

ISSN 1643-0315 • eISSN 2663-2270



ӘЛ-ФАРАБИ атындағы
ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЫ-ФАРАБИ

AL-FARABI KAZAKH
NATIONAL UNIVERSITY

ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ

ВЕСТНИК

СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ

RECENT CONTRIBUTIONS
TO PHYSICS

3(90)2024

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

ХАБАРШЫ

Физика сериясы

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

ВЕСТНИК

Серия физическая

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

№3 (90)

Алматы
«Қазақ университеті»
2024



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №3 (90) желтоқсан

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

Қуәлік № 14498-Ж

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

ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: physicskaz@gmail.com

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

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

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

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

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

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

Алдияров А.У., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

Жаңабаев З.Ж., ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

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

Буфенди Лайфа, профессор (Франция)

Иващук В.Д., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

Ишицука Эцуо, доктор (Жапония)

Лунарска Элина, профессор (Польша)

Сафарик П., доктор (Чехия)

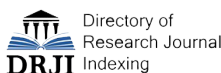
Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

Кеведо Эрнандо, профессор (Мексика)

ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

Дьячков В.В., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

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



Жоба менеджері

Гүлмира Шаккозова

Телефон: +7 701 724 2911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

Пішімі 60x84/8. Көлемі 7,5 б.т.

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

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

1-бөлім

**ТЕОРИЯЛЫҚ ФИЗИКА.
ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР БӨЛШЕКТЕР
ФИЗИКАСЫ. АСТРОФИЗИКА**

Section 1

**THEORETICAL PHYSICS.
NUCLEAR AND ELEMENTARY PARTICLE
PHYSICS. ASTROPHYSICS**

Раздел 1

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.
ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ.
АСТРОФИЗИКА**

A.A. Bisseenov^{1,2} , M.T. Kalambay^{2,3,4*} , Y.S. Abylkairov² , B.T. Shukirgaliyev^{3,2,4} 

¹Xi'an Jiaotong-Liverpool University, Suzhou, China

²Energetic Cosmos Laboratory, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

³Heriot-Watt International Faculty, K.Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

⁴Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: M.Kalambay@hw.ac.uk

EXPLORING OPEN STAR CLUSTER MEMBERSHIPS WITH N-BODY SIMULATIONS AND MACHINE LEARNING

This work explores the application of supervised machine learning algorithms on N-body simulations to analyze the membership of open star clusters. The simulations used in this study are based on the Plummer model, clusters formed with constant star-formation efficiency (SFE) per free-fall time. We use simulations with different SFE and initial random realization. The random forest model was trained using simulations based on a 15% SFE over a time period of 20-100 million years. Subsequently, the model was tested on other N-body simulations with SFEs ranging from 17% to 25%, demonstrating consistently high classification accuracy throughout the dynamic evolution of the tested simulations. The model successfully identified cluster members with minimal deviations despite variations in SFE. Additionally, the algorithm maintained robustness against noise and initial conditions. Most of the errors observed in the model were false positives (FP), often located within a 2 Jacobi radius, suggesting gravitational binding to the cluster's center. This framework and learning strategy exhibit effectiveness and hold promise for further application in analyzing mock observations obtained from N-body simulations. Future work will focus on extending this method to more realistic observational scenarios.

Key words: Star clusters, N-body simulation, Machine Learning, Supervised Learning.

А.А. Бисекенов^{1,2}, М.Т. Қаламбай^{2,3,4*}, Е.С. Абылкаиров², Б.Т. Шукиргалиев^{3,2,4}

¹Сиань Цзяотун-Ливерпуль университеті, Сучжоу қ., Қытай

²Энергетикалық ғарыш зертханасы, Назарбаев университеті, Астана қ., Қазақстан

³Хериот-Уатт Халықаралық факультеті, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

⁴В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: M.Kalambay@hw.ac.uk

N-денені модельдеу және машиналық оқыту арқылы шашыраңқы жұлдыздық шоғырларға мүшелікті зерттеу

Бұл жұмыс шашыраңқы жұлдыздық шоғырға мүшелікті талдау үшін N-денелі модельдеулерге Машиналық оқыту алгоритмдерін қолдануды зерттейді. Осы зерттеуде пайдаланылған симуляциялар шоғырдың бір еркін құлау уақытында жұлдыз түзілу тиімділігі (ЖТТ) тұрақты болатын Пламмер моделіне негізделген. Біз әртүрлі ЖТТ мен бастапқы кездейсоқ таралулармен ерекшеленетін симуляцияларды қолданамыз. Рандом Форест (Кездейсоқ орман) моделі 20-100 млн жыл аралығындағы ЖТТ 15%-ға негізделген симуляцияға оқытылды. Кейіннен ол ЖТТ 17%-дан 25%-ға дейінгі басқа N-дене симуляцияларына сыналды, және бұл модель сыналған симуляциялардың динамикалық эволюциясы барысында дәйекті жоғары жіктеу дәлдігін көрсетті. Модель жұлдыздардың пайда болу тиімділігінің өзгеруіне қарамастан кластер мүшелерін минималды ауытқулармен сәтті анықтай алды. Сонымен қатар, алгоритм шуыл мен бастапқы шарттардың өзгерісіне қатысты тұрақтылықын сақтап қалды. Модельде байқалған қателіктердің көпшілігі жалған позитивтер (FP) болды, олар көбінесе 2 Якоби радиусында орналасады, бұл шоғырдың центрімен гравитациялық байланысуының себебінен деп болжанады. Осы негіздемелік бағдарлама мен оқыту стратегиясы тиімді екен және N-дене симуляцияларын жорамал бақылауларын талдауда одан әрі қолданысқа ие болады. Болашақта осы жұмыстағы әдісті неғұрлым нақты бақылау сценарийлеріне дейін кеңейтуге бағытталады.

Түйін сөздер: жұлдыздық шоғырлар, N-денені модельдеу, машиналық оқыту, бақыланатын оқыту.

А.А. Бисекенов^{1,2}, М.Т. Каламбай^{3,4,2*}, Е.С. Абылкаиров², Б.Т. Шукиргалиев^{3,2,4}

¹Сиань Цзяотун-Ливерпульский университет, г. Сучжоу, Китай

²Энергетическая космическая лаборатория, Назарбаев университет, г. Астана, Казахстан

³Хериот-Уатт Международный факультет,

Актюбинский региональный университет им. К.Жубанова, г.Актобе, Казахстан

⁴Астрофизический Институт им. В. Г. Фесенкова, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: M.Kalambay@hw.ac.uk

Исследование членства в рассеянных звездных скоплениях с помощью моделирования N-тел и машинного обучения

В данной работе приведены результаты исследования по применению алгоритмов машинного обучения с учителем на симуляциях N-тел для анализа членства в рассеянных звездных скоплениях. Моделирование, использованное в данном исследовании, основано на модели Пламмера, а кластеры сформированы с постоянной эффективностью звездообразования (ПЭЗ) на время свободного падения. Каждая симуляция отличается ПЭЗ и начальной случайной реализацией. Модель случайного леса была обучена с использованием симуляций на основе эффективности образования звезд на уровне 15% за период времени от 20 до 100 миллионов лет. Затем модель была протестирована на других симуляциях N-тел с эффективностями образования звезд от 17% до 25%, и показана постоянная высокая точность классификации на протяжении динамической эволюции протестированных симуляций. Модель успешно определила звезды, относящиеся к кластеру с минимальными отклонениями, несмотря на вариации в эффективности звездообразования. Кроме того, алгоритм сохранял устойчивость к шуму и начальным условиям. Большинство ошибок, обнаруженные в модели, были ложными срабатываниями (FP) часто находящимися в пределах двух радиусов Якоби, что указывает на гравитационную привязанность к центру скопления. Показаны эффективность данной структуры и стратегии обучения и возможное дальнейшее применение в анализе мнимых наблюдений, полученных из симуляций N-тел. Продолжение исследования будет сосредоточено на расширении этого метода на более реалистичные наблюдательные сценарии.

Ключевые слова: звездные скопления, моделирование N-тел, машинное обучение, обучение с учителем.

Introduction

In recent decades, observational data has been growing intensively with the development of technology. Analyzing these data gives us new concepts about the evolution of stellar systems, Galaxies, and the Universe [1]. The study of star formation reveals more about the evolution of galaxies and the universe as a whole [1, 2]. Stars form from interstellar gas and dust. Open clusters (OCs), characterized by their relatively young ages (<100 Myr) and consisting of up to few thousand of stars, serve as invaluable laboratories for studying stellar evolution and dynamics [3].

Currently, more than four thousand OCs have been found in our galaxy. *Gaia* observations have played a crucial role in this discovery, providing a comprehensive and accurate three-dimensional map of stars, including their motions, luminosity, temperature, and composition [3, 4]. Identifying the membership of stars within these clusters is essential for understanding star formation and stellar evolution processes. Various methods, such as machine

learning (ML), have been applied to datasets such as *Gaia* observations [4, 5]. Commonly used machine learning methods are random forest, k-nearest neighbors (KNN), and unsupervised learning methods such as StarGo, UPMASK, and Gaussian mixture model (GMM) [6-10].

While these methods produce significant results and contribute to various catalogs, comparisons among such studies often reveal discrepancies. For instance, three different research (CG18 [11], KC19 [12], M21 [13]) investigated the membership of the NGC 2516 cluster. Each group reported a different count of member stars. However, only 25% of the stars identified by KC19, 41% by M21, and 68% by CG18 are consistent with one another [14]. These inconsistencies highlight the potential for errors in star classification, motivating our exploration of alternative approaches for membership analysis. In this work, we explore the possibilities of using ML models on N-body simulations for the membership analysis of OCs. Previous discussions have indicated significant discrepancies in star memberships within catalogs, possibly due to observational limitations

and methodological differences. To address these challenges, we propose leveraging N-body simulations where stars are pre-labeled as members or non-members throughout their simulated lifespan. This approach provides a robust framework for applying and testing ML approaches, potentially leading to the development of more accurate and effective methods for membership analysis.

Methods

The study utilized diverse N-body simulations of star clusters featuring variations in positions, masses, types of stars, and other parameters. These simulations exhibit discrepancies stemming from factors such as the number of stars, random configurations, and the star formation efficiency, illustrating the percentage of the gas mass designated for generating stars. Each simulation category encompasses a range of numerical data concerning Open Clusters stars at each time interval during the cluster's evolution in N-body time. Notably, the simulations in this investigation are rooted in the Plummer model, where the density peaked in the center and the star formation efficiency is constant during one free fall time throughout the gas. And that time passes faster in the center than at the edge of the gas cloud, and more stars form in the center. [15, 16]. Random realizations represent probabilistic values allocated to the initial positions and masses at the start of the simulation. Simulations featuring distinct random realizations exhibit variations in either mass or position. Specifically, there are three different random realizations of both position and mass, as indicated in Table 1. For each Star Formation Efficiency, nine simulations exist encompassing all possible combinations of random realizations for position and mass, as referenced in Table 2. Four SFEs in total result in a cumulative count of 36 simulations.

Table 1 - All random realizations of position and mass

Positions (P)	Mass (M)
1	1
2	2
3	3

Table 2 - All combinations of random realizations, where the first number indicates the position and the second number indicates the mass

11	12	13
21	22	23
31	32	33

In this investigation, SFEs ranged from 15% to 25% and featured a population of 10454 stars before instantaneous gas expulsion. This choice was motivated by the understanding that star clusters with lower SFEs and fewer stars are prone to reduced stability and quicker dissolution compared to those with higher SFEs and larger star populations. Within the 10454-star ensemble, approximately 20% of faint stars were omitted from the training dataset. According to data from the Gaia databases, stars with apparent magnitudes exceeding 21 magnitude in G-band [17] would be indiscernible to observers; thus they were also omitted from both training and testing datasets, along with other faint stars. Consequently, approximately 6000 stars remained for further analysis. Nonetheless, further reduction may be feasible, as certain stars may drift too far from the cluster over time. Details regarding the methodology for such refinement will be provided in subsequent sections.

For learning and testing, characteristics should be accessible and observable through observations, necessitating the selection of specific features. These features include the 2D galactocentric coordinates, velocities in corresponding directions, color index, and apparent magnitude. The primary rationale behind this choice is that these features are readily available in various datasets, making them suitable for study. This approach enables the exclusion of background stars from the testing and training processes, as background stars have minimal impact on the data when viewed from 150 parsecs above the galactic plane. We opted for 2D coordinates to simulate the scenario of observing the cluster from a vantage point situated 150 parsecs above the galactic plane along the Z-axis. Additionally, the presence of other stars in the Galaxy, known as field stars, necessitates their exclusion from consideration when observed from this elevated perspective. The color index ($B-V$) and apparent magnitude (m) serve as indirect measurements for the distance (Z-axis). The apparent magnitude is not directly incorporated into the simulations but can be computed using the formula:

$$m = M + 5(\lg d - 5), \quad (1)$$

where $d = 150 - Z$.

Learning and testing

The selection and overall approach to training the model on simulated star clusters posed the most critical and challenging aspect of the research. Given the tendency of open clusters to begin dissolving in their early stages of evolution and considering the

general similarity across small time intervals and specific stages of cluster evolution, determining which snapshot model to train proved to be particularly difficult. Moreover, imbalance became a concern as the cluster dissolved, resulting in fewer members and more non-members.

The imbalance issue was addressed by removing stars located more than 3 Jacobi radii from the cluster's center, ensuring they would not influence the learning process and maintaining a more balanced dataset. This approach facilitated effective training and testing, as stars distant from the cluster are easily identified as non-members due to their significant distance from the cluster's actual domain. This approach enabled the development of new learning strategies incorporating additional timeframes for training. While this resulted in a reduction in the number of stars in the datasets, the extent of this reduction varies across different timeframes and is not fixed.

The strategy for learning is to train on the snapshot after violent relaxation. This is the stage of the cluster equilibrium and will save the dynamic that would continue throughout the whole life-cycle of the cluster. In our simulations, the period is from 20 Myr to 100 Myr [17, 18]. The learning datasets are randomly chosen from 20 snapshot datasets. Learning on more snapshots is possible but will lead to overfitting, which would decrease performance. This approach was used for simulation with 15% SFE and 1st random realization for both position and mass, as shown in Table 3 with gray color. Further simulations with randomizations are given as simple numbers after the SFE number and "-" like "17-13", meaning 17% SFE with the 1st random realization of position and the 3rd random realization of mass.

Table 3 – Types of simulations used for testing. Gray is the simulation that was not tested but used for training. Pink is a simulation similar to training datasets, either by position or mass. Violet are the simulations that are completely different from learning data sets by position and mass.

11	12	13
21	22	23
31	32	33

For the testing, the trained model is used to predict membership of OC simulations with different SFEs of 17%, 20%, and 25% with position and mass random realizations as indicated in Table 3 with pink and violet colors. The time period used was from 20 Myr (end of violent relaxation) until the time-step when the cluster would have a Jacobi mass of less than 100 solar mass since it will be considered a

dissolved cluster. Despite the absence of a mass feature in learning and testing, the state of the cluster with 100 solar mass can be calculated by the corresponding Jacobi radius formula [19]:

$$R_j = \frac{GM_j}{(4 - \beta^2)\Omega^2}, \quad (2)$$

where G is the gravitational constant, M_j is Jacobi mass, β is normalized epicyclic frequency, and Ω is the angular speed of the star cluster [16]. Another stopping condition is the number of member stars, and an OC with less than 50 stars would not be considered OC.

Machine learning algorithm

We tested multiple supervised algorithms for the classification but only presented one most successful model, Random Forest (RF). The RF algorithm is the decision tree algorithm for various high-dimensional data. It works by bootstrapping (randomly creating new datasets from input datasets) and building a predictive tree. After that, each sample goes through these trees, and the algorithm selects the average output of those trees [20]. Despite being an ML model for datasets with multiple features, it proved to be very good at predicting the membership of the OCs [21], [22], [23]. Thus, testing and application of this algorithm were a high priority of the paper.

RF classifiers from the scikit-learn package have multiple hyperparameters, and major hyperparameters are the number of trees, max tree depth, max number of features, etc. The number of trees or estimators depends on the dataset, and a more significant number of trees can lead to a more accurate classification but also may cause longer runtime and overfitting. Max depth accounts for how many depth of leaves the tree should have when running the algorithm. Max depth affects the computational complexity of the learning and prediction.

The maximum number of features is the number used for the node split of the tree, and it can be either square root or $\log_2$ type. As for the criterion, the Gini index is used to measure the impurity in the values of datasets. Also, it is possible to use random states. In this study, the random forest has 100 trees, a max depth of 10, a square root type of max features (6 features ~ 2.49), and a random state of 42. It was possible to use a higher number of trees that would have also been deeper, but it was performing well as it is, and there was no real need to increase the complexity of both learning and testing. Other hyperparameters are left as default.

Evaluation metrics

The primary evaluation metric is the accuracy on other N-body simulation snapshots. It shows a percentage of how well the prediction was done broadly.

Table 4 – Confusion matrix of binary classification of stars

		Prediction	
		Non-Member	Member
Actual value	Non-Member	TN	FP
	Member	FN	TP

Despite having the general metric, we need to analyze true negatives (TN) and true positives (TP) for binary classification to understand performance better. The performance of the binary classification can be summarized with the confusion matrix shown in Table 4. The diagonal represents the number of correctly classified samples, and other values represent the number of samples classified incorrectly either as False Negative (FN) or False Positive (FP) [24]. Considering that a significant proportion of the testing samples would be either TP or TN, the true performance will be seen in the rates of FP and FN: False Positive Rate (FPR) and False Negative Rate (FNR). It is simply the rate of how many real positives or negatives are classified wrongly on the test. Formulas can be seen below:

$$FPR = \frac{FP}{TN + FP}, \quad (3)$$

$$FNR = \frac{FN}{TP + FN}. \quad (4)$$

Results and discussions

In this chapter, we would like to present the results of this work and show the performance of models according to evaluation metrics and further analysis of results. All dependent plots are given with the logarithmic scale because for each Myr on the x-axis until 175 Myr has six datasets. This is the reason why the plot is thicker until 200 Myr.

In plots, it is noticeable that there are several trends in all the tests for all SFEs. Firstly, it is evident that performance is very high, exceeding 90%. However, this trend is only universal in earlier time frames of the classification. Mostly, it is because OC

dissolves, and as time goes by, there will be fewer and fewer member star samples.

Classification performance on simulations with 17% SFE can be seen on the top panel of Figures 1 and 2. The accuracy stays high, but the actual drop starts at different late snapshots on different simulations. This is because OCs with lesser SFE tend to be less stable and dissolve faster. Early dissolving ones are the SFE 17-13 and 17-33. These random realizations have similar masses and start dissolving at the similar age of 400-500 Myr. Other simulations are more stable, and the actual drop in performance is less than 90% after 600 Myrs. However, even until the end, they maintained a high performance of closer to 80%.

Further, we've done an analysis of FPs and FNs throughout the dynamic evolution. In the case of simulations with 17% SFE in the early timeframes, the rate of FN stays highest and, over time, decreases, eventually reaching 0. This means that the model makes a few mistakes with star members of the cluster, and we mostly do not lose member stars during the classification. On the other hand, the amount of FP stays low at 20 Myr, but on further snapshots, it only increases and almost reaches 50% at the end. This means the model mistakes up to 50% of the non-members as members. Considering that the cluster is cut to a 3 Jacobi radius, this is the expected result.

Cluster classification examples at different ages are shown in Figure 3. The colors represent the type of classification from Table 3. In Figure 3 (top right panel), you can see how the model identified membership of stars at 20 Myr. Classification accuracy is around 92.7%, with 157 FPs and 83 FNs. In simulations, violent relaxation ends at 20 Myr, which is the starting testing period. The picture shows that the cluster's shape is generally captured, and it correctly classified both members and non-members for the most part. This is evident from the circular shape of the identified cluster and the location of the TPs and TNs. However, you may also see that all the FP and FN are located at the 2D plane or on the borders of the cluster. This means that mistakes mostly happen because of the absence of the Z plane because most of the FPs are located upper or lower to the X and Y planes on the Z axis. FN is located on borders, meaning that they are marginal statistical errors of the ML model. Despite these errors, these are promising results for young OC with 17% SFE and 20 Myrs.

Similar results can be seen with the same cluster after 100 Myr later in Figure 3 (top left panel), but the accuracy is higher and reached 95%. The numbers of FP and FN are 39 and 33, respectively. Considering the lower number of non-members, this

can be regarded as a good performance. Placements of the FPs and FNs are similar, but mistakes are considerably lower now than before.

The classification at 500 Myr can be seen in Figure 3 (bottom panel). The accuracy at that age is 93%, with no FNs and 42 FPs. FPs are both on borders and on the Z plane, higher or lower than the cluster.

Overall, the number of stars is decreasing, and this kind of performance will continue for the whole dynamic evolution.

From the analysis of the layout of the stars, we identified that most of the mistakes happen to stars on cluster borders and on stars that are higher or lower than the Z plane. Most mistakes are the FPs, and FNs are mostly statistical mistakes that are not present in the further testing age. This raises the question of whether this number of FPs is acceptable

for the membership analysis. To explore this, we need to know how far these stars are from the cluster's center. The cluster border is found by the Jacobi radius, and FPs are not within the Jacobi radius.

However, they might be within a two or 3 Jacobi radius, and at a 2 Jacobi radius distance, stars might still be gravitationally bound to the cluster's center.

The number of FPs within 2 and 3 Jacobi radii as a function of time can be seen in Figure 4.

From these results, we can see that most of the FPs are within a 2 Jacobi radius in all the classifications with different SFEs, and they may still be gravitationally bound to the center of the cluster. Thus, even FPs' mistakes can be considered member candidates in the future.

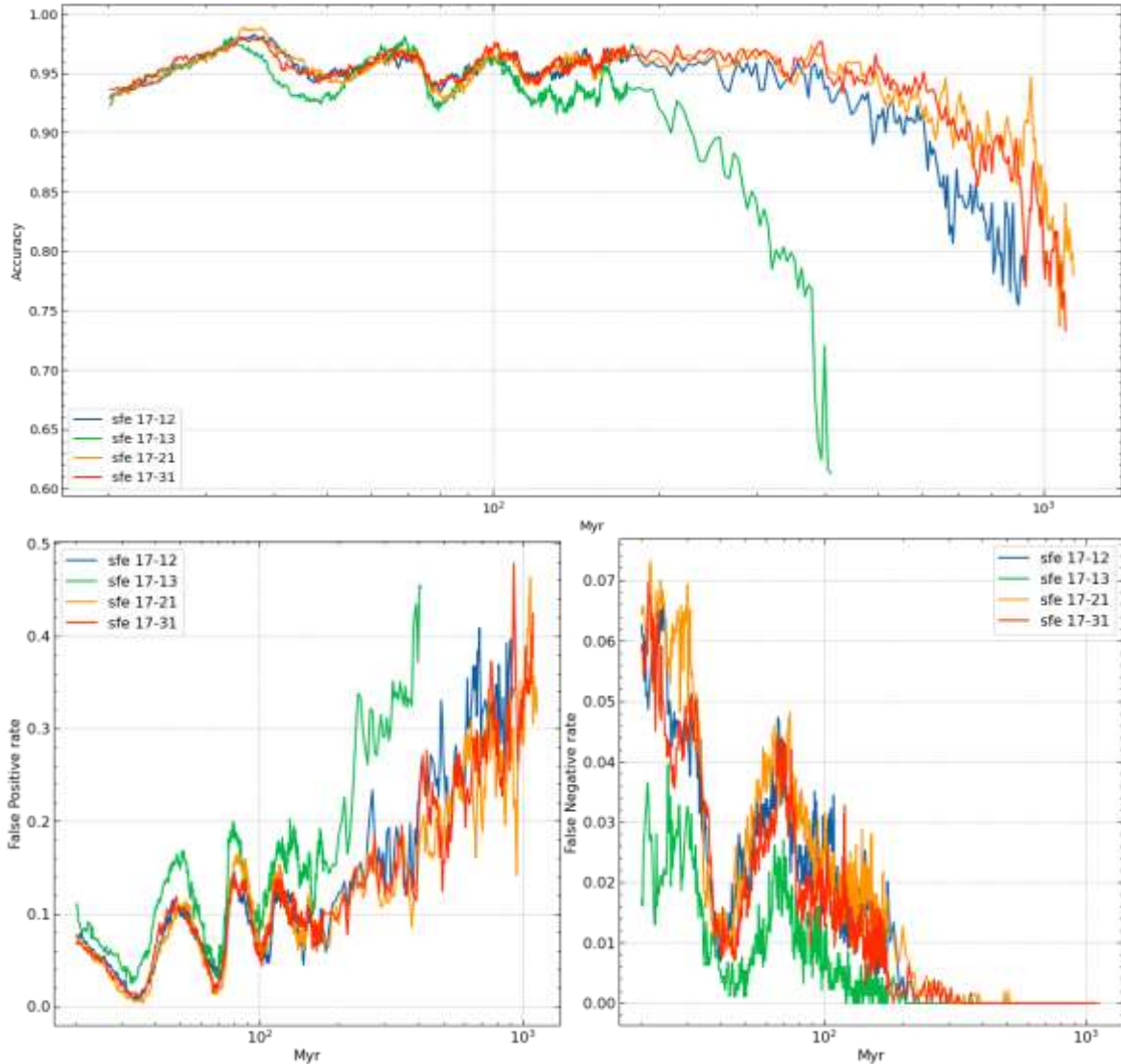


Figure 1 – Performance evaluation of RF model on simulations with 17% SFE on pink models from Table 2 in terms of Accuracy (top panel), False Positive Rate (bottom left panel), and False Negative Rate (bottom right panel) throughout the dynamic evolution.

