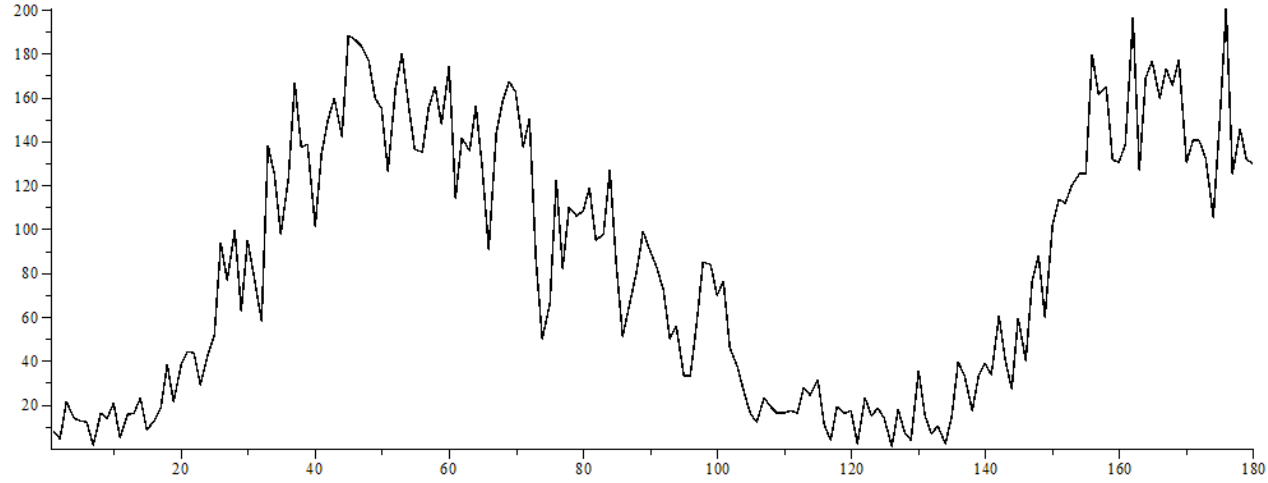


Рис. 2. Изменение фазы принимаемого сигнала от зенитного угла Солнца в средней точке трассы. Трасса Япония – Хабаровск. Сплошная линия – частота 10.2 кГц, точки – 11.05 кГц, штриховая – 13.6 кГц.

Измерения фазы проводились с интервалом 5 мин. Для вычисления функции между отчетами (связанными с более точным получением зенитного угла Солнца), была применена сплайн-

интерполяция. Одним из распространенных интерполяционных сплайнов является кубический, который был применен в данной работе при расчетах.

Полученные данные анализировались с 1976 г. по 1988 г. Для каждого усредненного отклонения фазы проводились вычисления зенитного угла Солнца в средней точке трассы, угла трасса – терминатор и брались из сборника Solar-Geophysical Data данные о количестве солнечных пятен, которые затем усреднялись (см. рис. 1). Знак минус при угле трасса – терминатор означает, что освещенность трассы начинается с приемной точки.

Для этой трассы уравнения регрессии описываются квадратичной функцией, параметры которых приведены в табл. 1.

Таблица 1

Уравнения регрессии фазы послевосходного всплеска относительно угла трасса-терминатор

Частота, кГц	Уравнение регрессии	Стандартное отклонение
10.2	$-0.0018\,\gamma^2 - 0.0232\gamma + 7.1737$	1.86 сц
11.05	$-0.0006\,\gamma^2 - 0.0656\gamma + 8.7621$	1.74 сц
13.6	$0.0002\,\gamma^2 - 0.0438\gamma + 5.9976$	1.64 сц

Как видно из табл. 1, коэффициенты при квадратичных членах достаточно малы, что показывает о том, что аппроксимирующие кривые можно представить и в линейном виде (стандартные отклонения чуть выше – 1.89, 1.75 и 1.64, соответственно).

Величины свободных членов, которые определяют максимальное отклонение величины фазы послевосходного всплеска, принимают наибольшее значение на частоте 11.05 кГц.

На рис. 3 приведены усредненные значения отклонения фазы послевосходного всплеска в зависимости от угла трасса-терминатор и аппроксимирующие кривые для соответствующих частот.

Наибольшее отклонение фазы наблюдается у частоты 11.05 кГц и наименьшее – у частоты 13.6 кГц.

В табл. 2 приведены коэффициенты корреляции между рассматриваемыми параметрами.

Таблица 2

Коэффициенты корреляции для трассы Япония – Хабаровск

	10.2 кГц	11.05 кГц	13.6 кГц
$\Delta\varphi - \chi$	0.41744	0.54322	0.41973
$\Delta\varphi - \gamma$	0.57992	0.63217	0.35535
$\Delta\varphi$ - W	-0.30653	-0.15696	-0.00869

Условные обозначения: $\Delta\varphi$ – отклонение фазы послевосходного всплеска (усредненное значение); χ – зенитный угол Солнца в средней точке трассы; γ – угол трасса-терминатор; W – число солнечных пятен.

Как видно из табл. 2, наибольший коэффициент корреляции наблюдается между зависимостью отклонения фазы послевосходного всплеска и угла трасса-терминатор (за исключением частоты 13.6 кГц) причем по значениям этих коэффициентов можно говорить о какой-то зависимости между этими параметрами.

По значениям коэффициента корреляции между отклонением фазы и средним значением числа Вольфа (солнечных пятен), наоборот, нельзя установить какую-либо функциональную зависимость.

Это можно говорить о том, что нет зависимости отклонения фазы послевосходного всплеска от солнечной активности. Для уточнения этого положения, по нашему мнению, необходимо провести более детальный анализ, т.е. расчеты не по усредненнным значениям исследуемых параметров, а по непосредственно принимаемым величинам этих же параметров на каждый день.

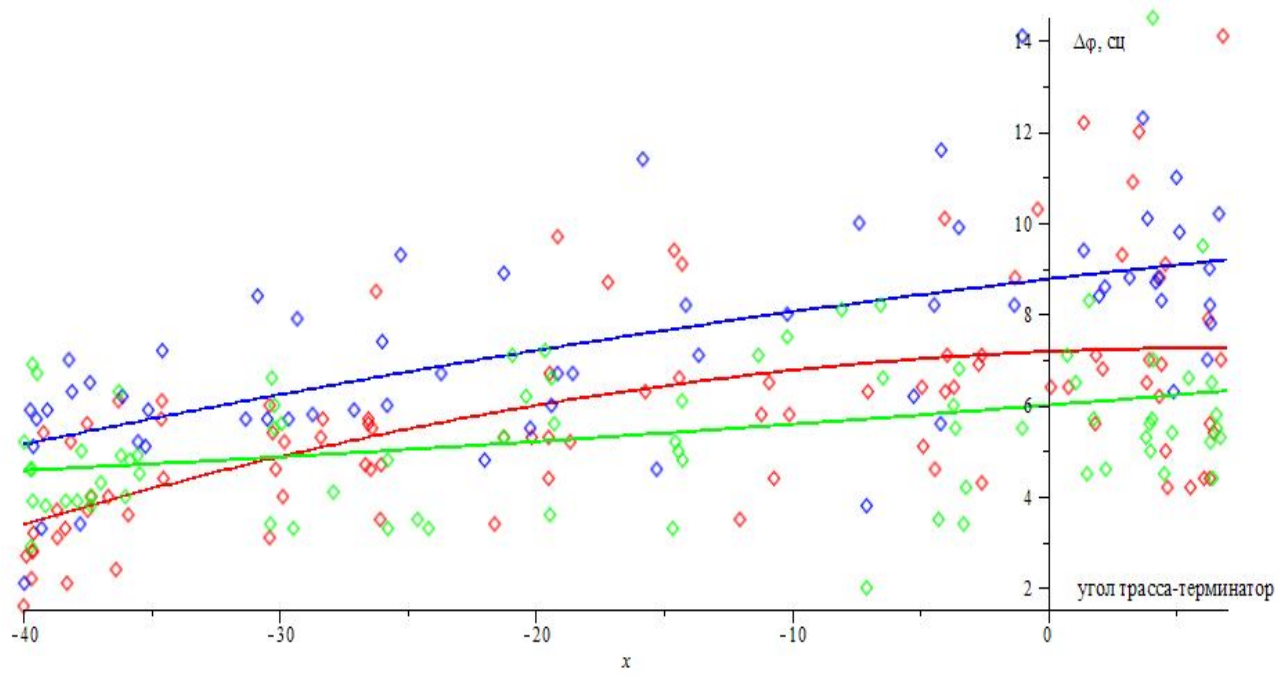


Рис. 3. Зависимость усредненной фазы послевосходного всплеска от угла трасса – терминатор. Красным – частота 10,2 кГц, синим – 11.05 кГц, зеленым – 13.6 кГц.

1. Смирнова, Н.В. Эффекты солнечной активности в области *D* ионосферы / Н.В. Смирнова, А.Д. Данилов // Геомагнетизм и аэрономия. – 1988. – Т. 38, № 3. – С. 92-101.

2. Корсаков, А.А. Сезонная вариация амплитуды сигналов ОНЧ радиостанций Новосибирск и Хабаровск при регистрации в Якутске в течение 2009-2016 гг. / А.А. Корсаков, Е.А. Павлов, В.И. Козлов // Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Амосова. – Якутск: Изд-во СВФУ. – 2018. – №4 (66). – С. 50-60.

3. Solar-Geophysical Data. Jan. 1976, № 377. PtI – Dec.1990. №556. PtI.

4. Краснушкин, П.Е. Влияние солнечного ветра на слой *C* земной ионосферы // Геомагнетизм и аэрономия. – 1966. – Т.6, №3. – С.602-604.

5. Байбулатов, Р.Б., Определение дневного профиля электронной концентрации слоев *C* и *D* ионосферы по измерениям наземных полей сверхдлинных радиоволн и профилю атмосферного давления / Р.Б.Байбулатов, П.Е. Краснушкин // Геомагнетизм и аэрономия. – 1966. – Т. 6, № 6. – С. 1051-1060.

6. Беленький, М.И., Определение параметров С-слоя нижней дневной ионосферы по данным о распространении СДВ и по детальной модели ионной химии / М.И. Беленький, А.Б. Орлов, Г.А. Петрова, А.Н. Уваров // XXI Всероссийская научная конференция «Распространение радиоволн» 25 – 27 мая 2005 г. – Йошкар-Ола. – 2005. – Т. 1. – С.407-411.

УДК 620.179.163

АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛАСТОМЕРОВ

В.И. Римлянд, К.А. Драчев
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
riml@pnu.edu.ru

ACOUSTIC PROPERTIES OF ELASTOMERS

V.I. Rimland, K.A. Drachev
Pacific State University (Khabarovsk)
riml@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.202-205

Среди большого многообразия полимерных материалов можно выделить большой класс эластомеров.

Эластомеры обладают высокоэластическими свойствами в широком интервале температур. К эластомерам относятся различные виды резин. Интерес к акустическим свойствам эластомеров и в частности резин связан с их применением. В акустическом диапазоне резины используются как звукопоглощающие материалы. В ультразвуковом диапазоне резины используются в различном качестве в гидроакустике. Наиболее оптимальные рабочие частоты гидролокаторов 50-200 кГц. Применяются и другие частоты от 20 кГц до 700 кГц (увеличение частоты позволяет увеличить разрешающую способность гидролокатора [1]). Соответственно необходимо знать акустические свойства используемых материалов различного назначения при температурах использования гидроакустических систем 0-40 ^{o}C. Резиноподобные материалы используются и в качестве фантомов внутренних органов человека для анализа работы аппаратов УЗИ в медицине [2]. В системах медицинской ультразвуковой диагностики обычно используют частоты от 2 до 29 МГц. Возможны и другие области применения эластомеров (резин), где требуется знание акустических свойств в широком интервале температур.

В настоящее время опубликовано большое количество работ, посвященных изучению акустических свойств эластомеров. При этом измеряются скорость звука, акустический импеданс, коэффициент поглощения применительно к использованию результатов в гидроакустике. В большинстве работ используется методика косвенного измерения акустических параметров в воде: излучатель и приемник ультразвука находятся в воде и между ними помещается образец резины (лист); производится сравнение акустического сигнала без образца и с образцом [3,4]. Данная методика позволяет проводит измерения только при одной температуре, или в относительно узком интервале [5].

Целью данной работы является исследование температурных зависимостей скорости звука c и коэффициента затухания α двух образцов резины в интервале от -24°C до 98°C. Существенно отличающихся по своим механическим свойствам. Первый образец можно условно отнести к «жёсткой» резине, второй (ОР2) к «мягкой». Образец ОР1 соответствует резине марки 122, ОР2 -3311 [6]. Предварительно авторами были проведены измерения плотности образцов ρ (методом Архимеда) и статического модуля Юнга $E_{ст}$, который измерялся методом прогиба. Результаты: ОР1 – $E_{ст}$ = 8,1 МПа, ρ = 1563 кг/м^3; ОР2 – $E_{ст}$ = 1,2 МПа, ρ = 1205 кг/м^3. В соответствие с графиком приведенном в работе [7] и исходя из значений статического упругого модуля, можно оценить твердость образцов по Шору. Для ОР1 твердость по Шору А примерно равна 82 ед., для ОР2 – 40 ед.

Измерения скорости звука

В отличие от работ, в которых измерения скорости и затухания проводились в воде, нами использовался метод непосредственного контакта образца с излучателем и приемником ультразвука. Образец помещался между прямыми совмещенными пьезопреобразователями с рабочей частотой 1,25 МГц. Скорость звука измерялась на основе измерения времени прохождения ультразвукового импульса (УИ) от излучателя до приемника t по формуле:

$$c = \frac{l}{t - t_0}, \qquad (1)$$

где l – расстояние между датчиками, t_0 – время аппаратной задержки сигнала,

В качестве зондирующего импульса использовался радиоимпульс частотой заполнения от 200 до 1000 кГц амплитудой 10 В, также измерения проводились с одиночным импульсом амплитудой 10 В и длительностью 1 мкс. Соответствующие аппаратура и методика измерений достаточно подробно описаны в работах [8, 9]. Расстояние l равнялось толщине образцов и составляло для ОР1 2,5 см, для ОР2 – 2,1 см, t_0 = 0,28 мкс. Время t определялось как превышение первой полуволной пришедшего УИ над уровнем фона на 10%. Для акустического контакта на поверхность образцов наносилась эмиссионная смазка. Дополнительные измерения и теоретические оценки на основе работы [9], показали, что скорость звука измерялась с погрешностью ± 10 м/с.

Для проведения измерений при температуре отличной от комнатной образец предварительно охлаждался или нагревался до заданной температуры, а затем помещался между пьездатчиками измерительной системы. Температура образца контролировалась термопарой, установленной внутри образца. Данная методика была использована в связи с тем, что необходимо было избежать нагрева пьезодатчиков. Предварительно были проведены одновременные измерения температуры поверхности $T_п$ внутреннего объема $T_{об}$ образцов в течении времени, соответствующего времени установки образца и одного измерения (не более 2 мин.). Данные измерения показали, что при отсутствии теплоизоляции между внешней поверхность образца и воздухом, максимальная разность $T_{об}$ - $T_п$ при $T_{об}$ = 98 °С составляла 1,7°С; при наличии теплоизоляции в виде внешнего экрана из слоя поролона толщиной 1 см, разность $T_{об}$ - $T_п$ при $T_{об}$ = 99°С составляла 0,4°С. Ниже везде приведены значения температуры, равные $T_{об}$.

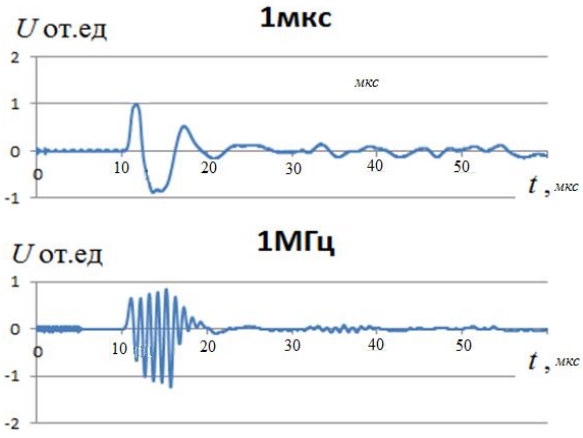


Рис. 1. Осциллограммы сигналов при $T_{об}$ = -24 °С для ОР1.

На рис. 1 приведены осциллограммы сигналов для одиночного возбуждающего импульса и радиоимпульса с частотой заполнения 1 МГц при $T_{об}$ = -24 °С (ОР1).

Из рисунка видно, что амплитуда УИ прошедшего от излучателя до приемника достаточно высокая. Однако, переотражённый импульс прошедший расстояние 3l ($t \approx$ 30мкс) имеет не большую амплитуду, что значительно увеличивает погрешность измерения коэффициента поглощения (см. ниже).

В табл. 1 приведены значения c для исследуемых образцов при различных температурах. На рис. 2 приведены зависимости скорости от температуры для частоты заполнения радиоимпульса 500 кГц. Как видно из таблицы и рисунка, с ростом температуры скорость звука достаточно быстро уменьшается

Таблица 1

Скорость продольной волны в образцах

$T_{об}$	ОР1 *c*, м/с				ОР2 *c*, м/с			
	1мкс	200 кГц	500 кГц	1 МГц	1мкс	200 кГц	500кГц	1МГц
-24	2527	2597	2592	2519	1676	1708	1704	1689
+2	2451	2505	2496	2472	1612	1648	1642	1634
+22	2122	2144	2138	2124	1511	1519	1512	1495
+41	1813	1835	1829	1821	1423	1429	1431	1426
+60	1788	1776	1769	1771	1343	1337	1332	1336
+98	1688	1714	1695	1717	1315	1296	1287	1298

При этом для обоих образцов наблюдается нелинейный характер изменения. Для более «жесткого» образца ОР1 значения *c* изменяются значительно быстрее, отношение *c* (-24)/ *c* (98) равно 1,53, для ОР1 1,32. Аналогичные зависимости наблюдаются и для других частот и одиночного импульса. Изменение скорости от частоты фактически не наблюдается. Это связано, видимо, с методикой измерения – по превышению «началом» УИ уровня фона, т.е. на значения *c* влияет крутизна переднего фронта импульса, а не частота заполнения радиоимпульса.

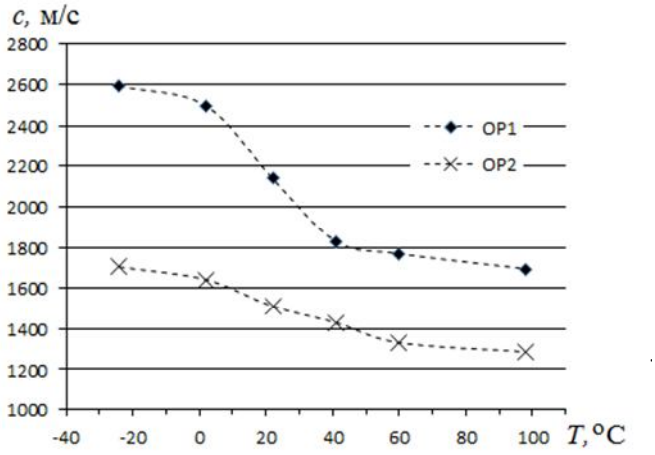


Рис. 2. Зависимость скорости звука от температуры для частоты 500 кГц.

На основе значений скорости звука для продольных волн были рассчитаны значения динамического модуля Юнга по формуле [10]:

$$E = \frac{c^2 \rho (1+\upsilon)(1-2\upsilon)}{1-\upsilon}, \qquad (2)$$

где υ – коэффициент Пуассона. Значение коэффициента Пуассона бралось равным 0,48. Данное значение бралось средним из справочных данных. Рассчитанные значения E изменяются пропорционально c^2: для ОР1 в интервале от 1130 МПА (-24°С) до 520 МПА (98°С) и ОР2 от 340 МПА (-24°С) до 230 МПА (98°С). Полученные значения можно только условно назвать динамическим модуле, так как согласно ГОСТу, динамический модуль определяется в результате механических испытаний при изменении нагрузки с частой около 500 Гц [12, 13]. На данных частотах динамический модуль примерно 10 раз больше статического. Полученные нами значения примерно в 100-200 раз превышают значения статических модулей. Численно они согласуются с результатами работы [5].

Измерения коэффициента затухания

Значения коэффициента затухания (α) рассчитывались по формуле

$$\alpha = \frac{20}{l_1} \log_{10} \frac{U_2}{U_1}, \qquad (3)$$

где U_1 и U_2 амплитуды первого и второго (переотражённого) импульсов соответственно, l_1 – удвоенная толщина образца. Значения α для разных температур и частот приведены в табл. 2.

Как указывалось выше, α измеряется с большой погрешность, вследствие малой величины U_2, второй фактор это изменение условий измерений при установке образца в измерительную систему для каждой температуры – изменяется контакт пьезопреобразователь-образец. Фактически погрешность по нашим оценкам составляет от 30 до 50 % измеренных значений α. В целом, это говорит о

необходимости изменения методики измерения коэффициента затухания. Из полученных значений α можно сделать вывод о росте коэффициента затухания с частотой. Температурные зависимости α не позволяют сделать однозначных выводов в виду большой погрешности измерений.

Таблица 2

Коэффициент затухания продольной волны в образцах

$T_{об}$	ОР1 α дБ/м				ОР2 α дБ/м			
	1мкс	200 кГц	500 кГц	1 МГц	1 мкс	200 кГц	500 кГц	1 МГц
-24	321	381	414	436	598	605	608	627
+2	305	301	399	389	442	480	535	535
+22	386	401	420	405	365	420	444	431
+41	313	332	246	366	420	439	478	698
+60	321	337	307	294	484	407	455	851
+98	482	417	326	496	393	377	331	732

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00295\19.

1. Лекомцев В. Гидроакустические средства визуализации для необитаемых подводных аппаратов. / В. Лекомцев // Современные технологии автоматизации. - 2013. - № 3. - С. 78-83.

2. Cafarelli A. Speed of sound in rubber-based materials for ultrasonic phantoms./ A. Cafarelli, P. Miloro, A. Verbeni, M. Carbone, A. Menciassi. // Journal of Ultrasound. - Vol. 19, - № 4, - pp 251–256.

3. Garu P. K. Acoustic & Mechanical Properties of Neoprene Rubber for Encapsulation of Underwater TransducersInternational / Pradeep Kumar Garu, Tapan Kumar Chaki // Journal of Scientific Engineering and Technology - 2012. - Vol. 1, - № 5, - pp 231-237.