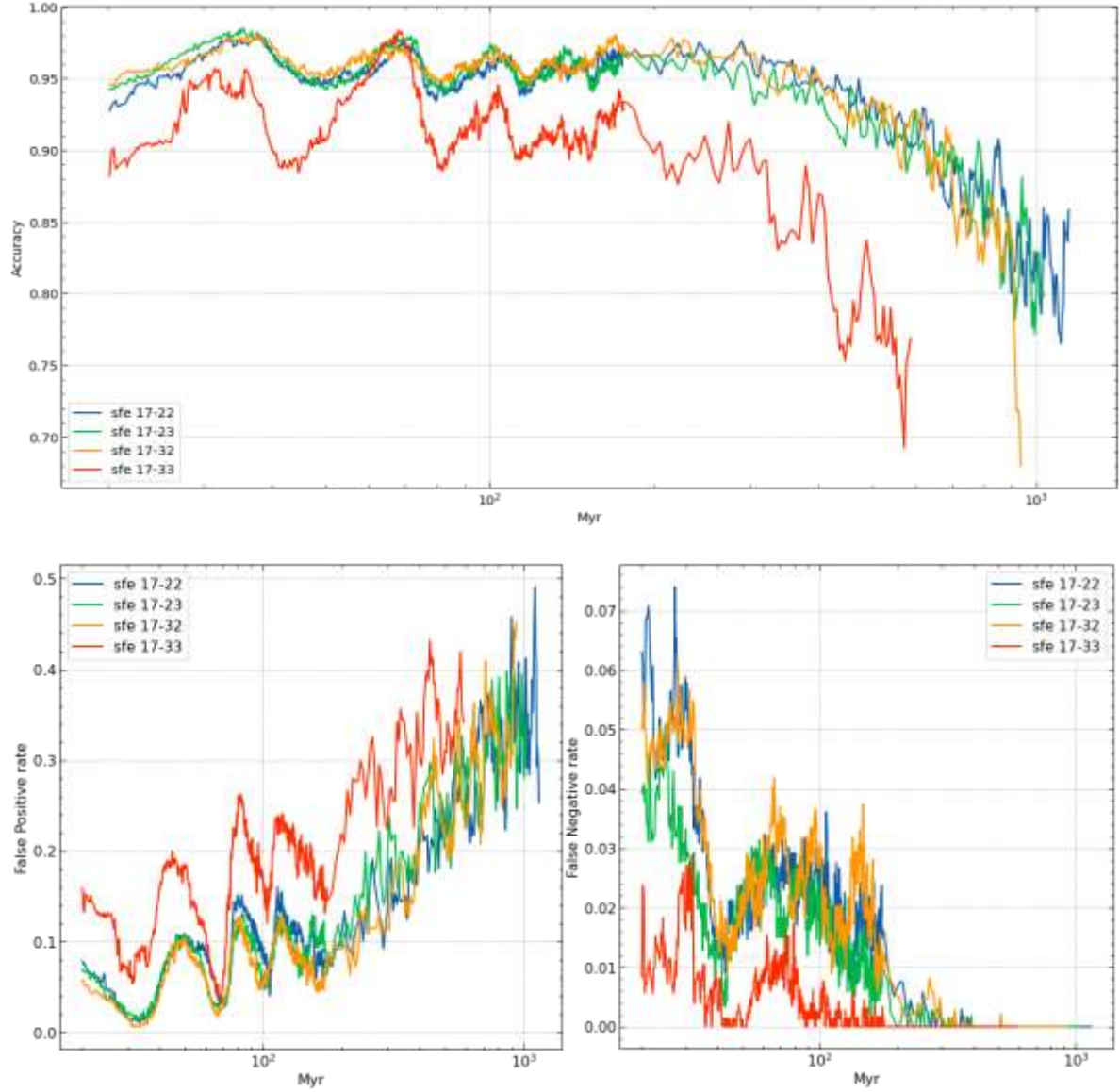


Figure 2 – Performance evaluation of RF model on simulations with 17% SFE on violet models from Table 2 in terms of Accuracy (top panel), False Positive Rate (bottom left panel), and False Negative Rate (bottom right panel) throughout the dynamic evolution.

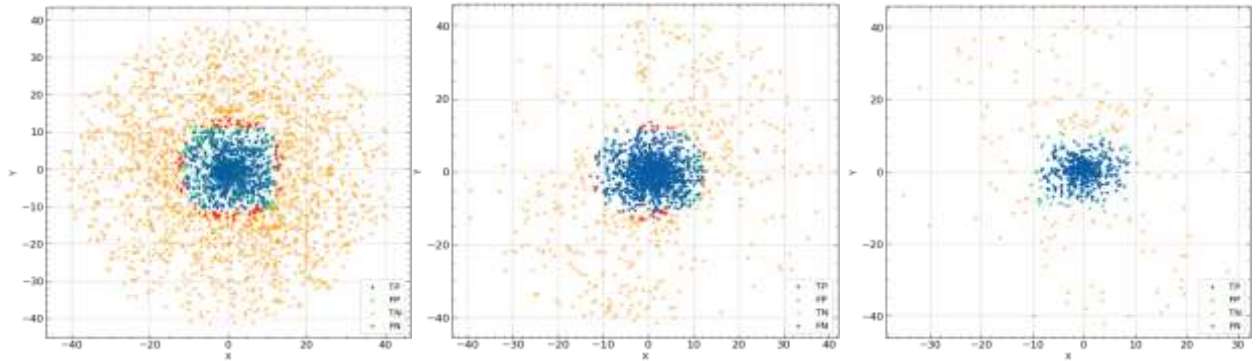


Figure 3 – Classification results on 17% SFE cluster at 20 Myr (1st panel), 100 Myr (2nd), and 500 Myr (3rd panel). Crosses are the negatives that are either true or false. Triangles are the positives, both true and false.

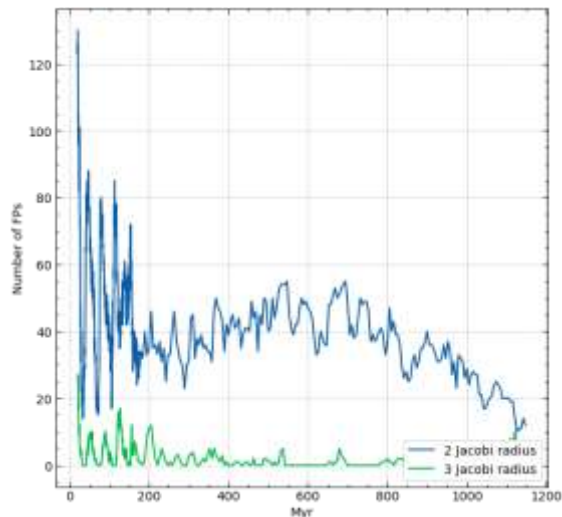


Figure 4 – The number of FPs throughout the test was within 2 Jacobi radius (blue) and between 2 and 3 Jacobi radius (green) on simulation with 17% SFE and 22 random realizations. There were no FPs beyond these distances

Conclusion

This work explores the possibilities of using the supervised learning approach combined with N-body simulations for membership determination. We trained the RF model on simulation with 15% SFE on the 20 random snapshots of its dynamic evolution's 20-100 Myr timeframe. This specific age of the cluster is chosen because it is the end of violent relaxation. Validation tests were done on N-body simulations with 17% SFE and different randomizations.

The model can predict the membership of all snapshots from 20 Myr until its dissolution with varying accuracy. The majority of snapshots, until getting close to dissolution, exceed 90%. Despite having such performance, it is identified that the

model tends to mistake non-member stars as members (FP), and the number of FPs only increased due to a lesser number of stars in testing and closer to the complete dissolution. However, most of the FPs are located inside the 2 Jacobi radius, which might indicate that those stars are still gravitationally bound to the cluster's center and may still be considered member stars. This framework shows that it is possible to train a supervised ML model on N-body simulation to predict the membership of similar and utterly different N-body simulations with six easily obtainable features, such as 2D coordinates, velocities, color index, and apparent magnitude. Nonetheless, this is just a proof of idea and cannot be used for observation with described interpretation.

As for future plans, we will apply this strategy to the simulations converted to mock observed simulations. Current simulations are in cluster-centered coordinates, and mock observation versions of the simulations would have features in a format that can be seen in actual observational data. Also, the clusters will be placed on the Galactic disk viewed from the position of the Sun. This should make classification more complex. Under these conditions, background stars will play a considerable role, and distinguishing field stars from cluster members will be hard for the supervised ML model. Additionally, we plan to use N-body simulations as a testing ground for other ML models, such as Star Galactic Origins, various density-based scanners, and more.

Acknowledgments

This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant AP13067834 and AP19677351).

References

- 1 Madau, P., and Mark, D., Cosmic star-formation history // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* - 2014. - Vol.52. - P.415-486.
- 2 Robert, C.K., and Neal, J.E., Star formation in the Milky Way and nearby galaxies. // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*. - 2012. - Vol.50. - P.531-608.
- 3 Krumholz, M.R., Christopher, F.M., and Joss, B., Star clusters across cosmic time. // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*. - 2019. - Vol.57. - P.227-303.
- 4 Vallenari, A., et al. Gaia data release 3 summary of the content and survey properties. // *Astronomy & Astrophysics*. - 2023. - Vol.674. - Art.No.A1.
- 5 Brown, A.G.A., et al. Gaia data release 2-summary of the contents and survey properties. // *Astronomy & Astrophysics*. - 2018. - Vol.616. - Art.No.A1.
- 6 Agarwal, M., et al. ML-MOC: machine learning (kNN and GMM) based membership determination for open clusters. // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. - 2021. - Vol.502.2. - P.2582-2599.
- 7 Hunt, E.L., and Sabine, R., Improving the open cluster census-I. Comparison of clustering algorithms applied to Gaia DR2 data. // *Astronomy & Astrophysics* - 2021. - Vol.646. - Art.No.A104.
- 8 Gao, X., Memberships of the open cluster NGC 6405 based on a combined method: Gaussian mixture model and random forest. // *The Astronomical Journal*. - 2018. - Vol.156.3. - P.121.

- 9 Krone-Martins, A., and Andre, M., UPMASK: unsupervised photometric membership assignment in stellar clusters. // *Astronomy & Astrophysics*. - 2014. - Vol.561. - Art.No.A57.
- 10 Yuan, Zh., et al. StarGO: A New Method to Identify the Galactic Origins of Halo Stars. // *The Astrophysical Journal*. - 2018. - Vol.863.1. - P.26.
- 11 Cantat-Gaudin, T., et al. A Gaia DR2 view of the open cluster population in the Milky Way. // *Astronomy & Astrophysics*. - 2018. - Vol.618. - Art.No.A93.
- 12 Marina, K., and Kevin, C., Untangling the galaxy. i. local structure and star formation history of the Milky Way. // *The Astronomical Journal*. - 2019. - Vol.158.3. - P.122.
- 13 Stefan, M., João, A., and Alena, R., Extended stellar systems in the solar neighborhood-v. Discovery of coronae of nearby star clusters. // *Astronomy & Astrophysics*. - 2021. - Vol.645. - Art.No.A84.
- 14 Bouma, L.G., et al. Rotation and lithium confirmation of a 500 pc halo for the open cluster NGC 2516 // *The Astronomical Journal*. - 2021. - Vol.162.5. - P.197.
- 15 Shukirgaliyev, B., Parmentier, G., Berczik, P., & Just, A. The star cluster survivability after gas expulsion is independent of the impact of the Galactic tidal field // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. - 2019. - 486. - 1045.
- 16 Shukirgaliyev, B., Parmentier, G., Just, A., & Berczik, P. The Long-term Evolution of Star Clusters Formed with a Centrally Peaked Star Formation Efficiency Profile // *The Astrophysical Journal*. - 2018. - 863. - 171.
- 17 Gaia Collaboration, Brown, A. G. A., Vallenari, A., Prusti, T., de Bruijne, J. H. J., Babusiaux, C., Bailer-Jones, C. A. L., Biermann, M., Evans, D. W., Eyer, L., et al. Gaia Data Release 2. Summary of the contents and survey properties // *Astronomy and Astrophysics*. - 2018. - 616. - A1.
- 18 Shukirgaliyev, B., Parmentier, G., Berczik, P., & Just, A. Impact of a star formation efficiency profile on the evolution of open clusters // *Astronomy and Astrophysics*. - 2017. - 605. - A119.
- 19 Just, A., Berczik, P., Petrov, M. I., & Ernst, A. Quantitative analysis of clumps in the tidal tails of star clusters // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. - 2009. - 392. - P.969.
- 20 Biau G., Scornet E. A random forest guided tour // *Test*. - 2016. - Vol.25. - P.197-227.
- 21 Gao X. A Machine-learning-based Investigation of the Open Cluster M67 // *The Astrophysical Journal*. - 2018. - Vol.869. - No 1. - P.9.
- 22 Gao X. H. Memberships, distance and proper-motion of the open cluster NGC 188 based on a machine learning method // *Astrophysics and Space Science*. - 2018. - Vol.363. - P.1-8.
- 23 Gao X. An Investigation of the Pleiades Cluster Using Machine Learning // *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*. - 2019. - Vol.131. - No 998. - P.044101.
- 24 Kohl M. Performance measures in binary classification // *International Journal of Statistics in Medical Research*. - 2012. - Vol.1. - No. 1. - P.79.

References

- 1 P. Madau, & D., Mark, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 52, 415-486 (2014).
- 2 C.K. Robert, & J.E., Neal, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 50, 531-608 (2012).
- 3 M.R. Krumholz, et al, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 57, 227-303 (2019).
- 4 A. Vallenari, et al, *Astron. & Astrophys.*, 674, A1 (2023).
- 5 A.G.A. Brown, et al., *Astron. & Astrophys.*, 616, A1 (2018).
- 6 M. Agarwal, et al., *MNRAS*, .502.2., 2582-2599 (2021).
- 7 E.L. Hunt, & R., Sabine, *Astron. & Astrophys.*, 646, A104 (2021).
- 8 X. Gao, *The Astronomical Journal*, 156.3, 121 (2018).
- 9 A. Krone-Martins, & M., Andre, *Astron. & Astrophys.*, 561, A57 (2014).
- 10 Zh. Yuan, et al., *The Astrophysical Journal*, 863.1, 26 (2018).
- 11 T. Cantat-Gaudin, et al., *Astron. & Astrophys.*, 618, A93 (2018).
- 12 K. Marina, & C., Kevin, *The Astronomical Journal*, 158.3, 122 (2019).
- 13 M. Stefan, A., João, & R., Alena, *Astron. & Astrophys.*, 645, A84 (2021).
- 14 L.G. Bouma, et al., *The Astronomical Journal*, 162.5, 197 (2021).
- 15 B. Shukirgaliyev, et al., *MNRAS*, 486, 1045 (2019).
- 16 B. Shukirgaliyev et al., *The Astrophysical Journal*, 863, 171 (2018).
- 17 Gaia Collaboration, *Astron. & Astrophys.*, 616, A1 (2018).
- 18 B. Shukirgaliyev et al., *Astron. & Astrophys.*, 605, - A119 (2017).
- 19 A. Just et al., *MNRAS*, 392, 969 (2009).
- 20 G. Biau et al., *Test*, 25, 197-227 (2016).
- 21 X.H. Gao et al., *The Astrophysical Journal*, 869, 1, 9 (2018).
- 22 X.H. Gao et al., *Astrophys. & Space Sci.*, 363, 1-8 (2018).
- 23 X.H. Gao et al., *Pub.Astron. Soc. of the Pacific*, 131, 998, 044101 (2019).
- 24 M. Kohl et al. *Inter. Journal of Stati. in Med. Resch.*, 1, 1, 79 (2012).

Article history:

Received 9 May 2024

Received in revised form 22 June 2024

Received in revised form 5 September 2024

Accepted 8 September 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 09.05.2024

Түзетілген түрде түсті – 22.06.2024

Түзетілген түрде түсті – 05.09.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Information about authors:

1. **A.A. Bissekenov** – PhD student, Xi'an Jiaotong-Liverpool University, Suzhou, China; Energetic Cosmos Laboratory, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan: e-mail: Abhinav.Varma21@student.xjtlu.edu.cn

2. **M.T. Kalambay** (corresponding author) – PhD, Energetic Cosmos Laboratory, Nazarbayev University, Astana; Heriot-Watt International Faculty, K.Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe; Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan. e-mail: M.Kalambay@hw.ac.uk

3. **Y.S. Abylkairov** – PhD, Energetic Cosmos Laboratory, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan. e-mail: sultan.abylkairov@nu.edu.kz

4. **B.T. Shukirgaliyev** – PhD, Ass.Prof., Heriot-Watt International Faculty, K.Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe; Energetic Cosmos Laboratory, Nazarbayev University, Astana; Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan. e-mail: b.shukirgaliyev@hw.ac.uk

Авторлар туралы мәлімет:

1. **А.А. Бисекенов** – PhD студенті, Сиань Цзяотун-Ливерпуль университеті, Сучжоу қ., Қытай; Энергетикалық ғарыш зертханасы, Назарбаев университеті, Астана қ., Қазақстан, e-mail: Abhinav.Varma21@student.xjtlu.edu.cn

2. **М.Т. Қаламбай** (автор корреспондент) – PhD, Энергетикалық ғарыш зертханасы, Назарбаев университеті, Астана қ.; В.Г. Фесенков ат. Астрофизикалық институт, Алматы қ.; Хериот-Уатт Халықаралық факультеті, Қ. Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. E-mail: M.Kalambay@hw.ac.uk

3. **Е.С. Абылкаиров** – PhD, Энергетикалық ғарыш зертханасы, Назарбаев университеті, Астана қ., Қазақстан. e-mail: sultan.abylkairov@nu.edu.kz

4. **Б.Т. Шукиргалиев** – PhD, қауым.проф., Хериот-Уатт Халықаралық факультеті, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ.; Энергетикалық ғарыш зертханасы, Назарбаев университеті, Астана қ.; В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы қ., Қазақстан. e-mail: b.shukirgaliyev@hw.ac.uk.

IRSTI 41.27.15

<https://doi.org/10.26577/RCPh.2024v90i3-02>D.B. Kuvatova^{1*}, T.P. Panamarev¹, M.V. Ishchenko^{2,1},A.P. Gluchshenko¹, P.P. Berczik^{2,1}¹Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan²Main Astronomical Observatory, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*e-mail: kuvatova@fai.kz

ESTIMATING GAMMA-RAY FLUX FROM MILLISECOND PULSARS ORIGINATING IN GLOBULAR CLUSTERS NEAR THE GALACTIC CENTER

In this study, we investigate the contribution of millisecond pulsars (MSPs) to the gamma-ray excess observed in the Galactic Center by analyzing data from high-resolution direct N-body simulations of six globular clusters (GCs) that experience close encounters with the nuclear star cluster. Using the ϕ -GPU code, we tracked the orbits of individual neutron stars (NSs) formed during the simulations, assuming a fraction of these NSs evolve into MSPs. Our model includes state-of-the-art single stellar evolution code including prescription for neutron star formation. We estimated the gamma-ray flux from these MSPs, considering known values for their gamma-ray emission. Our results show that MSPs originating from the six modeled GCs contribute a small but non-negligible fraction of the observed gamma-ray flux. This finding suggests that the actual gamma-ray flux from MSPs could be much higher when considering the entire population of GCs, potentially significantly contributing to the gamma-ray excess. This study highlights the importance of considering MSPs in the Galactic Center, originating from nearby globular clusters, as a potential source of the observed gamma-ray excess. Future work will involve more sophisticated simulations incorporating binary stellar evolution and comparing the fraction of MSPs in observed GCs to refine our models and improve the accuracy of our estimates.

Key words: millisecond pulsars, gamma-ray excess, galactic center, globular clusters, neutron stars, N-body simulations.

Д.Б. Куватова^{1*}, Т.П. Панамарев¹, М.В. Ищенко^{2,1},
А.П. Глущенко¹, П.П. Берцик^{2,1}¹В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы қ., Қазақстан³Басты астрономиялық обсерватория, Украина Ұлттық ғылым академиясы, Киев қ., Украина*e-mail: kuvatova@fai.kz

Галактикалық орталыққа жақын орналасқан шар тәрізді шоғырлардан шыққан миллисекундтық пульсарлардың гамма-сәулелену ағынын бағалау

Бұл зерттеуде біз миллисекундтық пульсарлардың (МСП) Галактикалық орталықта бақыланатын гамма-сәулеленудің артық мөлшеріне қосқан үлесін қарастырамыз. Ядролық жұлдыздық шоғырмен жақын соқтығысатын алты шар тәрізді шоғырлардың (ШТШ) тікелей N-денелі модельдеуі арқылы алынған жоғары дәлдіктегі симуляциялар деректерін талдаймыз. ϕ -GPU кодын қолдана отырып, біз симуляциялар барысында қалыптасқан жеке нейтрондық жұлдыздардың (НЖ) орбиталарын барладық, олардың кейбіреулері МСП-ға айналады деп болжаймыз. Осы модельде нейтрондық жұлдыздардың қалыптасу сценарийлерін ескеретін жаңартылған Single Stellar Evolution (SSE) коды қолданылады. Біз бұл МСП-дан гамма-сәулелену ағынын олардың гамма-сәулеленуінің белгілі мәндерін ескере отырып бағаладық. Нәтижелеріміз алты моделденген ШТШ-дан шыққан МСП гамма-сәулелену ағынына аз, бірақ елеулі үлес қосатынын көрсетеді. Осы тұжырыммен бүкіл ШТШ популяциясын ескере отырып, МСП-дан гамма-сәулелену ағыны әлдеқайда жоғары болуы мүмкін екенін және гамма-сәулеленудің артық мөлшеріне ықпал етуі мүмкін екенін болжаймыз. Бұл зерттеу жақын маңдағы шар тәрізді шоғырлардан шыққан МСП-ларды Галактикалық орталықтағы гамма-сәулеленудің артық мөлшерінің әлеуетті көзі ретінде қарастырудың маңыздылығын көрсетеді. Болашақ зерттеулер қос жұлдыздардың эволюциясын ескеретін күрделірек симуляцияларды жүргізуді көздейді және біздің моделімізді

нақтылау және бағалауларымыздың дәлдігін арттыру үшін ШТШ-да шынайы бақыланатын МСП үлесін салыстыруды қамтиды.

Түйін сөздер: миллисекундтық пульсарлар, артық мөлшердегі гамма-сәулелену, галактикалық орталық, шар тәрізді шоғырлар, нейтрондық жұлдыздар, N-денелі модельдеу.