4. Kyung-Il Jung. Acoustic Properties of Nitrile Butadiene Rubber for Underwater Applications / Kyung-Il Jung, Suk Wang Yoon, Kuk Young Cho, Jung-Ki Park. // Journal of Applied Polymer Science. - 2002. - Vol. 85, -pp 2764–2771.

5. H. Peter H. Motta. Acoustic and dynamic mechanical properties of a polyurethane rubber. / Peter H. Motta, C. Michael Roland // Journal of the Acoustical Society of America - Vol. 111, - № 4, - pp 1782-90.

6. Руководство по проектированию виброизоляции машин и оборудования. / Москва, Стройиздат. 1972, 160с.

7. Каталог «Simrit». Гл. 16 Специальные уплотнения: мембраны. - С 20.

8. Драчёв К. А. Автоматизированная измерительная система для проведения акустических измерений. / К. А. Драчёв, В. И. Римлянд, В. В. Савченко // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2017. – №1(44). – С. 13-20.

9. Драчёв К.А. Измерения акустических параметров с использованием радиоимпульса. / Драчёв К.А. В.И. Римлянд В.И. // Измерительная техника. – 2017. – № 6. – С. 60-64.

10. Гринченко В. Т. Основы акустики : учебное пособие / В. Т. Гринченко, И. В. Вовк, В. Т. Мацыпура ; перевод с укр. – Киев: Наукова думка ; Киев: ИГМ НАНУ, 2009. – 867 с.

11. Потапов А.И. Неразрушающий контроль конструкций из материалов / А.И. Потапов, Ф.П. Пеккер – Липецк, «Машиностроение», 1977.-157 с.

12. ГОСТ 23326-78 Резина. Методы динамических испытаний. Общие требования (с Изменением N 1).

13. ГОСТ 10828-75 Резина. Метод определения динамического модуля и модуля внутреннего трения при знакопеременном изгибе с вращением (с Изменением N 1).

УДК 535-15, 538.958

МАЛОГАБАРИТНЫЙ ИМПУЛЬСНЫЙ НАНОСЕКУНДНЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ ИК-ДИАПАЗОНА

А.В. Филимонов[1], С.Н. Вайнштейн [2], В.Е. Земляков[3]
[1]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (Санкт-Петербург)
[2]Университет Оулу, Оулу (Финляндия)
[3]Московский институт электронной техники (Зеленоград)
filimonov@rphf.spbstu.ru

SMALL PULSE NANOSECOND IR RADIATOR

A.V Filimonov[1], S.N. Weinstein[2], V.E. Countrymen[3]
[1]St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great, St. Petersburg
[2]University of Oulu, Oulu, Finland
[3]Moscow Institute of Electronic Technology, Zelenograd, Moscow, Russia
filimonov@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.206-209

Работа посвящена разработке технологии, созданию и оптимизации параметров миниатюрного импульсного оптического излучателя на инфракрасном лазерном диоде с длительностью импульса порядка одной наносекунды и импульсной мощностью более 40 Вт на основе эффекта высокоэффективного лавинного переключения в биполярных кремниевых транзисторах и конструктивных, компонентных и схемотехнических решений, позволяющих контролировать переходные процессы.

Введение

В современных оптических лидарах дальнего действия, работающих в ближнем ИК-диапазоне, используются передатчики с импульсной модуляцией на лазерных диодах, способные испускать оптические импульсы пиковой мощностью до 40 Вт продолжительностью 3-10 нс. Термин лидар (от англ. Light Detection and Ranging – LIDAR) относится к системам дальнометрии, работающим в оптическом диапазоне и использующим в качестве источника излучения газовый лазер или лазерный диод. Продолжительность импульсов более 3 нс является существенным ограничением для таких задач, как увеличение точности оптической дальнометрии.

Цель данной работы – продемонстрировать возможность создания миниатюрного импульсного оптического излучателя на инфракрасном лазерном диоде с длительностью импульса порядка одной наносекунды и импульсной мощностью более 40 Вт на основе эффекта высокоэффективного лавинного переключения в биполярных кремниевых транзисторах и конструктивных, компонентных и схемотехнических решений, позволяющих контролировать переходные процессы. Подобные устройства находят сегодня широкое применение в автомобиле- и авиастроении, судостроении, в области оптической локации, автоматических системах распознавания, системах технического зрения, различных областях электронной техники.

Для накачки широкополосных лазерных диодов высокой мощности, используемых в лазерных лидарах, есть необходимость генерировать импульсы тока продолжительностью в несколько наносекунд и амплитудой ~ 10 ÷ 100 А [1,2]. На наш взгляд, наилучшее из доступных решений этой

проблемы связано с использованием высоковольтных (~ 300 В) лавинных транзисторов [3] для оптических импульсов продолжительностью 3-10 нс из лазерных диодов мощностью 10-100 Вт. Такая продолжительность оптического импульса становится ограничением для лидаров высокой (дециметровой) точности, если задачей является максимальное увеличение расстояния дальнометрии (до нескольких километров и более) [4,5]. Действительно, диапазон частот принимающих каналов на основе лавинных детекторов на сегодняшний день выходит за пределы 300 МГц, что позволяет обнаруживать оптические импульсы продолжительностью в 1 нс без заметного уменьшения чувствительности детектора и выхода за критический предел уровня шума. Главная проблема заключается в наносекундных сильноточных (10-100 А) драйверах. Подобные устройства представлены на рынке [6], однако высокая цена и большой размер делает их использование в реальных условиях весьма затруднительным.

Эксперимент и обсуждение

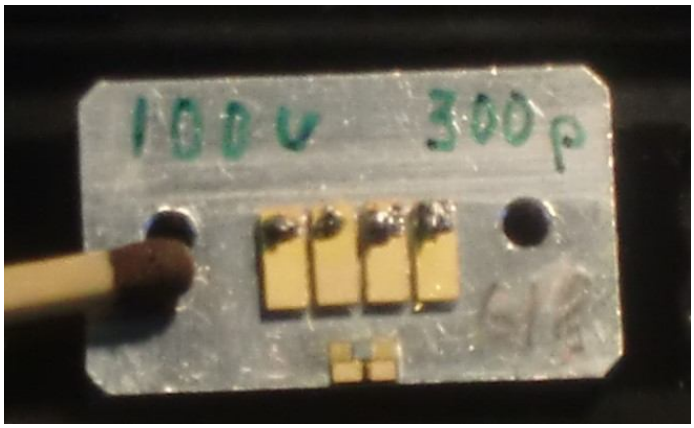


Рис.1. Лабораторный образец модуля оптического излучателя в сборе.

Ранее нами была предложена конструкция миниатюрного наносекундного излучателя для оптического радара [7]. Лабораторный образец излучателя представлена на рис. 1.

При измерении расстояния до объекта, имеется разброс результатов разовых замеров и точное определение расстояния требует усреднения результатов. Точность повышается как квадратный корень из числа измерений. Соответственно, работа радара в реальном времени требует достаточно высокой частоты повторения измерений. Основным фактором, ограничивающим частоту работы лавинного переключателя, является возникновение сильно локализованной области нагрева, и допустимая частота повторения импульсов определяется временем тепловой диффузии от этой микронной области до теплоотвода.

В ранее разработанных модулях [7] это время составляет порядка 1 мс и гарантированная частота работы модуля составляет не более 0.5 кГц. Требовалось решить задачу значительного увеличения частоты, по крайней мере до 10 кГц.

Установлено, что ни один из представленных на рынке промышленных конденсаторов не подходит в полной мере для наносекундных лазерных передатчиков высокой мощности вследствие неудовлетворительного качества диэлектрика или высокой паразитной индуктивности, связанной с большими геометрическими размерами, не позволяющими минимизировать паразитную индукивность конструкции излучателя. Это потребовало разработки оригинального конденсатора (рис. 2).

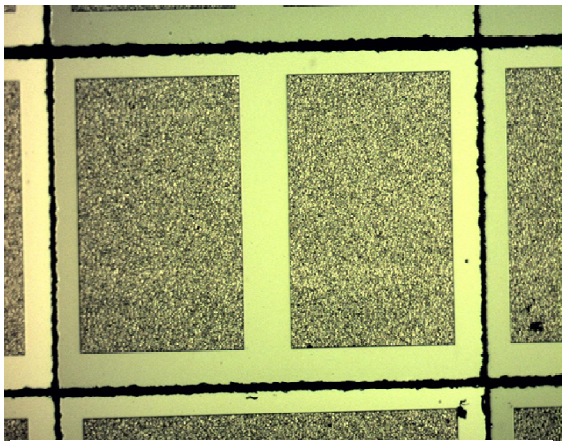


Рис.2. Фото чипа конденсатора с резом на кремниевой пластине, зготовленного по технологии PECVD. Диэлектрик – нитрид кремния.

Результаты эксперимента по исследованию возможности уменьшения продолжительности импульса тока и увеличения амплитуды импульса приведены на рис. 3. Пунктирная (расчётная) кривая сравнивается с результатами экспериментов, непрерывная кривая отражает ожидаемые значения для переключателя с бесконечно малым временем переключения.

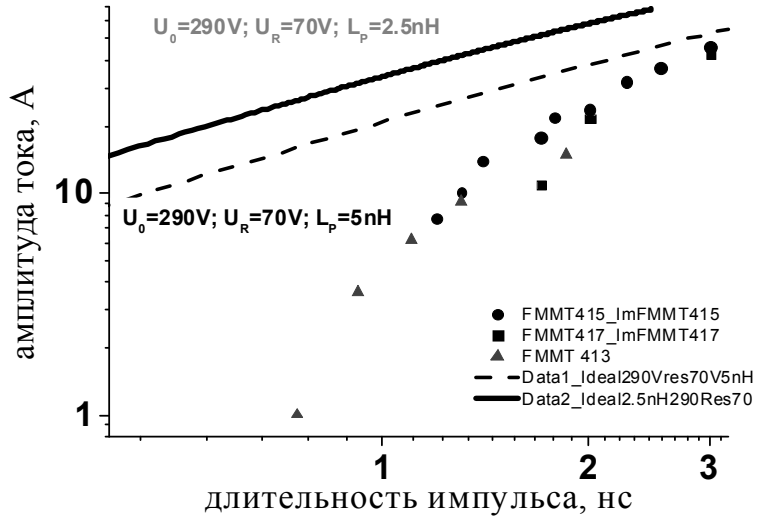


Рис. 3. Зависимость пикового тока от продолжительности импульса, измеренная с помощью оригинальных конденсаторов, контура с суммарной паразитной индуктивностью в 5 нГ и различных промышленных лавинных транзисторов моделей FMMT 415, 413 и 417 (пр-во Zetex Semiconductors).

Эти достаточно приблизительные, но наглядные подсчеты показывают основные ограничения при попытке генерации более коротких импульсов с увеличенной амплитудой. Конечно, в первую очередь требуется уменьшить паразитную индуктивность, внеся изменения в компоновку. Далее главным ограничением становится скорость переключения лавинного транзистора [8].

Установлено, что основным фактором, ограничивающим частотный диапазон работы лавинного оптического переключателя, является механизм высокочастотной деградации. Сразу после однократного переключения температура в горячей области (поперечное сечение несколько мкм), находящейся на границе коллектор – субколлектор достигает 700-800 К. Остывание через подложку толщиной 200 мкм происходит с характерным временем тепловой диффузии несколько десятых миллисекунды (~ 0.4 мс).

Это означает, что достаточно полное остывание, не допускающее постепенное накопление тепла от импульса к импульсу, требует несколько таких постоянных времени (> 1 мс), а следовательно 1 кГц является верхней границей допустимого диапазона рабочих частот излучателя. Если следующий импульс приходит раньше, чем несколько постоянных времени тепловой диффузии, начинается суммирование тепла в области пробоя, накопление тепла в горячей области, которое через некоторое время (порядка 105 импульсов) доведет температуру в этой области до тепловой деструкции кремния вблизи границы коллектор - субколлектор. Еще раньше деградация прибора возникнет из-за теплового шнура. После переключения прибора напряжение на нем начнет нарастать практически с нуля, стремясь через мс или несколько раньше достичь напряжения источника питания. В результате, на еще неостывшем приборе к «расплывающейся» и постепенно остывающей горячей области начнет прикладываться напряжение, в то время как носители в проводящем канале еще не рекомбинировали. Следовательно, начнется дополнительный нагрев всего канала, препятствующий полному остыванию горячей области. В этой работе проблема надежности работы переключателя на частотах до 10 кГц решается путем устранения дополнительного механизма разогрева горячей зоны и канала переключения между наносекундными импульсами. Схемотехнически транзистор перед моментом переключения отключается от источника напряжения, и после наносекундного токового импульса начинается сферическое растекание тепла от горячей области и вымирание неравновесных носителей. В итоге, перед приходом следующего импульса запуска все носители вымерли, а горячая зона успела существенно остыть (насколько позволила тепловая диффузия через подложку). Этот подход не устраняет,

разумеется, проблему остывания горячей области через подложку, но устраняет очень нежелательный механизм дополнительного разогрева, что позволило увеличить рабочую частоту почти на порядок.

Заключение

Разработана и отлажена технология создания микросборки лазерного излучателя с основными характеристиками:

- Длина волны: 900 nm
- Режим работы лазера: импульсный
- Длительность импульса: 1 нс
- Частота повторения импульсов: до 10 кГц с перспективой до 0.4 МГц
- Оптическая мощность: 40 Вт
- Размер сборки 2 х 1 мм2
- Размер излучателя: 30 мкм х 100 мкм.

Дальнейшее увеличение частоты возможно при условии уменьшения толщины транзисторного кристалла. Уменьшение толщины приводит к квадратичной зависимости рабочей частоты переключения оптического драйвера, то есть утонение подложки в два - три раза позволило бы увеличить частоту в четыре -девять раз, а уменьшение расстояния от границы коллектора до теплоотвода специальными технологическими способами до ~ 10 мкм могло бы в принципе позволить повысить рабочую частоту по крайней мере до 0.1 – 1 МГц.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и образования РФ, проект № 11.5861.2017/БЧ.

1. Biernat, A., Kompa, G. Powerful picosecond laser pulses enabling high – resolution pulsed laser radar // J. Optics. – 1998. – Vol. 29. – P. 225-228.

2. Kilpela, A., Kostamovaara, J. Laser pulser for a time-of-flight laser radar // Rev. Sci. Instr. – 1997. – Vol. 68. – P. 2253-2258.

3. Vainshtein, S.N., Duan, G., Filimonov, A.V., Kostamovaara J.T. Switching mechanisms triggered by a collector voltage ramp in avalanche transistors with short-connected base and emitter // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2016. – Vol. 63, Iss. 8. – P. 3044-3048.

4. Herden, W.B. Application of avalanche transistors to circuits with a long mean time to failure // IEEE Trans. Instrum. Meas. – 1976. Vol. IM-25, № 2. – P. 152-160.

5. Huikari, J.M.T., Avrutin, E.A., Ryvkin, B.S., Nissinen, J.J., Kostamovaara J.T. High-Energy picosecond pulse generation by gain switching in asymmetric waveguide structure multiple quantum well lasers // IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron.– 2015. – Vol. 21, Iss. 6. – Art. no. 762 1501206.

6. FID GmbH, сайт: http://www.fidtechnology.com.

7. Filimonov, A.V., Zemlyakov, V.E., Egorkin, V.I., Maslevtsov, A.V., Wurz, M.C., Vainshtein, S.N. Nanosecond miniature transmitters for pulsed optical radars // Lecture Notes in Computer Science. – 2017. – Vol. 10531 LNCS. P. 490-497

S. Vainshtein, V. Zemlyakov, V. Egorkin, A. Maslevtsov, A. Filimonov. Miniature high-power nanosecond laser diode transmitters using the simplest possible avalanche drivers // IEEE Transactions on Power Electronics. 2019. – Vol. 34, Iss. 4. – P. 3689-3699.

Секция 6

Физическое образование

УДК 53:075.8;378

ЭЛЕМЕНТЫ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ СТУДЕНТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

Е.А. Голышева[1], О.Н. Пушкина[2], С.В. Ланкин[2]
[1]Новосибирский государственный университет (г. Новосибирск)
[2]Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
lenok93@mail.ru

ELEMENTS OF STOCHASTIC TRAINING OF STUDENTS IN THE STUDY OF MOLECULAR PHYSICS

E.A. Golysheva[1], O.N. Pushkina[2], S.V. Lankin[2]
[1]Novosibirsk State University (Novosibirsk)
[2]Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
lenok93@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.210-214

Анализ учебных планов многих Российских университетов показывает, что при построении учебных курсов по физике не всегда учитываются принципы преемственности содержательной компоненты образования, благодаря которым студенты могли бы постепенно и логично усваивать новые объемы информации и наращивать каркас знаний. Физика – дисциплина, насыщенная сложным математическим содержанием. Не является исключением и раздел «Молекулярная физика». Для его усвоения требуется владение обширным математическим аппаратом: умение дифференцировать и интегрировать, а также понимание статистической сущности изучаемых явлений. В большинстве вузов курс молекулярной физики изучается на первом курсе, когда еще не до конца изучены методы математического анализа, а о статистике студенты пока не имеют представления. Теория вероятностей и математическая статистика изучаются чаще всего на третьем курсе. Школьные знания из области теории вероятностей и математической статистики являются недостаточными для понимания сути физических явлений. В большинстве школьных учебников по математике отсутствуют понятия дисперсии, среднего квадратического отклонения, законов распределения вероятностей.

Таким образом, в процессе изучения молекулярной физики необходимо уделять внимание вопросам теории вероятностей и математической статистики: необходимо проводить короткие математические беседы на дополнительных консультациях или на аудиторных занятиях (либо в начале, либо в конце занятия), задавать на дом небольшие математические задания, выполнение которых поможет в решении физических задач. Учебников по молекулярной физике и по теории вероятностей очень много, однако мы считаем, что лучшими для качественной подготовки студентов являются учебники Е.И. Бабаджана, И.В. Радченко, И.В. Савельева, Д.В. Сивухина, В. Феллера [1-5].

При изучении распределений Максвелла и Больцмана, явлений переноса, второго начала термодинамики [2,4] необходимо повторить известные из школьного курса математики определения и основные теоремы теории вероятностей, но уже в отношении физических явлений:

1) определение вероятности реализации какого-либо состояния произвольной системы, если состояния данной системы образуют дискретный ряд, через отношение числа измерений, которые дают это состояние к числу всех измерений или как отношение времени, в течение которого система находилась в этом состоянии ко всему времени измерений (здесь предполагается, что измерения проводятся через некоторый промежуток времени);

2) определение среднего;

3) теорему сложения вероятностей для несовместных событий и теорему умножения вероятностей для независимых событий.

Повторение основных понятий целесообразно осуществлять через элементарные примеры. Например, можно задать вопрос о том, как определить средний размер ноги у студентов группы; обсудить, что для решения было бы удобно сначала записать, у скольких студентов определенный размер ноги, что позволит перейти к следующему виду определения среднего:

$$\tilde{x} = \frac{\sum_i^N n_i x_i}{N} = \frac{\sum_i^N n_i}{N} x_i, \qquad (1)$$

где n_i – число элементов, имеющих значение x_i; i пробегает группы элементов, рассортированных по значениям; N – число всех объектов системы. Далее можно опять вернуться к задаче со средним размером ноги, однако теперь необходимо найти способ рассчитать средний размер ноги студентов в городе. Таким образом, осуществляется переход от отношения $\frac{n_i}{N}$ к вероятности обнаружить определенный размер ноги, и затем к плотности вероятностей [5].

Уместно представить дискретные данные в виде таблицы (табл. 1) с целью обнаружить одно важное свойство вероятностей: сумма вероятностей во второй строке таблицы равна 1.

Таблица 1

Распределение значений признака по вероятностям

Значение признака	x_1	x_2	x_3	...	x_K
Вероятность	p_1	p_2	p_3	...	p_k

Наконец, остается совершить переход от дискретного распределения к непрерывному распределению. Здесь можно упомянуть про длину стопы ноги, которая, в общем-то, не является дискретной величиной, тогда

$$\tilde{x} = \int_\Omega x dW(x), \qquad (2)$$

где $W(x)$ – распределение величины x, Ω – вся область определения x. Аналогично дискретному распределению следует отметить одно важное свойство плотности распределения вероятностей (условие нормировки). Здесь можно предложить к решению задачи 1-3.

Задача 1. Оценить, сколько автобусов (в среднем) находится на линии в городе А, если в городе проживает около 200 тысяч человек. В качестве оценки принять, что каждый человек ежедневно проводит в автобусе в среднем 0,25 часа, а средняя вместимость автобуса примерно 36 человек.

Задача 2. Материальная точка колеблется по закону $x = \sin \omega t$. Найти вероятность того, что при случайном измерении ее положения она будет обнаружена в интервале (x, $x + dx$).

Задача 3. Найти среднее значение величины x, ее среднее квадратичное значение, среднюю квадратичную флуктуацию и относительную флуктуацию, если $dw(x) = const \cdot exp(-\alpha x) dx$, где $\alpha > 0$.

На практическом занятии «Распределение Максвелла по скоростям» полезно повторить вывод распределения [2, 4]. В данном выводе вводится функция $g(v)$ – функция распределения по абсолютной скорости. Так как все направления скорости равновероятны, то в соответствии с принципом умножения вероятностей имеем:

$$g(v) = f(v_x)(v_y)(v_z), \tag{3}$$

где $f(v_i)$ – функция распределения по координате скорости. Далее это соотношение логарифмируется, а затем дифференцируется по координате скорости. Здесь важно пояснить, что функция распределения $g(v)$ – сложная функция и дифференцируется, как сложная функция $g\left(v\left(v_x, v_y, v_z\right)\right)$. В завершение занятия следует представить функции плотности распределения графически, обсудить их зависимость от температуры, изобразить графики функции при различных температурах [1, 3].

Можно обсудить наиболее вероятную скорость как наиболее вероятное значение модуля скорости, среднюю проекцию скорости на ось, среднюю и среднеквадратичную скорости, вывод которых будет сделан на следующем занятии, здесь же можно кратко обсудить способ поиска значений вышеуказанных скоростей и обсудить их смысл.

В качестве домашнего задания можно предложить решить задачу 4.

Задача 4. Зная, что вероятность обнаружить точку в промежутке $x \div x + dx$ пропорциональна $x^2 + 2x$, где $0 \le x \le 1$, а в промежутке $y \div y + dy$ пропорциональна $y^2 - 1$, где $0 \le y \le 1$, найти вероятность найти точку в прямоугольнике $x \div x + dx,\ y \div y + dy$.

Практика показывает, что у студентов часто возникают проблемы с пониманием отличия между средним от произведения и произведением средних. Особенно эта проблема заметна при определении давления. С целью показать разницу между произведением средних и средним произведения, достичь понимания, каким из этих двух выражений записывается давление газа, можно предложить студентам выполнить задачу 5.

Задача 5. Вычислить значения следующих выражений: $2m < v_x > J, v_x \ge 0$, $2m\int_0^\infty v_x dJ(v_x)$. Почему ответы различны? Какое из этих выражений имеет физический смысл? Какой?

После темы «Броуновское движение» можно предложить домашнюю лабораторную работу позволяющую увидеть связь между биномиальным, нормальным распределениями и распределением для свободных блужданий, увидеть, как меняется распределение по отклонениям в случае дискретных шагов определенной длины от количества сделанных шагов [5].

Пример домашней лабораторной работы

Рассмотрим дискретные блуждания частицы с определенной длинной шага и одинаковой вероятностью выбора направления (вправо и влево). Пусть частицей сделано 7 шагов, сколько из них может быть сделано вправо? Примите за успех шаг вправо. Найдите вероятности того, что из 7 шагов вправо будет сделано 0, 1, 2…7 шагов.

Заполните табл. 2. Постройте график распределения вероятностей. Как положение частицы вдоль координатной оси связано с числом успехов? Где на этой оси находится начало координат. Найдите сумму вероятностей. Посмотрите, что изменится при увеличении количества шагов (рассмотрите случаи *n = 15, n = 30*). Что случится, если вероятность шага вправо станет равной 0,25? Какую физическую характеристику нужно внести в модель данной задачи, чтобы изменить вероятность шага вправо?

Таблица 2

Вероятность числа успехов

Число успехов k	0	1	2	3	4	5	6	7
Вероятность числа успехов $P_n(k)$								

Выполнение данной лабораторной работы не займет много времени, поскольку производится в приложении Excel. Необходимо только позаботиться о том, чтобы у студентов были необходимые инструкции для выполнения работы.

Практика показывает, что внедрение в процесс обучения молекулярной физике элементов стохастики (с опорой на школьный опыт студентов, на их интуицию) приводит к повышению качества изучаемого предмета. Включение элементов стохастики в процесс изучения физики вовсе не делает ненужным для физиков изучение теории вероятностей и математической статистики на третьем курсе. Для того чтобы обучение теории вероятностей и статистике было качественным, следует решать со студентами не только математические задачи, но и задачи с физическим смыслом. Ниже приведены задачи 6-14, которые можно решать не только при изучении физики, но и на занятиях по теории вероятностей.

Задача 6. По нити, натянутой в трубке с высоким вакуумом, идет электрический ток. При этом происходит эмиссия электронов. Вероятность испускания электронов нитью в течение некоторого малого промежутка времени Δt равна p. Определите: средний заряд $\overline{Q}$, испущенный нитью за время t, дисперсию заряда $\left(\overline{\Delta Q}\right)^2$ за это же время, отношение дисперсии тока $\left(\overline{\Delta Q}\right)^2$ к среднему току $\overline{I}$, стандартное отклонение тока.

Задача 7. В сосуде объемом V находятся $N = 20$ молекул. Какова вероятность того, что все эти молекулы будут находиться только в одной из половин сосуда?

Задача 8. Определите долю молекул водорода, модули скоростей которых при температуре $t = 27^0C$ лежат в интервале скоростей от 1898 *м/с* до 1903 *м/с*.

Задача 9. Газ находится в тепловом равновесии в поле силы тяжести. Определите процент молекул, у которых потенциальная энергия больше их средней кинетической энергии поступательного движения.

Задача 10. Сосуд объёмом V_0 разделён перегородкой на две части с объёмами $V_1 = \frac{2}{3}V_0$ и $V_2 = \frac{1}{3}V_0$. В большей части находится 0,1 моль идеального газа, в меньшей же создан высокий вакуум. Определите изменение энтропии при удалении перегородки.

Задача 11. Макроскопическая система поглощает $\Delta E = 10^{-20}$ *Дж* энергии. При этом число доступных состояний системы увеличивается на 10%. Какова была температура этой системы?

Задача 12. Каковы вероятности заполнения электронами энергетических уровней, расположенных на 0,02 *эВ* выше и соответственно ниже уровня Ферми в натрии при $T = 300$ *К*, если для натрия $E_ф = 3{,}12$ *эВ*?

Задача 13. Какая часть свободных электронов в металле при температуре $T = 0$ *К* обладает энергией, большей $\frac{3}{4}T_ф$?

Задача 14. Определите, во сколько раз увеличивается статистический вес моля воды при переходе ее из жидкого состояния в газообразное состояние при температуре *100°С*.

Таким образом, включение элементов стохастики в процесс изучения молекулярной физики в вузе (с опорой на школьные знания студентов и их интуицию), а затем решение физических задач при

изучении теории вероятностей и статистики на старших курсах позволит обеспечить более качественную подготовку как будущих учителей физики, так и будущих специалистов в области физики.

1. Бабаджан, Е.И. Сборник качественных вопросов и задач по общей физике / Е.И. Бабаджан, В.И. Гервидс, В.Н. Дубовик. – М.: Наука, 1990. – С. 67-118.
2. Радченко, И.В. Молекулярная физика. Учеб. пособие. – М.: Наука, 1965. – 479 с.
3. Савельев, И.В. Курс общей физики: В 4 т. – Т. 4. Сборник вопросов и задач по общей физике: учеб. пособие. – М.: КНОРУС. - 2009. – 384 с.
4. Сивухин, Д.В. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. М., 1990. – 552 с.
5. Феллер, В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения: В 2 т. – Т. 1 пер. с англ. – М.: Мир, 1984. –

УДК 372.853

ФОРМИРОВАНИЕ МЕТОДОЛОГИЧЕСКИХ ЗНАНИЙ У УЧАЩИХСЯ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

Л.В. Горбанева
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
largorbaneva@mail.ru

FORMATION OF METHODOLOGICAL KNOWLEDGE FOR STUDENTS IN THE PROCESS OF TEACHING PHYSICS IN SECONDARY SCHOOL

L.V. Gorbaneva
Pacific State University (Khabarovsk)
largorbaneva@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.214-217

В настоящее время главным показателем эффективности обучения становится не столько сумма конкретных знаний, усвоенных учащимися, сколько сформированность у них умений и навыков самостоятельно приобретать новые знания в процессе учебной и трудовой деятельности. Неким «сухим остатком» всего обучения физике, когда человек уже позабыл конкретные факты, формулы, выводы, определения, на наш взгляд, должны остаться те знания, те интеллектуальные умения, которые позволяют человеку, независимо от рода своей деятельности, разобраться в новых явлениях, тенденциях, продуктах научно-технического прогресса, успешно осуществлять научный, т.е. наиболее эффективный подход к решению производственных и жизненных проблем, вставших перед ним. В этом случае важную роль играют методологические и науковедческие знания, то есть знания о методах познания, структуре физической науки, основных закономерностях ее развития.

В Федеральном государственном образовательном стандарте среднего общего образования РФ указывается на необходимость усвоения учащимися средней (полной) общеобразовательной школы методологических знаний и умений.

Необходимо подчеркнуть, что эти знания не являются чем-то внешним, привнесенным в основы физики, дополнительными к предметным, в традиционном смысле слова, знаниям, наоборот, они внутренне присущи современному курсу физики.

Известно, что общую схему физической науки составляют три основных элемента: основные понятия и теории, выработанные физикой к данному моменту; методы исследования и полученные с их помощью фундаментальные знания о природе; ответвления физики в другие отрасли наук и в практику.

Этим трем элементам в учебном предмете физика, необходимым образом должны соответствовать: предметные знания; методологические и науковедческие знания; политехнические знания.

До последнего времени физика в средней школе была представлена главным образом как система предметных знаний. Однако, физическая наука является сложным образованием, включающим в себя не только систему знаний, но и определенную область общественно-производственной практики, а именно – процесс добывания знаний. Физика – не только совокупность конкретных научных результатов, приведших к изобилию наукоемкого продукта, но и развитие специфического взгляда на природу, мировоззрение, отношение к действительности, не имеющее аналогов в других сферах интеллектуальной деятельности.

Решение ряда задач преподавания физики в средней школе на современном этапе таких, как формирование научного мировоззрения, формирование их познавательных интересов и творческих способностей, мы видим в определенном и довольно общем подходе к обучению физике, условно названном нами историко-методологическим.

Суть его заключается в таком изложении основных физических идей и теорий, при котором изучаются не только результаты, но и способы получения знаний, выработанные наукой и техникой в процессе познания природы. В таком подходе исторический аспект подчинен методологическому, являясь средством для формирования у учащихся собственно методологических и науковедческих знаний.

Эти знания чрезвычайно обширны, поэтому возникает проблема их отбора в учебных целях, конструирования дидактического комплекса историко-методологических и науковедческих знаний, удовлетворяющего критериям необходимости и достаточности.

В результате проведенного исследования были выделены дидактические требования к историко-методологическому материалу вводимому в курс физики средней школы. Этот материал должен:

служить сознательному усвоению физических знаний, углубленному пониманию сути изучаемых явлений и закономерностей;

вооружать учащихся общенаучными методами познания;

способствовать преодолению узкопрактического понимания физики, показывать ее как один из аспектов общечеловеческой культуры и основу современной техники;

развивать любознательность, интерес к овладению знаниями, творческие способности и физико-техническое мышление.

Учитывая особенности процесса обучения, выделенный материал должен быть компактным и неразрывно связанным с предметными знаниями, представлять интерес для учащихся, быть привлекательным, вызывая положительную мотивацию к учению.

В предлагаемом комплексе историко-методологических и науковедческих знаний все содержание этих знаний объединено в ряд основных направлений:

1. Научный эксперимент и экспериментальный метод исследований.

2. Физическая теория и теоретический метод исследования.

3. Стержневые методологические идеи физической науки.

4. Основные закономерности развития физической науки.

Остановимся на каждом из этих направлений.

1. Ныне действующий учебный эксперимент в средней школе не всегда может служить моделью научного эксперимента.

Существует определенная опасность, что у учащихся могут сложиться неправильные представления о сущности экспериментального метода, его месте в познании природы. Поэтому наряду с традиционным экспериментом мы предлагаем методически разработанную систему историко-методологических и науковедческих знаний о научном эксперименте, включающую знакомство учащихся с фундаментальными физическими опытами и наблюдениями, проведение лабораторных работ, воспроизводящих исторические опыты, и т.д.

На конкретных примерах учащиеся усваивают методологические условия и требования к проведению эксперимента, процедуре измерений и т.д.

2. Формирование знаний о теоретическом методе познания осуществляется путем ознакомления учащихся с методологическими свойствами основных физических теорий, изучаемых в школе, и с различными теоретическими приемами (т.е. инструментарием теоретического познания (индукция и дедукция, мысленный эксперимент, идеализация и моделирование, аналогия, научная гипотеза).

Здесь главное – показать неразрывную связь двух важнейших методов познания: экспериментального и теоретического. Это достигается цельным изучением (хотя бы качественным) основных физических теорий в соответствии со следующей методологической схемой-цепочкой:

обнаружение и накопление фактов путем наблюдений и опытов;

обобщение этих фактов путем выдвижения гипотез, позволяющих объяснить имеющиеся явления и закономерности;

разработка теории (уточнение гипотез и оформление математического аппарата);

получение следствий из положений разработанной теории;

экспериментальная проверка этих следствий.

Большинство физических теорий (в том числе и термодинамика, теория электромагнитного поля Максвелла, СТО, атомная теория Бора) развивались именно таким образом, что их основные ступени можно уложить в эту логически замкнутую цепочку-схему.

3. В основные методологические идеи курса физики мы включили те, которые в истории физики играли громадную эвристическую роль и приводили к правильным результатам, часто ограждая исследователя от бесплодных путей в поисках истины.

К этим идеям относятся: сохранение важнейших физических величин (импульса, энергии, электрического заряда, барионного «заряда» и др.); элементарность структурных единиц материи; симметрия пространства-времени и свойств материи; единство физической картины мира.

4. Учащихся средних школ необходимо познакомить и с рядом закономерностей развития физики. Важно, чтобы они поняли обусловленность этого развития социальными процессами, общим уровнем культуры и потребностями техники. При изучении материалов из различных разделов физики необходимо показать учащимся на конкретных примерах обусловленность развития физики общественными потребностями.

Среди других закономерностей развития физики важно отметить чередование «спокойных» периодов и «революционных» скачков.

Учащимся показывается борьба противоположных концепций, старого с новым, то, что А. Эйнштейн образно назвал «дремой идей», и ее решение как очередную победу человека в борьбе с самой природой. Так, при изучении механики на первый план выносится борьба представлений Галилея – Ньютона с «аристотеллианскими» представлениями о характере движения, при рассмотрении становления молекулярной физики – борьба кинетических представлений с механистическими, при изложении электродинамики – борьба близкодействия и дальнодействия, при изучении оптики – борьба волновых и корпускулярных представлений о природе света, квантовой физики – борьба концепций непрерывности и дискретности в природе, механического детерменизма и статистических закономерностей в атомных процессах.

Другой важной закономерностью в развитии науки является наличие границ применимости физических понятий и законов на каждом этапе развития науки (т.е. каждый установленный закон имеет строгие границы применимости, за которыми эти знания уже неверны). Эта закономерность отражает одно из важнейших положений о соотношении относительной и абсолютной истины.

1. Атепалихин, М.С. Вопросы методологии физических измерений при обучении физике: монография / М.С. Атепалихин, Ю.А. Сауров. – Киров: Изд-во Кировского ИПК и ПРО, 2005. – 106 с.
2. Володарский, В.Е. Учебные задачи и задания, помогающие овладеть методами познания / В.Е. Володарский // Физика в школе. – 1999. – № 2. – С. 41-45.
3. Голин, Г.М. Вопросы методологии физики в курсе средней школы. – М.: Просвещение. – 1987. – 128 с.
4. Задачи по физике с методологическим содержанием: пособие для учителей / Ю.А. Сауров, К.И. Гридина и др.; под ред. Ю. А. Саурова. – Киров, 2000. – 66 с.
5. Кочергина, Н.В. Система методологических знаний в школьном курсе физики: учебное пособие. – М.: Прометей. – 2002. – 208 с.
6. Малинин, А.Н. Методология научного познания в постановке и решении учебных физических задач // Физика в школе. – 2000. – № 5. – С. 61-66.

УДК 53:372.8; 378.147

ФИЗИКА В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ КУРСАНТОВ ВОЕННЫХ ВУЗОВ

В.А. Евдокимова
Дальневосточное высшее общевойсковое командное училище имени Маршала Советского Союза К.К. Рокоссовского (г. Благовещенск)
iris_87@mail.ru

PHYSICS IN THE SYSTEM OF PREPARATION OF MILITARY UNIVERSITY CURSORS

V.A. Evdokimova
Far Eastern Higher Combined Arms Command School named after Marshal of the Soviet Union K.K. Rokossovsky (Blagoveshchensk)
iris_87@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.217-219

Подготовка офицеров Российской Армии – выпускников военных вузов во многом совпадает с подготовкой по физике в гражданских технических вузов. Типовые учебные программы по высшей математике и курсу общей физики созданы на основе типовых учебных программ, разработанных научно-методической комиссией при комитете по высшей школе. В процессе обучения используются учебники, пособия, сборники задач как для технических вузов, так и разработанные педагогическим составом училища.

Физика является одной из фундаментальных наук, лежащих в основе развития техники и технологий военной промышленности, поэтому в решении проблем военно-прикладной направленности ей принадлежит ведущая роль. Разработка методов и средств реализации межпредметных связей между физикой и военными учебными дисциплинами является актуальной задачей. Сложность решения заключается в том, что выше названные дисциплины не является родственными и изучение их разделено временем. Проблема связи между фундаментальной и профессиональной компонентами

обучения не имеет достаточного теоретического обоснования. Не разработанность проблемы межпредметных связей между дисциплинами в военных вузах выражается отсутствием специальных исследований, разработкой данной проблемы.

Данная работа посвящена проблеме совершенствования методики преподавания физики в военных вузах на примере Дальневосточного высшего общевойскового командного училища им. Маршала Советского Союза К.К. Рокоссовского.

Проблема перестройки процесса обучения курса физики в военной школе связана с возникшим в конце XX в. кризисом российского естественно-научного образования. Понижения интереса к изучению курса физики в средней школе отразилось на качестве подготовки военных специалистов. Старая система образования в реальных условиях уже не годится для выполнения психолого-педагогических и методических задач. В современных условиях главными целями курса физики являются: – получение курсантами базовых представлений к описанию физических явлений в природе и технике; – развития научного мышления, самостоятельности; – расширению практических умений обобщенного характера. Преподавание, следуя развитию науки, должно непрерывно менять свои формы, ломать традиции, искать новые технологии. Однако в этом процессе необходимо проявлять большую осторожность. Выдвигая новые методики обучения, нужно постоянно помнить о требованиях к курсантам, к их конечным знаниям.

Система подготовки курсанта военного вуза не всегда отвечает современным требованиям, предъявляемым к военной службе. Отсутствие гибких учебных планов, учебников и учебных пособий не позволяет курсанту развиваться в полной мере. Многие учебники созданы без связи с военной профессией, дают лишь общие ориентиры.

В настоящее время курсанты ДВОКУ изучают курс физики на 1-м курсе. Время, отводимое на изучение физики, всего 5% (216 ч) от общего бюджета времени. Курс физики не является профилирующим, а является базовой специальностью. Поэтому межпредметные связи физики с математикой, химией, технической механикой, РХБЗ и т.д. имеют векторный характер.

Анализ знаний школьного курса физики выявил у первокурсников училища низкий уровень умения решать физические задачи. Большинство курсантов понимают значимость физики для их профессии. Они отмечают, что предмет способствует развитию мышления (26%), помогает понять смежные дисциплины (23%), углубляет представление о физических процессах протекающих в технике (22%). Однако курсанты отмечают, что практические занятия по решению физических задач самые трудные (37%); не знают какие законы необходимо применить при решении задач (56%); с чего начинать решение задачи (36%). Для курсантов желательным является алгоритмический подход к решению задач (76%), так как он позволяет большинству из них справиться с решением типовых задач. Практические занятия по решению задач нравятся лишь 11% обучающихся, в связи с отсутствием школьной базы, на которую опираются при решении задач. Лабораторные работы выбирают 53% обучающихся, экспериментальные задачи – 40%. Это свидетельствует о преобладании чувственно-конкретного, а не абстрактно-логического мышления.

Предметное содержание курса физики строится по методическому принципу одинаковой плотности связей между разделами (механика, статистическая физика и термодинамика, электричество и магнетизм, колебания и волны, оптика, квантовая физика). В каждый раздел курса включен основной материал, усвоение которого следует добиваться, не останавливаясь на частных фактах. Таким основным материалом для всего курса физики служат: законы сохранения (энергии, импульса. электрического заряда), молекулярно-кинетические и электронные представления, законы термодинамики, понятия массы, плотности, силы и энергии, законы Ома и Ньютона, Кулона и Ампера, явление электромагнитной индукции, волновые и квантовые свойства света, постулаты Бора, протекание ядерных реакций. При изучении физических теорий, мировоззренческой интерпретации физических

законов формируются знания курсантов о современной научной картине мира. В содержании курса физики отражены теоретико-познавательные аспекты учебного материала: границы применимости физических теорий, роль опыта в физике как источника знаний и критерий правильности теорий, сведения из истории развития физики, роль физики в развитии вооружения и военной технике.

В аспектном ракурсе курсанты с помощью физики изучают пространственно-временные формы существования материи, проблемы методологии естественнонаучного познания. В объектном ракурсе изучают различные уровни организации вещества: микроскопический – элементарные частицы, атом и атомное ядро, молекулы; макроскопический – газ, жидкость, твердое тело, плазма, четыре типа взаимодействия (гравитационное, электромагнитное, сильное и слабое). Свойства электромагнитного поля (включая оптические явления), область технических применений физики и связанные с этим экологические проблемы.

В своей работе преподаватели используют межпредметные методы, которые представляют собой способы, соответствующие эвристическому образованию: методы смыслового видения, графических ассоциаций, гипотез, наблюдений, сравнений, эвристических бесед и т.д.

Какие же задачи мы ставим? Первая – мотивация. По мере увлечения предметом переходим ко второй задачи – научность знаний, то есть идем от простого к сложному. Третья задача – творчество. Для мотивации подходят демонстрации легкие и простые. Переход к научности осуществляется усложнением заданий к опыту (помимо наблюдений, например, проводить расчет погрешности результатов эксперимента, выдвинуть гипотезу, спрогнозировать результат, рассчитать результат). Это достигается на лабораторных и практических занятиях. Широко используются интерактивные средства обучения. Третий этап является продолжением двух, так как творчество без мотивации и научности не возможно. Здесь используются творческие задания, участие в различных викторинах и т.д. При изучении курса такими методами курсанты осваивают физические понятия и термины. учатся работать с формулами и физическим оборудованием. В процессе преподавания важно научить применять основные положения науки для самостоятельного объяснения физических явлений. Выделение основного материала в каждом разделе физики помогает преподавателю обратить внимание обучающихся на те вопросы, которые они должны усвоить основательно и глубоко.

Знания – это физические суждения, подлежащие усвоению. Их выделяют при анализе содержания учебного материала. Они определяют образовательные цели занятия. Все физические знания (понятия, законы, теории, научные факты) представляют собой факты, которых в природе нет, а создаются людьми в ходе их повседневной предметно-практической деятельности. Формирование самостоятельности молодого поколения – важнейшая задача преподавателей. Лишь мыслящий, творческий человек способен противостоять жизненным проблемам. В заключении можно выделить следующее. Реформирование системы профессионального высшего военного образования в качестве приоритетных направлений предусматривает фундаментализацию базовой подготовки как основу профессионализации образования. Установление новым стандартом требования к результатам обучающихся вызывают необходимость в изменении содержания обучения на основе принципов межпредметности как условия достижения высокого качества образования.