Д.Б. Куватова^{1*}, Т.П. Панамарев¹, М.В. Ищенко^{2,1},
А.П. Глущенко¹, П.П. Берцик^{2,1}

¹Астрофизический Институт им. В. Г. Фесенкова, г.Алматы, Казахстан

²Главная Астрономическая Обсерватория, Национальная Академия Наук Украины, г.Киев, Украина

*e-mail: kuvatova@fai.kz

Оценка потока гамма-излучения от миллисекундных пульсаров, происходящих из шаровых скоплений вблизи Галактического центра

В этом исследовании рассматривается вклад миллисекундных пульсаров (МСП) в избыток гамма-излучения, наблюдаемый в Галактическом центре, анализируя данные симуляций высокого разрешения, полученные методом прямого N-тельного моделирования шести шаровых скоплений (ШС), которые испытывают близкие столкновения с ядерным звездным скоплением. Используя код ϕ -GPU, отслеживаются орбиты отдельных нейтронных звезд (НЗ), образованных в ходе симуляций, предполагая, что часть этих НЗ эволюционирует в МСП. Предложенная модель включает обновленный код Single Stellar Evolution (SSE), который учитывает сценарии формирования нейтронных звезд. Оценён поток гамма-излучения от этих МСП, учитывая известные значения их гамма-излучения. Данные результаты показывают, что МСП, происходящие из шести смоделированных ШС, вносят небольшой, но заметный вклад в наблюдаемый поток гамма-излучения. Этот вывод предполагает, что реальный поток гамма-излучения от МСП может быть намного выше при учете всей популяции ШС, что потенциально может способствовать избытку гамма-излучения. Это исследование подчеркивает важность учета МСП в Галактическом центре, происходящих из близлежащих шаровых скоплений, как потенциального источника наблюдаемого избытка гамма-излучения. Будущие работы будут включать более сложные симуляции, учитывающие эволюцию двойных звезд, и сравнение доли МСП в наблюдаемых ШС для уточнения наших моделей и повышения точности наших оценок.

Ключевые слова: миллисекундные пульсары, избыток гамма-излучения, галактический центр, шаровые скопления, нейтронные звезды, моделирование N-тел.

Introduction

An excess of gamma rays emanating from the central region of the Galaxy (so-called the Galactic Center Excess – GCE) was detected during the analysis of data obtained with the Fermi Large Area Telescope [1,2]. There are several hypotheses regarding the nature of the GCE, for example, annihilation of dark matter particles [3], radiation from millisecond pulsars [4], and other mechanisms. Such diversity is due to the fact that the issues of the GCE spectrum and spatial morphology [5] are not fully resolved, since different interstellar emission models (IEMs) correspond to completely different characteristics of the GCE [6]. Some authors propose multicomponent models to explain the GCE. For example, the authors [7] consider various IEMs, including the distribution of point sources, interstellar gas, the inverse Compton effect, bremsstrahlung, etc. Their templates with dark matter and millisecond pulsar components showed good agreement with the

observed excess. It is likely that several factors are responsible for the GCE, and different components of IEMs contribute to it

The spectral energy distribution of the GCE peaks at several GeV. Since millisecond pulsars have a rapid fall-off above several GeV, they are assumed to be potential sources of the GCE [3]. In addition, it is likely that the spatial distribution of the excess is not spherical and smooth, and correlates with the distribution of stars in the Galactic bulge and bar [8,9]. However, the observed population of millisecond pulsars measured by the Fermi telescope with sufficiently hard spectral indices is insufficient to explain the excess [3,10]. Nevertheless, if pulsars from globular clusters of the Galaxy are taken into account, it might be possible to explain the excess, although current observational data still do not allow making final conclusions.

Globular clusters (GCs) are gravitationally bound star systems, the typical age of which is more than 10-12 billion years [11,12]. Comprehending the

relationship between globular clusters and the central areas of galaxies, especially those containing nuclear star clusters and supermassive black holes, is crucial for understanding models of galactic formation [13,14]. Due to dynamical friction, globular clusters tend to migrate to the center of the Galaxy (e.g. [15,16]. Analysis of the GAIA catalogs has shown that the existing globular clusters of the Milky Way feature a wide range of orbits [17,18]. In our previous works, we reconstructed the orbital evolution of observed clusters by backward integration in a time-varying Galactic potential taken from Illustris-TNG cosmological simulations (add links to the 1st papers). We showed that some of the objects approach the Galactic center to within 100 pc [19]. Recently, we conducted a detailed analysis of the clusters that approach the galactic center most closely: we modeled their evolution from 2 Gyr after the formation up to the present day, including stellar evolution [20].

In this paper, we focus on the dynamics of neutron stars (NS) from these globular clusters. By assuming that some of these NSs will result in millisecond pulsars, we analyze gamma-ray emission of these pulsars and discuss their contribution to the observed gamma-ray excess.

The paper is organized as follows. In Section 2 we summarize methods of integration and briefly describe the clusters we studied. In Section 3, we present the main results, and in Section 4 we summarize our findings.

Methods

In our previous work [21], we integrated the orbits of 159 GCs, using data from the GC catalog¹ [17,18], transforming them to Galactocentric coordinates [22]. We considered the following parameters: galactocentric distance of the Sun $R_{\odot} = 8.178$ kpc [23], height above the galactic plane $Z_{\odot} = 20.8$ pc [24] and speed relative to the Local Standard of Rest (LSR) $V_{\text{LSR}} = 234.737$ km/s [25,26].

We assessed the influence of measurement errors on the initial data and GC orbits, finding that the errors had an insignificant impact on many GCs [21]. For the integration of GC orbits 10 billion years back in time, we used a dynamically evolving potential from the IllustrisTNG-100 cosmological modeling database [27]. The spatial scales of the disk and dark matter halo were derived using the Miyamoto-Nagai profile [28] for the disk and the Navarro-Frank-White profile [29] for the halo. A

detailed procedure for selecting potentials and constructing their components is given in [21,30].

For numerical simulation, we employed a parallel dynamic N-body code ϕ -GPU [31,32], based on a fourth-order Hermite integration scheme with hierarchical individual block time steps. The orbits of the 159 GCs were reconstructed in one of the selected external dynamic potentials, designated as number 411321 in IllustrisTNG-100. From this analysis, we selected six clusters – Palomar 6, HP 1, NGC 6401, NGC 6642, NGC 6681, and NGC 6981 – that have a high probability of approaching the Galactic Center during their dynamic evolution.

We integrated a stellar evolution library into the code [33,34], taking into account stellar winds, supernova core-collapse, and other phenomena. The stellar mass distribution was based on the initial mass function [35] with limits of 0.08-100 $M_{\odot}$, with each simulated particle corresponding to 10 stars of the same type. This approach, previously used in the works [36,37], allows for more accurate models to determine the necessary parameters for the GCs.

Each GC was initialized to an equilibrium state using the King model distribution function [38], based on such parameters as the half-mass radius r_{hm} and the dimensionless central potential W_0 . The initial conditions for this simulation were taken from the previous integration without stellar evolution. The Galactic Dynamical Potential was complemented by a Plummer-type potential [39] for the NSC. The supermassive black hole as a separate particle was not included in the integration.

For each of the six clusters, we carried out a series of integrations from 8 billion years ago, varying parameters such as mass, half-mass radius, and King's concentration parameter, to find models that matched the observed values within a deviation of no more than 5%.

Results and discussion

Millisecond pulsars, which are highly energetic remnants from neutron stars, typically form in binary systems with red giants or main-sequence stars (see [40] for a review). Due to the asymmetry of the supernova explosion, newly formed neutron stars experience high kick velocities, which were initially thought to be sufficient for them to escape the low escape velocities of globular clusters. However, observations have confirmed the presence of millisecond pulsars within globular clusters,

¹

https://people.smp.uq.edu.au/HolgerBaumgardt/globular/orbits_table.txt

indicating that they can form and be retained in these environments (see e.g. [41] for a recent discovery).

Our computational code phi-GPU, although not featuring binary stellar evolution, includes state-of-the-art single stellar evolution with scenarios for neutron star formation without any kicks. Using this model, we tracked the orbits of all individual neutron stars formed during the simulations to investigate the dynamics and potential presence of neutron stars that could evolve into millisecond pulsars in the central region of the Milky Way.

We modeled six globular clusters that come close to the Galactic Center: NGC 6642, NGC 6401, HP 1, NGC 6681, Palomar 6, and NGC 6981. Figure 1 shows the positions of all neutron stars from these clusters within a 1 kpc sphere around the Galactic Center, projected in Galactic coordinates with a ± 8 degrees box. Neutron stars with blueshifts are shown in blue, while those with redshifts are depicted in red. The figure includes 2210 neutron stars from NGC 6642 (with 1110 still inside the cluster), 380 from NGC 6401, 420 from HP 1, 40 from NGC 6681, and 270 from Palomar 6. For clarity, only every 10th neutron star is displayed. Notably, no neutron stars from NGC 6981 are present in this region. The significant number of neutron stars from NGC 6642 is expected, as the cluster's center frequently lies within this 1 kpc Galactic central region, as indicated by the dense red clump in the plot's upper right.

Thus, Figure 1 demonstrates that a significant number of potential millisecond pulsar progenitors are dispersed within the central kiloparsec of the Galaxy. Assuming that a certain fraction of these neutron stars are actually millisecond pulsars (10%) and using known values for the gamma-ray flux they emit, we can estimate the morphology of this radiation.

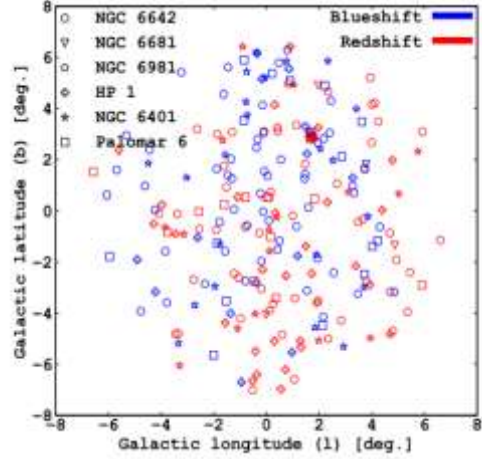


Figure 1 – Neutron star distributions within a 1 kpc sphere from the GalC are projected in galactic coordinates, with a ± 8 -degrees box for all GCs at present day. Taken from [20]

Based on the NS distribution obtained from GCs simulations in our simulations, we estimated the gamma-ray flux from millisecond pulsars. We constructed 2D histogram of NSs in the region, and considering the average gamma-ray flux from a millisecond pulsar ranges from 10^{-12} to 10^{-11} $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ [42], and taking into account that each simulated particle corresponds to 10 physical NS and the fraction of millisecond pulsars from the total number of particles is 0.1, we reconstruct the emission flux from the pulsars. This proportion was selected randomly from the NS distribution. Figure 2 shows the resulting radiation fluxes for cases 10^{-12} and 10^{-11} $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ in an ± 8 -degrees box around the central region of the MW (these fluxes may be produced by a MSP with Luminosity of 10^{34} - 10^{35} erg s^{-1} at a distance of 8 kpc).

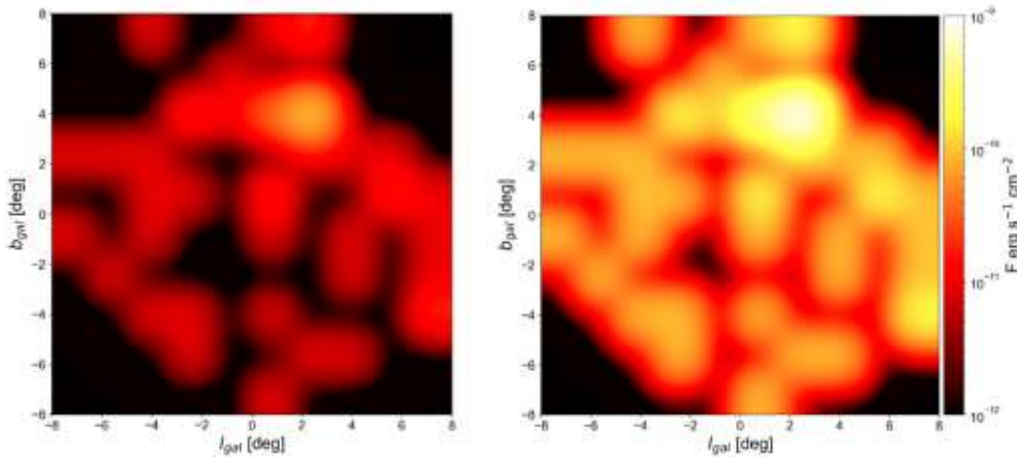


Figure 2 – Gamma-ray fluxes from the distribution of millisecond pulsars if the average flux from one pulsar is 10^{-12} (left) and 10^{-11} (right) in a ± 8 -degrees box around GalC

The figure reveals that emission of the MSPs originating from 6 globular clusters contributes to a small fraction of the observed flux [2]. However, we should note that here we made a simple estimation based only on 6 globular clusters that approached the Galactic center in the past that exist in the MW today. However, evidence suggests [43,44] that at least some globular clusters contributed to the formation of the nuclear star cluster of the Milky Way meaning that we see only surviving clusters. Thus, in reality the expectation is that the actual gamma ray flux from MSPs may be much higher, potentially significantly contributing to the observed gamma-ray excess.

Conclusion

We analyzed data from 6 high-resolution direct N-body simulations of Milky Way globular clusters that experience close encounters with the nuclear star cluster [20]. By tracking the orbits of individual neutron stars and assuming a certain fraction of them evolve into millisecond pulsars, we estimated the

gamma-ray flux of these pulsars. Although the flux produced by these pulsars is not sufficient to explain the observed gamma-ray excess, our results indicate that the presence of millisecond pulsars in the Galactic Center, originating from nearby globular clusters, should be considered.

To improve the calculations of the contribution of millisecond pulsar flux to the observed gamma-ray radiation, more sophisticated simulations are needed in the future. These simulations should include binary stellar evolution to refine the estimates of the fraction of millisecond pulsars among neutron stars. Additionally, comparing the fraction of millisecond pulsars in observed globular clusters with high numbers of millisecond pulsars can further enhance our models.

Acknowledgments

This research has been funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP14870501).

References

- 1 Boyarsky A., Malyshev D., Ruchayskiy O. A comment on the emission from the Galactic Center as seen by the Fermi telescope // *Phys. Lett. B. Elsevier BV.* – 2011. – Vol. 705, № 3. – P.165–169.
- 2 Hooper D., Linden T. Origin of the gamma rays from the Galactic Center // *Phys. Rev. D. American Physical Society.* – 2011. – Vol. 84, № 12. – Art.No. 123005.
- 3 Hooper D., Goodenough L. Dark matter annihilation in the Galactic Center as seen by the Fermi Gamma Ray Space Telescope // *Phys. Lett. B.* – 2011. – Vol. 697, № 5. – P. 412–428.
- 4 Bartels R., Krishnamurthy S., Weniger C. Strong Support for the Millisecond Pulsar Origin of the Galactic Center GeV Excess // *Phys. Rev. Lett.* – 2016. – Vol. 116, № 5. – Art.No.051102.
- 5 Hooper D. The status of the galactic center gamma-ray excess // *SciPost Phys. Proc.* – 2022.
- 6 Di Mauro M. Investigating the Fermi Large Area Telescope sensitivity of detecting the characteristics of the Galactic center excess // *Phys. Rev. D. American Physical Society.* – 2020. – Vol. 102, № 10. – Art.No.103013.
- 7 Di Mauro M. Characteristics of the Galactic Center excess measured with 11 years of Fermi-LAT data // *Phys. Rev. D. American Physical Society.* – 2021. – Vol. 103, № 6. – Art.No. 063029.
- 8 Bartels R. et al. The Fermi-LAT GeV excess as a tracer of stellar mass in the Galactic bulge // *Nature Astronomy. Nature Publishing Group.* – 2018. – Vol. 2, № 10. – Art.No.819–828.
- 9 Macias O. et al. Strong evidence that the galactic bulge is shining in gamma rays // *J. Cosmol. Astropart. Phys. IOP Publishing.* – 2019. – Vol. 2019, № 09. – P. 042.
- 10 Abazajian K.N. The consistency of Fermi-LAT observations of the galactic center with a millisecond pulsar population in the central stellar cluster // *J. Cosmol. Astropart. Phys. IOP Publishing.* – 2011. – Vol. 2011, № 03. – P.010.
- 11 Vandenberg D.A. et al. The Ages of 55 Globular Clusters as Determined Using an Improved $\delta V_{TO}^{\text{HB}}$ Method Along with Color-Magnitude Diagram Constraints, and Their Implications for Broader Issues // *arXiv [astro-ph.GA]*. – 2013.
- 12 Valcin D. et al. Inferring the Age of the Universe with Globular Clusters // *arXiv [astro-ph.CO]*. – 2020.
- 13 Bland-Hawthorn J., Gerhard O. The Galaxy in Context: Structural, Kinematic, and Integrated Properties // *Annu. Rev. Astron. Astrophys. Annual Reviews.* – 2016. – Vol. 54, №54. – P.529–596.
- 14 Neumayer N., Seth A., Böker T. Nuclear star clusters // *ã.* – 2020. – Vol. 28, № 1. – P.4.
- 15 Tremaine S.D. The effect of dynamical friction on the orbits of the Magellanic clouds // *Astrophysical Journal.* – 1976. – Vol.203, Jan. 1, 1976, pt. adsabs.harvard.edu.
- 16 Capuzzo-Dolcetta R. The Evolution of the Globular Cluster System in a Triaxial Galaxy: Can a Galactic Nucleus Form by Globular Cluster Capture? // *APJ.* – 1993. – Vol. 415. – P. 616.
- 17 Vasiliev E., Baumgardt H. Gaia EDR3 view on galactic globular clusters // *Mon. Not. R. Astron. Soc. Oxford Academic.* – 2021. – Vol. 505, № 4. – P.5978–6002.
- 18 Baumgardt H., Vasiliev E. Accurate distances to Galactic globular clusters through a combination of Gaia EDR3, HST, and literature data // *MNRAS.* – 2021. – Vol. 505. – № 4. – P.5957–5977.
- 19 Ishchenko M. et al. Milky Way globular clusters on cosmological timescales - II. Interaction with the Galactic

centre // *Astron. Astrophys. Suppl. Ser. EDP Sciences.* – 2023. – Vol. 674. – Art.No. A70.

20 Ishchenko M. et al. Dynamical evolution of Milky Way globular clusters on the cosmological timescale I. Mass loss and interaction with the nuclear star cluster // *arXiv [astro-ph.GA]*. – 2024.

21 Ishchenko M. et al. Milky Way globular clusters on cosmological timescales - I. Evolution of the orbital parameters in time-varying potentials // *Astron. Astrophys. Suppl. Ser. EDP Sciences.* – 2023. – Vol.673. – Art.No.A152.

22 Chemerynska I.V. et al. Kinematic characteristics of the Milky Way globular clusters based on Gaia DR2 data // *arXiv [astro-ph.GA]*. – 2022.

23 Reid M.J., Brunthaler A. The proper motion of Sagittarius A*. ii. The mass of Sagittarius A // *Astrophys. J. American Astronomical Society.* – 2004. – Vol. 616, № 2. – P. 872–884.

24 Bennett M., Bovy J. Vertical waves in the solar neighbourhood in Gaia DR2 // *Mon. Not. R. Astron. Soc. Oxford Academic.* – 2018. – Vol. 482, № 1. – P.1417–1425.

25 Bovy J. et al. The Milky Way's circular-velocity curve between 4 and 14 kpc from APOGEE data // *Astrophys. J. IOP Publishing.* – 2012. – Vol. 759, № 2. – P. 131.

26 Drimmel R., Poggio E. On the solar velocity // *Res. Notes AAS.* – 2018. – Vol. 2, № 4. – P. 210.

27 Nelson D. et al. The IllustrisTNG simulations: public data release // *Computational Astrophysics and Cosmology.* – 2019. – Vol. 6, № 1. – P.2.

28 Miyamoto M., Nagai R. Three-dimensional models for the distribution of mass in galaxies // *adsabs.harvard.edu.* – 1975. – Vol. 27, No. 4. – P.533-543.

29 Navarro J.F., Frenk C.S., White S.D.M. A universal density profile from hierarchical clustering // *Astrophys. J. American Astronomical Society.* – 1997. – Vol. 490, № 2. – P. 493–508.

30 Mardini M.K. et al. Cosmological insights into the early accretion of r-process-enhanced stars. I. a comprehensive chemodynamical analysis of LAMOST J1109+0754 // *Astrophys.J. Am. Astr. Soc.* -2020. -Vol.903. P.88.

31 Berczik P. et al. High performance massively parallel direct N-body simulations on large GPU clusters // *International conference on high performance computing.* – 2011. – P. 8–18.

32 Berczik P. et al. Up to 700k GPU Cores, Kepler, and the Exascale Future for Simulations of Star Clusters Around Black Holes // *Supercomputing. Springer Berlin Heidelberg.* – 2013. – P. 13–25.

33 Kamlah A.W.H. et al. Preparing the next gravitational million-body simulations: evolution of single and binary stars in NBODY6++GPU, MOCCA, and MCLUSTER // *MNRAS.* – 2022. – Vol. 511, № 3. – P. 4060–4089.

34 Banerjee S. et al. BSE versus StarTrack: Implementations of new wind, remnant-formation, and natal-kick schemes in NBODY7 and their astrophysical consequences // *Astron. Astrophys. Suppl. Ser. EDP Sciences.* – 2020. – Vol. 639. – P. A41.

35 Kroupa P. On the variation of the initial mass function // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* – 2001. – Vol. 322, № 2. – P. 231–246.

36 Panamarev T. et al. Star-disc interaction in galactic nuclei: formation of a central stellar disc // *MNRAS.* – 2018. – Vol. 476, № 3. – P. 4224–4233.

37 Panamarev T. et al. Direct N-body simulation of the Galactic centre // *MNRAS.* – 2019. – Vol. 484, № 3. – P. 3279–3290.

38 King I.R. The structure of star clusters. III. Some simple dynamical models // *AJS.* – 1966. – Vol. 71. – P.64.

39 Plummer H.C. On the problem of distribution in globular star clusters // *MNRAS.* -1911. - Vol.71. -P.460–470.

40 Manchester R.N. Millisecond Pulsars, their Evolution and Applications // *J. Astrophys. Astron.* – 2017. – Vol. 38, № 3. – P. 42.

41 Padmanabh P.V. et al. Discovery and timing of ten new millisecond pulsars in the globular cluster Terzan 5 // *Astron. Astrophys. Suppl. Ser. EDP Sciences.* – 2024. – Vol. 686. – P. A166.

42 Xing Y., Wang Z. Fermi study of γ -ray millisecond pulsars: the spectral shape and pulsed emission from J0614–3329 up to 60 GeV // *ApJ. IOP Publishing.* – 2016. – Vol. 831, № 2. – P. 143.

43 Do T. et al. Revealing the Formation of the Milky Way Nuclear Star Cluster via Chemo-dynamical Modeling // *APJL.* – 2020. – Vol. 901, № 2. – P. L28.

44 Arca Sedda M. et al. On the Origin of a Rotating Metal-poor Stellar Population in the Milky Way Nuclear Cluster // *APJL.* – 2020. – Vol. 901, № 2. – P. L29.

References

- 1 A. Boyarsky, D. Malyshev, & O. Ruchayskiy, *Phys. Lett. B* 705, 165–169 (2011).
- 2 D. Hooper, & T. Linden, *Phys. Rev. D* 84, 123005 (2011).
- 3 D. Hooper, & L. Goodenough, *Phys. Lett. B* 697, 412–428 (2011).
- 4 R. Bartels, S. Krishnamurthy, & C. Weniger, *Phys. Rev. Lett.* 116, 051102 (2016).
- 5 D. Hooper, *SciPost Phys. Proc.* (2022) doi:10.21468/scipostphysproc.12.006.
- 6 M. Di Mauro, *Phys. Rev. D* 102, 103013 (2020).
- 7 M. Di Mauro, *Phys. Rev. D* 103, 063029 (2021).
- 8 R. Bartels, E.C. Storm, Weniger, & F. Calore, *Nature Astronomy* 2, 819–828 (2018).
- 9 O. Macias, et al. *J. Cosmol. Astropart. Phys.* 2019, 042 (2019).
- 10 K.N.J. Abazajian, *Cosmol. Astropart. Phys.* 2011, 010 (2011).
- 11 D.A. Vandenberg, K. Brogaard, R. Leaman, & L. Casagrande, *arXiv [astro-ph.GA]* (2013).