УДК 378.147.88

МЕТОДЫ НАУЧНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ В РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММЫ УЧЕБНОЙ ПРАКТИКИ

В.В. Жидков, И.В. Егорова
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
jvlvl@mail.ru

RESEARCH METHODS IN THE IMPLEMENTATION OF THE EDUCATIONAL PRACTICE PROGRAM

V.V. Zhidkov, I.V. Egorova
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
jvlvl@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.220-222

Известно, что одной из методологических проблем науки является поиск критериев сравнения окружающих человека веществ. Другой методологической проблемой является переход от наблюдения и описания к попыткам объяснить различные факты на основе эксперимента с использованием физических приборов [1]. Среди направлений экспериментальных исследований в области химии первое связано с изучением соединений, имеющих молекулярное строение и постоянный состав. Такие вещества при нормальных условиях могут быть твердыми (салициловая, аскорбиновая кислоты, глюкоза), жидкими (метиловый, этиловый спирты, ацетон, диэтиловый эфир), газообразными (молекулярные кислород, азот, углекислый и угарный газы, озон). Второе направление связано с изучением кристаллов, главным образом неорганических соединений (солей, оксидов, сплавов металлов), обладающих переменным составом.

Для идентификации химических веществ и установления их строения все большую роль в химическом эксперименте играют физические методы анализа веществ и реакций.

Именно с вопросами решения данных методологических проблем связана организация учебной практики «Физико-химические методы анализа веществ» студентов, обучающихся на естественно-географическом факультете БГПУ по направлению подготовки 05.03.06 «Экология и природопользование».

Рабочая программа учебной практики предполагает реализацию цели: формирование у студентов понимания принципов, условий применимости и ограничений в использовании физико-химических методов качественного, количественного и структурного анализа биологически значимых химических соединений в биологических пробах и умение адекватно выбирать необходимые подходы для решения конкретных задач в химическом анализе.

Основные задачи практики: обучить студентов технике современных физико-химических методов анализа в экологической химии, методам оценки и выбора методов анализа, адекватных поставленной задаче; обучить рациональному и эффективному использованию информационных технологий в решении задач химии и экологии; ознакомить с правилами техники безопасности в химической лаборатории; ознакомить с устройством приборов и правилами работы на них.

Достижение цели и решение задач практики реализуется посредством интеграции научного знания в учебный процесс.

Знания о природе химической связи и ее влиянии на физические и химические свойства веществ, природе и классификации химических соединений, функциональных группах органических веществ, качественных реакциях, ранее сформированные при изучении дисциплин «Химия биогенных элементов», «Органическая химия», «Основы гидрохимии», «Химическая экология и мониторинг окружающей среды», являются основой для подготовки студентов к практической деятельности, формированию умений и навыков наиболее распространенных операций, требующих внимательности, наблюдательности, аккуратности, усидчивости, терпеливости.

Перед выполнением экспериментальной части практики студенты определяют цели и задачи, которые позволяют понять: что неизвестно, что дано, в чем состоит условие, достаточно ли условие для определения неизвестного, не встречалась ли раньше эти задачи, известны ли подобные задачи? Составить план решения задачи: найти связь между данными и неизвестными. Если не удается сразу обнаружить такую связь, необходимо рассмотреть вспомогательные задачи и прийти к плану решения. Осуществление плана решения задачи предполагает поэтапный контроль: является ли данный этап уместным, правильным? Этап изучения и осмысления полученного решения, возможность проверки хода решения задачи и результата [2].

В соответствии с рабочей программой практики выполнение экспериментальной части включает подготовку и определение физических констант этилового спирта, ацетона; идентификацию аскорбиновой кислоты (витамин С), глюкозы, бензойной кислоты, хлорида натрия, карбоната натрия по температурам плавления; рефрактометрию, ИК-спектроскопию.

Одним из заданий учебной практики является освоение метода разделения жидкостей и изучение их физических свойств. В качестве примера студенты анализируют технический ацетон. Промышленные способы получения, применение, физические и химические свойства кетонов были рассмотрены при изучении дисциплины «Органическая химия». Технический ацетон представляет собой смесь органических жидкостей: ацетона, пропанола-2, воды, диизопропилового эфира и др. Для разделения смеси методом перегонки при атмосферном давлении студентам необходимо ознакомиться с химической посудой и отработать навыки по сборке установки для перегонки, научиться определять степень чистоты отгоняемой фракции по температуре кипения. Изучение устройства рефрактометра и принципа его работы является следующим этапом в идентификации разделяемых фракций по значению показателя преломления. Полученные результаты исследования студенты обсуждают и сопоставляют с литературными данными.

В рамках практики студентам предлагается очистить смеси кристаллических веществ методом перекристаллизации, выделить салициловую, аскорбиновую или бензойную кислоты и сравнить их физические свойства и ИК-спектры с исходными образцами.

Для идентификации салициловой кислоты студентам необходимо отделить ее от этилового спирта. Этанол отгоняют из раствора салицилового спирта. Далее изучают растворимость кислоты в различных растворителях, перекристаллизовывают из воды, измеряют температуру плавления кристаллического вещества, сопоставляют экспериментальные и литературные данные; снимают и анализируют ИК-спектр кислоты, изучают таблицы спектральных данных и относят характеристические полосы к функциональным группам; формулируют выводы.

Реализация программы практики предполагает изучение студентами некоторых вопросов самостоятельно под руководством преподавателя с целью развития знаний, умений, навыков и личностных качеств. Домашняя самостоятельная работа может быть выполнена в виде упражнений, задач, подготовка рефератов, докладов, выполнения заданий, в том числе творческих [2].

В ходе учебной практики студенты самостоятельно находят, например, информацию по определению белка биуретовым методом; рибонуклеазе, пероксидазе, эстераза и методам определения их удельной активности в семенах сои фотоэлектроколориметрическим методом; множественным формам каталаз и их определению электрофорезом в полиакриламидном геле.

Завершает учебную практику конференция студентов и представление отчета. Сформированные при прохождении учебной практики навыки и умения студенты используют в проектной деятельности, а также при выполнении курсовых и дипломных работ.

1. Макареня, Л.А. Методология химии: Пособие дли учителя / Л.А. Макареня, В.Л. Обухов. – М. : Просвещение, 1985. – 160 с.
2. Андреев, В.И. Педагогика высшей школы. Инновационно-прогностический курс: учебное пособие. – Казань: Центр инновационных технологий, 2008. – 500 с.

УДК 378

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ШКОЛЬНИКОВ ПО ФИЗИКЕ В СИСТЕМЕ НЕПРЕРЫВНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

А.А. Зеева, Т.А. Меределина
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
biofirm@mail.ru

SCIENTIFIC RESEARCH ACTIVITY OF SCHOOLCHILDREN IN PHYSICS IN THE SYSTEM OF CONTINUOUS EDUCATION

A.A. Zeeva, T.A. Meredelina
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
biofirm@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.222-224

Федеральные государственные образовательные стандарты (ФГОС) обеспечивают не только единство образовательного пространства Российской Федерации, но и преемственность основных образовательных программ, начиная с начального общего и заканчивая программами высшего профессионального образования. Зачастую требования и знания, полученные в школе, отличаются от тех, что предъявляются при поступлении в вуз. Появляется необходимость создавать условия обучения на старшей ступени средней школы, которые были бы максимально приближены к вузовской системе образования. вузы и общеобразовательные школы должны быть взаимно заинтересованы в подготовке к поступлению школьников в высшие учебные заведения и проводить необходимую подготовительную работу. В ФГОС прописаны основные образовательные компетенции, которыми должен овладеть обучающийся. Один из путей их формирования является вовлечение обучающихся в учебно-исследовательскую деятельность [1]. Этот аспект функций и целей образования, общий для школы и вуза, является важным фактором их интеграции, условием оптимизации их преемственности. Подобная преемственность способствует развитию не только познавательных и коммуникативных возможностей ученика, но и качественной подготовке студентов – будущих учителей [2, 3].

Сотрудниками лаборатории спектрального анализа и студентами физико-математического факультета БГПУ был разработан и реализуется в течение последних трех лет проект «Организация научно-исследовательской работы по физике в системе непрерывного образования». Целью проекта является создание условий успешного взаимодействия студентов физико-математического факультета и учащихся 8-10 классов средней школы в научно-исследовательской деятельности. В процессе реализации проекта решается проблема дефицита преемственности средней и высшей школы. Проект

имеет четыре направления деятельности: учебно-методическое, научно-методическое, кадровое, проф. ориентационное. В основе лежит совместная работа учителей средних образовательных учреждений с преподавателями вузов по обмену опытом в научно-исследовательской работе. Научно-методическое направление включает в себя работу факультативов и кружков на базе вуза и средних образовательных учреждений. Совместное проведение предметных недель, олимпиад, семинаров и конференций со средними образовательными учреждениями. Разработка основных образовательных программ и технологий, обеспечивающих непрерывность и преемственность образования на границе школа-вуз. Оказание методической помощи преподавателями вузов при разработке учебных программ средних образовательных учреждений по профильным дисциплинам, осуществление экспертной оценки. Совместное проведение научно-практических конференций учителей и учащихся средних образовательных учреждений со студентами и преподавателями вузов. В проекте предусмотрено решение кадрового вопроса, предлагается прохождение учащимися средних образовательных учреждений практических занятий по физике на базе педагогического университета. Направление студентов и специалистов вуза в средние образовательные учреждения для обеспечения учебного процесса и участия в учебно-методической работе. Результатом работы проекта станет самоопределение каждого ученика на будущую профессию, поэтому одно из направлений проекта посвящено пропаганде профессий, по которым готовят взаимодействующие образовательные учреждения. Информирование о правилах приема и условиях обучения вузе, демонстрация фильмов и рекламных роликов о профильных вузах в средних образовательных учреждениях, выступления представителей университета в средних образовательных учреждениях с лекциями о специальностях, по которым готовят вузы. Проведение дней открытых дверей во взаимодействующих образовательных учреждениях.

Ежегодно работа проходит в четыре этапа (таблица), подготовительный этап начинается в октябре, в апреле подводятся итоги, анализируется деятельность и проводится творческий отчет.

Этапы реализации проекта

Цели	Задачи	Мероприятия	Результаты
Подготовительный этап			
Изучение индивидуальных особенностей ребят. Определение уровня профильной подготовки учащихся и проф. ориентационная диагностика.	Обсудить и скоординировать действия по реализации проекта с участниками.	Встречи с участниками проекта, анкетирование и тестирование учащихся. Формирование «карты развития » учащихся.	Мониторинг, диагностическая карта.
Организационный этап			
Организация системы взаимодействия «Школа-вуз»	Наладить связи с лицеем и школами.	Получение задания каждой группой учеников. Составление планов по каждому конкретному заданию.	Наличие договора о сотрудничестве со школами. Планы работы.
Основной этап			
Организовать формы работы по обучению учеников и студентов профессиональному взаимодействию.	Проведение физического эксперимента. Подготовка докладов и презентаций для выступления на ученических конференциях.	Совместное проведение научно-практических конференций учителей и учащихся средних образовательных учреждений со студентами и преподавателями вузов. Работа факультативов и кружков на базах вузов и средних образовательных учреждений с учетом профилизации.	Выступления учащихся, студентов и преподавателей на конференциях различного уровня.
Аналитический этап			
Рефлексивный анализ, планирование дальнейшего развития.	Проанализировать выполнение целей и задач проекта.	Анализ проведенных работ. Анализ руководителями и учителями нового опыта. Проектирование дальнейших действий.	Аналитическая справка. Презентация и творческий отчет по реализации проекта.

Если отличительной особенностью личности младшего школьника является повышенная впечатлительность и внушаемость, а также слабо развитые способности принимать самостоятельные решения, то в подростковом и старшем подростковом возрасте ярко проявляется самостоятельность. Учащиеся все чаще отказываются от посторонней помощи, таким образом, они удовлетворяют главную потребность этого периода – потребность считаться взрослыми [4]. Прежде всего, это проявляется в стремлении старшеклассника приобщиться к жизни и деятельности взрослых. При этом в первую очередь перенимаются более доступные, чувственно воспринимаемые стороны взрослости – внешний облик и манера поведения. Для его самосознания важно ощущать себя взрослым, но еще важнее осознание его взрослости окружающими. Такая взрослость приобретается путем подражания, и здесь она делится на внешнюю «женскую» и «мужскую». Индивидуальные особенности являются важной частью при обучении, и познаются в процессе работы с учащимся. Физическое состояние и здоровье влияют на работоспособность и внимание. Важно знать особенности познавательной деятельности учащихся, свойства их памяти, склонности и интересы. Существенным является знание типологии характера каждого ученика, которое поможет учитывать ее при организации коллективной деятельности. Всестороннее знакомство с ребятами происходит на подготовительном этапе проекта, по итогам анкетирования, индивидуальным беседам, наблюдениям составляются диагностические карты учащихся, по которым отслеживается развитие ученика в течение нескольких лет.

На организационном и основном этапах необходимо постоянно поддерживать интерес учащихся к исследовательской деятельности. Для этого необходима эффективная работа по формированию у школьников мотивации к исследовательской деятельности, поддержание и развитие познавательного интереса учащихся. Организаторы проекта выделяют следующие педагогические условия формирования исследовательских умений школьников:

целенаправленность и систематичность;

мотивированность: ребенок должен увидеть смысл своей исследовательской деятельности, рассматривать свою работу как возможность реализации собственных талантов и возможностей;

творческая атмосфера: педагогу необходимо способствовать созданию творческой, рабочей атмосферы, поддерживать интерес учащихся к исследовательской работе;

личность педагога: необходимо, чтобы команда преподавателей и студентов состояла из творчески работающих людей, стремящихся к созданию креативной рабочей обстановки, обладающих определенными знаниями;

учет возрастных особенностей школьников: обучение исследовательским умениям должно осуществляться на доступном для учащихся уровне, само исследование быть посильным, интересным и полезным.

Последний этап реализации проекта предусматривает мониторинг результативности проекта, проектирование дальнейших действий.

Работа по проекту ведется три последних года, содержание и результаты педагогического эксперимента по организации научно-исследовательской деятельности группы студентов и учащихся постоянно корректируются и меняются. Положительные результаты деятельности участников проекта послужат началом дальнейшего развития взаимодействий общеобразовательной школы и ВУЗа на более высоком уровне.

1. Федеральный государственный образовательный стандарт основного общего образования. – М.: Просвещение, 2017. – 61 с.

2. Филатова, Л.О. Развитие преемственности школьного и вузовского образования в условиях профильного обучения в старшем звене средней школы. М.: Лаборатория базовых знаний, 2005. – 192 с.

3. Васильева, Г.Н. Исследовательская деятельность учащихся по физике // Актуальные задачи педагогики: Материалы III Международной научной конференции. – Чита: Молодой ученый. – 2013. – С. 91-93.

4. Мачулис, В.В. Роль новых информационных технологий в обеспечении преемственности естественнонаучного образования в средней и высшей школе. – Тюмень, 2002. – 137с.

УДК 53:001.8;371.31

ПРОПЕДЕВТИКА НАНОТЕХНОЛОГИЙ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

И.В. Иваченко, С.В. Ланкин
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
svlankin@yandex.ru

PROPEDEUTICS OF NANOTECHNOLOGIES IN SECONDARY SCHOOL

I.V. Ivachenko, S.V. Lankin
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
svlankin@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.225-227

Актуальность знаний в области нанотехнологий для учащихся средних школ определяется временем. Нанотехнология в настоящее время стала одной из наиболее важных направлений в физике, химии, биологии и технических наук [5]. Наноматериалы и нанотехнологии связаны с большим количеством научных дисциплин и эта специфика уже отражается как на процесс обучения дисциплин естественно-научных дисциплин, так и на изучение структур и физико-химических явлений на наноуровне. Для популяризации нанонауки (наноматериалов и нанотехнологий) необходимо ознакомление учащихся средних щкол с наностуктурными материалами и технологиями в элементарной форме [1]. Стремительное развитие инновационных материалов на базе нанотехнологий предполагает знакомство учащихся с наномиром, методами получения наноразмерных объектов и перспективными направлениями их применения [2].

Целью пропедевтики знаний о наноструктурных объектов должно являться популяризация среди учащихся, мотивация заинтересованности к новому направлению в науке, а также ориентация школьников на последующее профессиональное образование. Поэтому необходимо внедрять нестандартные формы проведения школьных уроков по естественно-научным дисциплинам, а также – организацию исследовательской работы. При правильной педагогической постановке деятельности учащихся познавательный интерес может стать устойчивой характеристикой личности, что и требует ФГОС второго поколения [4].

Физика создает у учащихся представление о научной картине мира. Глобальная задача современного естествознания – познание живой природы. Такое познание невозможно без взаимодействия наук о природе: биологии, химии и физики, ведущих исследования на молекулярном уровне [3]. Нанотехнологии – сложная, профессиональная, междисциплинарная область, это детище современной фундаментальной науки. Причем, в области, например, наноматериалов, переплетены фундаментальные научные основы и прорывные технологии практического использования знаний [6].

Уроки физики обладают огромным потенциалом для формирования целостной научной картины мира. Научно-технический прогресс связан с великими открытиями в области фундаментальной физики. Открытие радиоактивности, электромагнитных волн, ультразвука, реактивного движения и т.д. привело к тому, что человек применяя эти знания, двинул далеко вперед развитие техники. Произошли глубокие, качественные изменения во многих областях. В современных учебниках по физике недостаточно интересной и жизненной информации, которую школьники могли бы применить в своей жизни. Зачастую школьники не понимают, важность предметных знаний. Однако хорошая база

физических знаний, умений и навыков дает возможность понять, что будущее страны сегодня связано, прежде всего, с возрождением отечественной экономики, основанной на высоких технологиях, базой которых являются научные исследования. Являясь основой научно-технического прогресса, физика формирует творческие способности у учащихся, их мировоззрение, способствуя целям обучения и воспитания, если в процессе обучения сформирован интерес к знаниям. Время урока строго регламентировано и конечно главная задача, по пропедевтике нанотехнологий, которую нужно довести до учащихся требует от учителя глубоких предметных знаний. Данную проблему решает и внеурочная работа, которая позволяет школьникам самостоятельно находить недостающую информацию из дополнительных источников [4].

При стандартах первого поколения российское образование в основном строилось на классно-урочной форме деятельности, где педагогу отводилась доминирующая роль, при различных типах уроков. К урочным занятиям относятся уроки, проводимые по учебным программам, а также большинство факультативных занятий по учебным предметам. Такие занятия ограничивают возможности творческой организации обучения, воспитания и развития личности школьника, создания оптимальных условий для самостоятельной деятельности учителей и учащихся, для учета личностных особенностей педагогов и школьников.

В основе обучения в современной школе лежит творческое мышление. Такой подход предполагает, что ребенок не только овладевает системой знаний, но осваивает универсальные способы действий и с их помощью сможет сам добывать информацию о мире. Это требование второго поколения образовательных стандартов.

Задачи по популяризации нанотехнологий существенно отличаются от обычных целей на уроках тем, что не имют полного ответа, и поэтому она трудно реализуются. Проблема состоит не только в том, чтобы помочь школьникам открыть в себе способности о которых они ранее не подозревали. Помочь в этом могут приемы, стимулирующие индивидуальную творческую деятельность. В качестве тренинга можно предлагать нестандартный способ решения проблемы. В новом подходе преподаватель выполняет функцию координатора. Очень важно, чтобы организация уроков была направлена на развитие личностных качеств и познавательной активности самих учащихся, способствовала формированию основных профессиональных умений, потребности к самостоятельному выполнению заданий, восприятию и осмыслению новых теорий.

Для реализации этих задач опытные учителя используют разнообразные методики, проблемные и игровые задания. Дидактическая игра позволяет реализовать все основные функции обучения: образовательную, воспитательную, развивающую. Такие формы занятий имеют значение для расширения образовательного пространства за счёт введения в содержание курса естественных наук современных представлений о новых материалах и технологиях.

На наш взгляд поставленная проблема решается на уроках естественно-научных дисциплин в старших классах. Для пропедевтики нанотехнологий предлагаем педагогам тематику курса «Основы наноматериалов и нанотехнологий»:

1. Нанонаука. История развития нанотехнологий.

2. Классификация наноматериалов. Самоорганизация и самосборка в нанотехнологиях.

3. Инструменты нанотехнологий.

4. Нанооткрытия в химии, медицине, текстильной и пищеой промышленностях, строительстве, военном деле, космосе, электронике, машиностроении и т.д.).

Главным результатом работы с учащимися должна стать не сумма переданной информации, а формирование интереса школьников к проблеме нанотехнологий, развития их мышления. Поэтому, каждому предметнику необходимо разработать тематическое планирование уроков, расширить выше предложенную тематику, пересмотреть цели и задачи уроков естественно-научного цикла, ввести элементы наномира.

В последние десятилетия, бурно развивающиеся области нанотехнологий, изучающие наноструктуры материалов значительно повлияли на школьное образование. Тема «нано» стала популярной на олимпиадах различного уровня, а в общеобразовательных школах уже вводятся элективные курсы по этой теме, написаны учебные пособия и выполняются исследовательские проекты. Нанонаука стала поистине междисциплинарной, в ней трудно бывает разделить биологию, физику, химию. Для лучшего усвоения межпредметного материала мы рекомендуем для учащихся старших классов ввести практикум по решению задач с привлечением необходимых сведений из наноматериалов и нанотехнологий. Предлагаем одну из используемых контрольных работ для школьников.

Контрольная работа по курсу «Основы наноматериалов и нанотехнологий»:

1.	Радиус атома железа равен 132 пм. При каком минимальном n размер частицы железа попадет в нанодиапазон?	(n = 4)
2.	Определить долю (%) атомов золота на поверхности наночастицы золота.	(40-50%)
3.	Имеются два наноматериала одного и того же химического состава. Средний радиус частицы первого материала – 200 нм, а второго – 40 нм. Форма частиц – шар. Во сколько раз второй материал имеет большую удельную поверхность?	(s/v = 5)
4.	Удельная поверхность открытых одностенных углеродных нанотрубок равна 1000 $м^2/г$, а плотность - 1,3 $г/см^3$. Определить диаметр нанотрубки.	(d = 3нм)
5.	Определите массу графенового квадрата 10 × 10 мм. Длину связи С – С для графита взять из справочной литературы.	(m = 76,1 нг)
6.	Оцените, сколько атомов цинка входит в состав наностержня диаметром 20 нм и длиной 1 мм. Плотность оксида цинка равна 5,75 $г/см^3$.	(N = $1{,}34 \times 10^{10}$)
7.	Давление насыщенного водяного пара фазы и макрофазы отличаются на 1%. Определите минимальный радиус капли воды, при котором ее можно еще считать макрофазой. Сколько молекул содержится в такой капле.	(r = 105 нм, N = 162 млн)

Таким образом, считаем возможным создание элективного курса на базе старшей школы по пропедевтике нанотехнологий с использованием современных научных достижений в физике, биологии и химии с целью активации познавательного интереса старшеклассников.

1. Алфимова, М.М. Занимательные нанотехнологии.. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 96 с.
2. Алфимова, М.М. Занимательные нанотехнологии. Режим доступа: https://www.youtube.com/watch?v= LbsDVTRBW2M. – 23.04.2018.
3. Елагина, В.С. Профессиограмма деятельности учителей естественнонаучных дисциплин по реализации межпредметных связей в обучении школьников // Наука и школа. – 2002. – № 2. – С. 24-30.
4. Евладова, Е.Б. Внеурочная деятельность: взгляд сквозь призму ФГОС // Воспитание школьников. – 2012. – № 3. – С. 16.
5. Нанотехнологии. Азбука для всех / под ред. Ю.Д. Третьякова. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 368 с.
6. Нанотехнологии. – Режим доступа: https://investments.academic.ru/ – 14.05 2018.

УДК 372.8:52

МЕТОДИКА ОБУЧЕНИЯ АСТРОНОМИИ ЧЕРЕЗ МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ

Ю.О. Иванюк
Амурский колледж сервиса и торговли (г. Благовещенск)
ivanuri1991@mail.ru

METHODS OF TEACHING ASTRONOMY THROUGH INTERDISCIPLIC RELATIONS

Yu.O. Ivanyuk
Amur College of Service and Trade (Blagoveshchensk)
ivanuri1991@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.228-230

Проблема в образовании заключается не только в передаче объема знаний, а еще и в том, чтобы научить учиться. В данной статье автор рассматривает метапредметный подход на уроках астрономии с целью активизировать творческую деятельность учащихся. Метапредметность позволяет создать целостную картину мира в сознании ученика, объединив учебные дисциплины из различных областей (физика, математика, химия, биология, география и т.д.). Игровые моменты на уроках помогают студентам осознать возможность применения приобретенных знаний в смежных областях науки, синтезировать явления, заново выдвинуть идеи, повторить открытие. Такая методика позволяет по новому организовать понимание. На таких уроках астрономии происходит формирование личности ответственной, самостоятельной, творческой, а также происходит углубление знаний по предмету.

Как и большинство современных наук, астрономия в наши дни отличается стремительным ростом. Это объясняется не только тем, что освоение космоса беспредельно расширило границы нашего познания о Вселенной, но и тем, что очень давно (более 150 лет назад) началось содружество между астрономией и физикой, химией, биологией. Физика, химия, биология, радиосвязь и другие науки получили развитие, благодаря астрономии – гигантской лаборатории, в которой эксперимент ведется природой в масштабах, пока еще не осуществимых на земле.

Астрономия и ее методы познания имеют огромное значение в жизни человечества. Нет таких отраслей хозяйства и направлений науки, где не использовались бы астрономические технологии: измерение точного времени, составление географических карт, прогноз погоды, предсказывание магнитных бурь и морских приливов, проблемы навигации, обнаружение полезных ископаемых – пожалуй, всего не перечислить, где бы сегодня астрономия не нашла применение.

Благодаря своим достижениям, средствам массовой информации, астрономия получила известность и вновь вернулась в общеобразовательные учебные заведения разных ступеней образования. Ее эвристическое значение и воспитательное действие на человека любого возраста чувствуется ежедневно. Поэтому не удивляет стремление как можно раньше приобщить учеников начальных классов к астрономическим знаниям. С другой стороны, обучение астрономии требует больших усилий для учителей из-за отсутствия метапредметной связи учебных дисциплин, единой трактовки научных понятий, обще методических требований к процессу обучения.

Анализ интегрированных курсов («Окружающий мир», «Природоведение», «Физика и астрономия», «Химия и астрономия», «География и астрономия») показал, что школьный курс астрономии не должен быть уменьшенным курсом, излагаться не поверхностно, а с опорой на знания учащихся

по математике, физике, химии, биологии, географии, истории и др. Его место на вершине пирамиды школьных знаний, как курса завершающего, не только физико-математического образования, но и их философского и экологического образований, нравственного и эстетического воспитания. Следует отметить, что разрабатываемая концепция астрономического образования в общеобразовательной школе предусматривает: 1) постепенное формирование основных понятий астрономии и космонавтики на протяжении всех лет учебной деятельности учащихся в школе; 2) само обучение астрономии должно строиться на основе достижений психологии и педагогики.

В настоящей статье мы делаем попытку проанализировать эти актуальные проблемы.

Новые понятия «метапредмет», «метапредметное обучение», «метапредметный подход», «метапредметность» приобретают сейчас особую популярность. Это вполне понятно, т.к. метапредметность заложена в основу новых стандартов. Метапредметный подход предполагает, что школьник (студент) не только овладевает системой знаний, но и осваивает универсальные способы учебных действий и с их помощью самостоятельно добывает информацию об окружающем мире. Сегодня важно не столько дать учащимся количество знаний, сколько научить его учиться [14].

Метапредметный подход в образовании, в частности астрономии, разрабатывается для того, чтобы решить проблему разобщенности, оторванности друг от друга разных учебных дисциплин. В природе физические, химические, биологические процессы взаимосвязаны, в учебных же заведениях все эти явления изучаются раздельно, тем самым их природные связи разрывают. Метапредметы – учебные дисциплины, предполагающие работу с материалом нескольких учебных предметов сразу. Это новая образовательная форма, которая выстраивается поверх традиционных учебных дисциплин. В основе лежит мыследеятельностный тип интеграции учебного материала и принцип рефлексивного отношения к базисным организованностям мышления: «знание», «знак», «проблема», «задача» [5, 6, 14].

Дидактическая модель учебного предмета «Астрономия» состоит из двух блоков: основной и процессуальный. Для астрономии основным компонентом являются – научные знания, т.к. только на их основе, и с их помощью возможна реализация всех других ее задач. Процессуальный блок включает комплекс вспомогательных знаний (межнаучные, логические, методологические, межпредметные, историко-научные, оценочные и др.), способы деятельности, формы организации процесса обучения (лабораторные работы, практикумы, наблюдения, домашний эксперимент и др.) [2, 7, 9].

В основе метапредметного подхода находится понимание того, что главное, чему надо учить школьников, – это творческое мышление. Метапредметный подход обеспечивает переход от существующей практики дробления знаний на предметы к целостному образному восприятию мира.

Обеспечение взаимосвязи преподавания астрономии, физики, химии есть ряд нерешенных вопросов, в частности, не устранено полностью некоторое дублирование учебного материала (молекулярно-кинетическое строение вещества, спектральный анализ, тепловое излучение, строение атома, ядерные реакции, физическое поле, теория относительности, законы движения планет, космические скорости и т.д.). Для ликвидации дублирования материала учителя астрономии должны знать программы, содержание родственных предметов. При составлении поурочных планов нужно учитывать не только предыдущую подготовку учащихся, но и указывать, какой материал, где и как его добыть.

Связь между преподаванием астрономии, математикой, физикой, химией, биологией в основном понятийная. Добиться для них полного временного согласования в учебном процессе очень трудно (например, уравнение движение планет, содержание периодического закона Д.И. Менделеева, фотонная структура света, химические действия света, спектры). Курс астрономии [1,4, 8, 10, 11] насыщен сведениями о физике планет, о свойствах материи за пределами Земли, что делает астрономию тесно связанной с физикой.

Методическая работа позволяет определить следующую структуру осуществления метапредметности на уроках астрономии: 1) уроки с привлечением некоторых знаний учащихся из других учебных предметов; 2) наблюдения и экспериментальные опыты; 3) обобщающие уроки; 4) решение

нетрадиционных задач; 5) проведение мониторинга метапредметных результатов; 6) участие в работе олимпиад; 7) организационно-деятельностные игры; 8) турниры способностей; 9) проекты.

Для реализации поставленных целей используем материалы из учебников, задачников по астрономии [1-4, 8, 10-13], электронные учебники, энциклопедии фирм: «1С», «Дрофа», «Кирилл и Мефодий», «Мир вокруг нас».

В качестве примера приведем следующие задачи:

1. Измерьте самодельным эклиметром высоту над горизонтом Полярной звезды и нескольких ярких известных звезд. Проанализируйте результат.

2. При помощи школьного астрономического календаря и подвижной карты звездного неба найдите вечером на небе главные созвездия и планеты. Зарисуйте их положения. Повторите наблюдения через 1, 2, 3 месяца. Объясните результаты.

3. Какие наблюдения доказывают, что в годичном движении Земли ось ее вращения не изменяет своего направления в пространстве?

4. Можно ли наблюдать Венеру утром на западе, а вечером на востоке? Проведите опыт и объясните его.

5. Как определить широту местности по Полярной звезде?

6. В какое время года линейная скорость движения Земли вокруг Солнца наибольшая (наименьшая) и почему?

7. Видимый угловой диаметр Солнца равен 30’. Найти расстояние от Земли до Солнца, если радиус Солнца равен 695000 км.

8. Почему карманные часы в роли компаса дают неточные показания?

9. Почему затмения Луны повторяются через 18 лет?

10. Что произойдет с космонавтом в открытом космосе, если нарушится герметичность скафандра?

В заключение следует отметить, что в условиях новых стандартов образования учитель должен уметь организовывать деятельность учащихся таким образом, чтобы создавались условия как для формирования универсальных учебных действий, так и самих предметных и метапредметных компетенций обучающихся.

---

1. Бакулин, П.И., Кононович, Э.В., Мороз, В.И. Курс общей астрономии. – М.: Наука, 1966. – 527 с.
2. Воронцов-Вельяминов, Б.А. Методика преподавания астрономии. – М.: Просвещение, 1985. – 240 с.
3. Воронцов-Вельяминов, Б.А. Сборник задач по астрономии: пособие для учащихся. – М.: Просвещение, 1980.– 56 с.
4. Воронцов-Вельяминов, Б.А., Страут, Е.К. Астрономия. Базовый уровень. – М.: Дрофа, 2018. – 238 с.
5. Гнитецкая, Т.Н., Ковальчук, Н.Н., Резник, Б.Л. О метапредметности и физике // Школа будущего. – 2018. – № 1. – С. 109-121.
6. Гнитецкая, Т.Н., Шутко, Ю.Е., Иванова, Е.Б., Ковальчук, Н.Н. Иерархические связи и естественнонаучная картина мира // Философия образования. – 2015. – № 5. – С. 49-58.
7. Горев, П.М., Лунеева, О.Л. Межпредметные проекты учащихся средней школы: учебно-методическое пособие. – Киров: ВГУ, 2014. – 58 с.
8. Кондакова, Е.В., Чаругин, В.М. Астрономия. 10-11 классы. Тетрадь-практикум. – М.: Просвещение, 2018. – 32 с.
9. Ланина, И.Я. Не уроком единым. Развитие интереса к физике. – М.: Просвещение, 2002. – 223 с.
10. Левитан, Е.П. Астрономия. – М.: Просвещение, 2018. – 240 с.
11. Майлс Л., Смит А. Астрономия и космос. – М.: Изд-во Росмэн, 2002.–98 с.
12. Перельман, Я.И. Занимательная астрономия. – СПб.: СЗКЭД, 2017. – 224 с.
13. Рябоволов, Г.И., Дадашева, Н.Р., Самойленко, П.И. Сборник дидактических заданий по физике. – М.: Высш. шк., 1990. – 512 с.
14. Хуторской, А.В. Метапредметный подход в обучении: научно-методическое пособие. – М.: Эйдос, 2016. – 80 с.

УДК 001.891.53

НЕДОСТАТКИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ СТУДЕНТОВ-ФИЗИКОВ В РАМКАХ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА

О.Е. Кадеева, В.Н. Сырицына
Дальневосточный федеральный университет (г. Уссурийск)
kadeeva.oe@dvfu.ru

DISADVANTAGES IN THE FORMATION OF RESEARCH COMPETENCE OF PHYSICIAN STUDENTS WITHIN THE LABORATORY PRACTICE

O.E. Kadeeva, V.N. Syritsyna
Far Eastern Federal University (Ussuriysk)
kadeeva.oe@dvfu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.231-232

В настоящее время университеты ставят главной задачей формирование общих и профессиональных навыков студентов, позволяющих их быстро адаптироваться к окружающей среде. Компетентностный подход в образовании требуется, чтобы умения и навыки студентов-физиков формировались во время учебного процесса, приближенных максимально к реальной профессиональной деятельности. Организация учебного процесса, при котором сформировались бы умения студента-физика, носит проблемы различного характера и представляет важную задачу педагогического характера. Эти умения в университете формируются в ходе лабораторных работ, при выполнении которых у студентов-физиков формируется самостоятельность в проведении экспериментов различного характера и умения применять данные знания в поставленных задачах.

Исследовательская компетенция включает в себя высокие моральные ценности и мотивацию; личностные качества; научные и правовые знания; исследовательские способности и умения; креативные методики исследовательской работы и другое. А также содержит в своем понимании такие структурные компоненты как мотивационно-ценностные; когнитивные; действенно-операционные и рефлексивно-регулировочные. Здесь мотивационно-ценностный компонент демонстрирует надобность к познавательной активности, самостоятельность в принятии решений, а так же выявление ценностной ориентации, проведенных в ходе самостоятельного исследования. Когнитивный компонент формирует естественнонаучную картину мира. Это выражается через познание сути и технологии методов исследования и анализе формулирования полученных знаний. Действенно-операционный компонент определяется способностью выделять проблему исследования, формулировать цель и задачи, и выдвигать научные гипотезы. При этом нужно уметь структурировать полученные знания, формулировать выводы, объяснять и тем более защищать и доказывать собственные идеи. Рефлексивно-регулировочный компонент формирует умения доказывать выбранный метод в осуществлении исследования. Исходя из вышеперечисленного можно сделать выводы, что компоненты исследовательской деятельности выражаются через воспроизведение теоретических знаний; анализ использованной литературы; выбор адекватных исследовательских инструментов; самостоятельное проведение исследований; оформление результатов и так далее.

При этом намечаются и определенные минусы. Студенты-физики выполняют лабораторный практикум по плану, подготовленным преподавателем, при этом лишаются самостоятельности, то есть выбора оборудования, постановки экспериментов. Так же есть еще один минус, это групповое

выполнение эксперимента. Это означает, то один из группы может выполнить данную работу, а остальные выполняют вспомогательные функции, которые не содействуют приобретению практических навыков с оборудованием и присвоением новых знаний. И тем самым нарушается главный из образовательных компонентов лабораторного практикума – самостоятельное практическое освоение знаний. Следующая проблема, которая может возникнуть, это задержка в проведении работы.

Но существует такой вид лабораторного практикума, который позволяет перекрыть данные недостатки и называется он удаленный – это вид для самостоятельного обучения. Он обеспечивает удаленное проведение лабораторного практикума на компьютерах, но они должны быть прикреплены к учебным комплексам, где размещен теоретический материал. Можно самостоятельно выбирать задание, настраивать параметры эксперимента, схему и обрабатывать результаты без лишних хлопот и ошибок.

При этом нельзя забывать о традиционной методике постановки лабораторного практикума по предмету физики и ее этапов: теоретическая подготовка к занятию; знакомство с оборудованием и последовательностью выполнения работы, а также с техникой безопасности; допуск к лабораторному практикуму, который проверяет подготовку студентов; выполнение экспериментальной части между двумя участниками по определенной последовательности действий; обработка полученных данных, теоретический анализ и формулировка вывода; защита лабораторных работ, при которой студенты получают оценку.

Теоретические знания по лабораторным работам студенты получают на лекциях, либо во внеаудиторных занятиях с методическими указаниями к выполнению практикума. Иногда возникают такие ситуации, что по учебному плану не были проведены лекции, где имелась теоретическая информация о данной лабораторной работе, но все ровно нужно ее провести. Поэтому сами студенты вынужденно самостоятельно знакомиться с теорией согласно методическим пособиям, собранным преподавателем. Явный приоритет к теории приучает студентов в будущей деятельности к письменным указаниям. Вместо этого выпускникам университетов ставят задачи, для достижения которых не будет определенным, так как имеется недостаток информации, который бы достиг ожидаемого результата.

Второй недостаток в методики выполнения лабораторных практикумов – отсутствие взаимодействие в процессе проведения данных работ, так как два студента работают по определенной последовательности и отделены от других. Поэтому не формируется навык сопоставления результатов с другими, а так же недостаточна ответственность за достоверность результата в проведенной работе. В настоящее время в основе образования лежит взаимодействие между студентами, направленное на саморазвитие и самоопределение личности в дальнейшей жизни, а так же к адаптации в изменении технологичности и социальной экономичности в жизни.

---

1. Ashchepkov,V.T. Theoretical bases and applied aspects of professional adaptation of teachers of the higher school: Avtoref. yew. …Drs. pedagogical sciences. – Maykop, 1997. – P. 34.

2. Dogadin, N.G. Strengthening of a role of a laboratory practical work in theoretical training of students // The Physicist in the system of modern education (FSSO-OZ): works of the seventh International conference: сб. article of SPb.: RGPU of A.I. Herzen. – 2003. – T. 1. – P. 199.

3. Eltsov, A.B. Integrative approach as theoretical basis of implementation of a school physical experiment. Yew. doctors of pedagogical sciences. – Ryazan, 2007. – P. 342.

4. Igoshev, I.A. Formation and development of research skills and abilities in pupils in the course of training in physics // Questions of a technique and psychology of formation of physical concepts. – Chelyabinsk, 1970. – Issue 1. – P. 84-94.

УДК 37.014

ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЕ ДИСЦИПЛИНЫ КАК ОСНОВА РАЗВИТИЯ ИНЖЕНЕРНОГО МЫШЛЕНИЯ

А.В. Казарбин[1], Ю.В. Лунина[2]
[1]Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
[2]Хабаровский технический колледж (г. Хабаровск)
000283@pnu.edu.ru

NATURAL SCIENTIFIC DISCIPLINES AS THE BASIS FOR THE DEVELOPMENT OF ENGINEERING THINKING

A.V. Kazarbin[1], Yu.V. Lunin[2]
[1]Pacific State University (Khabarovsk)
[2]Khabarovsk Technical College (Khabarovsk)
000283@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.233-237

Анализ подготовки будущих инженеров свидетельствует, что их уровень не вполне отвечает современным требованиям. Существующая образовательная система не создает достаточных условий для личностно-профессионального развития будущих специалистов, раскрытия их творческого потенциала и формирования компетенций. Ориентированная на традиционные результаты педагогического процесса в виде знаний-умений-навыков, она оказывается в ряде случаев неспособной подготовить студента к комплексному решению жизненных и производственных задач. Целью же современного инженерного образования является не столько передача системных знаний, умений и навыков в определенной сфере, сколько развитие способностей постоянно приобретать их и активно использовать для решения возникающих задач. В связи с этим необходим перенос акцентов на развивающую функцию образования, ориентированную на гармоничное личностно-профессиональное развитие выпускника и формирование его компетенций. Изменение целей инженерного образования, актуализация его социокультурной миссии требует осмысления его как приоритетной сферы общественной жизни, как пространства развития сущностных сил человека.

В настоящее время качество инженерного образования, обеспечиваемое существующей образовательной системой, перестало удовлетворять ожидания общества, производства, государства и каждого его гражданина. Проблемы несформированности у выпускников инженерных вузов России инженерного мышления имеют глубокие корни и вызваны не только несовершенством программ профессионального образования и методами преподавания в образовательных организациях среднего и высшего профессионального образования, но также определенными пробелами на уровнях общего и дошкольного образования.

Причины выявленных проблем можно сформулировать следующим образом:

• слабые профессиональные компетенции выпускников инженерных специальностей, направленные на создание идеи и проектирование изобретения, а также разработку технологий изобретения, обусловлены несовершенствами конструктивного мышления, недостаточным вниманием к его развитию на всех уровнях образования;

• слабая степень развития опережающей креативности связана с низким уровнем развития воображения и творческого мышления, основы которых закладываются в период формирования базовой культуры личности в дошкольном и младшем школьном возрасте;

• неразвитость стратегического мышления и несформированность системного подхода, а также слабая устойчивость к информационной перегрузке и непонимание потребностей потребителя вызваны несовершенством программ профессионального образования и технологий их реализации, отсутствием в программах курсов и модулей, направленных на формирование данных профессиональных компетенций;

• слабость таких социальных навыков, как умение работать в команде, боязнь брать на себя лидерство определяются недостатками позитивной социализации обучающихся на всех уровня образования и др.

Вышеперечисленные проблемы усугубляются слаборазвитой социокультурной средой (отсутствие уважения к интеллектуальному труду и интеллектуальной собственности, низкий престиж инженерных кадров низкая оплата труда и т.д.), современным социально-экономическим состоянием страны и политическим давлением на Россию. Сегодня в условиях санкций, связанных с запретом поставок в Россию высокотехнологичного оборудования, пришло понимание того, что экономическая независимость России тесно связана с необходимостью повышения уровня инженерного образования и технологических преобразований в России.

Вышеперечисленное требует поиска новых подходов к разработке новой модели инженерного образования, а именно: целей, отбору содержания, методов, организационных форм подготовки будущего инженера, ориентированного на постоянное наращивание субъектного и профессионального потенциала.

Под инженерным мышлением мы называем вид познавательной деятельности, направленной на исследование, создание и эксплуатацию новой высокопроизводительной и надежной техники, прогрессивной технологии, автоматизации и механизации производства, повышение качества продукции. Главное в инженерном мышлении – решение конкретных, выдвигаемых производством задач с помощью технических средств для достижения наиболее эффективного и качественного результата [3].

К особенностям инженерного мышления можно отнести: способность выявлять техническое противоречие и осознанно изначально ориентировать мысль на идеальное решение, ориентация мысли в наиболее перспективном направлении, с точки зрения законов развития технических систем; способность управлять психологическими факторами, осознанно форсировать творческое воображение. Инженерное мышление характеризуется еще и тем, что, осознанно и целенаправленно сгенерировав идею, субъект ощущает потребность в ее конструкторской проработке, т.е. воплощении идеи в реальный проект новой техники, технологии и т.д.

Отсюда глобальная задача технического вуза – формирование у студентов именно системного творческого инженерного мышления, для чего, кроме способности сознательно целенаправленно генерировать нестандартные технические идеи, необходимо овладеть методологией творчества с тем, чтобы оптимально использовать базу общенаучных и специально-профессиональных знаний в области машиностроения, технологии и конструирования машин. При решении прикладных задач научные знания внедряются в различные области практики. Неизбежная особенность такой деятельности состоит в ее творческом характере.