- 12 D. Valcin, J.L. Bernal, R. Jimenez, L. Verde, & B.D. Wandelt, arXiv [astro-ph.CO] (2020).
- 13 J. Bland-Hawthorn, & O. Gerhard, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 54, 529–596 (2016).
- 14 N. Neumayer, A. Seth, & T. Böker, *A* 28, 4 (2020).
- 15 S.D. Tremaine, *Astrophysical Journal*, 203, 1, 1976, (1976).
- 16 R. Capuzzo-Dolcetta, *APJ* 415, 616 (1993).
- 17 E. Vasiliev, & H. Baumgardt, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 505, 5978–6002 (2021).
- 18 H. Baumgardt, & E. Vasiliev, *MNRAS* 505, 5957–5977 (2021).
- 19 M. Ishchenko, M. Sobolenko, et.al., *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 674, A70 (2023).
- 20 M. Ishchenko, et al. arXiv [astro-ph.GA] (2024).
- 21 M. Ishchenko, et al. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 673, A152 (2023).
- 22 I.V. Chemerynska, M.V. Ishchenko, et.al., arXiv [astro-ph.GA] (2022).
- 23 M.J. Reid, & A. Brunthaler, *Astrophys. J.* 616, 872–884 (2004).
- 24 M. Bennett, & J. Bovy, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 482, 1417–1425 (2018).
- 25 J. Bovy, et al., *Astrophys. J.* 759, 131 (2012).
- 26 R. Drimmel & E. Poggio, *Res. Notes AAS* 2, 210 (2018).
- 27 D. Nelson, et al., *Computational Astrophysics and Cosmology* 6, 2 (2019).
- 28 M. Miyamoto, & R. Nagai, *Adsabs.harvard.edu*, 27 (4), 533-543 (1975).
- 29 J.F. Navarro, C.S. Frenk, & S.D.M. White, *Astrophys. J.* 490, 493–508 (1997).
- 30 M.K. Mardini, et al. *Astrophys. J.* 903, 88 (2020).
- 31 P. Berczik, et al. International conference on high performance computing 8–18 (2011).
- 32 P. Berczik, et al. Up to 700k GPU Cores, Kepler, and the Exascale Future for Simulations of Star Clusters Around Black Holes. in *Supercomputing* 13–25 (Springer Berlin Heidelberg, 2013).
- 33 A.W.H. Kamlah, et al. *MNRAS* 511, 4060–4089 (2022).
- 34 S. Banerjee, et al., *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 639, A41 (2020).
- 35 P. Kroupa, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 322, 231–246 (2001).
- 36 T. Panamarev, et al., *MNRAS* 476, 4224–4233 (2018).
- 37 T. Panamarev, et al., *MNRAS* 484, 3279–3290 (2019).
- 38 I.R. King, *AJS* 71, 64 (1966).
- 39 H.C. Plummer, *MNRAS* 71, 460–470 (1911).
- 40 R.N. Manchester, *J. Astrophys. Astron.* 38, 42 (2017).
- 41 P.V. Padmanabh, et al., *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 686, A166 (2024).
- 42 Y. Xing, & Z. Wang, *ApJ* 831, 143 (2016).
- 43 T. Do, et al. *APJL* 901, L28 (2020).
- 44 M. Arca Sedda, et al., *APJL* 901, L29 (2020).

Article history:

Received 17 July 2024

Accepted 8 September 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 17.07.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Information about authors:

1. **Dana Kuvatova** (corresponding author) – MSc, Junior researcher at Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan. e-mail: kuvatova@fai.kz

2. **Taras Panamarev** – Ph.D, Lead Researcher at Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan; Postdoctoral Research Assistant at the University of Oxford, Great Britain. e-mail: panamarev@aphi.kz

3. **Maryna Ishchenko** – c.ph.-m.sc. Ph.D; Senior Researcher at Main Astronomical Observatory, National Academy of Sciences of Ukraine; Kyiv, Ukraine. e-mail: marina@mao.kiev.ua

4. **Anton Gluchshenko** – MSc student, Laboratory assistant at Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan. e-mail: gluchshenko@fai.kz

5. **Peter Berczik** – Dr.Sci., Head of department, Main Astronomical Observatory, National Academy of Sciences of Ukraine; Kyiv, Ukraine. e-mail: berczik@mao.kiev.ua

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Куватова Дана** (автор корреспондент) – Фесенков ат. астрофизикалық институтының кіші ғыл. қызм., Алматы қ., Қазақстан. e-mail: kuvatova@fai.kz

2. **Панамарев Тарас** – Ph.D, Фесенков ат. астрофизикалық институтының жетекші ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; Оксфорд университетінің докторантурадан кейінгі ғылыми көмекшісі, Ұлыбритания. e-mail: panamarev@aphi.kz

3. **Ищенко Марина** – физ.-мат. ғыл. канд. Ph.D; Украина Ұлттық ғылым академиясының Бас астрономиялық обсерваториясының аға ғылыми қызм./; Киев қ., Украина. e-mail: marina@mao.kiev.ua

4. **Глуценко Антон** – магистрант, Фесенков ат. астрофизикалық институтының лаборанты, Алматы қ., Қазақстан. e-mail: gluchshenko@fai.kz

5. **Берцик Петр** – Ph.D, Украина Ұлттық ғылым академиясының Бас астрономиялық обсерваториясының бөлім меңгерушісі; Киев қ., Украина. e-mail: berczik@mao.kiev.ua

МРНТИ 29.05.45

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v90i3-03>

Т.Х. Садыков¹ , Х.К. Махмет^{1,2*} , О.А. Новолодская¹ ,
В.В. Пискаль³ , А.Х. Аргынова¹ , К.А. Аргынова¹ ,
А.М. Алменова¹ , В.В. Жуков³ , В.И. Осенмук³ 

¹Satbayev University, Физико-технический институт, г. Алматы, Казахстан

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

³Тянь-Шаньская высокогорная научная станция, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: hansh2210@gmail.com

ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ШИРОКИХ АТМОСФЕРНЫХ ЛИВНЕЙ НА ВЫСОТЕ ГОР

В физике высоких энергий одним из основных направлений являются широкие атмосферные ливни (ШАЛ). Этот феномен в настоящее время остается малоизученным: ученым неизвестна природа их возникновения, механизмы формирования в высших слоях атмосферы и другие. В данной статье были описаны главные характеристики атмосферных ливней и их основные свойства. Основой исследований ШАЛ послужили многочисленные эксперименты, проведенные на комплексной установке «Адрон-55». Ливни были записаны и обработаны методом ионизационного калориметра, суть которого состоит в том, чтобы измерять энергию ШАЛ суммарной ионизацией частиц. Данный калориметр с поглотителями из железа и свинца обеспечивает высокую точность измерений, экспериментальная ошибка которых составляет всего 10%. Обработка экспериментальных данных осуществлялась программой, разработанной на языке C++. Эксперименты показали, что самые распространенные частицы в ливнях – электронно-фотонная и адронная компоненты, доля которых составляет 95–98% частиц в стволе ливня. Программой было обработано 8717 ливней за время равное 485 часам. Анализ энергетического диапазона зарегистрированных ливней подтверждает теорию их галактического происхождения. Также вычисление основных параметров дает возможность проводить дальнейшие исследования ШАЛ в более развернутом виде.

Ключевые слова: космические лучи, широкие атмосферные ливни, физика высоких энергий, ионизационный калориметр, ионизация.

T.Kh. Sadykov¹, Kh.K. Makhmet^{1,2*}, O.A. Novolodskaya¹, V.V. Piskal³,
A.Kh. Argynova¹, K.A. Argynova¹, A.M. Almenova¹, V.V. Zhukov³, V.I. Osenmuk³

¹Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³Tien-Shan high mountain scientific station, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: hansh2210@gmail.com

Main parameters of extensive air showers at mountain altitudes

In high-energy physics, one of the key areas of research is the study of extensive air showers (EAS). This phenomenon remains insufficiently understood; scientists still lack comprehensive knowledge about the nature of their origin and the mechanisms responsible for their formation in the upper layers of the atmosphere. In this paper, the main characteristics and properties of air showers are described in detail. Numerous experiments conducted at the Hadron-55 complex form the foundation of EAS research. The showers were recorded and analyzed using the ionization calorimeter method, which measures the energy of EAS by detecting the total ionization produced by particles. This calorimeter, equipped with iron and lead absorbers, ensures high measurement accuracy, with an experimental error of only 10%. The experimental data were processed using a program developed in C++. The experiments revealed that the most common particles in the showers are electron-photon and hadronic components, which account for 95-98% of the particles in the shower core. A total of 8717 showers were processed by the program over a period of 485

hours. An analysis of the energy range of the registered showers supports the theory of their galactic origin. Additionally, calculating the primary parameters allows for further, more detailed studies of EAS.

Key words: cosmic rays, extensive air showers, high energy physics, ionization calorimeter, ionization

Т.Х. Садыков¹, Х.Қ. Махмет^{1,2*}, О.А. Новолодская¹, В.В. Пискаль³,
Ә.Х. Арғынова¹, К.А. Арғынова¹, А.М. Әлменова¹, В.В. Жуков³, В.И. Осенмұқ³

¹Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы қ., Қазақстан

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

³Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясы, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: hansh2210@gmail.com

Таулардың биіктігіндегі кең атмосфералық нөсерлердің негізгі сипаттамалары

Жоғары энергетикалық физикада негізгі бағыттардың бірі кең атмосфералық нөсер (КАН) болып табылады. Бұл құбылыс қазіргі уақытта жеткілікті деңгейде зерттелмеген: ғалымдар олардың пайда болу табиғатын, атмосфераның жоғарғы қабаттарында қалыптасу механизмдерін және тағы басқа аспектілерін толық зерттемеген. Бұл мақалада ауа нөсерлердің негізгі сипаттамалары және олардың негізгі қасиеттері сипатталған. Зерттеудің негізі болып "Адрон-55" кешенді қондырғысында КАН-ді жүргізілген көптеген эксперименттер болды. Нөсерлер иондаушы калориметр әдісімен тіркеліп, өңделді. Атмосфералық нөсерлер бөлшектердің жалпы иондалуы арқылы КАН-дің энергиясын өлшейтін ионданушы калориметр әдісімен тіркеліп, өңделді. Бұл калориметр темір мен қорғасын сіңіргіштерімен жабдықталған, ол жоғары өлшеу дәлдігін қамтамасыз етеді, ал эксперименттік қателік небәрі 10%-ды құрайды. Эксперименттік деректер C++ тілінде әзірленген бағдарламамен өңделді. Эксперименттер көрсеткендей, нөсерлердегі ең көп таралған бөлшектер — электронды-фотондық және адрондық компоненттер, олардың үлесі нөсер өзегіндегі бөлшектердің 95-98%-ын құрайды. Бағдарлама 485 сағат ішінде 8717 нөсерді өңдеді. Тіркелген нөсерлердің энергетикалық диапазонын талдау олардың галактикалық табиғаты теориясын растайды. Сонымен қатар, негізгі параметрлерді есептеу кең атмосфералық нөсерлерді одан әрі тереңірек зерттеуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: ғарыштық сәулелер, кең атмосфералық нөсер, жоғары энергетикалық физика, иондану калориметрі, иондану.

Введение

Широкие атмосферные ливни (ШАЛ) образуются в результате взаимодействия первичной космической частицы с атмосферой Земли. Космические лучи представляют собой стабильные частицы и атомные ядра, зародившиеся и ускоренные до высоких энергий в отдаленных уголках Вселенной. Хотя до уровня наблюдений доходят только отдаленные потомки первичной частицы (за исключением высокоэнергетических мюонов, возникающих на начальных этапах каскада), некоторые свойства первичного взаимодействия все же можно проследить через цепочку последующих взаимодействий.

В основе представления о широком атмосферном ливне (ШАЛ) лежит модель ядерного каскада. Принято считать, что широкий атмосферный ливень — это гигантский электрон-ядерный поток частиц, в котором достигают полного расцвета все элементарные частицы, содержащиеся в пределах атмосферы при

умеренных энергиях, и характерные для ШАЛ: электрон-фотонная, адронная и мюонная компоненты, излучение Вавилова-Черенкова, радиоизлучение и др. Фотоны и электроны самые распространённые частицы в ливне — их доля от полного числа частиц составляет примерно 95–98% в центральной части и 80% на расстоянии 200–250 м от центра ливня. Поэтому самым простым и надежным методом исследования атмосферных ливней долгое время считалась регистрация их электронно-фотонной компоненты.

Широкие атмосферные ливни состоят из трех основных компонентов: *электронно-фотонной, мюонной и ядерно-активной*. Для измерения потока энергии электронно-фотонной компоненты используются специальные детекторы, размещенные в различных точках комплексной установки. Было замечено, что широкий атмосферный ливень постоянно обновляется за счет подпитки ядерными компонентами высокой энергии в его стволе, и в глубине атмосферы электронно-фотонная компо-

нента (ЭФК) находится в равновесии с высоко-энергетическими ядерно-активными частицами.

Таким образом, ШАЛ предоставляют уникальную возможность исследовать характеристики взаимодействия частиц сверхвысоких энергий с атомными ядрами.

Материалы и методы

Для изучения основных свойств и параметров ШАЛ необходимо использовать комплексные установки. Наблюдения за ливнями осуществляются с помощью Тянь-Шаньской высокогорной установки под названием «Адрон-55», находящаяся на высоте 3340 м над уровнем моря, недалеко от г. Алматы. На рисунке 1 представлена схема ионизационного калориметра. «Адрон-55» включает в себя 2-х-ярусный

координатный ионизационный кало-риметр площадью 55 м^2 с общей толщиной поглотителя 1200 г/см^2 и центральную ливневую установку из 30 сцинтилляционных детекторов площадью около 320 м^2 и 8 периферийных сцинтилляционных счетчиков на расстоянии до 100 м. На рис.1 показан схематический план установки Адрон-55, состоящая из центральной и периферийной частей.

Ионизационный калориметр используется для изучения характеристик взаимодействий адронов в стволах широких атмосферных ливней (ШАЛ). Калориметр состоит из двух частей: верхней, называемой гамма-блок, и нижней, называемой адронный блок. Эти части расположены вертикально на расстоянии 2,2 м друг от друга для проведения экспериментов по поиску чармированных частиц.

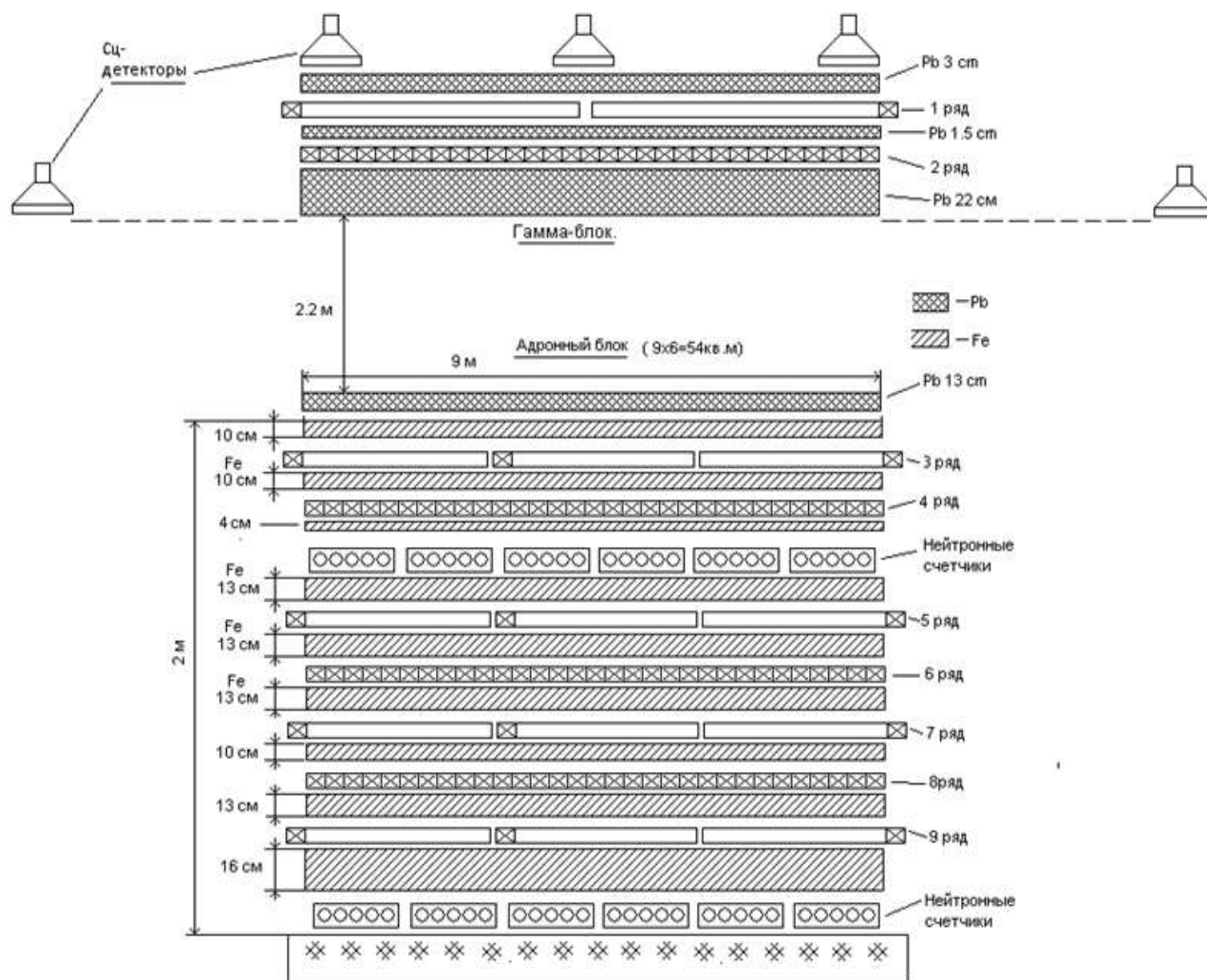


Рисунок 1 – Общий вид установки Адрон 55. Поперечный разрез калориметра

Гамма-блок включает два ряда ионизационных камер: 100 камер в первом ряду и 138

камер во втором, разделенных свинцовым экраном толщиной 26 см или 310 г/см^2 .

Адронный блок состоит из железного поглотителя с полостями, в которых установлены ионизационные камеры. Этот блок предназначен для измерения энергии компонентов космического излучения и определения траекторий частиц, что позволяет более детально изучать характеристики взаимодействий частиц космического излучения. Адронный блок содержит 4 ряда ионизационных камер, по 144 камеры в каждом ряду, расположенных взаимно-перпендикулярно с поглотителем из железа между рядами [23]. Ошибка в определении энергии взаимодействия в ионизационном калориметре толщиной 1100 г/см² и шести уровней наблюдения составляет менее 10%.

Определение основных параметров ШАЛ

В ходе экспериментов были выявлены следующие параметры ливня: число электронов N_e , энергия E , координаты оси ливня X , Y , зенитный θ и азимутальный ϕ углы.

Нахождение углов ствола ливня.

Углы θ и ϕ определяются по разности времени прихода фронта ШАЛ. На рис. 2 отображена схема местоположения 2-х групп сд-детекторов по 4 детектора в каждой группе,

расположенных по окружности радиуса 40 м и радиуса 100 м соответственно.

Вычисление прихода оси ливня осуществляется по относительной задержке импульсов в двух парах сцинтилляторов, расположенных на расстоянии 40 м друг от друга в 2 соседних домиках, размещенных во взаимно перпендикулярных направлениях. Точность измерения зенитного угла $\sim 5^\circ$.

Определение числа частиц в ионизационном калориметре.

Сигнал с нити ионизационной камеры подается на логарифмический усилитель, который позволяет автоматически изменять коэффициент усиления: для малых сигналов около 5 мВ усиление составляет $K=100$, для больших сигналов свыше 5 в – $K=0.2$. Это позволило получить широкий динамический диапазон для входных сигналов свыше $D=3 \cdot 10^5$ без насыщения усилителя. На рисунке 2 проиллюстрировано схематическое изображение канала регистрации калориметра. Таким образом, АЦП с диапазоном $D=4095$ или $4 \cdot 10^3$, позволяет измерять сигналы в диапазоне $D=3 \cdot 10^5$. Обратное восстановление кода в сигнал в мВ выполняется программно.

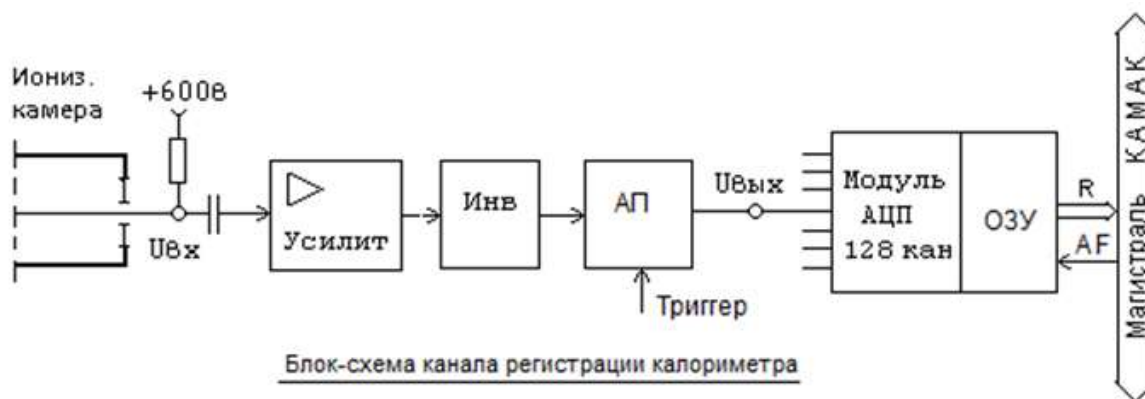


Рисунок 2 – Блок-схема канала регистрации калориметра

Сигнал на вход усилителя $U_{вх}$ поступает с нити ионизационной камеры. Следовательно, сигнал на выходе усилителя $U_{е(вых)}$ с коэффициентом усиления $K=100$ от одного электрона равен:

$$\begin{aligned} U_{е(вых)} &= U_{вх} \cdot K = \\ &= U_{вх} \cdot 100 = 390 \text{ мкВ} = 0.39 \text{ мВ} \end{aligned} \quad (1)$$

откуда ионизация равна:

$$n_e = \frac{U_{вх}}{U_e}. \quad (2)$$

Ионизация n_e есть число частиц, зарегистрированное в ряду калориметра. Значит полное число электронов в ливне будет равно:

$$N_e = \sum_{i=1}^8 n_e. \quad (3)$$

Энергия ШАЛ, выделившаяся в калориметре

Энергия электронно-ядерной лавины E является суммой трех типов энергии: энергии, выделившейся в железном поглотителе, энергии

электронно-фотонного каскада, образовавшегося в свинцовом поглотителе калориметра, и корректировки на энергию, ушедшую за пределы калориметра и не зарегистрированную из-за конечной толщины поглотителя.

$$E = E_{pb} + E_{Fe} + E_{попр}. \quad (4)$$

Энергия E_{pb} определялась как число частиц в пике электронно-фотонного каскада, при этом вводился коэффициент 1.7 для измеряемого числа частиц ионизационной камерой, который необходим при учетывании переходного эффекта на границе свинец-медь (толщина стенки ионизационной камеры равна 3 мм). Точность определения энергии ЭФК по числу частиц в максимуме его развития составляет 30%.

Вычисление координат оси ливня

При нахождении координат оси ливня были учтены следующие предположения:

- около оси ливня плотность потока частиц максимальная;
- ливень имеет аксиальную симметрию, иными словами плотность потока ливневых частиц зависит только от расстояния до оси ливня и не зависит от азимутального угла.