В основе инженерного мышления лежит прикладной тип мышления, который предполагает наличие не только теоретических знаний, умений и навыков, но и умение самостоятельно поставить цель, выстроить план действий (иногда это происходит на интуитивном уровне), внести конструктивные изменения в разрабатываемое техническое устройство, предложить другое решение проблемы. Важная составляющая деятельности инженера – внедрение материального продукта и экономи-

ческий расчет всех расходов на его производство, презентация (предъявление изделия в более выгодном свете: социальная значимость, надежность, безопасность и др.).

Получить необходимый результат для подготовки будущих инженеров при изучении отдельных предметов невозможно, необходима некая надпредметность, метапредметность знаний и способов деятельности. Метапредметность следует рассматривать как принцип интеграции содержания образования, как способ формирования теоретического мышления и универсальных видов деятельности, она позволяет сформировать в сознании учащихся целостное представление о картине мире.

Для развития инженерного мышления специалисту необходим определенный запас знаний и опыта, позволяющий ему видеть проблемы более широко и нестандартно. Организующей и направляющей силой, нацеленной на формирование инженерного мышления, является мировоззренческая культура специалиста, интегрально формирующаяся за счет всестороннего совокупного математического, естественнонаучного, технического и гуманитарного образования, осознания исторического опыта, в том числе в области науки, техники и инженерной деятельности, осмысленного в широком контексте [1].

По мнению авторов, формирование и успешное развитие такого комплексного понятия как инженерное мышление невозможно без физико-математической подготовки на качественной технической базе образовательного процесса, максимально приближенной к реальному производству.

Математика была всегда неотъемлемой частью человеческой культуры, ключом к познанию окружающего мира, базой научно-технического прогресса, важной компонентой развития личности, в том числе и ее мировоззрения. В этом состоят ценности математического образования, его фундаментальность содержания, как для общества, так и для отдельной личности. Для формирования инженерного мышления важна фундаментальная математическая подготовка, которая предполагает соединение научного знания и процесса обучения, направленного на раскрытие творческого потенциала учащегося в учебном процессе по математике.

Наиболее значимым для развития конструкторских и изобретательских способностей школьников и студентов является учебный предмет физика. Задача данного предмета формирование естественнонаучного взгляда на окружающую действительность, исследовательский подход к изучению явлений, развитие логического мышления, обучение практическим умениям и навыкам. Кроме того, развитие интеллекта происходит благодаря работе с абстрактными моделями при изучении некоторых тем. В процессе обучения физике происходит развитие различных ключевых компетенций, необходимых будущему инженеру, например, информационной компетенции, экологической, коммуникативной, деятельностно-творческой и пр. [2].

Физика вносит наиболее существенный вклад в развитие у школьников и студентов мотивации к изобретательской деятельности (от ситуативных интересов до устойчивых мотивов, перерастающих в дальнейшем в ценностные ориентации и убеждения) и приобретение учащимися практического опыта различных видов конструкторской и изобретательской деятельности: изготовление физических моделей, конструкций и установок, преобразование бытовых приборов выполнение домашних опытов и экспериментов, проведение комплексных исследований природных объектов и явлений, выполнение проектов технической направленности и др.

В формирование инженерного мышления на занятиях физики большой вклад вносит проектная деятельность. Она способствует развитию умений рассматривать явления с точки зрения физики – определять природу явления и его закономерности. Проектное обучение способствует:

• развитию у учащихся: абстрактного мышления, саморефлексии, определения своей собственной позиции, самооценки, критического мышления и др.;

• формированию интеллектуальных умений (аналитических, критических, коммуникативных и др.).

Это обеспечивает развитие комплекса качеств, влияющих на успешность деятельности в меняющихся условиях, социальную мобильность, формирование инженерного мышления.

Сегодня необходимо создавать новую модель инженерного образования, целью которой будет создание условий для целенаправленного личностного развития детей и молодежи, формирования у них положительного восприятия научно – технической, исследовательской и проектной деятельности, устойчивой мотивации к получению инженерного образования, формирования на всех уровнях образования инженерного мышления, подготовки компетентных инженерных кадров в соответствии с существующими потребностями экономики страны. Данная модель должна способствовать решению таких задач как:

1. Повышение уровня вовлеченности и осведомленности детей и молодежи в сфере точных наук, моделирования и конструирования, начиная с дошкольного возраста, посредством профориентационных мероприятий, в т.ч. в системе дополнительного образования.

2. Формирование положительного восприятия инженерной деятельности, промышленного развития края через вовлечение общественных организаций и родителей в систему образовательных событий, обеспечение информационной открытости образовательных организаций.

3. Формирование устойчивой мотивации к получению инженерного образования посредством проведения различных мероприятий (конкурсов, экскурсий на предприятия и т.д.), профориентационной работы, направленных на популяризацию профессии инженера.

4. Обеспечение углубленной практико-ориентированной подготовки обучающихся общеобразовательных организаций в естественно-математической и информационно-технологической областях.

5. Формирование инженерного мышления как результата активной профориентационной работы.

6. Актуализация вариативной части учебных планов в школах, образовательных программ в дошкольных образовательных организациях, путем интеграции основного и дополнительного образования – разработка и внедрение «сквозных» основных образовательных программ общего и дополнительного образования.

7. Поддержка и развитие олимпиадного движения по предметам физико-математического цикла, увеличение количества его участников.

8. Повышение квалификации и переподготовка преподавателей всех уровней образования (в т.ч. и высшего).

9. Увеличение количества детей, привлекаемых к обучению по программам дополнительного образования инженерно-технической направленности (робототехника, 3D-моделирование, техническое моделирование и др.), в т.ч. в рамках сетевого взаимодействия учреждений образования и предприятий.

10. Повышение уровня участия промышленных предприятий в подготовке инженерных кадров путем взаимодействия с образовательными организациями от дошкольного до высшего профессионального (в т.ч. дополнительного) образования.

Формировать инженерное мышление необходимо с раннего возраста. Важно отметить, что в развитии инженерного мышления принимают участие все субъекты образовательной деятельности, с которыми на протяжении всей жизни сталкивается человек [4]. Необходимо заложить в ученика стимулы к зарождению внутренней мотивации, без которой процесс познания будет невозможен.

---

1. Зуев, П.В. Реализация принципа метапредметности при формировании инженерного мышления учащихся // Формирование инженерного мышления в процессе обучения: материалы Международной научно-практической конференции. – Екатеринбург, Россия. – 2015. – 44 с.

2. Мерзлякова, О.П. Компетентностный подход при обучении физике в школе: Учебно-методическое пособие // О.П. Мерзлякова, П.В. Зуев // LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co, Германия. – 2011.
3. Малых, Г.И., Осипов В.Е. История и философия науки и техники: методические указания. Иркутск: ИрГУПС, 2008. – 91 с.
4. Халперн, Д. Психология критического мышления. 4-е международное издание. – СПб.: Питер, 2000. – 512 с.

УДК 372.85

АКТУАЛЬНОСТЬ СТАНОВЛЕНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ МОБИЛЬНОСТИ БУДУЩИХ ПЕДАГОГОВ В СОВРЕМЕННЫХ УСЛОВИЯХ

Е.М. Коландария
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
kolandar@mail.ru

ACTIVITY OF FORMATION OF PROFESSIONAL MOBILITY OF FUTURE TEACHERS IN MODERN CONDITIONS

E.M. Colandaria
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
kolandar@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.237-239

Динамическое изменение и развитие современного общества обусловливает рост требований к профессиональной мобильности будущего педагога, именно это, определяет качество и направление преобразований, в процессе организации его профессиональной подготовки. Готовность современного педагога-предметника к эффективной профессиональной деятельности предполагает не только глубокое усвоение профессиональных компетенций, но и достаточно высокий уровень сформированности профессионально значимых свойств и качеств личности, обусловливающих его профессиональный рост и постоянное самосовершенствование.

Успех современного образования определяется, прежде всего, способностью гибкого и оперативного реагирования на постоянно меняющиеся условия. Нашему государству, современному обществу необходим специалист, умеющий быстро и качественно перестраивать содержание своей профессиональной деятельности в связи со сменой требований рынка труда. Устаревшие методы в новых условиях деятельности могут оказаться не эффективными, и даже регрессивными. Возникает потребность специалиста в получении новых знаний и навыков в течение всей жизни, с учетом конкретных условий и ситуаций.

Для достойного ответа на новый вызов и прорыв в будущее России необходима иная образовательная система, ориентированная на потребности общества знаний и на общественные ценности. В связи с эти и необходима корректировка содержания образования, заключающаяся в переходе от подготовки специалиста, востребованного обществом, к подготовке специалиста, способного создавать общество знаний. Следует изменить и общий стиль обучения, развития и воспитания будущих выпускников, так как уже сегодня нужны специалисты в области образования, способные эффективно действовать в меняющихся социальных, экономических, политических условиях; учителя, спо-

собные осваивать новое информационное поле, сохранять и приумножать достижения образования и культуры [3].

В исследованиях часто отождествляют следующие понятия «конкурентоспособность», «успешность» и мобильность в профессиональной деятельности, что является ошибочным. Следует уточнить эти понятия. Успех – это субъективное понимание жизненного удовлетворения, формирование же конкурентоспособности требует более жесткой концепции личностного развития [4].

Профессиональная мобильность предполагает владение системой обобщенных профессиональных приемов и умение эффективно их применять для выполнения каких-либо заданий в смежных отраслях производства и сравнительно легко переходить от одной деятельности к другой.

Можно выделить два основных типа профессиональной мобильности – горизонтальная и вертикальная.

– горизонтальная профессиональная мобильность подразумевает переход индивида из одной профессиональной группы в другую, расположенную на том же уровне в плане оплаты и престижности профессии;

– вертикальная профессиональная мобильность – это те отношения, которые возникают при перемещении индивида из одного профессионального пласта в другой.

Данные понятия в плоскости педагогического образования конкретизирует Б. М. Игошев следующим образом:

– под вертикальной профессиональной мобильностью он подразумевает готовность педагога к продвижению по карьерной лестнице от учителя-предметника до руководителя любого уровня в сфере образования (завуча, директора образовательного учреждения, работника или руководителя управления образованием). Следует учесть, что речь идет не о его карьеризме, который строится на нездоровых амбициях, а именно о стабильном непрерывном социально-профессиональном росте и развитии специалиста. В этом процессе становления он естественно поднимается в своей профессиональной деятельности до более высокого уровня, а все накопленные знания и полученный опыт работы обеспечивает достаточно прочный фундамент для его дальнейшего профессионального роста и развития;

– под горизонтальной профессиональной мобильностью педагога разумеется рассматривается повышение его профессионального мастерства (получение более высокой квалификационной категории, успешное участие в профессиональных конкурсах), а также его профессиональную готовность к работе в образовательных учреждениях разного вида и типа (государственных и негосударственных, в условиях инновационной или проектной деятельности и т. д.) В данной плоскости возможна и смена профессиональной деятельности [1].

Важно учитывать, что становление профессиональной мобильности происходит в процессе воспитания, обучения, получения жизненного опыта и профессиональной деятельности, так как не является врожденным качеством. Профессиональная мобильность с одной стороны выступает как условие, а с другой стороны как следствие развития профессионального разделения труда в соответствии с потребностями общества путем смены профессии, освоения новых профессий. Наиболее успешно процесс становления профессиональной мобильности специалиста протекает в высшей школе.

В период обучения в высшем учебном заведении мы можем говорить о становлении горизонтальной внутрипрофессиональной мобильности будущих выпускников. Горизонтальная внутрипрофессиональная мобильность предполагает успешность в осуществлении разнообразных видов профессиональной деятельности будущего специалиста, а не сводится лишь к его продвижению по ступеням педагогического мастерства и изменением уровня его подготовленности к работе в образовательных учреждениях разного типа. Для успешной организации процесса становления и развития

профессиональной мобильности будущих учителей, следует включать студентов во всевозможные виды педагогической деятельности на различных этапах и уровнях ее реализации [2].

Можно утверждать, что успех профессиональной деятельности выпускников высших учебных заведений, с учетом современного состояния рыночной экономики, не возможен без их профессиональной мобильности.

Исходя из этого, необходимо вести подготовку будущего учителя, способного к профессиональной мобильности.

Учитывая изложенные аспекты, можно сформулировать основные задачи высшего профессионального образования в свете становления профессиональной мобильности будущих педагогов в условиях его модернизации и глобализации.

1. Образование предполагает подготовку специалистов, которые способны достаточно легко обучаться, успешно и быстро приспосабливаться к изменяющимся условиям и содержанию профессиональной деятельности, заинтересованных в своем беспрерывном образовании и совершенствовании.

2. Образование заключается в формировании у будущего специалиста таких личностных качеств и способностей, которые позволят ему самостоятельно ориентироваться в профессиональном мире и правильно выстраивать направление своего карьерного роста.

Эффективность решения указанных задач можно достичь в ходе грамотного сочетания теоретической подготовки будущих учителей и их практической деятельности. Необходимо ориентироваться на образование связей, которые способны обеспечивать целостность образовательного процесса, образовательных систем ВУЗа, всей системы образования.

---

1. Игошев, Б.М. Профессиональная мобильность учителя: организационно-педагогический аспект // Известия Уральского гос. ун-та. – 2008. – № 56. – С. 34-40.

2. Захарова, М.А., Карпачева И.А., Мезинов, В.Н. Формирование профессиональной мобильности будущего специалиста сферы образования в условиях педагогической практики. – Режим доступа: https://cyberleninka.ru/article/n/formirovanie-professionalnoy-mobilnosti-buduschego-spetsialista-sfery-obrazovaniya-v-usloviyah-pedagogicheskoy-praktiki. – 26.06.2019.

3. Кашлач, В.М. Становление профессиональной мобильности педагога в процессе профессионального образования. – Режим доступа: https://cyberleninka.ru/article/n/stanovlenie-professionalnoy-mobilnosti-pedagoga-v-protsesse-professionalnogo-obrazovaniya. – 27.06.2019

4. Посухова, О.Ю. Тенденции профессиональной мобильности в современном российском обществе // «Ломоносов». Материалы XIII Междунар. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. – Т. I. – М., 2006. – С. 203-205.

УДК 53:001.8;536.758

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОДЕРЖАНИЯ КУРСА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ В ВУЗЕ

С.В. Ланкин
Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)
svlankin@yandex.ru

METHODOLOGICAL ASPECTS OF THE CONTENT OF THE COURSE OF MOLECULAR PHYSICS AT THE UNIVERSITY

S.V. Lankin
Blagoveshchensk State Pedagogical University (Blagoveshchensk)
svlankin@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.240-242

Связь проблемы содержания обучения с проблемой передачи и информирования способа мышления по прежнему остаются актуальными в современном образовании вообще и физического в частности. Анализ различных аспектов методологии физического познания можно найти в работах В.Д. Бакулова, Т.Я. Дубнищевой, С.А. Лебедева, В.Н. Мощанского, А.М. Новикова, В.С. Степина, Е.В. Ушакова, И.С. Якиманской [1, 3, 7, 8, 10, 15, 16, 17], ориентированных на учителя физики средней школы. Вместе с тем, следует отметить, что вопросы методологии физического познания не находят системного освещения в учебных пособиях по физике для вузов.

Методология физики как система знаний о принципах и общих закономерностях физического познания мира может быть структурирована. «Вертикальную» структуру методологии представляют уровни: философско-мировоззренческий, общенаучный, общефизический, конкретно-научный. «Горизонтальную» структуру методологии составляют конкретные представления вертикальных уровней. Преподавание любого предмета подразумевает опору на ранее известные, уже изученные факты. Не является исключением и преподавание молекулярной физики для бакалавриата в вузе. Изучение молекулярной физики предполагает владение студентами хорошим математическим аппаратом, в который входят знания математической статистики, математического анализа, дифференциальных уравнений и комбинаторики. Указанные дисциплины читаются во втором семестре первого курса или в третьем второго курса [2, 6].

Проблемы, связанные с формированием статистических представлений широко обсуждаются в рамках теории и методики физики, написаны учебники для базового и профильного обучения, – например, А.К. Кикоин, И.К. Кикоин, С.Я. Шамаш [4, 5], Г.Я. Мякишев, Б.Б. Буховцев, В.М. Чапругин [9], Н.С. Пурышева, О.А. Крысанова [11, 12]. Особенность современного образования состоит в том, что оно все более носит метапредметный характер. Уровень изложения материала в школьных учебниках качественный. Авторы ограничиваются темами, для изложения которых достаточно знаний школьной математики. Анализ вузовских учебников по молекулярной физике [5, 13, 14] опирается на элементарные знания статистики, методах интегрирования и дифференцирования.

При изучении указанной дисциплины перед студентами стоит три основные задачи: 1) освоить физические понятия и термины; 2) научиться работать с формулами; 3) уметь прогнозировать физические явления, используя методы научного познания [1, 10, 15, 16].

Для коррекции готовности студентов к решению указанных задач была проведена оценка уровня подготовки студентов к изучению курса молекулярной физики. Данная оценка проводилась с помощью контрольной работы на первых занятиях. В эксперименте приняли участие 35 студентов физ. факультета НГУ и 20 – БГПУ [2]. С заданием на 57% справились студенты НГУ и 5, 9% – БГПУ. К вузовским первым занятиям в лучшем случае остается 17% знаний предметного материала. Требуется специальная работа с сознанием учащихся, чтобы они перестали припоминать и позволили себе думать самостоятельно. Преподавание молекулярной физики на первом (втором) курсе является компромиссным вариантом. По ряду причин этот курс следует проводить на старших курсах, т.к. студенты младших курсов не знакомы с методологическими компонентами физики, с теорией электромагнетизма, основами квантовой механики. Все вышесказанное определило тему и цель настоящей статьи.

Общенаучный уровень включает методы познания, которые изучают студенты в философии на втором курсе, используемые в молекулярной физике, в других разделах физики, но и в других науках. Первую группу составляют эмпирическое и теоретическое познание. Вторая группа включает подходы к изучению объектов познания: структурный, функциональный, системный, вероятностный и др. Третья группа заполнена методами, связанными с организацией мыслительных действий: анализ и синтез, сравнение, абстрагирование, идеализация, аналогия, мысленный эксперимент, моделирование, гипотеза, обобщение, доказательство, обоснование.

Философско-мировоззренческий уровень представлен фундаментальными идеями: идея материальности природы, идея о пространстве и времени как форма существования материи [1, 10, 16], идея единства картины мира [3], идея атомизма, идея взаимодействий материи, квантово-полевая концепция и др. Некоторые идеи выступают в роли эвристического метода познания и получили название принципов: симметрии, сохранения, соответствия, причинности, дополнительности [15].

Проблемно-исторический уровень методологии предполагает рассмотрение связи развития физики с социальными процессами, уровнем развития культуры и потребности физической науки и техники, наличие границ применимости физических понятий, законов, преемственности в развитии знаний, связи теории и эксперимента и т.п.

Конкретно-научный уровень связан с особенностями методологии изучения конкретных физических объектов, процессов, явлений, с изучением методов измерения физических величин. Введение содержания методологии физики в учебный процесс может осуществляться через реализацию концепции методологизации стандартных курсов физики [15]. Для изучения элементов методологии в курсе молекулярной физики выдвинуты следующие дидактические принципы: принцип приоритетности вопросов курса, принцип приведения методики изложения предметно-содержательных аспектов в соответствии с методологией познания, учет различия между учебной и научной познавательной деятельностью.

Для методологического анализа структуры физических теорий наиболее приемлемым является подход, предложенный В.С. Степиным [15]. В соответствии с этим подходом подразделяются фундаментальные теоретические схемы, что позволяет построить иерархию теорий. В структуру теоретических схем включается базис, состоящий из эмпирического (научные факты, закономерности, абстрактные объекты), теоретического (физические идеи и принципы науки, гипотезы, модели явлений и реальных тел, научные теории, математический аппарат) и философско-мировоззренческого компонентов. Ядро теории представлено системой понятий об идеализированных объектах познания, системой понятий о характеристиках, содержательно-физическими описаниями, моделями, постулатами, принципами и системой общих законов, выраженных в уравнениях.

В курсе молекулярной физики значительную роль составляют теории, построенные по методологии модельных гипотез (идеальный и реальный газы, статистические распределения, явления

переноса, микро- и макросостояния, статистический вес, цикл Карно, фазовые превращения, строение кристаллов и жидкостей и т.д.).

В соответствии с поставленной целью теории одного и того же познавательного объекта могут иметь качественные различия. Феноменологические теории, вводя систему уравнений (термодинамика), анализируют связи между различными параметрами состояния, молекулярно-кинетическими представлениями, изопроцессами и т.п. Таковыми, например, являются феноменологические теории теплоемкости. Предметом анализа микроскопических теорий служат механизмы микропроцессов, обуславливающих микроскопические свойства (поверхностное натяжение). Динамические теории раскрывают динамику процессов или явлений (диффузия, теплопроводность, вязкость).

В заключение следует отметить на математичность включения методологических аспектов в предметно-содержательную «канву» курса молекулярной физики и всех остальных разделов общей физики.

---

1. Бакулов, В.Д. Актуальные методологические проблемы научного познания // Сб. научных и методологических работ. – М.: ЮФУ, 2016. – Вып. 1. – 259 с.
2. Голышева, Е.А. Уровень подготовки студентов к изучению молекулярной физики в вузе / Е.А. Голышева, С.В. Ланкин, О.Н. Пушкина // Научные разработки: евразийский регион: Материалы Международной науч. конф. теоретических и прикладных разработок. – М.: Инфинити. – 2019. – С. 49-54.
3. Дубнищева, Т.Я. Динамические и статистические закономерности микромира. Концепция современного естествознания. Учебное пособие. – Новосибирск.: Сиб. универ. изд-во, 2003. – С. 147-185.
4. Кикоин, А.К. Физика: учебник для 10 класса школ и классов с углубленным изучением физики / А.К. Кикоин, И.К. Кикоин, С.Я. Шамаш. – М.: Просвещение, 2018. – 302 с.
5. Кикоин, И.К. Молекулярная физика: Учебное пособие / И.К. Кикоин, А.К. Кикоин – М.: Наука, 1975. – 498 с.
6. Ланкин, С.В. Проблемы обучения физике в вузе // Физика: Фундаментальные и прикладные исследования, оборудование: Материалы XV регион. науч. конф. – Благовещенск: Изд-во АмГУ, 2017. – С. 152-154.
7. Лебедев, С.А. Уровни научного знания // Вопросы философии. – 2010. – № 1. – С. 62-75.
8. Мощанский, В.Н. Формирование мировоззрения учащихся при изучении физики. – М.: Просвещение, 1989. – 192 с.
9. Мякишев, Г.Я. Физика. Учебник для 10 кл. общеобраз. учреждений / Г.Я. Мякишев, Б.Б. Буховцев, В.М. Чапручин. – М.: Просвещение, 2018. – 400 с.
10. Новиков, А.М. Методология / А.М. Новиков, Д.А. Новиков. – М.: ИНРГ, 2007. – 668 с.
11. Пурышева, Н.С. Метапредметный подход в методике обучения физики / Н.С. Пурышева, О.А. Крысанова. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ, 2013. – 215 с.
12. Пурышева, Н.С. Физика. Учебник для 10 кл. общеобраз. учреждений / Н.С. Пурышева, Н.С. Возжаевская, Д.А. Исаева. – М.: Просвещение, 2018. – 400 с.
13. Радченко, И.В. Молекулярная физика. Учебное пособие. – М.: Наука, 1965. – 479 с.
14. Сивухин, Д.В. Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. – М.: Наука, 1990. – 552 с.
15. Степин, В.С. Методы научного познания / В.С. Степин, А.Н. Елеуков. – М.: Мысль, 1974. – 239 с.
16. Ушаков, Е.В. Введение в философию и методологию науки. – М.: КНОРУС, 2008. – 592 с.
17. Якиманская, И.С. Педагогическая психология: парадоксы исследования. – М.: МПСИ; Воронеж: НПО «МОДЕК», 2008. – 648 с.

УДК 378

ПОВЫШЕНИЕ МОТИВАЦИИ УЧАЩИХСЯ В ПРОЦЕССЕ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ ПОСРЕДСТВОМ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ

Е.Н. Масленникова
Средняя школа № 2 (г. Благовещенск)
elena1964maslen@mail.ru

IMPROVEMENT OF MOTIVATION OF STUDENTS IN THE PROCESS OF STUDYING PHYSICS THROUGH RESEARCH WORK

E.N. Maslennikova
School No. 2 of Blagoveshchensk (Blagoveshchensk)
elena1964maslen@mail.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.243-244

Современный мир – неограниченное пространство для реализации самых смелых идей и способностей каждого человека, независимо от его местожительства, возраста и социального положения. Профессиональное будущее ребенка во многом зависит от системы образования, которая позволяет развивать его потенциал и формировать навыки, столь необходимые в различных областях производства. Перед современной школой, ориентированной исключительно на академические и энциклопедические познания выпускника, стоят новые задачи, направленные на формирование у выпускников готовности эффективно использовать свои внутренние и внешние ресурсы для достижения поставленной цели. Сегодня весь мир обсуждает основные задачи образования, говорит об универсальных компетентностях, которые полностью отвечают требования «мира труда». Компетентность – это результат образования, выражающийся в овладении учащимся определенным набором способов деятельности, по отношению к определенному предмету воздействия. Его значение состоит в том, что:

1) овладевая каким-либо способом деятельности, учащийся получает опыт присвоения деятельности; «способ деятельности» означает:

- присвоение цели учащимся, а значит, ситуация, позволяющая осознать процесс управления своей деятельностью;

- интеграция различных результатов образования, поскольку освоить деятельность (в отличии от действия) через подражание невозможно;

2) формируется персональный «ресурсный пакет», который составляет второй после самоуправления слой, необходимый для формирования компетенции;

3) компетентности ценны как результат образования сами по себе – набор осваиваемых способов деятельности должен быть социально востребованным и позволять учащемуся оказываться адекватным типичным ситуациям;

4) именно такой набор осваиваемых способов деятельности и является предметом запроса работодателей (и других заказчиков), который может быть актуален некоторое количество времени, а затем корректироваться в связи с изменением социально-экономической ситуации.

В Федеральном государственном стандарте прописаны основные компетенции, которыми должен овладеть обучающийся. Один из путей формирования которых является – вовлечение обучающихся в учебно-исследовательскую деятельность [1]. Современным ученикам доступны многие

способы получения информации. На этом фоне снижается мотивация изучения физики, хотя в настоящее время потребность в качественных специалистах инженерного профиля резко возросла. Соответственно встает вопрос о повышении мотивации учащихся при изучении физики.

В 2016-2017 учебном году сотрудниками лаборатории спектрального анализа БГПУ Л.П. Карацуба и Т.А. Меределиной было сделано предложение о совместной научно-исследовательской работе учащихся школы № 2 г. Благовещенска» и студентов физико-математического факультета БГПУ. На подготовительном этапе определились группы учащихся 8-10 классов, которые заинтересовались проектом и проявили желание работать. Встречи с участниками проекта, анкетирование и тестирование, позволили сформировать «карты развития» учащихся, определить уровень способностей и профильной подготовки ребят. Учащиеся были разбиты на группы, каждой группой руководили студенты 4-5 курса, вместе со студентами ребята составляли планы по каждому конкретному заданию, проводили физический эксперимент, готовили доклады и презентаций для выступления на ученических конференциях. Совместное проведение научно-практической работы учащихся школы со студентами и преподавателями вуза способствует решению еще одной важнейшей задачи современности – ликвидации дефицита преемственности школа-вуз [2]. За три учебных года было выполнено 12 экспериментальных ученических работ. В таблице представлены результаты участия учеников в научно-практических конференциях.

Призовые места в научно-практических конференциях за 2016-2019 гг.

	Школьная научно-практическая конференция «Логос»	Городская конференция «Старт в науку»	Областная конференция «Человек в современном образовательном пространстве»
2016-2017	1, 2 место	2 место	1, 2, 2, 3 место
2017-2018	1, 3 место	2 место	1, 2, 3 место
2018-2019	2, 3 место	3 место	Номинация « За актуальность исследования»

Объекты исследования были разнообразные: «Определение наличия канцерогенов в сигаретном пепле», «Определение наличия канцерогенов в чипсах», «Загрязнение почвы в разных частях города», «Наличие ПАУ в подсолнечном масле разной прожарки» и другие не менее интересные темы. Учащиеся выступали со своими работами перед одноклассниками и учащимися других классов. В ходе работы у 7 учащихся повысилась итоговая оценка, дети стали лучше заниматься не только по физике, но и по другим предметам. В ходе изучения некоторых тем дети, которые участвовали в научно- исследовательской работе, сами становились «учителями» и представляла своим одноклассникам новый материал. Ребята овладели умениями формулировать гипотезы, конструировать, проводить эксперименты, оценивать полученные результаты; овладели умением сопоставлять экспериментальные и теоретические знания с объективными реалиями жизни, что полностью отвечает требованиям стандарта [3].

Безусловно, такая работа способствует повышению мотивации учащихся при изучении физики, способствует развитию коммуникативных и познавательных способностей учащихся, готовит ребят к взрослой жизни, помогает определиться с выбором будущей профессии.

1. Федеральный государственный образовательный стандарт основного общего образования. – М.: Просвещение, 2017. – 61 с.

2. Филатова, Л.О. Развитие преемственности школьного и вузовского образования в условиях профильного обучения в старшем звене средней школы. – М.: Лаборатория базовых знаний, 2005. – 192 с.

3. Савенков, А.И. Психологические основы исследовательского подхода к обучению. – М.: Просвещение, 2006. – 434 с.

УДК 378: 37.09

ОБ АККРЕДИТАЦИИ НАПРАВЛЕНИЯ ПОДГОТОВКИ 03.03.02 «ФИЗИКА»

А.Б. Пагубко
Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)
005981@pnu.edu.ru

ABOUT ACCREDITATION OF THE TRAINING DIRECTION 03.03.02 PHYSICS

A.B. Pagubko
Pacific State University (Khabarovsk)
005981@pnu.edu.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.245-248

При формировании основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП) по направлению подготовки 03.03.02 «Физика» является обязательным выполнение требований принятого стандарта [1] и иных нормативных и локальных актов по вопросам высшего образования, разъясняющих положения этого стандарта [2 - 4].

Дисциплины. На начальной стадии создания ОПОП был определен круг дисциплин базовой и вариативной части, который обеспечивал в полной мере реализацию образовательной программы с учетом профиля подготовки, а также кадрового состава кафедры и привлекаемых к реализации программы специалистов профильных организаций, уровень материальной базы университета. Отбор дисциплин, особенно вариативной части, определяется направлениями научной работы сотрудников кафедры, их уровнем квалификации. Дисциплины по выбору представляют собой адаптированные к учебному процессу результаты научной деятельности преподавателей кафедры и привлеченных специалистов. Все это в целом позволяет определить профиль подготовки, привлекательность для абитуриентов и востребованность на рынке труда.

Далее была разработана матрица распределения дисциплин и практик с учетом последовательности их изучения (прохождения) обучающимися. И наконец, для каждой дисциплины окончательно было определено количество зачетных единиц (ЗЕ) и вид промежуточного контроля. В настоящее время 1 ЗЕ приравнена к 36 академических часов, на контроль в форме экзамена выделяется одна зачетная единица, общая учебная работа обучающегося (аудиторная вместе с самостоятельной работой) составляет в среднем 54 часа в неделю.

Учебный план и календарный график. На основании выше изложенного был формирован учебный план и календарный график. Согласно ФГОС ВО на каждый должно приходиться по 30 зачетных единиц и не более 12 контрольных мероприятий (зачетов и экзаменов).

При формировании учебного плана в рамках первого блока Б1 на базовую часть пришлось 57 %, а на вариативную часть – 43% от общего количества ЗЕ этого блока. Причем 46% зачетных единиц вариативной части – это дисциплины по выбору. Требовалось еще учесть соотношение контактной (аудиторной) и самостоятельной работ, которое составило 1:1 (по 50%), а также лекций к аудиторной работе, что в нашем случае составило 39,98%. Средняя недельная нагрузка за весь период обучения – 53,9 часа при средней аудиторной нагрузке – 26,2 часа.

Компетенции. Следующим шагом в формировании ОП является закрепление компетенций из перечня в стандарте за соответствующими дисциплинами и практиками. Как показал опыт, число компетенций, которые будут сформированы при изучении данной дисциплины, не должно быть

большим, обычно 1-2 компетенции и очень редко – до 4 компетенций. При распределении компетенций обязательно создание матрицы компетенций, наличие которой позволяет, во-первых, «видеть» наличие закрепления за дисциплиной соответствующего набора компетенций, во-вторых, установить взаимосвязь дисциплин с соответствующей компетенцией (согласно нормативным актам каждая компетенция должна формироваться как минимум двумя дисциплинами, причем из базовой и вариативных частей первого блока). Профессиональные компетенции (ПК) и общепрофессиональные компетенции (ОПК) раскрываются главным образом дисциплинами вариативной части. Особое место в процессе формирования компетенций играют практики. Практики являются основой для становления обучающихся в профессиональном плане, в приобретении ими опыта практической деятельности по направлению подготовки. По этой причине за практиками закрепляют главным образом профессиональные компетенции соответствующих видов деятельности.

Программы практик. В учебном плане предусмотрено три вида практик, как последовательных этапов в развитии навыков самостоятельной работы: учебная практика, производственная практика и преддипломная практика. Учебная практика проводится дискретно в виде одного дня в неделю в течение семестра. Производственная практика (научно-исследовательская работа) проводится в конце 6 семестра и является этапом в подготовке междисциплинарного курсового проекта. Преддипломная практика, как обязательная, проводится после завершения теоретического обучения и обеспечивает возможность применения знаний и практических навыков в области физики для определения подготовленности выпускника к выполнению профессиональных задач.

Программы практик представляют собой обязательные документы отражающие все элементы процесса по формированию выбранных компетенций: от предшествующих практике дисциплин до к*ритериев и шкалы оценивания усвоения компетенций по уровням.* Местом практики являются лаборатории университета, а также организации активно занимающиеся научной и инновационной деятельностью в области физики и смежных областях, с которыми заключаются договора о долгосрочном сотрудничестве. Режим работы организации распространяется на практикантов с продолжительностью рабочей недели в астрономических часах: для обучающегося возрастом до 18 лет – не более 35 часов; при возрасте выше 18 лет – не более 40 часов. Форма отчетности: Зачет с оценкой при условии предоставления рабочего плана (графика), индивидуального задания, дневника, отчета по практике, отзыва руководителя.

Рабочая программа дисциплины. Для реализации образовательной программы подготавливается рабочая программа дисциплины (РПД), в которой, наряду с общими сведениями о месте дисциплины в учебном плане и трудоемкости, отражается структура и содержание каждого из видов занятий и самостоятельной работы (тема, количество часов). Указываются также компетенции, формирующиеся у обучающихся в результате освоения этой дисциплины через категории «знать», «уметь», «владеть» по трем уровням. РПД содержит сведения об учебно-методическом, информационном и материально-техническом обеспечении с указанием на приказы о ежегодном обновлении перечней программного обеспечения, баз данных, информационных справочных систем и аудиторном фонде. Неотъемливаемой частью РПД является фонд оценочных средств (ФОС), представляемый как отдельный документ. Построение ФОСа основывается на перечне компетенций с указанием этапов их формирования, показателей оценивания компетенций и шкалы оценок, набора типовых контрольных заданий необходимых для оценки знаний, умений, навыков, характеризующих этапы формирования компетенций по видам и формам занятий и контроля.

Аннотации дисциплин. РПД с соответствующим ФОС представляет собой достаточно объемный документ, что затрудняет общее знакомство с ОП. Аннотация дисциплины размером в одну страницу имеет стандартизированный вид: название дисциплины, направление подготовки и профиль, место дисциплины в УП, реализуется кафедрой, цель и содержание дисциплины, формируемые

компетенции, перечень образовательных технологий (лекции, лабораторные работы, практические занятия, самостоятельная работа, консультации, контроль и т.д.), общая трудоемкость (зачетные единицы и часы), распределение аудиторных часов по видам занятий и на самостоятельную работу, виды контроля.

Государственная итоговая аттестация. Итоговая аттестация направлена на проверку сформированности всех компетенций: общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) выбранных видов деятельности. Форма государственных аттестационных испытаний – подготовка и защита выпускной квалификационной работы (ВКР). Оценка овладения компетенциями ОК проводиться отдельным тестированием. Программа итоговой аттестации помимо формы содержит требования к оформлению ВКР, порядок подготовки и процедуру защиты ВКР, программное и материально-техническое обеспечение. Основная часть программы раскрывает компетенции по категориям «знать», «уметь», «владеть» и по уровням, этапы формирования и связь с дисциплинами, описание показателей и критерии их оценки.

Кадровый состав. Расчет целочисленных значений ставок научно-педагогических работников (НПР) обеспечивающий реализацию образовательной программы и удовлетворяющий требованиям стандарта производится по часам аудиторной нагрузки преподавателя на одного обучающегося. При таком подходе к расчету сильно теряют преподаватели тех дисциплин, в которых есть плановые индивидуальные виды работ с указанием часов на студента (например, курсовая работа, расчетно-графическая работа и т.д.). В этом случае зачтется только время на одного студента. Наиболее привлекательным для учета затраченного времени на индивидуальную работу со студентом является междисциплинарные курсовые проекты, так как позволяют привлекать большее число сотрудников кафедры и высококвалифицированных специалистов из иных организаций.

Требования ФГОС ВО по направлению 03.03.02 «Физика». Доля штатных НПР должна составлять не менее 50%. Доля НПР, имеющих базовое высшее образование, а также прошедших программу повышения квалификации объемом не менее 500 часов, соответствующее профилю преподаваемой дисциплины – не менее 70%. Доля НПР, имеющих ученую степень (в том числе ученую степень, присвоенную за рубежом и признаваемую в Российской Федерации) и (или) ученое звание (в том числе полученное за рубежом и признаваемое в Российской Федерации), – не менее 60%. Доля НПР из числа руководителей и работников организаций, деятельность которых связана с направленностью (профилем) реализуемой данную программу (имеющих стаж работы в данной профессиональной области не менее 3 лет) – не менее 6%.

Материальная база. Финансирование реализации ОПОП ВО по направлению подготовки 03.03.02 «Физика» осуществляется в объеме нормативов финансирования высшего учебного заведения. Материально-техническая база обеспечивает проведение всех установленных учебным планом дисциплин и междисциплинарной подготовки в соответствии действующих санитарных и противопожарных правил и норм. Образовательный процесс полностью обеспечен: лекционными аудиториями с презентационным оборудованием; компьютерными классами с соответствующим бесплатным и лицензионным программным обеспечением; специализированными аудиториями, оснащенными соответствующим лабораторным оборудованием для проведения лабораторных работ.

Компьютеры учебных аудиторий объединены в локальные телекоммуникационные сети. Обеспечена возможность беспроводного доступа к сети, в том числе с личных ноутбуков. Существует возможность выхода в сеть Интернет, в том числе в процессе проведения занятий. Использование системы личных электронных кабинетов студентов и преподавателей. Наличие аудиторий для самостоятельной работы обучающихся и лабораторий для проведения научно-исследовательских работ студентов.

Библиотека и интернет-ресурсы. Все РПД обеспечены полным комплектом учебно-методических материалов, включая интерактивные образовательные ресурсы, с представлением информа-

ции о них в локальной сети ТОГУ и сети Интернет (время доступа – не менее 150 часов в год на человека). Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями основной учебной литературы из расчета не менее 50 экземпляров на 100 обучающихся каждого из изданий и дополнительной литературы в расчете не менее 25 экземпляров на 100 обучающихся.

Всем обучающимся предоставляется возможность использования электронно-библиотечной системы через сайт и электронные читальные залы, включая доступ к полнотекстовым научно-методическим и учебно-методическим материалам.

Общая характеристика. На основании подготовленных материалов по образовательной программе пишется общая характеристика (ОХ) ОПОП, в которой отражены нормативные документы, цель ОПОП, трудоемкость, область и объекты, а также виды и задачи профессиональной деятельности выпускников и компетенции, как результат освоения программы. Вторая часть ОХ содержит сведения об образовательном процессе и ресурсное обеспечение.

Деканат. Важную роль в реализации образовательной программы играет деятельность деканата, который непосредственно формирует контингент обучающихся (приказы на зачисление) и отслеживает его движение (приказы на перевод с курса на курс, на профиль, на выход в академический отпуск и выход из него, на отчисление, ведение личных карточек студентов, хранение экзаменационно-зачетных ведомостей, экзаменационных листов и иные виды документов менее значимых для образовательного процесса, но имеющих значение для обучающихся). Кроме того, введении деканата находятся составление расписания занятий и сессий. Как показала практика расписания занятий и сессий должны храниться не менее пяти лет.

Тестирование. При аккредитации обязательно проводится тестирование обучающихся старших курсов экспертом по тестам самого эксперта или тестам подготовленным кафедрой. Требование к тестам – это возможность делать заключение о степени усвоения обучающимися компетенций стандарта.

Итоги. Успешное прохождение процедуры аккредитации кафедрой физики ТОГУ [5].

---

1. ФГОС ВО по направлению подготовки 03.03.02 «Физика» (уровень бакалавриата) // Портал Федеральных государственных образовательных стандартов. – Режим доступа: http://fgosvo.ru/uploadfiles/ fgosvob/ 030302_Fisika.pdf

2. Приказ Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 г. №301 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры» // Федеральный портал «Российское образование». – Режим доступа: http://www.edu.ru/documents/search/ ?document%5Brasdel%5D %5B%5D=&document%5Borgan%5 D%5B %5D =%7C116&document%5Btype% 5D%5B%5D=%7C2&form%5 Bfrom%5 D=05.04.2017 &form%5Bto% 5D=&document%5Bnum% 5D=301&document%5 Bname%5D=&document%5 Btext%5D=

3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 29 июня 2015 г. № 636 «Об утверждении порядка проведения государственной итоговой аттестации по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры» // Федеральный портал «Российское образование» – Режим доступа: http:// www.edu.ru/documents/search/?document%5Brasdel%5D%5B% 5D=&document%5Borgan%5D%5B%5D=&document%5Btype%5D%5B%5D=&form%5Bfrom%5D=29.06.2015&form%5Bto%5D=&document%5Bnum%5D=636&document%5Bname%5D=&document%5Btext%5D=

4. Устав ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет» // Портал ТОГУ. – Режим доступа: http://pnu.edu.ru/media/filer_public/e1/58/e1583357-de12-4e28-9679-569451576f47/ustav-togu-26122018.pdf

5. Свидетельство о государственной аккредитации ТОГУ серия 90А01 № 0003208 регистрационный № 3053 от 10.04.2019 с приложением 1// Портал ТОГУ – Режим доступа: http://pnu.edu.ru/media/filer_public/9e/24/9e245262-ef56-4111-966f-848ebb832c56/ akkred-10042019.pdf

УДК 378.016

АНАЛИЗ ОТРАЖЕНИЯ ПРЕДМЕТОВ «ФИЗИКА» И «ОБЩАЯ ФИЗИКА» В ПРОЕКТАХ ПРИМЕРНЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ И УЧЕБНЫХ ПЛАНАХ ВУЗОВ РФ ПО ИНЖЕНЕРНЫМ НАПРАВЛЕНИЯМ ДЛЯ ФГОС 3++ БАКАЛАВРИАТА И СПЕЦИАЛИТЕТА

А.В. Сюй[1, 2]

[1] *Дальневосточный государственный университет путей сообщения (г. Хабаровск)*

[2] *Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)*

alsyuy271@gmail.com

ANALYSIS OF REFLECTION OF SUBJECTS OF PHYSICS AND GENERAL PHYSICS IN THE PROJECTS OF EXAMPLE EDUCATIONAL PROGRAMS AND CURRICULAS OF HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS OF THE RUSSIAN FEDERATION IN ENGINEERING DIRECTIONS FOR THE FEDERAL STATE EDUCATION STANDARIET 3 ++

A.V. Xu[1,2]

[1]*Far Eastern State University of Railway Engineering (Khabarovsk)*

[2]*Pacific State University (Khabarovsk)*

alsyuy271@gmail.com

DOI: 10.2250/PFARE.2019.249-251

Начиная с распада СССР (1991 г.) наша страна находится в постоянных реформах, политических, экономических и образовательных. В связи с Болонским процессом Российская Федерация стала активно применять образовательные технологии западных стран и разрабатывать свои образовательные стандарты, которые сфокусированы на приобретение обучающимися определенного набора компетенций в зависимости от направления и уровня подготовки. Каждая компетенция содержит определенный набор знаний, умений и владений, которыми должен овладеть обучающийся в процессе обучения. Министерство образования РФ в разные годы имело несколько наименований. Сегодня мы получили два министерства образования: Министерство просвещения РФ (дошкольное, общее среднее и среднее профессиональное образование) и Министерство образования и науки РФ (высшее образование и исследовательские институты). Далее мы будем обсуждать только высшее образование.