Для определения одной координаты оси X используется ковер сцинтилляционных детекторов, содержащий 5 рядов по 6 счетчиков в каждом. Два крайних счетчика в каждом ряду исключаются из расчетов. Счетчики в ряду расположены вдоль оси, перпендикулярной искомой координате. Затем определяется ряд с наибольшей плотностью потока частиц:

$$\rho_{j\max} = \sum_{i=1}^6 \rho_{ij}/4 \quad (5)$$

где j – номер ряда, i – номер сцинтиллятора в ряду. Величина координаты X оси ливня определяется методом центра тяжести:

$$X = \frac{\sum_{j=j\max-1}^{j\max+1} \rho_j x_j}{\sum_{j=j\max-1}^{j\max+1} \rho_j}, \quad (6)$$

где x_j – координата j -ого ряда относительно центра установки. Если найденная этим методом координата оси ливня лежит в пределах 3.5 м ($|X| < 3.5$ м), то координата оси X считается найденной правильно. Аналогичным образом находится и координата Y оси ливня.

Результаты и обсуждение

Регистрация широких атмосферных ливней проводилась с 2019 года. В банк данных было записано 8717 ливней с $N_e > 6.4 \cdot 10^4$, оси которых лежат в круге радиусом 18 м, зарегистрированных за время 485 часов. На рисунке 3 отображена гистограмма распределения ионизации во всех рядах калориметра, а зеленая линия показывает траекторию струи ливня через всю установку в проекциях X и Y .

При осмотре событий из вторичного банка было обнаружено, что 90% ядерного состава ливней – легкие электроны и фотоны, которые поглощаются свинцом уже в первых 3 слоях калориметра. Тяжелые частицы, проходящие через все слои калориметра достаточно редки. Прослеживается такая статистика: пик частоты событий обнаружено с числом электронов от $N_e = 1.9 \cdot 10^5$ до $5.2 \cdot 10^5$. Более детально о первичном анализе данных с ТШНВС изложено в работе [3].

На рисунке 3 показан паспорт ливня, зарегистрированный 1 января 2021 года. Как видно из рисунка это “молодой” ливень с числом частиц $N_e \sim 5.6 \cdot 10^5$ и энергией равной 25 ТэВ. Зелеными линиями отображена траектория оси ливня в двух проекциях: в четной и нечетной. Поскольку координаты оси ливня почти совпадают с координатами центра установки, то его ось на находится почти посередине сцинтилляционного ковра. Это довольно распространенный тип ливней, зарегистрированных установкой.

Заключение

Широкие атмосферные ливни являются интересным феноменом в физике высоких энергий. Поскольку ШАЛ были открыты относительно недавно, то предоставляют широкий полигон для исследований. В данной статье были изложены их основные параметры и методы их нахождения. Определение этих параметров позволяет сделать первичный анализ о поведении и свойствах ливней и являются фундаментом для дальнейших исследований.

Благодарность

Работа выполнена в рамках проекта (грант №AP19679396) при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан.

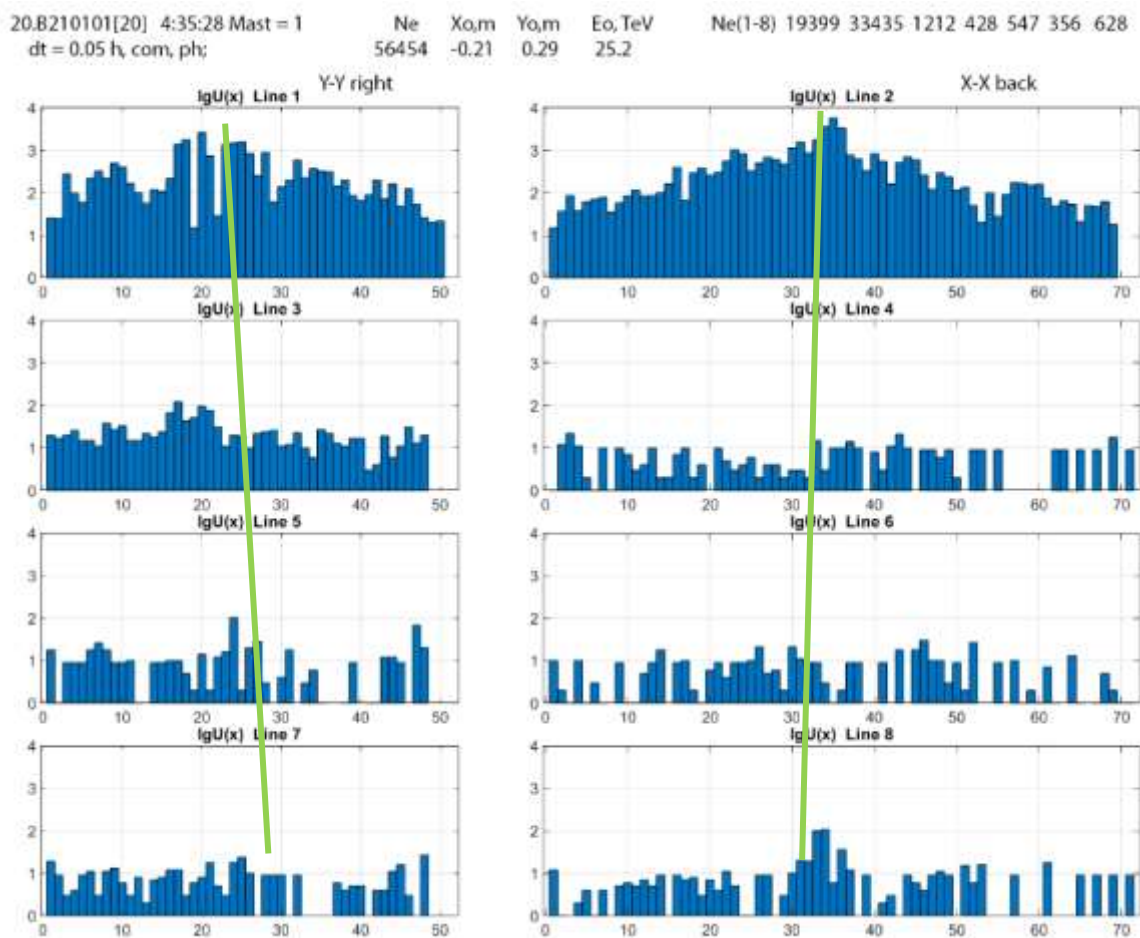


Рисунок 3 – Паспорт ливня с адронной компонентой

Литература

- 1 Pryga, J.S., Stanek, W., Woźniak, et al. Analysis of the Capability of Detection of Extensive Air Showers by Simple Scintillator Detectors // Universe – 2022 – Vol. 8. – P.425.
- 2 Shaulov S.B., P.F. Beyl et al. Investigation of EAS cores // EPJ Web Conf. 145, ISVHECRI 2016 – XIX International Symposium on Very High Energy Cosmic Ray Interactions (26 June 2017), 17001.
- 3 Fabjan, C.W., Fournier, D. Calorimetry // In: Fabjan, C., Schopper, H. (eds) Particle Physics Reference Library. Springer, Cham. – 2020 – P. 201–280.
- 4 Kadhom F. Fadhel; b, & Al-Rubaiee, et. al. Reconstruction of Air-Shower Parameters through Lateral Distribution Function of Ultra-High Energy Particles // Acta physica polonica – 2021– Vol. 140 – P. 344-349.
- 5 Mukhamedshin, R., Sadykov, T., Serikkanov, A., et al. Studies of Anomalous Phenomena in the Development of Electron-Nuclear Cascades in the EAS Cores Registered by a Modernized Complex Installation at Mountain Altitudes // Appl. Sci. – 2023 – Vol. 13 – P.2507.
- 6 Sadykov, T., Mukhamedshin R., Galkin V., et al. First Results of Studying EAS Cores Using a High-Mountain Ionization Calorimeter // Particles – 2024 – Vol. 7(1) – P. 40-51.
- 7 Stenkin, Y.V. Overview on EAS Neutrons: Recording and Simulations // Phys. Atom. Nuclei – 2023 – Vol. 86 – P. 1090–1094.
- 8 García-León, M. Scintillation Detectors. In: Detecting Environmental Radioactivity // Graduate Texts in Physics. Springer, Cham. – 2022 – P. 299–337.
- 9 Cates, Joshua; Choong, Woon-Seng; Brubaker, Erik. Scintillation and Cherenkov Photon Counting Detectors with Analog Silicon Photomultipliers for TOF-PET // TechRxiv. Preprint – 2023 – 25 p.
- 10 Giuseppe Di Sciascio. The full coverage approach to the detection of Extensive Air Showers // 21st International Symposium on Very High Energy Cosmic Ray Interactions. – 2023 – SciPost Phys. Proc. 13, 019.
- 11 Cao, Z., Aharonian, F.A., An, Q. et al. Ultrahigh-energy photons up to 1.4 petaelectronvolts from 12 γ -ray Galactic sources // Nature – 2021 – Vol. 594 – P. 33–36.
- 12 Христиансен Г.Б.. Космические лучи сверхвысоких энергий. – М.: Атомиздат, 1975. – с. 117–118.

- 13 Грейзен К. Физика космических лучей – Москва, 1958 – Т. 3. – С.7.
- 14 В.С. Асейкин, И.Н. Киров, Н.М. Нестерова, Н.М. Никольская, С. И. Никольский и др. // Характеристики электронно-фотонной компоненты широких атмосферных ливней на высоте 3330 м над уровнем моря // Препринт № 142, ФИАН, Москва, 1976.
- 15 Адамов Д.С., Баркалов К.В., Вильданов Н.Г. и др. Пространственно-энергетические характеристики электронно-фотонной и адронной компонент шал с $\text{Ne} = 5.105 - 107$ на уровне гор. // Препринт № 187, ФИАН, Москва, 1989.
- 16 Moore E., Gendre B., Orange N. B., Panther F. H., Constraints on the ultra-high energy cosmic ray output of gamma-ray bursts // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society – 2024. – Vol.530 (1). – P.555-559.
- 17 Hao-Ning He, B. Theodore Zhang et. al. A Detectable Ultra-high-energy Cosmic-Ray Outburst from GRB 221009A // Astrophys.J. – 2024. – Vol. 963 (2). – P.109.
- 18 Григоров Н. Л., Рапопорт И. Д., Шестоперов В. Я. // Частицы высоких энергий в космических лучах: монография. - Москва: Наука, 1973. – С.15–17.
- 19 Асейкин В.С., Никольская Н.М., Павлюченко В.П. и др. // Универсальный алгоритм оценки основных параметров ШАЛ. Препринт № 31, ФИАН, Москва, 1987.
- 20 Мурзин В.С. Астрофизика космических лучей: учеб. пособие для вузов. – Москва: Логос, 2007. – 397 с.
- 21 Ziegler J.F. Terrestrial cosmic rays // IBM Journal of Research and Development. – 1996. – Vol. 40. – P.19-39.
- 22 Stanev T. Cosmic Rays and Extensive Air Showers. Elastic and Diffractive Scattering // Proceedings, 13th International Conference, Blois Workshop, CERN, Geneva, Switzerland, (June 29-July 3, 2009).
- 23 Пискаль В.В., Жуков В.В. Комплексная установка «Адрон-55» для исследования характеристик взаимодействия частиц сверхвысоких энергий в космических лучах. Техническое описание, 2017. – С.5.
- 24 Sommers P. Extensive air showers and measurement techniques // Comptes Rendus Physique. – 2005. – Vol.5. Iss.4 – P. 463-472.
- 25 Voronin D., et al. Calibration system of EAS Cherenkov arrays using commercial drone helicopter. 37th International Cosmic Ray Conference — ICRC 2021 (Berlin, 12–23 July, 2021).

References

- 1 J.S. Pryga, W. Stanek, Wo'zniak, et al. Universe, **8**, 425 (2022).
- 2 S.B. Shaulov, P.F. Beyl, et al., EPJ Web Conf. 145, 17001 (2017).
- 3 C.W. Fabjan, D. Fournier, in Particle Physics Reference Library, eds. C. Fabjan and H. Schopper (Springer, Cham, 2020), p. 201–280.
- 4 F.F. Kadhom, Al-Rubaiee et al., Acta Phys. Pol. 140, 344-349 (2021).
- 5 R. Mukhamedshin, T. Sadykov, A. Serikkanov et al., Appl. Sci. 13, 2507 (2023).
- 6 T. Sadykov, R. Mukhamedshin, V. Galkin et al., Particles 7, 40-51 (2024).
- 7 Y.V. Stenkin, Phys. Atom. Nuclei 86, 1090–1094 (2023).
- 8 M. García-León, in Detecting Environmental Radioactivity, Graduate Texts in Physics (Springer, Cham, 2022), p. 299–337.
- 9 J. Cates, W.S. Choong, E. Brubaker, TechRxiv. Preprint (2023), 25 p.
- 10 G. Di Sciascio, SciPost Phys. Proc. 13, 019 (2023).
- 11 Z. Cao, F.A. Aharonian, Q. An et al., Nature 594, 33–36 (2021).
- 12 G.B. Khristiansen, Kosmicheskie Luchi Sverkhvysokikh Energii (Atomizdat, Moscow, 1975), p. 117–118. (in Russ).
- 13 K. Greisen, Fizika Kosmicheskikh Luchey (Moscow, 1958), Vol. 3, p. 7. (in Russ).
- 14 V.S. Aseikin, I.N. Kirov, N.M. Nesterova, N.M. Nikolskaya, S.I. Nikolsky et al., Preprint No. 142, FIAN, Moscow (1976). (in Russ).
- 15 D.S. Adamov, K.V. Barkalov, N.G. Vildanov et al., Preprint No. 187, FIAN, Moscow (1989). (in Russ).
- 16 E. Moore, B. Gendre, N.B. Orange, F.H. Panther, Mon. Not. R. Astron. Soc. 530, 555-559 (2024).
- 17 H.-N. He, B. Theodore Zhang et al., Astrophys. J. 963, 109 (2024).
- 18 N.L. Grigorov, I.D. Rapoport, V.Ya. Shestoperov, Chastitsy Vysokikh Energii v Kosmicheskikh Luchey (Nauka, Moscow, 1973), pp. 15–17. (in Russ).
- 19 V.S. Aseikin, N.M. Nikolskaya, V.P. Pavlyuchenko et al., Preprint No. 31, FIAN, Moscow (1987). (in Russ).
- 20 V.S. Murzin, Astrofizika Kosmicheskikh Luchey (Logos, Moscow, 2007), 397 p. (in Russ).
- 21 J.F. Ziegler, IBM J. Res. Dev. 40, 19-39 (1996).
- 22 T. Stanev, Proceedings of the 13th International Conference, CERN, Geneva, Switzerland, June 29-July 3, 2009.
- 23 V.V. Piskal, V.V. Zhukov, Kompleksnaya Ustanovka "Adron-55" dlya Issledovaniya Kharakteristik Vzaimodeistviya Chastits Sverkhvysokikh Energii v Kosmicheskikh Luchey, Tekhnicheskoe Opisanie (2017), p. 5. (in Russ).
- 24 P. Sommers, Comptes Rendus Physique 5(4), 463-472 (2005).
- 25 D. Voronin et al., 37th International Cosmic Ray Conference — ICRC 2021, Berlin, July 12–23, 2021.

История статьи:

Поступила – 06.04.2024

Поступила в доработанном виде – 05.07.2024

Принята – 08.09.2024

Article history:

Received 6 April 2024

Received in revised form 5 July 2024

Accepted 8 September 2024

Информация об авторах:

1. **Т.Х. Садыков** – д.ф.-м.н., профессор, ВНС, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы, e-mail: turlan43@mail.ru.

2. **Х.М. Махмет** – PhD студент (автор корреспондент), МНС, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы, e-mail: hansh2210@gmail.com.

3. **О.А. Новолодская** – к.ф.-м.н., СНС, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы, e-mail: novololga@yandex.ru.

4. **В.В. Пискаль** – НС, Тянь-Шаньская высокогорная научная станция, Казахстан, г. Алматы, e-mail: slava.piscal@mail.ru.

5. **А.Х. Аргынова** – СНС, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы, e-mail: argali7@mail.ru.

6. **К.А. Аргынова** – МНС, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы, e-mail: kora.argynova@gmail.com.

7. **А.М. Алменова** – Satbayev University, Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы, e-mail: aidana_alm@mail.ru.

8. **В.В. Жуков** – к.ф.-м.н., Тянь-Шаньская высокогорная научная станция, Казахстан, г. Алматы, e-mail: cosmo-base@mail.ru.

9. **В.И. Осенмук** – ведущий инженер, Тянь-Шаньская высокогорная научная станция, Казахстан, г. Алматы, e-mail: Almaty_vova@mail.ru.

Information about authors:

1. **T.Kh. Sadykov** – Dr. of Phys. and Math. Sc., Prof., Lead Researcher, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty, e-mail: turlan43@mail.ru.

2. **Kh.M. Makhmet** – PhD student (corresponding author), Junior researcher, Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, e-mail: hansh2210@gmail.com.

3. **O.A. Novolodskaya** – Cand. Phys. Math. Sci., Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty, e-mail: novololga@yandex.ru.

4. **V.V. Piscal** – Researcher, Tien-Shan high mountain scientific station, Kazakhstan, Almaty, e-mail: slava.piscal@mail.ru.

5. **A.Kh. Argynova** – Senior researcher, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty, e-mail: argali7@mail.ru.

6. **K.A. Argynova** – Junior researcher, Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty, e-mail: kora.argynova@gmail.com.

7. **A.M. Almenova** – Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan e-mail: aidana_alm@mail.ru.

8. **V.V. Zhulov** – Cand. Phys. Math. Sci., Tien-Shan high mountain scientific station, Almaty, Kazakhstan, e-mail: cosmo-base@mail.ru.

9. **V.I. Osenmuk** – Lead engineer, Tien-Shan high mountain scientific station, Almaty, Kazakhstan, e-mail: Almaty_vova@mail.ru.

2-бөлім

ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2

PLASMA PHYSICS

Раздел 2

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Ж.Е. Онайбергенов^{1,2} , А.Е. Абдрахманов² ,

С.А. Оразбаев² , Т.С. Рамазанов² , А.У. Утегенов^{1,2*} 

¹Институт прикладных наук и информационных технологий, г.Алматы, Казахстан

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

*e-mail: almasbek@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ЭЛЕКТРОНОВ В ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА ПРИ ПОСТОЯННОМ ТОКЕ Ar и Ar/C₂H₂

В данной работе предоставлены результаты исследования температуры электронов в аргонной и аргон-ацетиленовой плазме тлеющего разряда постоянного тока. Для определения основного параметра комплексной плазмы был использован оптико-эмиссионный метод. Зависимость температуры электронов от рабочего давления, напряжения и времени разряда определялась по интенсивности спектральных линий. Напряжение источника варьировалось от 1 кВ до 1,5 кВ, а давление поддерживалось между 0,1–1 торр. В зависимости от времени температура электронов рассчитывалась каждые 20 секунд в течение 200 секундного разряда. Результаты показали, что в аргонной плазме с повышением давления температура электронов снижается до показателя давления 0,4 торр, последующее увеличение приводит к повышению температуры. Также с увеличением напряжения источника наблюдается снижение температуры электронов в пределах погрешности. Кроме этого, в пылевой плазме (PECVD в Ar-C₂H₂) температура электронов в зависимости от давления и напряжения источника имела тенденцию, аналогичную той, что наблюдалась в аргонной плазме. Однако температура электронов в пылевой плазме в зависимости от времени в начальный момент повышается, после резко снижается с течением времени.

Ключевые слова: пылевая плазма, температура электронов, PECVD, плазма с наночастицами, оптическая спектроскопия.

Z.E. Onaibergenov^{1,2}, A.E. Abdrakhmanov², S.A. Orazbayev², T.S. Ramazanov², A.U. Utegenov^{1,2*}

¹Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: almasbek@physics.kz

Investigation of the temperature of electrons in a glow discharge plasma at direct current Ar and Ar/ C₂H₂

This paper presents the results of the study of the electron temperature in argon and argon-acetylene plasma of DC glow discharge. The optical-emission method was used to determine the main parameter of the complex plasma. The dependence of the electron temperature on the operating pressure, voltage, and discharge time was determined from the intensity of spectral lines. The source voltage was varied from 1 kV to 1.5 kV, and the pressure was maintained between 0.1-1 torr. As a time-dependent function, the electron temperature was calculated every 20 seconds during a 200-second discharge. The results showed that in argon plasma, as the pressure increases, the electron temperature decreases up to a pressure value of 0.4 torr, subsequent increase leads to an increase in temperature. Also, with the increase in source voltage, a decrease in electron temperature within the error limits is observed. In addition, in dust plasma (PECVD in Ar-C₂H₂), the electron temperature as a function of pressure and source voltage showed a trend similar to that observed in argon plasma. However, the electron temperature in dust plasma increases as a function of time at the initial moment, after which it decreases sharply with time.

Key words: Dusty plasma, electron temperature, PECVD, plasma with nanoparticles, optical spectroscopy.

Ж.Е. Оңайбергенов^{1,2}, А.Е. Әбдрахманов², С.А. Оразбаев², Т.С. Рамазанов², А.У. Утегенов^{1,2*}

¹Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты, Алматы қ, Қазақстан

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ, Қазақстан

*e-mail: almasbek@phsyics.kz

Тұрақты токта Ar және Ar/C₂H₂ солғын разрядты плазмадағы электрондардың температурасын зерттеу

Бұл жұмыста тұрақты токтағы солғын разрядының аргон және аргон ацетилен плазмасындағы электрондардың температурасын зерттеу нәтижелері келтірілген. Күрделі плазманың негізгі параметрін анықтау үшін оптика эмиссиялық әдіс қолданылды. Электрондардың температурасының қысымнан, кернеуден және уақыттан тәуелділігі спектрлік сызықтардың интенсивтілігін талдау арқылы анықталды. Эксперимент барысында кернеу көзі 1кВ-тан 1,5кВ-қа дейін жүйелі түрде өзгертіліп отырды, ал қысым көрсеткіші тұрақты түрде 0,1-1 торр арасында сақталды. Уақыттан тәуелділігі бойынша 200 секундқа созылған солғын разрядта әр 20 секунд сайын электрондардың температурасы есептеліп отырды. Алынған нәтижелер көрсетуі бойынша аргон плазмасында қысымның жоғарылауымен электрондардың температурасы 0,4 торр қысым көрсеткішіне дейін төмендеп, содан кейін қайта көтерілетінін көрсетті. Электрондардың температурасы бөлшексіз яғни аргон плазмасында кернеу көзі жоғарылауымен қателік шегінде төмендей бастайтыны байқалды. Тозаңды плазмада (PECVD Ar-C₂H₂) жүргізілген зерттеу нәтижесін саралау барысында электрондардың температурасы қысым мен кернеу көзінен тәуелділігі аргон плазмасында байқалған тенденциялармен өте ұқсас болғаны анықталды. Бастапқы сәтте уақытқа байланысты тәуелділікте тозаңды плазмадағы электрондардың температурасы біртіндеп жоғарылай бастап, кейін уақыт өте келе күрт төмендейтінін нәтижелер көрсетті.

Түйін сөздер: тозаңды плазма, электрондар температурасы, PECVD, нанобөлшектері бар плазма, оптикалық спектроскопия.

Введение

Изучение комплексной плазмы как модели конденсированных сред в настоящее время является одним из актуальных направлений научных исследований [1, 2]. Плазма, содержащая пылевые частицы, используется для моделирования целого ряда процессов в конденсированных средах. В качестве модели сложной плазмы в исследованиях используются установки РК-4 [3, 4], РК-3 Плюс [5–7] и РКЕ Nefedov [8], которые с 2001 года по сегодняшний день использовались для экспериментов на борту Международной космической станции (МКС). В условиях микрогравитации были обнаружены различные феномены, связанные с пылевыми частицами, такие как плазменный кристалл [9–12], пылевые волны [13–16], пустоты (войд) [17–20]. Важность исследования этих явлений заключается в понимании фундаментальных физических процессов, связанных с фазовыми переходами и созданием новых материалов.

Присутствие пылевых частиц значительно влияет на ключевые параметры плазмы, такие как температура и концентрация электронов [21]. Диагностика пылевой плазмы позволяет получить полное представление о механизмах и причинах этих явлений. Существует различные методы диагностики такие как электрический зонд

Ленгмюра [22–29], лазерные интерферометры [30–33] и оптические спектрометры [26, 34–37]. Использование оптических методов для диагностики плазмы, в том числе пылевой, является надежным подходом, поскольку не влияет на плазму и на конечный результат.