За последние 10 лет высшее образование в РФ претерпело несколько волн – Федеральных государственный образовательных стандартов высшего образования (ФГОС 1, 2, 3). На сегодня мы имеем уже ФГОС 3++, по которому должны вести обучение все ВУЗы страны. К ФГОС 3++ добавляются профессиональные стандарты по всем специальностям и в совокупности ВУЗы должны разрабатывать основные образовательные программы (ООП) по всем направлениям подготовки основываясь на примерных основных образовательных программах (ПООП), которые разрабатываются учебно-методическими объединениями (УМО) по каждому направлению подготовки. В УМО входят самые квалифицированные и опытные работники высшего образования.

В связи с тем, что ФГОС 3++ не обязывает образовательные организации высшего образования (ОО ВО) составлять ООП с точным распределением по дисциплинам и часам, а лишь дает перечень обязательных дисциплин для изучения, каждая ОО вольна составлять ООП по своему усмотре-

нию, руководствуясь ФГОС 3 ++, профессиональными стандартами и ПООП. Но ПООП до сих пор еще не утверждены Минобрнауки РФ, мало того примерно по половин ПООП еще не разработаны. Есть только проекты ПООП по некоторым направлениям подготовки по бакалавриату и специалитету.

В данной работе проведен анализ отражения предметов Физика и Общая физика в проектах примерных образовательных программ и учебных планах вузов РФ по инженерным направлениям для ФГОС 3++ бакалавриата и специалитета, в связи с тем, что идет повальное сокращение объемов по физике на данных направлениях подготовки, а по некоторым из них даже исключение из учебного плана.

На сайте федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования размещены проекты ПООП для всех направлений подготовки по бакалавриату и специалитету. Ниже приведены таблицы, в которых содержатся сведения о количестве зачетных единиц и числа семестров, предусмотренных для освоения физики по математическим, естественным и инженерным направлениям подготовки в соответствии с ФГОС 3++. Данные с портала федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования проанализированы на 30.05.19 по всем имеющимся ПООП.

Можно сделать некоторые выводы. По бакалавриату и по специалитету количество часов по физике вполне достаточное. Отмечается стабильно сильная подготовка по физике по такому направлению как 140000 Ядерная энергетика и технологии. Общая физика изучается шесть семестров объемом 30 зачетных единиц (1ЗЕ= 36 академических часов). Уже стало традиционным снижение объема по физике для направления 080000 Техника и технологии строительства по бакалавриату 5 ЗЕ на 2 семестра и по специалитету 10 ЗЕ на 2 семестра. Ранее (примерно до 2010 года) по данному направлению всегда было 3 семестра.

Примечательно то, что по направлению 070000 Архитектура в ПООП приводится общий объем по циклу дисциплин (модулей) общеинженерного направления, т.е. ОО ВО сама выбирает наименование и объем нагрузки по этим дисциплинам. Таким образом, ОО ВО вправе вовсе не планировать физику в учебном плане ООП, как это уже сделано в ряде ПООП, например:

29.03.05 Конструирование изделий легкой промышленности,

09.03.02 Информационные системы и технологии,

09.03.03 Прикладная информатика,

По направлению 110000 Электроника, радиотехника и системы связи ОО ВО также самостоятельно решает о включении такой дисциплины как физика в учебный план.

По некоторым направлениям, таким как 24.03.01 Ракетные комплексы и космонавтика и 24.03.02 Системы управления движением и навигация ОО ВО самостоятельно формирует объем и количество семестров по физике.

Следует отметить, что повсеместно наблюдается тенденция сокращения объема общеинженерных дисциплин по всем направлениям подготовки. Многие ОО ВО делают это за счет увеличения специальных дисциплин, поскольку сейчас они ограничены только ФГОС 3++, который жестких рамок не задает. Если в СССР все учебные планы были одинаковыми и обучающиеся в разных городах, например по направлению строительство железных дорог изучали одни и те же дисциплины с одинаковым объемом, и студент, при необходимости (по семейным обстоятельствам), мог перевестись из одного ВУЗа в другой, то сейчас это сильно осложняется несовпадением программ. И таким обучающимся приходится досдавать и перезачитывать освоенные дисциплины. Зачастую даже некоторые дисциплины отсутствуют. Сегодня студент, восстанавливаясь в том же ВУЗе на ту же специальность, например, из академического отпуска может иметь разницу в часах, потому что учебные планы разрабатываются и актуализируются каждый год. И из года в год учебный план меняется.

Выпускающие кафедры, разрабатывающие ООП, прежде всего руководствуются своими интересами, т.е. планируют учебный план таким образом, что побольше часов отводят дисциплинам, преподаваемым выпускающей кафедрой и поменьше часов на другие кафедры. Из-за этого «страдают» общеобразовательные дисциплины, в том числе физика. Остается только рекомендовать Минобрнауки РФ взвешенней подходить к утверждению ПООП с ослабленным общеинженерным циклом. И желательно в ПООП прописывать конкретные объемы всех дисциплин, а не отдавать на откуп образовательным организациям высшего образования.

1. http://fgosvo.ru/fgosvo/88/4/23
2. http://fgosvo.ru/fgosvo/146/145/19

УДК 53:372.8; 378.147

МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ В ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ КУРСАНТОВ ВОЕННОГО ВУЗА

Т.А. Трюхан, П.В. Трюхан
Дальневосточное высшее общевойсковое командное училище имени Маршала Советского Союза К.К. Рокоссовского (г. Благовещенск)
tat-tryukhan@yandex.ru

INTERDISCIPLIC RELATIONS IN TEACHING THE PHYSICS OF MILITARY UNIVERSITY CURSORS

T.A. Tryukhan, P.V. Tryukhan
Far Eastern Higher Combined Arms Command School named after Marshal of the Soviet Union K.K. Rokossovsky (Blagoveshchensk)
tat-tryukhan@yandex.ru

DOI: 10.2250/PFARE.2019.251-253

Современная наука становится все более междисциплинарной, все прорывные технологии лежат на стыке наук. Это ярко проявляется в естествознании – физике, химии, биологии, экологии, науках о Земле. Физика является основой современного естествознания: ее законы, приборы и методы исследования успешно применяются в других естественных науках. Без нее не возможен прорыв в технологиях высокого уровня, создание новой военной техники, решение энергетических, экологических и ресурсных проблем.

На современном этапе прорыв в будущее может дать конвергенция, то есть объединение, взаимопроникновение наук и технологий, фундаментом которой является знание наиболее общих законов природы, и которая, по мнению авторов отчета, подготовленного в 2002 г. во Всемирном центре оценки технологий [1], должна объединить знания и наивысшие технологические достижения в области изучения живого и неживого миров и позволить создать природоподобные системы с качественно иными механизмами выработки и потребления энергии [2]. Изучение физики вырабатывает специфический метод мышления и физическую интуицию, которые чрезвычайно плодотворны не только

в науке, но и в жизни. Прошедшие «физическую школу» приобретают творческий потенциал и нестандартные подходы к решению многих проблем.

Чтобы успешно решать актуальные задачи квалифицированному выпускнику военного вуза уже не достаточно иметь узкоспециальную подготовку в своей области, ему необходимы знания в смежных областях, а также четкое представление об основных законах природы, лежащих в основе происходящих процессов и явлений

Преподавание общего курса физики в военном вузе сегодня имеет особое значение и играет важную роль для будущего офицера. Изучение дисциплины «физика» способствует развитию физического мышления, познанию современной физической картины мира. Знания в области физики не только формируют научное мировоззрение, но и закладывают фундамент для освоения специальных военных дисциплин. Теснейшая связь физики с другими дисциплинами привела к тому, что физика глубочайшими корнями вросла в химию, математику, техническую механику и военные науки. Важно не только ознакомить курсантов с основными физическими принципами и законами, научить их использовать свои знания в решении конкретных задач, но и показать тесную взаимосвязь физики с выбранной ими специализацией. Необходимо продемонстрировать на примерах, как наиболее общие законы данной науки (такие как законы сохранения, начала термодинамики, постулаты Бора и др.) находят практическое применение в военном деле.

Современные темпы развития военной техники и ее производства определяют качество профессиональной подготовки офицерского состава Российской Армии в форме квалификационных требований. Они характеризуют образ будущего офицера, а именно, профессиональные знания, умения решать поставленные задачи на уровне максимальной динамичности и творческого подхода с использованием сформированных навыков и компетенций. Выпускник должен знать устройство штатного вооружения и боевой техники, должен быть подготовлен к ее практическому применению, к организации эксплуатации и восстановления техники, особенно в полевых условиях

Это возможно решить с использованием средств и методов реализации межпредметных связей. Проблема межпредметных связей занимает одно из центральных мест в современной дидактике. Одним из прогрессивных направлений в решении данной проблемы является внедрение метапредметных связей в образовательный процесс, применение которых обеспечивает единство подходов преподавателей разных дисциплин к достижению общих целей. Использование метапредметных связей обогащает возможности базисного учебного плана, не приводя к перегрузке курсантов. Например, изучение раздела динамика по физике и дифференциального исчисления по математике и т.д. Аналогично, одинаковый математический аппарат используется при рассмотрении темы «Теория вероятностей и математическая статистика» и «Теория стрельбы». Эти примеры демонстрируют необходимость формирования у курсантов универсального знания, опирающегося на метапредметные связи.

Развитие метапредметных связей в подготовке курсантов призвано обеспечить формирование общей, целостной картины мира, в частности, в рамках получаемой специальности. Это возможно только при активном участии самих обучающихся в учебном процессе. Такая активность в настоящее время достигается за счет использование современных интерактивных технологий обучения. Обосновано, что взаимосвязанное использование технологий развития и саморазвития познавательной самостоятельности и активности обучающихся в процессе обучения физике обеспечивается информационной средой, методологическим основанием которой служат процессы развития и саморазвития (необходимое условие) и связью содержательной и процессуальной сторон обучения (достаточное условие).

Взаимосвязанное использование технологий развития и саморазвития на практических и лабораторных занятиях способствуют повышению интереса и мотивации к изучению физики, конкретизации фундаментальных понятий, законов и теории.

Физика является одной из фундаментальных наук, лежащих в основе развития техники и технологии современного производства, поэтому в решении задач военно-прикладной направленности ей принадлежит определяющая роль. Следует отметить, что решение физических задач военно-прикладного характера является одним из направлений реализации межпредметных связей.

Таким образом, методика обучения курсантов военных вузов решению физических задач межпредметного содержания направлена на повышение качества подготовки и развитие личности будущих офицеров.

Систематическое и целенаправленное использование межпредметных физических задач будет способствовать:

1) повышению интереса и мотивации к изучению физики;

2) конкретизации фундаментальных понятий, законов и теории;

3) раскрытию связей физики с военно-специализированными дисциплинами;

4) расширению знаний курсантов о физических основах функционирования военной техники, о научных методах познания;

5) развитию самостоятельности и широты мышления курсантов.

---

1. Converging Technologies for Improving Human Performance // Nanotechnology, Biotechnology, Information Technology and Cognitive Science / ed. by M.C. Roco, W.S. Bainbridge.– Arlington, Virginia: National Science Foundation. – 2002. – 482 c.

2. Копейкин, К. Что есть реальность? Размышляя над произведениями Эрвина Шредингера. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2014. – 138 с.

СОДЕРЖАНИЕ

Секция 1. Теоретическая физика и моделирование

Авербух Б.Б., Пономарева М.С. Оптическое магнитное зеркало на границе среды с электрическим или электромагнитным откликом на внешнее поле 3

Авербух Б.Б., Пономарева М.С. Распространение плоской S-поляризованной электромагнитной волны в среде из элементов Гюйгенса 6

Алёшин М.С, Прохоренко А.В. Применение библиотек OPEN SOURCE PHYSICS и JZY3D для моделирования виртуальных лабораторных работ по атомным процессам 10

Быковский М.С., Масловская А.Г. Двумерная модель Изинга сегнетоэлектрического фазового перехода: реализация методом Монте-Карло 14

ГорбуновЛ.И., ПоповаА.В., Криштоп В.В. Приложение для моделирования результатов работы интерференционно-поляризационных фильтров 18

Драчёв К.А., Молоканов Б.М., Римлянд В.И. П. Применение метода конечных элементов для расчета акустических полей 22

Жукова В.И., Жуков Е.А. Свойство позитивности оператора переноса нейтронов 26

Капитан В.Ю., Васильев Е.В. Моделирование скирмионных структур в рамках классической модели Гейзенберга 30

Копылова И.Б., Гавриленко К.О. Разработка модели для определения диэлектрических параметров облученных электронами кристаллов триглицинсульфата 33

Красников И.В., Сетейкин А.Ю. Моделирование температурного поля эпидермиса в присутствии наночастиц золота 36

Ливашвили А.И., Криштоп В.В., Якунина М.И. Светоиндуцированная динамика концентрации наночастиц в наножидкости (нелинейный подход) 38

Ливашвили А.И., Костина Г.В., Брюханова Т.Н., Манжула И.С. Нелинейная динамика наночастиц в жидкофазной среде с учетом концентрационной конвекции и сил светового давления 42

Мазур Е.А., Мазур А.И. Параметризация сдвигов фаз в *J*-матричном формализме обратной задачи рассеяния 45

Мазур А.И., Трусенко М.С. Упругое рассеяние альфа-частиц 48

Мороз Л.И., Масловская А.Г. Приложение дробно-дифференциального исчисления к задачам моделирования процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических материалов 53

Насыров В.В. Потенциал однократной ионизации атома гелия 57

Трусенко М.С., Каминский А.В., Белим Л.В. К определению модового состава объемных акустических волн 60

Ульянычева В.Ф., Ульянычев Н.В. Аппаратно-программный комплекс для исследования динамики дыхания 62

Секция 2. Физика конденсированного состояния

Андроникова Д.А., Бронвальд Ю.А., Филимонов А.В., Вахрушев С.Б. Несоразмерная неустойчивость на границе зоны Бриллюэна в цирконате свинца с малым добавлением титана 66

Верхотурова И.В., Нещименко В.В. Расчет концентрации наведенных центров поглощения в оксиде цинка 70

Галкин К.Н., Галкин Н.Г., Доценко С.А., Субботин Е.Ю., Чусовитин Е.Е., Пячин С.А., Астапов И.А. Эпитаксиальный рост и оптические свойства полупроводниковых пленок Ca_2Si, выращенных на Si(111) с жертвенным слоем Mg_2Si 73

Галкин К.Н. Галкин Н.Г. Полупрозрачные и проводящие пленки моносилицида и дисилицида кальция на кремнии для кремниевой оптоэлектроники..... 77

Дудин А.Н., Нещименко В.В. Радиационные дефекты в полых частицах оксида цинка, индуцированные воздействием низкоэнергетических протонов..... 82

Ланкин С.В. Электрические свойства природного клиноптилолита..... 86

Меределина Т.А., Барышников С.В. Адсорбция молекул 3,4-бензпирена в фуллеритовых соединениях 90

Милинский А.Ю. Размерные эффекты в иодиде диизопропиламмония 93

Набережнов А.А., Стукова Е.В., Алексеева О.А., Новикова С.А., Franz A. Сегнетоэлектрический фазовый переход в композите «нитрит натрия + 3D-SBA-15» 97

Тихомирова Г.В., Петросян Т.К., Суханова Г.В., Тебеньков А.В. Транспорт и фазовые переходы в графите при холодном сжатии..... 101

Филимонов А.В. Нанотехнологии в электронике. есть ли предел масштабированию интегральных схем..... 104

Юрина Ю.В., Нещимепнко В.В. С Центры окраски микросфер оксида алюминия, индуцированные воздействием электронов..... 108

Секция 3. Материаловедение

Брянский А.А., Башков О.В., Проценко А.Е., Шакирова О.Г. Кластеризация сигналов акустической эмиссии при анализе кинетики разрушения полимерного композиционного материала..... 111

Бурков А.А., Чигрин П.Г., Кулик М.А. Электроискровые Fe-Al-C-MoS2 покрытия на нержавеющей стали AISI 304..... 113

Дворник М.И., Михайленко Е.А. Получение порошков твердого сплава методом электроэрозионного диспергирования в разных средах..... 117

Каминский О.И., Макаревич К.С., Кириченко Е.А., Зайцев К.С., Пячин С.А. В Получение β-BI_2O_3 методом низкотемпературного пиролитического синтеза и исследование его оптическими методами..... 120

Ким В.А., Тэйн Аунг Нгве, Афанасьева А.А. Импульсное лазерное упрочнение конструкционных сталей 123

Кириченко Е.А., Каминский О.И., Зайцев А.В., Пячин С.А., Макаревич К.С. Получение и фотокаталитические характеристики металл-оксидных композитов α-Bi_2O_3/Bi с различным содержанием висмута 126

Одинокова О.А. Коэффициент вязкости истинного течения полимеров как технологический параметр переработки полимера в изделия..... 129

Пячин С.А., Беля А.В., Каминский О.И. Расчет параметров массопереноса при электроискровом легировании в зависимости от размеров анода..... 133

Пячин С.А., Власова Н.М., Кулик М.А., Каминский О.И., Фролов А.М.,Ткачев В.В., Крутикова В.О. Формирование интерметаллидных покрытий механическим легированием 137

Секция 4. Оптика и лазерная физика

Гончарова П.С., Криштоп В.В., Карпец Ю.М., Киреева Н.М., Попова А.В., Савич Д.С., Ефременко В.Г. Применение электрооптического эффекта для модуляции широкополосного излучения с гауссовым распределением амплитуды..... 141

Долгополов И.С., Петрова М.С., Сюй А.В., Штарева А.В. Оптический фильтр на основе глубокой рельефной структуры переменной глубины 144

Иванова Г.Д., Мяготин А.В., Иванов В.И. Электрострикционная линза в наносуспензии.....147

Кравченко С.И., Капустина Г.Г., Леоненко Н.А. Способы исследования продуктов воздействия лазерного излучения на минеральные образцы..... 150

Мазур Е.А., Жуков Е.А., Жукова В.И. Оптический метод контроля толщины поверхностного слоя для непрозрачных материалов.....154

Максименко В.А. Особенности дихроизма в легированных кристаллах ниобата лития..... 156

Михеенко А.В., Андреев А.И. Численное моделирование нагрева воды под действием сфокусированного лазерного излучения..... 158

Нащочин Е.О., Штарев Д.С., Штарева А.В., Сюй А.В. Температурная эволюция энергии Урбаха висмутата стронция $Sr_3Bi_2O_6$ 161

Петрова М.С., Долгополов И.С., Сюй А.В., Жижченко А.Ю. Изготовление глубокой рельефной структуры переменной глубины для применения в оптическом фильтре..... 164

Пикуль О.Ю., Сидоров Н.В., Палатников М.Н. Аномальная оптическая двуосность кристаллов $LiNBO_3$ с двойным легированием катионами Ta и Mg..... 167

Савич Д.Е., Попова А.В. А Моделирование работы интерференционно-поляризационного фильтра Шольца на примере спектра абсолютно черного тела 170

Шарыпов Р.Е., Капустина Г.Г., Леоненко Н.А. Изучение процесса воздействия лазерного излучения на минеральные наномасштабные среды 174

Штарева А.В., Сюй А.В., Штарев Д.С., Нащочин Е.О. Об аномальной люминесценции гетероструктур $Sr_3Bi_2O_6/SrCO_3$ 177

Секция 5. Техническая физика

Антонов А.А., Барышников С.В. Автоматизация параллельной регистрации линейных и нелинейных диэлектрических свойств сегнетоэлектриков..... 181

Бондарева Т.В., Круглов М.С. Исследование электронно-пучковых эффектов в емкостном высокочастотном разряде низкого давления..... 184

Зайцев А.В., Каминский О.И., Кириченко Е.А., Макаревич К.С., Пячин С.А. Методика оценки био-индифферентности перспективных фотокатализаторов видимого света 186

Зиссер И.С., Васильева А., Фалеев Д.С. Определение электрофизических характеристик солнечных модулей 190

Кхун Х.Х., Башков О.В., Хейн Зо. Исследование волн акустической эмиссии, генерируемых различными типами источников в пластине 194

Нестеров В.И. О влиянии солнечной активности на фазу ОНЧ сигнала трасса Япония – Хабаровск 198

Римлянд В.И., Драчёв К.А. Акустические свойства эластомеров 202

Филимонов А.В., Вайнштейн С.Н., Земляков В.Е. Малогабаритный импульсный наносекундный излучатель ИК-диапазона 206

Секция 6. Физическое образование

Голышева Е.А., Пушкина О.Н., Ланкин С.В. Элементы стохастической подготовки студентов при изучении молекулярной физики 210

Горбанева Л.В. Формирование методологических знаний у учащихся в процессе обучения физике в средней школе 214

Евдокимова В.А. Физика в системе подготовки курсантов военных вузов..... 217

Жидков В.В., Егорова И.В. Методы научного исследования в реализации программы учебной практики..... 220

Зеева А.А., Меределина Т.А. М Научно-исследовательская деятельность школьников по физике в системе непрерывного образования 222

Иванченко И.В., Ланкин С.В. Пропедевтика нанотехнологий в средней школе..... 225

Иванюк Ю.О. Методика обучения астрономии через межпредметные связи 228

Кадеева О.Е., Сырицина В.Н. Недостатки при формировании исследовательских компетенций студентов-физиков в рамках лабораторного практикума 231

Казарбин А.В., Лунина Ю.В. Естественнонаучные дисциплины как основа развития инженерного мышления 233

Коландария Е.М. Актуальность становления профессиональной мобильности будущих педагогов в современных условиях..... 237

Ланкин С.В. Методологические аспекты содержания курса молекулярной физики в вузе 240

Масленникова.Е.Н. Повышение мотивации учащихся в процессе изучения физики посредством научно-исследовательской работы 243

Пагубко А.Б. Об аккредитации направления подготовки 03.03.02 «Физика»..... 245

Сюй А.В. Анализ отражения предметов «Физика» и «Общая физика» в проектах примерных образовательных программ и учебных планах вузов РФ по инженерным направлениям для ФГОС 3++ бакалавриата и специалитета 249

Трюхан.Т.А., Трюхан П.В. Межпредметные связи в обучении физике курсатов военного вуза 251

Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование. *Материалы XVII региональной научной конференции 15 – 21 сентября 2019 г.*

Издательства: АмГУ, БГПУ. Подписано к печати 03.09.19. Редактор – *Е.В. Стукова.* Компьютерная верстка – *Л.М. Пейзель.* Формат 60х84/8. Усл. печ. л. 29,99. Тираж 200. Заказ 820.