Параметры электронной температуры, электронной плотности и аксиального электрического поля в зависимости от тока источника и давления в атмосфере неона с пылевыми частицами определялись с помощью зонда на экспериментальной установке РК-4 с источником постоянного тока с изменяющейся полярностью [3]. Результаты работы показывают, что с увеличением тока осевое электрическое поле и температура электронов уменьшаются, а концентрация электронов увеличивается. Осевое электрическое поле демонстрирует сложную зависимость от давления: при низких давлениях оно уменьшается, а при высоких давлениях может оставаться неизменной или увеличиваться. Однако температура электронов уменьшается с ростом давления, в то время как концентрация увеличивается [3]. В работе Антонова и др. [25], проведенном на той же экспериментальной установке, целью которого было оценить заряд пылевых частиц и сравнить скорости дрейфа частиц в условиях микрогравитации и на земле при различных параметрах и типах газа. Авторы

измеряли основные параметры без пылевой плазмы в зависимости давления на земной экспериментальной установке. Результаты показали другую зависимость температуры электронов и осевого электрического поля от давления в атмосфере аргона по сравнению с атмосферой неона. В аргоновой атмосфере электронная температура и электрическое поле увеличиваются с ростом давления. Напротив, в атмосфере неона температура электронов снижается на незначительную величину с ростом давления, а электрическое поле остается неизменным. Также наблюдалось, что плотность электронов увеличивается с ростом давления [25].

В ряде работ [31, 34, 35, 38] в которой пылевая плазма была получена путем введения химический активного газа, были определены основные параметры плазмы. В данных работах [39–41] в плазме высокочастотного емкостного разряда в смеси Ar/SiH_4 на основе зондовой диагностики были определены температура и плотность электронов в зависимости от времени. В результате исследования обнаружено, что концентрация электронов снижается с истечением времени, а температура электронов увеличивается. Gordillo-Vazquez и другие [37] определили температуру электронов с помощью оптического метода в высокочастотного емкостного разряде $\text{Ar}/\text{H}_2/\text{C}_2\text{H}_2$, а также $\text{Ar}/\text{H}_2/\text{CH}_4$. Результаты данной работы показали, что с повышением процентного содержания аргона температура электронов снижается, а также в атмосфере метана и аргона температура ниже, чем в атмосфере ацетилена. Авторы работы [28] измерили температуру электронов, концентрацию ионов и потенциал плазмы внутри пустоты (войда), с помощью зонда в условиях микрогравитаций. По результатам данной работы температура электронов, потенциал плазмы были выше, чем без пылевой компоненты, а плотность ионов была меньше в тех же условиях.

В представленной работе была определена температура электронов с помощью оптического метода на земной установке РК-4 Qaz, которая является аналогом РК-4 на МКС [3]. Исследована зависимость температуры электронов от напряжения и давления как в аргоновой, так и в аргон-ацетиленовой плазмы.

Экспериментальная установка

Принципиальная схема экспериментальной установки РК-4 Qaz представлена на рисунке 1, которая состоит из П-образной боросиликатной стеклянной газоразрядной трубки (1). Трубка имеет длину 330 мм, а внутренний диаметр

составляет 25 мм. Разряд зажигается источником постоянного тока Плазон (5) между анодными (6) и катодными (7) электродами из нержавеющей стали марки 304 AISI, на расстоянии 200 мм, диаметром 20 мм и толщиной 2 мм. Воздух из камеры был выкачен с помощью роторного насоса марки Вакма 2HBP-5ДМ (2) и турбомолекулярного насоса Pfeiffer Hicube80 (3) до показателя давления 10^{-4} торр. Подача рабочего газа в систему осуществлялась с помощью регуляторов массового расхода (4) XINNOVIS S 500 со скоростью 160 куб. см для аргона и 0,6 куб. см для ацетилена. Давление системы измерялось с помощью датчика контроллера модели Edwards ADC Enhanced MKII, D39591500. В области положительного столба с использованием оптического эмиссионного спектрометра (9) модели АТР 2000 излучения измерялось в диапазоне 200–1100 нм.

Эксперимент был проведен в различных значениях давления в диапазоне 0,1–1 Торр и напряжения от 1 до 1,5 кВ. Система находилась без потоковом режиме. Процентное содержание ацетилена (C_2H_2) составляло $\sim 2\%$. После введения ацетилена с помощью спектрометра были получены спектральные линии с интервалом в 20 секунд в течение 200 секундного периода.

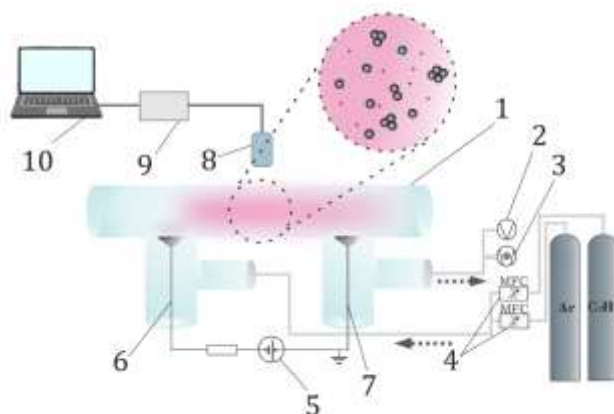


Рисунок 1 - Схема экспериментальной установки РК-4 Qaz. Газоразрядная трубка (1), роторный насос (2), турбомолекулярный насос (3), регуляторы массового расхода (4), источник постоянного тока (5), катод (6), анод (7), объектив спектрометра (8), оптический эмиссионный спектрометр (9), ноутбук (10)

Метод расчета температуры электронов

Температура электронов была рассчитана с помощью модели коронного баланса плазмы. В своей работе Fujimoto [42] утверждает, что при низких давлениях и малых плотностях электронов в разрядах типа тлеющего разряда преобладают такие процессы, как прямое возбуждение из

основного состояния и спонтанный радиационный распад. Поэтому в данном эксперименте в плазме преобладает кинетика коронно-балансной плазмы. Gordillo-Vazquez и другие в своей работе [37] представили модифицированный метод построения графика Больцмана на основе коронно-балансной модели, который был использован для расчета температуры электронов в данной работе:

$$\ln\left(\frac{I_{ij}\lambda_{ij}\sum_{i>j}A_{ij}}{A_{ij}b_{1i}}\right) = -\frac{E_{1i}}{kT_e} + \text{const},$$

где λ_{ij} – длина волны излучающей плазмы; I_{ij} – интенсивность спектральной линии между энергетическими уровнями i и j ; A_{ij} – коэффициент вероятностного перехода для спонтанного излучения из с уровня i на более низкий j ; E_{1i} – энергия возбужденного состояния уровня i ; b_{1i} – коэффициент в экспоненциальном приближении коэффициента скорости возбуждения электронным ударом от основного состояния 1 до уровня i ; k – постоянная Больцмана; T_e – температура электронов.

Для дальнейших расчетов использовалось спектральная линия аргона на длине волны 750,38 нм со спонтанными переходами $2p \rightarrow 1s2$. Значения константы b_{1i} для линий аргона $b_{1i} = 3,508 \cdot 10^{-9}$ [26, 36, 37].

Результаты и обсуждение

Аргоновая плазма

В результате экспериментов была определена зависимость температуры электронов аргоновой плазмы от давления и напряжения источника. Результаты показали (рис. 2) что с увеличением напряжения при фиксированном давлении в 0,4 торр температура электронов линейно снижается с $\sim 0,93$ эВ до $\sim 0,9$ эВ. Представленную тенденцию можно объяснить тем, что с увеличением напряжения источника возрастает скорость ионизации, что приводит к увеличению концентрации электронов. Это, в свою очередь, увеличивает частоту столкновений электронов с нейтральными атомами, ионами аргона что приводит к охлаждению электронов [26].

В ходе экспериментов было обнаружено что температура электронов в зависимости от давления при 0,4 торр имеет самую низкую температуру электронов. Как показано на рис. 2, температура электронов снижается с 1,01 эВ до 0,92 эВ при повышении давления до 0,4 торр при фиксированном напряжении 1 кВ. При

дальнейшем повышении давления от 0,4 до 1 торр температура электронов увеличивается и достигает 1,04 эВ. Возможно, причиной такой тенденций было утечка газа из системы.

Полученные результаты температуры электронов в чистом аргоне хорошо согласуется с другими исследованиями [43, 44] которые использовали для определения оптический метод.

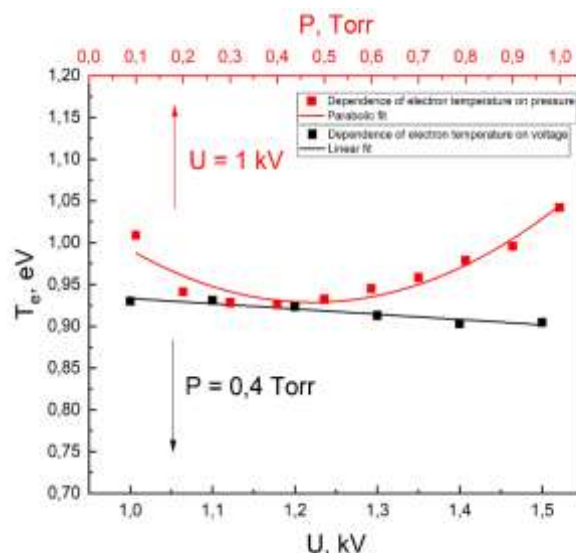


Рисунок 2 - Зависимость температуры электронов в аргоновой плазме от напряжения при давлении 0,4 торр (красная линия) и давления при напряжениях 1 кВ (черная линия)

Плазма Ar-C₂H₂

Пылевая плазма была получена путем введения химически активного газа (ацетилен), и было замечено, что размер и концентрация частиц в плазме не остаются постоянными в зависимости от времени. Аналогичные результаты были представлены в работах [45, 46]. Изменение размера и концентрации частиц резко влияет на основные параметры плазмы [31].

Результаты показали, что после введения ацетилена в плазму аргона температура электронов изменяется в зависимости от времени. На рис. 3 представлены графики зависимости температуры электронов от времени при различных значениях давления и напряжения плазмы. В начальный момент температура электронов выше и по истечению времени снижается. Повышение температуры электронов после введения ацетилена можно объяснить тем, что начинается процесс формирования пылевых частиц, который приводит к снижению концентрации электронов нарушая ионизационный баланс в плазме, тем самым отрицательно заряжая частицы. Повышения температуры электронов является механизмом

компенсации падения концентраций электронов для поддержания разряда [27, 47, 31]. Дальнейшее снижение температуры электронов с течением времени можно объяснить образованием пылевых частиц, прошедших несколько стадий роста [31]. Пылевые частицы под воздействием электростатических сил оседают на поверхности анода, что приводит к уменьшению их концентрации в наблюдаемой зоне и, как следствие, к снижению температуры электронов.

Температура электронов в зависимости от давления в пылевой плазме повторяет тенденцию аргоновой плазмы (рис.2). На рисунке 3 видно, что самая низкая температура электронов наблюдается при показателе давлений 0,4 торр. Предположительно в данном показателе давления процесс формирования частиц происходит быстрее. При более высоких показателях давления процесс протекает более медленно из-за присутствия высокой концентрации частиц.

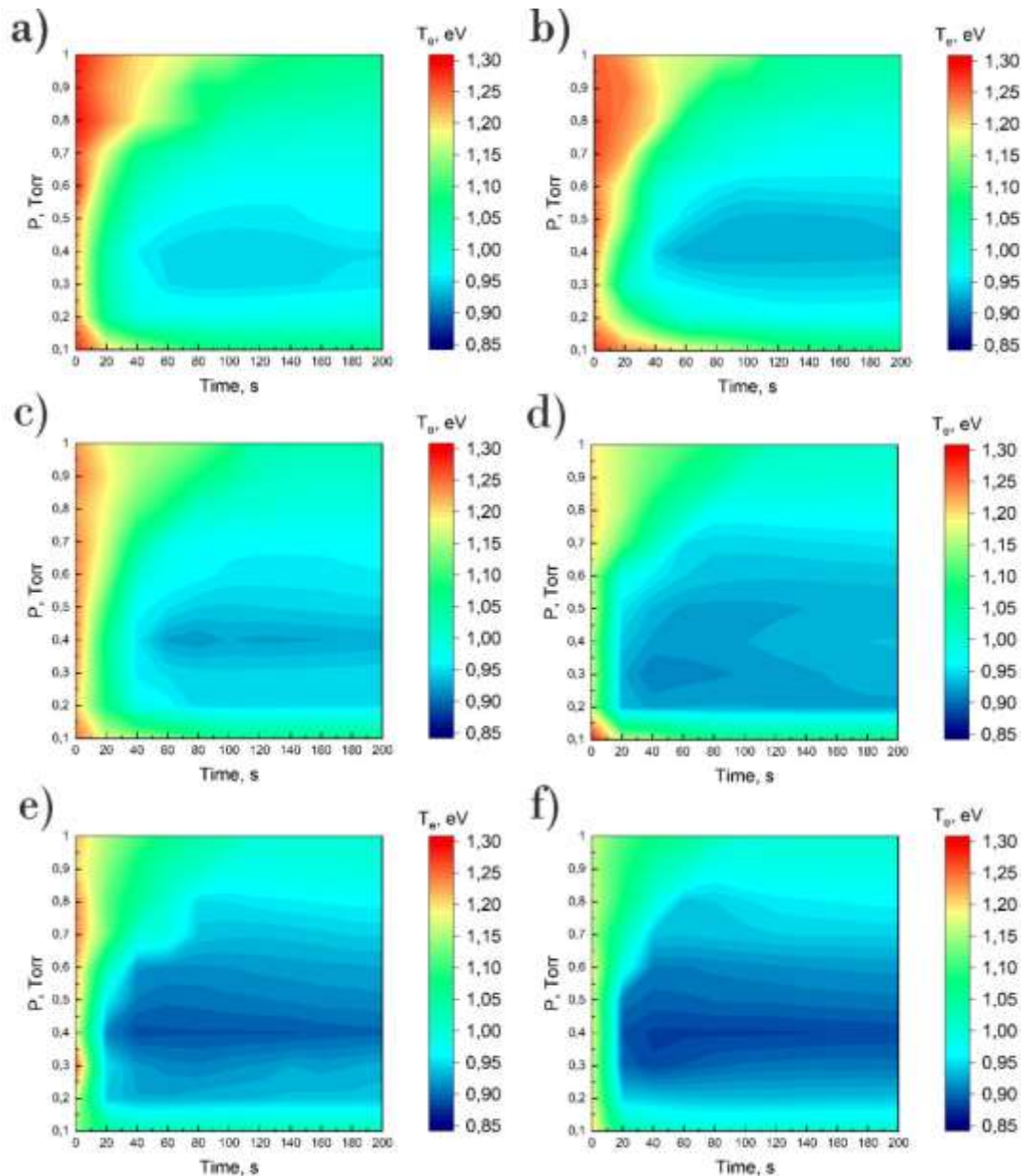


Рисунок 3 – Зависимость температуры электронов от времени и давления в плазме $\text{Ar-C}_2\text{H}_2$ при различных значениях напряжения: а) 1 кВ, б) 1,1 кВ, в) 1,2 кВ, д) 1,3 кВ, е) 1,4 кВ, ф) 1,5 кВ.

Результаты показали, что с повышением напряжения, подаваемого источником, температура электронов снижается. На рисунке 3А при напряжении 1 кВ и фиксированном

давлении 0,4 торр, в момент времени $t = 60$ с, температура электронов равна $\sim 0,95$ эВ. При дальнейшем повышении напряжения источника до 1,5 кВ температура электронов снижается

примерно до $\sim 0,9$ эВ, при фиксированном значении других параметров. Снижение температуры электронов можно объяснить тем, что процесс формирования частиц происходит быстрее тем самым за счет более сильной электрической силы действующее на пылевые частицы, покидают зону наблюдения. В работе [38] говорится, что при повышении мощности процесс диссоциаций молекул происходит быстрее тем самым ускоряется процесс формирования частиц.

Заключение

В данной работе изучалась температура электронов в аргоновой и аргонно-ацетиленовой плазме в зависимости от основных параметров плазмы. Результаты показали, что с увеличением напряжения источника аргоновой плазмы температура электронов линейно уменьшается. Напротив, температура электронов в зависимости от давления демонстрировала снижение вплоть до значения давления 0,4 торр, после чего она возрастала.

В пылевой плазме температура электронов в зависимости от времени в начальный момент

была высокой и по истечению времени температура электронов снижается. Такая тенденция связано с ростом пылевых частиц. При введениях ацетилена в газоразрядную трубку начинается рост пылевых частиц что приводит к снижению концентраций электронов тем самым для поддержания ионизационного процесса, а также самого разряда электроны нагреваются. Температура электронов в пылевой плазме в зависимости от давления показало схожую тенденцию с аргоновой плазмы. Температура электронов при показателе давления 0,4 торр была самая низкая и также предположительно при таком показателе процесс формирования частиц происходит быстрее. Таким образом данное исследование позволило изучить температуру электронов в зависимости от разных параметров плазмы тем самым дав понимания влияния присутствия пылевых частиц.

Благодарность

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19576153 и BR18574080).

Литература

- 1 Thoma M.H., Thomas H.M., Knapke C.A., Melzer A., Konopka U. Complex plasma research under microgravity conditions // *npj Microgravity*. – 2023. – Vol.9. – P.13.
- 2 Beckers J., Berndt J., Block D., Bonitz M., Bruggeman P.J., Couëdel L., Delzanno G.L., Feng Y., Gopalakrishnan, R., Greiner F., Hartmann P., Horányi M., Kersten H., Knapke C.A., Konopka U., Kortshagen U., Kostadinova, E.G., Kovačević, E., Krasheninnikov, S.I., Mann, I., Mariotti, D., Matthews, L.S., Melzer, A., Mikikian, M., Nosenko V., Pustynnik M.Y., Ratynskaia S., Sankaran R.M., Schneider V., Thimsen E.J., Thomas E., Thomas H.M., Tolia P., van de Kerkhof M. Physics and applications of dusty plasmas: The Perspectives 2023 // *Phys. Plasmas*. – 2023. – Vol.30. – Art.No.120601.
- 3 Pustynnik M.Y., Fink M.A., Nosenko V., Antonova T., Hagl T., Thomas H.M., Zobnin A.V., Lipaev A.M., Usachev A.D., Molotkov V.I., Petrov O.F., Fortov V.E., Rau C., Deysenroth C., Albrecht, S., Kretschmer M., Thoma M.H., Morfill G.E., Seurig R., Stettner A., Alyamovskaya V.A., Orr A., Kufner E., Lavrenko E.G., Padalka G.I., Serova E.O., Samokutyayev A.M., Christoforetti S. Plasmakristall-4: New complex (dusty) plasma laboratory on board the International Space Station. // *Review of Scientific Instruments*. Rev. Sci. Instrum. – 2016. – Vol.87. – Art.No.093505.
- 4 Fortov V., Morfill G., Petrov O., Thoma M., Usachev A., Hoefner H., Zobnin A., Kretschmer M., Ratynskaia S., Fink M., Tarantik K., Gerasimov Y., Esenkov V. The project “Plasmakristall-4” (PK-4) - A new stage in investigations of dusty plasmas under microgravity conditions: First results and future plans. // *Phys. Control. Fusion*. – 2005. – Vol.47. – P.B537.
- 5 Lipaev A.M., Molotkov V.I., Zhukhovitskii D.I., Naumkin V.N., Usachev A.D., Zobnin A. V., Petrov O.F., Fortov V.E. Study of the Dusty-Gas Discharge Plasma in the Plasma Crystal-3 Plus Space Laboratory (Review). // *High Temperature*. – 2020. – Vol.58. – P.449-475.
- 6 Thomas H.M., Morfill G.E., Fortov V.E., Ivlev A. V., Molotkov V.I., Lipaev A.M., Hagl T., Rothermel H., Khrapak S.A., Suetterlin R.K., Rubin-Zuzic M., Petrov O.F., Tokarev V.I., Krikalev S.K. Complex plasma laboratory PK-3 Plus on the International Space Station. // *New J Phys*. – 2008. – Vol.10. – Art.No. 033036.
- 7 Khrapak A.G., Molotkov V.I., Lipaev A.M., Zhukhovitskii D.I., Naumkin V.N., Fortov V.E., Petrov O.F., Thomas H.M., Khrapak S.A., Huber P., Ivlev A., Morfill G.: Complex Plasma Research under Microgravity Conditions: PK-3 Plus Laboratory on the International Space Station // *Contributions to Plasma Physics*. – 2016. – Vol.56. – P.253-262.
- 8 Thomas H.M., Morfill G.E., Ivlev A. V., Nefedov A.P., Fortov V.E., Rothermel H., Rubin-Zuzic M., Lipaev A.M., Molotkov V.I., Petrov O.F. PKE-nefedov - Complex plasma research on the international space station. // *Microgravity sci. Technol*. – 2005. – Vol.16. – P.317–321.

- 9 Piel A. Plasma crystals: Experiments and simulation. // *Plasma Phys. Control. Fusion.* – 2017. – Vol.59. – Art.No. 014001.
- 10 Mitic S., Pustynnik M.Y., Erdle D., Lipaev A.M., Usachev A.D., Zobnin A. V., Thoma M.H., Thomas H.M., Petrov O.F., Fortov V.E., Kononenko O. Long-term evolution of the three-dimensional structure of string-fluid complex plasmas in the PK-4 experiment. // *Phys Rev E.* – 2021. – Vol.103. – Art.No.063212.
- 11 Pustynnik M.Y., Klumov B., Rubin-Zuzic M., Lipaev A.M., Nosenko V., Erdle D., Usachev A.D., Zobnin A.V., Molotkov V.I., Joyce G., Thomas H.M., Thoma M.H., Petrov O.F., Fortov V.E., Kononenko O. Three-dimensional structure of a string-fluid complex plasma. // *Phys Rev Res.* – 2020. – Vol.2. – Art.No. 033314.
- 12 Liu B., Goree J., Pustynnik M.Y., Thomas H.M., Fortov V.E., Lipaev A.M., Usachev A.D., Petrov O.F., Zobnin A.V., Thoma M.H.: Time-dependent shear motion in a strongly coupled dusty plasma in PK-4 on the international space station (ISS). *IEEE Transactions on Plasma Science.* – 2021. – Vol.49. – P.2972-2978.
- 13 Chutia B., Deka T., Bailung Y., Sharma S.K., Bailung H. A nanodusty plasma experiment to create extended dust clouds using reactive argon acetylene plasmas. // *Phys Plasmas.* – 2021. – Vol.28. – Art.No. 063703.
- 14 Bajaj P., Khrapak S., Yaroshenko V., Schwabe M. Spatial distribution of dust density wave properties in fluid complex plasmas. // *Phys Rev E.* – 2022. – Vol.105. – Art.No.025202.
- 15 Jaiswal S., Pustynnik M.Y., Zhdanov S., Thomas H.M., Lipaev A.M., Usachev A.D., Molotkov V.I., Fortov V.E., Thoma M.H., Novitskii O.V. Dust density waves in a dc flowing complex plasma with discharge polarity reversal. // *Phys Plasmas.* – 2018. – Vol.25. – Art.No. 083705.
- 16 Yaroshenko V.V., Khrapak S.A., Pustynnik M.Y., Thomas H.M., Jaiswal S., Lipaev A.M., Usachev A.D., Petrov O.F., Fortov V.E.: Excitation of low-frequency dust density waves in flowing complex plasmas. // *Phys Plasmas.* – 2019. – Vol.26. – Art.No. 053702.
- 17 Wang Y., Zhu X., Chen Z., Huang F. Numerical study on the influence of electron temperature on void formation in dusty plasma. // *Phys Scr.* – 2020. – Vol.95. – Art.No. 055606.
- 18 Vasilyak L.M., Vetchinin S.P., Polyakov D.N. Effect of Ionization on Void Formation in an RF Discharge under Microgravity Conditions. // *Plasma Phys. Rep.* – 2023. – Vol.49. – P.290–295.
- 19 Pikalev A., Semenov I., Pustynnik M., R  th C., Thomas H. Dim and bright void regimes in capacitively-coupled RF complex plasmas. // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2021. – Vol.30. – Art.No.035014.
- 20 Lipaev A.M., Khrapak S.A., Molotkov V.I., Morfill G.E., Fortov V.E., Ivlev A. V., Thomas H.M., Khrapak A.G., Naumkin V.N., Ivanov A.I., Tretschke S.E., Padalka G.I. Void closure in complex plasmas under microgravity conditions. // *Phys Rev Lett.* – 2007. – Vol.98. – Art.No.265006.
- 21 Liang Y., Yuan C., Li H., Tian R., Wu J., Kudryavtsev A.A., Zhou Z., Tian H. Influence of dust particles on DC glow discharge plasma. // *Phys Plasmas.* – 2018. – Vol.25. – Art.No. 023701.
- 22 Chami A., Arnas C. Spatial distributions of plasma parameters in conventional magnetron discharges in presence of nanoparticles. // *J Plasma Phys.* – 2020. – Vol.86. – Art.No. 905860512.
- 23 Schmidt, J., Hyde T.W. Discharge parameters of PlasmaKristall-4BU: A modifiable dusty plasma experiment // *Rev. Sci. Instrum.* – 2021. – Vol.91. – Art.No. 083506.
- 24 Ding, Z., Yao J., Wang Y., Yuan C., Zhou Z., Kudryavtsev A.A., Gao R., Jia J. Machine learning combined with Langmuir probe measurements for diagnosis of dusty plasma of a positive column. // *Plasma Sci. Technol.* – 2021. – Vol.23. – Art.No. 095403.
- 25 Antonova T., Khrapak S.A., Pustynnik M.Y., Rubin-Zuzic M., Thomas H.M., Lipaev A.M., Usachev A.D., Molotkov V.I., Thoma M.H. Particle charge in PK-4 dc discharge from ground-based and microgravity experiments. // *Phys. Plasmas.* – 2019. – Vol.26. – Art.No. 113703.
- 26 Orazbayev S.A., Ussenov Y.A., Ramazanov T.S., Dosbolayev M.K., Utegenov A.U. A Calculation of the Electron Temperature of Complex Plasma of Noble Gases Mixture in CCRF Discharge. // *Contributions to Plasma Physics.* – 2015. – Vol.55. – P.428-433.
- 27 Ussenov Y.A., von Wahl E., Marvi Z., Ramazanov T.S., Kersten H. Langmuir probe measurements in nanodust containing argon-acetylene plasmas. // *Vacuum.* – 2019. – Vol.166. – P.15-25.
- 28 Klindworth M., Arp O., Piel A. Langmuir probe system for dusty plasmas under microgravity. // *Rev. Sci. Instrum.* – 2007. – Vol.78. – Art.No. 033502.
- 29 Ussenov Y.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Dosbolayev M.K. Application of dust grains and Langmuir probe for plasma diagnostics // *EPL.* – 2014. – Vol.105. – Art.No. 15002.
- 30 Staps T.J.A., Donders T.J.M., Platier B., Beckers J. In-situ measurement of dust charge density in nanodusty plasma. // *J Phys D Appl Phys.* – 2022. – Vol.55. – Art.No. 08LT01.
- 31 Donders T.J.M., Staps T.J.A., Beckers J. Characterization of cyclic dust growth in a low-pressure, radio-frequency driven argon-hexamethyldisiloxane plasma // *J Phys D Appl Phys.* – 2022. – Vol.55. – Art.No. 395203.
- 32 Killer C., Wegner T., Melzer A., Meichsner J. Influence of dust particles on the bulk electron density in radio frequency plasmas measured by microwave interferometry. // *Phys Plasmas.* – 2015. – Vol.22. – Art.No. 123702.
- 33 Stefanović I., Sadeghi N., Winter J., Sikimić B. Influence of nanoparticle formation on the time and the space resolved metastable density in argon-acetylene plasmas // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2017. – Vol.26. – Art.No.065014.
- 34 Garofano V., B  rard R., Boivin S., Joblin C., Makasheva K., Stafford L. Multi-scale investigation in the frequency domain of Ar/HMDSO dusty plasma with pulsed injection of HMDSO // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2019. – Vol.28. – Art.No.055019.

- 35 Garofano V., Stafford L., Despax B., Clergereaux R., Makasheva K. Cyclic evolution of the electron temperature and density in dusty low-pressure radio frequency plasmas with pulsed injection of hexamethyldisiloxane // *Appl. Phys. Lett.* – 2015. – Vol.107. – Art.No. 183104.
- 36 Niu T.Y., Cao J.X., Liu L., Liu J.Y., Wang Y., Wang L., Lv Y. A comparison among optical emission spectroscopic methods of determining electron temperature in low pressure argon plasmas // *Chinese Physics.* – 2007. – Vol.16. – P.2757-2763.
- 37 Gordillo-Vázquez F.J., Camero M., Gómez-Aleixandre C. Spectroscopic measurements of the electron temperature in low pressure radiofrequency Ar/H₂/C₂H₂ and Ar/H₂/CH₄ plasmas used for the synthesis of nanocarbon structures // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2006. – Vol.15. – P.42-51.
- 38 Hundt M., Sadler P., Levchenko I., Wolter M., Kersten H., Ostrikov K. Real-time monitoring of nucleation-growth cycle of carbon nanoparticles in acetylene plasmas. // *J Appl Phys.* – 2011. – Vol.109. – Art.No.123305.
- 39 Kil B.C., Seon C.R., Chung C.W., Yoon N.S., Wonho C. Correlation between nanoparticle and plasma parameters with particle growth in dusty plasmas. // *J Appl Phys.* – 2011. – Vol.109. – Art.No.013312.
- 40 Bouchoule A., Boufendi L., Hermann J., Plain A., Hbid T., Kroesen G., Stoffels E., Stoffels W.W. Formation of dense submicronic clouds in low pressure Ar-SiH₄ RF reactor: Diagnostics and growth processes from monomers to large size particulates // *Pure and Appl. Chem.* – 1996. – Vol.68. – P.1121-1126.
- 41 Xiong Z., Held J., Kortshagen U. Reliability of double probe measurements in nanodusty plasmas // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2023. – Vol.32. – Art.No. 035001.
- 42 Fujimoto T. Kinetics of Ionization-Recombination of a Plasma and Population Density of Excited Ions. II. Ionizing Plasma. // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1979. – Vol.47. – P.273-281.
- 43 Tangjitsomboon P., Ngamrungraj D., Mongkolnarin R. Comparison of electron temperature in DC glow discharge and AC glow discharge plasma. // In: *Journal of Physics: Conference Series.* – 2019. – Vol.1380. – Art.No. 012022.
- 44 Mitic S., Pustynnik M.Y., Morfill G.E. Spectroscopic evaluation of the effect of the microparticles on radiofrequency argon plasma. // *New J Phys.* – 2009. – Vol.11. – Art.No. 083020.
- 45 Groth S., Greiner F., Piel A. Spatio-temporally resolved investigations of layered particle growth in a reactive argon-acetylene plasma // *Plasma Sources Sci Technol.* – 2019. – Vol.28. – Art.No. 115016.
- 46 Donders T., Staps T., Beckers J. Time-Synchronized Microwave Cavity Resonance Spectroscopy and Laser Light Extinction Measurements as a Diagnostic for Dust Particle Size and Dust Density in a Low-Pressure Radio-Frequency Driven Nanodusty Plasma. // *Appl. Sci.* – 2022. – Vol.12. – Art.No. 12013.
- 47 Denysenko I., Berndt J., Kovacevic E., Stefanovic I., Selenin V., Winter J. The response of a capacitively coupled discharge to the formation of dust particles: Experiments and modeling. // *Phys Plasmas.* – 2006. – Vol.13.

References

- 1 M.H. Thoma, H.M. Thomas, C.A. Knapik, A. Melzer, and U. Konopka, *npj Microgravity* 9, 13 (2023).
- 2 J. Beckers, J. Berndt, D. Block, M. Bonitz, P J. Bruggeman, L. Couëdel, G.L. Delzanno, and et al, *Phys. Plasmas* 30, 120601 (2023).
- 3 M. Y. Pustynnik, M.A. Fink, V. Nosenko, T. Antonova, and et. al, *Rev. Sci. Instrum.* 87, 093505 (2016).
- 4 V. Fortov, G. Morfill, O. Petrov, M. Thoma, and et. al, *Phys. Control. Fusion* 47, B537 (2005).
- 5 A.M. Lipaev, V.I. Molotkov, D.I. Zhukhovitskii, V.N. Naumkin, and et. al, *High Temp.* 58, 449 (2020).
- 6 H.M. Thomas, G.E. Morfill, V.E. Fortov, A.V. Ivlev, and et. al, *New J. Phys.* 10, 033036 (2008).
- 7 A.G. Khrapak, V.I. Molotkov, A.M. Lipaev, D.I. Zhukhovitskii, V.N. Naumkin, V.E. Fortov, O.F. Petrov, H. M. Thomas, S. A. Khrapak, P. Huber, A. Ivlev, and G. Morfill, *Contrib. Plasma Phys.* 56, 253 (2016).
- 8 H.M. Thomas, G.E. Morfill, A.V. Ivlev, A.P. Nefedov, V E. Fortov, H. Rothermel, and et.al, *Microgravity Sci. Technol.* 16, 317 (2005).
- 9 Piel, *Plasma Phys. Control. Fusion* 59, 014001 (2017).
- 10 S. Mitic, M.Y. Pustynnik, D. Erdle, A.M. Lipaev, and et. al, *Phys. Rev. E* 103, 063212 (2021).
- 11 M.Y. Pustynnik, B. Klumov, M. Rubin-Zuzic, A.M. Lipaev, and et. al, *Phys. Rev. Res.* 2, 033314 (2020).
- 12 B. Liu, J. Goree, M.Y. Pustynnik, H.M. Thomas, V.E. Fortov, and et. al, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 49, 2972 (2021).
- 13 B. Chutia, T. Deka, Y. Bailung, S. K. Sharma, and H. Bailung, *Phys. Plasmas* 28, 063703 (2021).
- 14 P. Bajaj, S. Khrapak, V. Yaroshenko, and M. Schwabe, *Phys. Rev. E* 105, 025202 (2022).
- 15 S. Jaiswal, M. Y. Pustynnik, S. Zhdanov, H. M. Thomas, and et. al, *Phys. Plasmas* 25, 083705 (2018).
- 16 V.V. Yaroshenko, S.A. Khrapak, M.Y. Pustynnik, H.M. Thomas, and et. al, *Phys. Plasmas* 26, 053702 (2019).
- 17 Y. Wang, X. Zhu, Z. Chen, and F. Huang, *Phys. Scr.* 95, 055606 (2020).
- 18 L. M. Vasilyak, S. P. Vetchinin, and D. N. Polyakov, *Plasma Phys. Rep.* 49, 290 (2023).
- 19 Pikalev, I. Semenov, M. Pustynnik, C. R  th, and H. Thomas, *Plasma Sources Sci. Technol.* 30, 035014 (2021).
- 20 M. Lipaev, S. A. Khrapak, V. I. Molotkov, G. E. Morfill, V. E. Fortov, A. V. Ivlev, H. M. Thomas, A. G. Khrapak, V. N. Naumkin, A. I. Ivanov, S. E. Tretschke, and G. I. Padalka, *Phys. Rev. Lett.* 98, 265006 (2007).
- 21 Y. Liang, C. Yuan, H. Li, R. Tian, J. Wu, A. A. Kudryavtsev, and Z. Zhou, *Phys. Plasmas* 25, 023701 (2018).

- 22 Chami and C. Arnas, J. Plasma Phys. 86, 905860512 (2020).
- 23 J. Schmidt and T. W. Hyde, Rev. Sci. Instrum. 91, 083506 (2020).
- 24 Z. Ding, J. Yao, Y. Wang, C. Yuan, Z. Zhou, A. A. Kudryavtsev, R. Gao, and J. Jia, Plasma Sci. Technol. 23, 095403 (2021).
- 25 T. Antonova, S.A. Khrapak, M.Y. Pustynnik, M. Rubin-Zuzic, H.M. Thomas, A.M. Lipaev, A.D. Usachev, V.I. Molotkov, and M.H. Thoma, Phys. Plasmas 26, 113703 (2019).
- 26 S. A. Orazbayev, Y. A. Ussenov, T. S. Ramazanov, M. K. Dosbolayev, and A. U. Utegenov, Contrib. Plasma Phys. 55, 428-433 (2015).
- 27 Y.A. Ussenov, E. von Wahl, Z. Marvi, T.S. Ramazanov, and H. Kersten, Vacuum 166, 15-25 (2019).
- 28 M. Klindworth, O. Arp, and A. Piel, Rev. Sci. Instrum. 78, 033502 (2007).
- 29 Y.A. Ussenov, T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, and M.K. Dosbolayev, EPL 105, 15002 (2014).
- 30 T.J.A. Staps, T.J.M. Donders, B. Platier, and J. Beckers, J. Phys. D: Appl. Phys. 55, 08LT01 (2022).
- 31 T.J.M. Donders, T.J.A. Staps, and J. Beckers, J. Phys. D: Appl. Phys. 55, 395203 (2022).
- 32 C. Killer, T. Wegner, A. Melzer, and J. Meichsner, Phys. Plasmas 22, 123702 (2015).
- 33 I. Stefanović, N. Sadeghi, J. Winter, and B. Sikimić, Plasma Sources Sci. Technol. 26, 065014 (2017).
- 34 V. Garofano, R. Bérard, S. Boivin, C. Joblin, K. Makasheva, and L. Stafford, Plasma Sources Sci. Technol. 28, 055019 (2019).
- 35 V. Garofano, L. Stafford, B. Despax, R. Clergereaux, and K. Makasheva, Appl. Phys. Lett. 107, 183104 (2015).
- 36 T.Y. Niu, J.X. Cao, L. Liu, J.Y. Liu, Y. Wang, L. Wang, and Y. Lv, Chin. Phys. 16, 2757-2763 (2007).
- 37 F.J. Gordillo-Vázquez, M. Camero, and C. Gómez-Aleixandre, Plasma Sources Sci. Technol. 15, 42-51 (2006).
- 38 M. Hundt, P. Sadler, I. Levchenko, M. Wolter, H. Kersten, and K. Ostrikov, J. Appl. Phys. 109, 123305 (2011).
- 39 B.C. Kil, C.R. Seon, C.W. Chung, N.S. Yoon, and C. Wonho, J. Appl. Phys. 109, 013312 (2011).
- 40 A. Bouchoule, L. Boufendi, J. Hermann, A. Plain, T. Hbid, G. Kroesen, E. Stoffels, and W. W. Stoffels, Pure Appl. Chem. 68, 1121-1126 (1996).
- 41 Z. Xiong, J. Held, and U. Kortshagen, Plasma Sources Sci. Technol. 32, 035001 (2023).
- 42 T. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jpn. 47, 273-281 (1979).
- 43 P. Tangjitsomboon, D. Ngamrungraj, and R. Mongkolnavin, J. Phys.: Conf. Ser. 1380, 012022 (2019).
- 44 S. Mitic, M. Y. Pustynnik, and G. E. Morfill, New J. Phys. 11, 083020 (2009).
- 45 S. Groth, F. Greiner, and A. Piel, Plasma Sources Sci. Technol. 28, 115016 (2019).
- 46 T. Donders, T. Staps, and J. Beckers, Appl. Sci. 12, 12013 (2022).
- 47 I. Denysenko, J. Berndt, E. Kovacevic, I. Stefanovic, V. Selenin, and J. Winter, Phys. Plasmas 13, (2006).

История статьи:

Поступила 26 июля 2024

Поступила после доработки 05 сентября 2024

Принята 08 сентября 2024

Article history:

Received 26 July 2024

Received in revised form 5 September 2024

Accepted 8 September 2024

Сведения об авторах:

1. **Ж.Е. Онайбергенов** – студент бакалавриата, Институт прикладных наук и информационных технологий, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан, email: onaibergenovz@gmail.com

2. **А.Е. Абдрахманов** – PhD студент, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан. email: azamat.abdrakhman06@gmail.com

3. **С.А. Оразбаев** – PhD, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан. email: sagi.orazbayev@gmail.com

4. **Т.С. Рамазанов** – докт.физ.-мат.наук, Академик НАН РК при Президенте РК, проф., Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан. email: ramazan@physics.kz

5. **А.У. Утегенов** (автор-корреспондент) – PhD, Институт прикладных наук и информационных технологий, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан. email: almasbek@physics.kz

Information about authors:

1. **Z.E. Onaibergenov** – undergraduate student, Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. email: onaibergenovz@gmail.com

2. **A.E. Abdrakhmanov** – PhD student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. email: azamat.abdrakhman06@gmail.com

3. **S.A. Orazbayev** – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. email: sagi.orazbayev@gmail.com

4. **T.S. Ramazanov** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of the NAS under the President of the Republic of Kazakhstan, Prof., Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan email: ramazan@physics.kz

5. **A.U. Utegenov** (corresponding author) – PhD, Institute of Applied Sciences and Information Technologies, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. email: almasbek@physics.kz

3-бөлім

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

Section 3

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

Раздел 3

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

M.K. Beisembekov¹ , G.I. Omarbekova¹ , S.A. Guchenko¹ , S.K. Tazhibayev¹ ,
A.K. Aimukhanov¹ , D.A. Afanasyev¹ , A.K. Nurmakhanova² , A.K. Zeinidenov^{1*} 

¹Buketov Karaganda University,

Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan

²Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail address: a.k.zeinidenov@gmail.com

EVOLUTION OF STRUCTURAL, OPTICAL PROPERTIES AND ELECTRICAL TRANSPORT OF NiO_x FILMS ANNEALED IN DIFFERENT ENVIRONMENT

The influence of the annealing medium of thin films of nickel oxide (NiO_x) on structural, optical and electrical transport properties is studied in this paper. NiO_x films were synthesized by sol-gel method and annealed at a temperature of 300 °C in air, inert nitrogen (N₂), oxygen (O₂) gases and vacuum. The values of the films thickness were determined from the transverse cleavage of the SEM image. The films thickness depends on the annealing medium. Measurements of the EDX spectra of NiO_x films were carried out. Analysis of the quantitative O/Ni ratio showed that the film annealed in an air atmosphere is close to the stoichiometric parameters of NiO. Measurements of the EDX spectra of NiO_x films were carried out. According to the Raman spectra, an increase in peak intensities is observed indicating an increase in the density of defects in the film by Ni vacancies depending on the annealing medium. Absorption spectra and Tauc plots of NiO_x films were obtained. The optical density of the films depends on the annealing conditions of the films. Data analysis shows that the band gap width depends on the annealing medium and varies from $E_g = 3.12$ eV to $E_g = 3.45$ eV. The analysis of the impedance spectra allowed us to estimate the values of the resistances R_1 and R_2 . It is shown that an increase in the resistance of R_1 is associated with a decrease in the density of defects in the NiO_x film, decrease in the recombination resistance of R_2 , and an increase in recombination processes at the interface.

Key words: nickel oxide, sol-gel technology, annealing environment, optical band gap, absorption coefficient, dispersion index, electrical transport characteristics.

М.К. Бейсембеков¹, Г.И. Омарбекова¹, С.А. Гученко¹, С.К. Тәжібаев¹,
А.К. Аймуханов¹, Д.А. Афанасьев¹, А.К. Нұрмаханова², А.К. Зейниденов^{1*}

¹Бөкетов атындағы Қарағанды университеті,

Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан

²Алматы технологиялық университеті, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: a.k.zeinidenov@gmail.com

Әртүрлі ортада күйдірілген NiO_x қабықшаларының құрылымдық, оптикалық және электрлік тасымалдау қасиеттерінің эволюциясы

Бұл жұмыста никель оксидінің (NiO_x) жұқа қабықшаларын құрылымдық, оптикалық және электр тасымалдау қасиеттері зерттелді. NiO_x қабықшалары золь - гель әдісімен синтезделіп, 300 °C температурада ауада, инертті азот (N₂), оттегі (O₂) газдарында және вакуумда күйдірілді. Қабықшалар қалыңдығының мәндері СЭМ суреттеріндегі көлденең кескіндерінен анықталды. Қабықшалардың қалыңдығы күйдіру ортасына байланысты өзгереді. NiO_x қабықшаларының EDX спектрлерін өлшеу жүргізілді. О/Ni сандық қатынасын талдау, ауа атмосферасында күйдірілген қабықша NiO стехиометриялық көрсеткіштеріне жақын екенін көрсетті. Комбинациялық шашырау спектрлері бойынша шыңдар қарқындылығының жоғарылауы байқалады, бұл күйдіру ортасына байланысты Ni бос орындарының қабықша ақауларының тығыздығының жоғарылауын көрсетеді. Жұтылу спектрлері алынды және NiO пленкаларының таук графиктері қабықшалардың оптикалық тығыздығы, қабықшаларды күйдіру жағдайларына байланысты. Деректерді талдау көрсеткендей, тыйым салынған аймақ ені күйдіру ортасына байланысты $E_g = 3,12$ эВ-ден $E_g = 3,45$ эВ-ге дейінгі аралықта. Кедергі спектрлерін талдау R_1 және R_2 кедергі мәндерін бағалауға мүмкіндік берді. R_1 кедергісінің жоғарылауы

NiO_x пленкасындағы ақаулардың тығыздығының төмендеуімен, R_2 рекомбинациялық кедергісінің төмендеуімен және рекомбинациялық процестердің жоғарылауымен байланысты екендігі көрсетілген.

Түйін сөздер: никель оксиді, золь-гель технологиясы, күйдіру ортасы, оптикалық тыйым салынған аймақ, жұтылу коэффициенті, дисперсия индексі, электр тасымалдау сипаттамалары.

М.К. Бейсембеков¹, Г.И. Омарбекова¹, С.А. Гученко¹, С.К. Тажибаев¹,
А.К. Аймуханов¹, Д.А. Афанасьев¹, А.К. Нурмаханова², А.К. Зейниденов^{1*}

¹Карагандинский университет имени Букетова,

Научный центр нанотехнологий и функциональных наноматериалов, г. Караганда, Казахстан

²Алматинский технологический университет, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: a.k.zeinidenov@gmail.com

Эволюция структурных, оптических и электротранспортных свойств пленок NiO_x , отожженных в различных средах

В работе исследовано влияние среды отжига тонких пленок оксида никеля (NiO_x) на структурные, оптические и электротранспортные свойства. Пленки NiO_x были синтезированы золь-гель методом и отожжены при температуре 300 °С на воздухе, инертных газах азота (N_2), кислорода (O_2) и в вакууме. Значения толщины пленок определяли по поперечному сколу СЭМ-изображения. Толщина пленок зависит от среды отжига. Проведены измерения EDX-спектров пленок NiO_x . Анализ количественного соотношения O/Ni показал, что пленка, отожженная в атмосфере воздуха, близка к стехиометрическим параметрам NiO . Проведены измерения EDX-спектров пленок NiO_x . По спектрам КР наблюдается увеличение интенсивности пиков, свидетельствующее об увеличении плотности дефектов пленки вакансиями Ni в зависимости от среды отжига. Получены спектры поглощения и таук-графики пленок NiO_x . Оптическая плотность пленок зависит от условий отжига пленок. Анализ данных показывает, что ширина запрещенной зоны зависит от среды отжига и варьируется от $E_g = 3,12$ эВ до $E_g = 3,45$ эВ. Анализ спектров импеданса позволил оценить значения сопротивлений R_1 и R_2 . Показано, что увеличение сопротивления R_1 связано с уменьшением плотности дефектов в пленке NiO_x , уменьшением рекомбинационного сопротивления R_2 и усилением рекомбинационных процессов на границе раздела.

Ключевые слова: оксид никеля, золь-гель технология, среда отжига, оптическая запрещенная зона, коэффициент поглощения, показатель дисперсии, характеристики электротранспорта.

Introduction

Among many conductive oxide materials, nanostructured nickel oxide (NiO_x) films attract considerable attention due to their unique structural, electrical and optical properties [1-2]. Numerous studies have made significant progress in the development and improvement of the properties of NiO_x , which has led to its widespread use in various electronic devices such as thin-film transistors, photovoltaic cells, LEDs, sensors, storage devices and catalysts [3]. Nickel oxide is an inorganic semiconductor with p-type transport properties that can be used as a hole-conduction layer (HTL) material in optoelectronic devices [4]. NiO_x exhibits natural hole conductivity, as a rule, due to a large number of intrinsic defects, such as Ni vacancies and O vacancies. However, Ni vacancies are considered effective NiO_x acceptors, they also impair the transparency of the material in the visible area. It was found that the presence of a Ni vacancy in NiO_x

grown in a medium with a high O content leads to significant absorption of subzones compared with an O vacancy in NiO_x grown in a medium with a high Ni content [5].

Various methods are used to improve the characteristics of NiO_x films, including changing the concentration of impurities, using various synthesis and post-treatment methods in UV ozone [6,7], oxygen plasma [8] and thermal annealing. The most common type of post-treatment is thermal annealing [9]. At the same time, the conditions of thermal annealing of the film are also of great importance. As a rule, in order to recrystallize the film and reduce the density of point defects, annealing is carried out in an oxygen-containing medium at a temperature of 200-500 °C and a duration of 10 to 60 minutes [10-13]. However, it is believed that atmospheric annealing does not allow the removal of NiOOH phases on the surface of an oxide semiconductor [14]. It is assumed that there is a high probability of the formation of NiOOH phases after heat treatment as a result of

reaction with moisture from the atmosphere. The use of vacuum annealing can contribute to the thermal decomposition of the NiOOH phase. In addition, since the NiO_x phase is more stable than the Ni₂O₃ phase, at low oxygen partial pressure [15], vacuum heat treatment should reduce the content of this phase on the surface.

Thus, it is necessary to study technological methods for optimizing internal defects in NiO_x to simultaneously increase the conductivity and transparency of films, for the application of transparent optoelectronic devices.

In this work, NiO_x films were obtained by sol-gel method and the effect of thermal annealing in various media on the morphology, optical and electrical properties of NiO_x films was studied [16].

Materials and methods

Thin films preparation

Nickel oxide films were obtained on the surface of a solid substrate as follows: nickel nitrate hexahydrate [Ni(NO₃)₂ · 6H₂O] weighing $m = 145$ mg (Sigma-Aldrich) was dissolved in a volume of ethyleneglycol ($V = 1$ ml). Monoethanolamine (5 μ l) was added to the resulting solution. The solution was stirred at room temperature for 16 hours and then kept for 24 hours at room temperature. It was applied to the surface of a solid substrate using a pipetted dispenser by centrifugation (SPIN150i, Semiconductor Production System) at a rotational speed of 1500 rpm. The obtained films were pre-annealed at a temperature of 100 °C for 15 minutes. After that, the films were annealed in different media at a temperature of 300 °C for 45 minutes (Fig. 1).

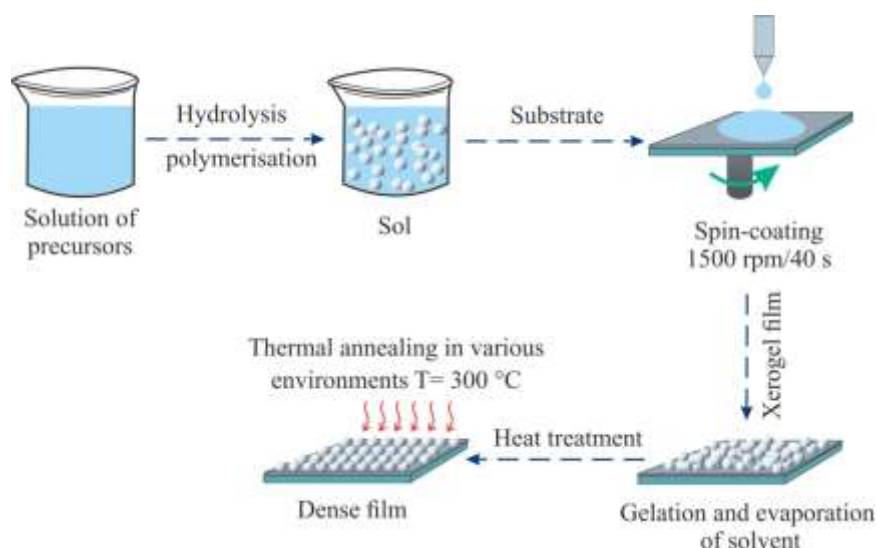


Figure 1 – Schematic representation of NiO_x thin films deposition from a sol by a spin-coating technique

The surface of NiO_x thin films was studied using scanning electron microscopy (SEM), MIRA 3 LMU (TESCAN). Energy dispersive X-ray radiation (EDX) is measured in an INCA PentaFET-x3 analyzer (Oxford Instruments, England) to assess the quality of thin films.

Scanning probe microscopy is used to study the surface roughness of NiO_x thin films using an atomic force microscope JSPM-5400 (AFM, JEOL). The AFM images were processed using a modular program for analyzing data from scanning probe microscopy (Win SPMII Data-Processing Software). The average grain size distribution of NiO_x was obtained from topographic images using ImageJ software.

The Raman spectra were measured using the Gurzil Raman Microscope TORMS-532/TORMS-785 (Thunder Optics, France). To excite the spectra,

radiation from a semiconductor laser (ThunderOptics, France) with a wavelength of 523 nm and a line width of 0.3nm was applied.

The absorption and transmission spectra of the studied samples were measured on AvaSpec-ULS2048CL-EVO spectrometer (Avantes). A combined deuterium-halogen light source AvaLight-DHc (Avantes) with an operating range of 200-2500 nm was used as probing radiation.

The impedance spectra were measured on a P45X potentiostat-galvanostat in the impedance mode with an additionally installed FRA-24M frequency analyzer module. The error in determining the parameters of charge carrier transport did not exceed 5% and was predominantly 1-1.5%. Fitting and analysis of the spectral parameters were performed using the EIS-analyzer software according to the procedure described in [17].

Results and discussion

Surface morphology

Fig. 2 shows SEM images of the surface of nanostructured NiO_x films annealed at 300 °C in air, inert nitrogen (N_2), oxygen (O_2) and vacuum. As can be seen from the SEM image, the morphology of the NiO_x film in the annealed air atmosphere has a smoother surface structure. For films annealed in an inert N_2 atmosphere and in a vacuum, the surface morphology has a fine-grained structure. The film annealed in an O_2 atmosphere has a morphology with larger grains. The thicknesses of NiO_x films were determined from the SEM images of the transverse

cleavage. It can be seen from the SEM image that the film annealed on an air atmosphere has the greatest thickness value of ~ 187 nm. For NiO_x films annealed in N_2 , the thickness is ~ 89 nm. During annealing in O_2 , a decrease in film thickness to ~ 76 nm is observed, the smallest film thickness of ~ 58 nm is obtained by annealing in vacuum.

Table 1 shows the results of EDX analysis of NiO_x films annealed at 300 °C in various media. For the EDX analysis, the NiO_x film was applied to Si substrates. According to the EDX spectra, a change in the quantitative ratio of the elemental composition of O/Ni is observed. Thus, when annealed in an air atmosphere, the NiO_x film becomes closer to the stoichiometric index (O/Ni ~ 0.8).

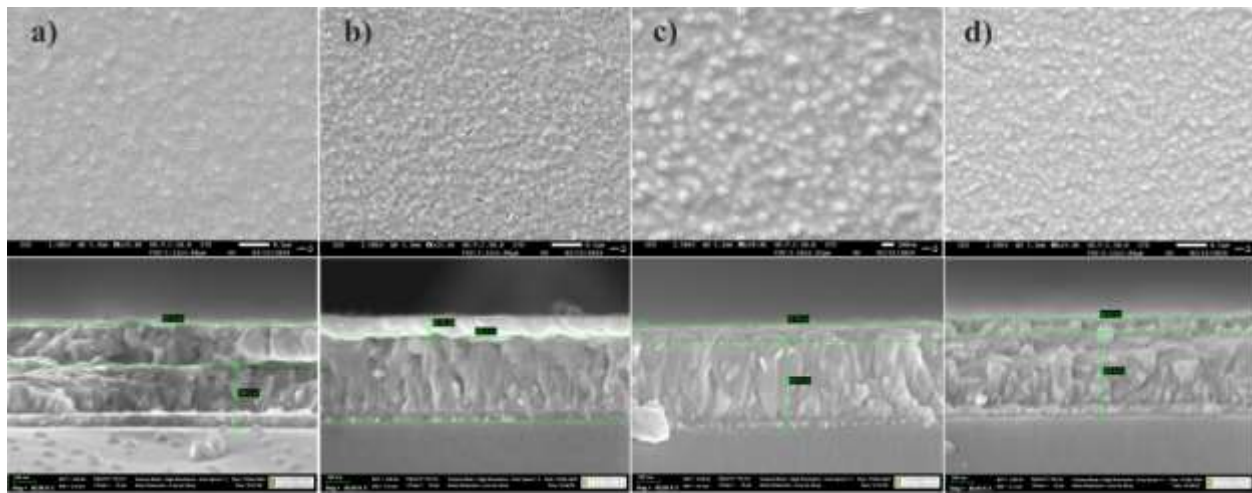


Figure 2 – Change in ambient temperature up to 300 °C in (a) air, (b) nitrogen, (c) oxygen and (d) vacuum

Table 1 – Morphology parameters and EDX analysis (Atomic percentages) of the surface of NiO_x films

Annealing ambient	Film thickness, Nm	Ni, %	O, %	Ni/Oratio
Air	187	44.5	55.5	0.80
Nitrogen	89	33.4	66.6	0.50
Oxygen	76	18.0	82.0	0.21
Vacuum	58	42.3	64.4	0.65

Annealing of films in an inert atmosphere of N_2 and vacuum leads to a decrease in the stoichiometric index to 0.5. Annealing of films in pure O_2 gas leads to a significant decrease in the atomic nickel content to 18% and the stoichiometric index by 0.21. Thus, quantitative EDX analysis of films annealed in inert N_2 , O_2 gas and in vacuum indicates insufficient stoichiometry between Ni and O atoms.

Raman spectra of light in NiO_x films

Fig. 3 shows the Raman spectra of NiO_x films annealed in various media. The Raman spectra were measured in the range of 300 cm^{-1} – 1500 cm^{-1} . In the Raman light scattering spectra of NiO_x films, bands with a scattering maximum of 533 cm^{-1} corresponding to Ni-O oscillations belonging to a single-phonon longitudinal optical mode of the first order (1P) LO and a strong band with a scattering maximum of 1130 cm^{-1} relating to a two-phonon longitudinal optical mode of the second order (2P) 2LO are observed [18]. As can be seen from the Fig.3, the intensity of the bands depends on the annealing medium of the NiO_x films. The maximum scattering intensity is observed for NiO_x films deposited on the air atmosphere. The lowest scattering intensity has a NiO_x film pressed on an oxygen atmosphere. The observed increase in peak intensities in the scattering spectrum of films indicates an increase in the density of defects in the film formed by Ni vacancies depending on the annealing medium.

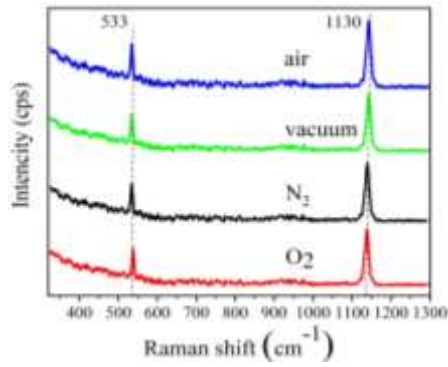


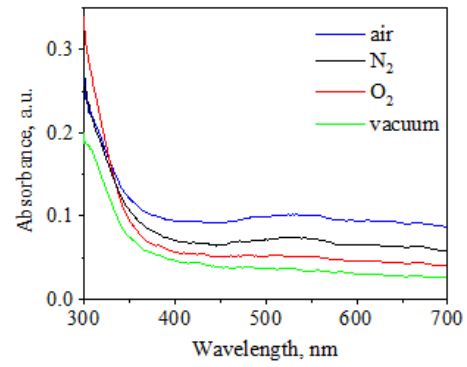
Figure 3 – Raman spectra for NiO_x films

Optical properties

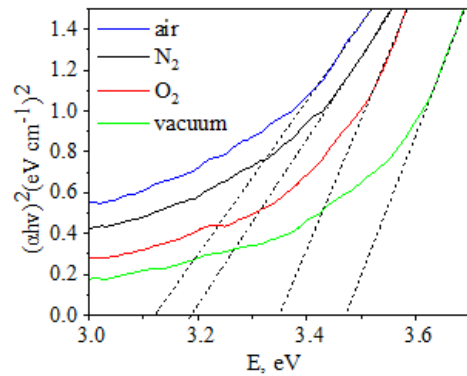
Fig. 4 shows the absorption of NiO_x films obtained under various annealing conditions. It can be seen from Fig. 4a that the absorption spectrum of NiO_x has a maximum at a wavelength equal to $\lambda = 300$ nm. The absorption spectra of annealed films in air has an optical density of 0.25. During annealing in N₂, an increase in optical density to 0.26 is observed. The films annealed in O₂ have an increase in optical density up to 0.33. The optical density reduces to 0.19 for films annealing in vacuum. The absence of correlations between the thicknesses of films annealed in different media and the values of optical densities in the absorption spectra is associated with the compaction of the structure of NiO_x films, as shown in [19].

The observed good absorption of films in the short-wavelength region of the spectrum corresponds to the interband transition from the valence band to the bottom of the conduction band. This region corresponds to transitions from the final states of the valence band to the expanded states of the conduction band. A band in the long-wavelength part of the absorption spectrum of NiO_x films at $\lambda > 360$ nm is observed. The band may be associated with light scattering on grains in the NiO_x film. Fig. 4b shows the Tauc graphs for NiO_x films. The optical band gap was calculated by plotting the dependence $(\alpha h\nu)^2$ from photon energy E in eV (α is the absorption coefficient, $h\nu$ is the photon energy) and extrapolation of the rectilinear part of this graph to the energy axis.

Data analysis shows that the band gap width depends on the annealing medium and varies from $E_g = 3.12$ eV to $E_g = 3.45$ eV. This can be caused by both the high density of film defects and the high density of oxygen vacancies responsible for the high conductivity of films [20]. Interstitial oxygen in NiO_x films act as lattice defects and can reduce the optical band gap. In addition, interstitial oxygen atoms diffuse from NiO_x films during the thermal annealing process, as a result, the optical band gap E_g of NiO_x films increases.



a)



b)

Figure 4 – Absorption spectra (a) and Tauc plots (b) of NiO_x films obtained under various annealing conditions

Table 2 – Parameters of optical characteristics of NiO_x films under various annealing conditions

Annealing ambient	D , ($\lambda = 305$ nm)	Optical band gap (eV)
Air	0.20	3.12
Nitrogen	0.26	3.18
Oxygen	0.32	3.34
Vacuum	0.23	3.45

Photoelectrical characterizations

The influence of the annealing medium of NiO_x films will obviously affect the hole transport in NiO_x films. To study in detail the effect of the annealing medium on the transport of charge carriers in the NiO_x film, the electrical impedance spectra were measured.

Fig. 5 shows the impedance spectra of FTO/NiO_x/Al cells annealed in different media obtained using a hodograph fitting. The model was analyzed according to an equivalent electrical circuit using the EIS-analyzer software package (in Fig. 5). Table 3 shows the electrical transport parameters of the cells calculated, where R_1 is the total resistance of the external electrodes adjacent to NiO_x (total resistance of the film), R_2 is the recombination resistance at the NiO_x/electrode boundary.

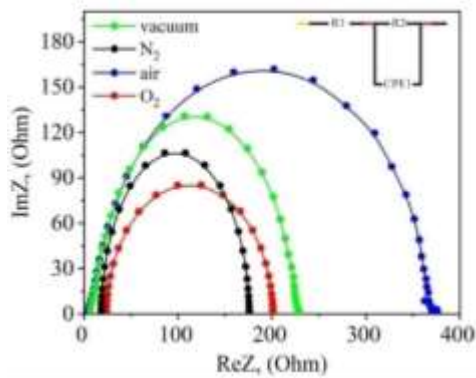


Figure 5 – Impedance spectra of FTO/NiO_x/Al, cells annealed in different environment

Table 3 – The value of the electrophysical parameters of the films

Annealing temperature, °C	R_1 , (Ohm)	R_2 , (Ohm)
Air	5.19	371.45
Vacuum	8.75	282.65
N ₂	23.98	224.26
O ₂	26.72	202.18

The analysis of the impedance spectra allowed us to estimate the values of the resistances R_1 and R_2 . It is important to note that R_1 and R_2 depend on the bias voltage and cell configuration, however, if these parameters do not change, then changes in the values of R_1 and R_2 will be associated with changes in the structural properties of NiO_x during annealing in different media.

R_1 represents the total resistance of the outer adjacent layers (FTO/Al). In our case, all functional layers except NiO_x were obtained under the same conditions, then it is obvious that changes to R_1 will be associated with a change in the resistance of NiO_x films. As can be seen from Table 3, the value of R_1 has the lowest value for a cell with NiO_x annealed on an air atmosphere. The maximum resistance value R_1 has a NiO_x film annealed in an inert atmosphere N₂. An increase in the resistance value R_1 depending on the annealing medium is associated with a decrease in the density of defects formed by Ni vacancies depending on the annealing medium responsible for high conductivity [21].

The R_2 resistances characterizing charge recombination at the NiO_x/electrode interface also vary depending on the annealing medium of the NiO_x

film. It should be noted that the higher the value of R_2 , the lower the charge recombination rate at the NiO_x/electrode interface will be [22-25]. As can be seen from Table 3, cells with film annealed in the air atmosphere have the highest resistance value R_2 , which indicates a low recombination rate of holes at the NiO_x/electrode interface. Annealing of NiO_x films in the O₂ atmosphere leads to a decrease in recombination resistance, which means an increase in recombination processes.

Conclusion

The structural, optical and electrical transport properties of NiO_x films produced by sol-gel technology were investigated. It was found from SEM images the surface of NiO_x films have a granular structure, the sizes of which depend on the annealing medium. According to EDX analysis of films, it was shown that films annealed in inert N₂, O₂ and in vacuum have insufficient stoichiometry between Ni and O atoms. The results of measuring the Raman spectra showed that the observed increase in peak intensities in the scattering spectrum of films is associated with an increase in the density of Ni defects depending on the annealing medium. It is shown that the band gap width depends on the annealing medium and is explained by the presence of interstitial oxygen in NiO_x films, which act as lattice defects, this leads to an increase in the optical band gap E_g . The values of the resistances R_1 and R_2 of NiO_x films annealed in different media estimated from the impedance spectra. It is shown that an increase in R_1 resistance depending on the annealing medium. It is associated with a decrease in the density of defects in the NiO_x film. Decrease in the recombination resistance (R_2) indicates an increase in recombination processes at the NiO_x/electrode interface. The results obtained will find applications of NiO_x thin films on electronic devices such as solar cells, gas sensors and catalysts cells.

Acknowledgments

This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No.AP19679938).

References

- 1 Imran M., Coskun H., Khan A.N. and Ouyang J. Role of annealing temperature of nickel oxide (NiO_x) as hole transport layer in work function alignment with perovskite // *Applied Physics A.* – 2021. – Vol.127. – Art.No.117.
- 2 Aimukhanov A.K., Zeinidenov A.K., Omarbekova G.I. and Plotnikova I.V. Investigation of optical and electrophysical characteristics of composite films nio/pedot:pss // *Eurasian Phys. Tech. J.* – 2020. – Vol.17. – P.55-60.

- 3 Timoshnev S., Kazakin A., Shubina K., Andreeva V., Fedorenko E., Koroleva A., Zhizhin E., Koval O., Kurinnaya A., Shalin A., Bobrovs V. and Enns Y. Annealing temperature effect on the physical properties of NiO thin films grown by DC magnetron sputtering // *Advanced Materials*. – 2024. – Vol.11. – Art.No.2300815.
- 4 Irwin M.D., Buchholz D.B., Hains A.W., Chang R.P. and Marks J.T. p-Type semiconducting nickel oxide as an efficiency-enhancing anode interfacial layer in polymer bulk-heterojunction solar cells // *PNAS*. – 2008. – Vol.105. – 2783-2787.
- 5 Arunodaya J. and Sahoo T. Effect of Li doping on conductivity and band gap of nickel oxide thin film deposited by spin coating technique // *Mater. Res. Express*. – 2019. – Vol.7. – Art.No.016405.
- 6 Alkarsifi R., Ackermann J. and Margeat O. Hole transport layers in organic solar cells: A review, *Journal of Metals // Materials and Minerals*. – 2022. – Vol.32 (4). – P.1-22.
- 7 Lian Q., Wang P-l., Wang G., Zhang X., Huang Y., Li D., Mi G., Shi R., Amini A., Zhang L. and Chun C. Doping Free and Amorphous NiO x Film via UV Irradiation for Efficient Inverted Perovskite Solar Cells // *Advanced science*. – 2022. – Vol.9. – Art.No.2201543.
- 8 Nishihara Y., Chikamatsu M., Kazaoui S., Miyadera T. and Yoshida Y. Influence of O₂ plasma treatment on NiO x layer in perovskite solar cells // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2018. – Vol.57. – Art.No.04FS07.
- 9 Porqueras I. and Bertran E. Electrochromic behaviour of nickel oxide thin films deposited by thermal evaporation // *Thin Solid Films*. – 2001. – Vol.398-399. – P.41-44.
- 10 Huang F., Chu C., Wang Z., Zhang Y., Ye J., Lv Y., Gong H., Li Y., Zhang Z-H. and Gu S. GaN-based quasi-vertical Schottky barrier diode hybridized with p-NiO layer to achieve 1.1 kV breakdown voltage and enhance the current spreading effect // *Applied Physics Express*. – 2022. – Vol.15 (8). – Art.No.084001.
- 11 Kazakin A.N., Komarevtsevm I.M., Vyacheslavova E.A., Kondrateva A.S., Mishin M.V., and Enns Ya.B., Modification of the optical and electrical properties of NiO films by thermal annealing // *SPbPU Journal – Physics and Mathematics*. – 2022. – Vol.15 (3.3).
- 12 Karsthof R., Frodason Y.K., Galeckas A., Weiser P.M., Zviagin V. and Grundmann M. Light Absorption and Emission by Defects in Doped Nickel Oxide // *Advanced Photonics Research published by Wiley-VCH GmbH*. – 2022. – Vol.3. – Art.No 2200138.
- 13 Lany S, Osorio-Guillén J. and Zunger A. Origins of the doping asymmetry in oxides: Hole doping in NiO versus electron doping in ZnO // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 75. – Art.No 241203(R).
- 14 Martínez-Gil M., Pintor-Monroy M.I., Cota-Leal M., Cabrera-German D., Garzon- Fontecha A., Quevedo-L'opez M.A. and Sotelo-Lerma M. Influence of annealing temperature on nickel oxide thin films grown by chemical bath deposition // *Mater. Sci. Semicond. Process*. – 2017. – Vol.72. – P.37-45.
- 15 Wang M., Thimont Y., Presmanes L., Diao X. and Barnabe A. The effect of the oxygen ratio control of DC reactive magnetron sputtering on as-deposited non stoichiometric NiO thin films // *Appl. Surf. Sci*. – 2017. – Vol.419. – P.795-801.
- 16 Jiménez-González A.E., and Cambray J.G. Deposition of NiO_x thin films by sol–gel technique. *Surface //Engineering*. – 2000. – Vol.16(1). – P.73–76.
- 17 Bisquert J., Mora-Sero I. and Fabregat-Santiago F. Diffusion-recombination impedance model for solar cells with disorder and nonlinear recombination // *Chemelectrochem*. – 2013. – Vol.1 (1). – P.289–296.
- 18 Cazzanelli E., Kuzmin A., Mariotto G., Mironova-Ulmane N., Study of vibrational and magnetic excitations in NiMg_{1-x}Co_x solid solutions by Raman spectroscopy // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2003. – Vol.15. – Art.No 2045.
- 19 Beisembekov M.K., Omarbekova G.I., Tazhibayev S.K., Aimukhanov A.K., Baltabekov A.S., Ziyat A.Z. and Zeinidenov A.K. The role of annealing temperature on the optical and electrical transport properties of NiO_x films // *Optical Materials*. – 2024. – Vol.151. – Art.No 115398.
- 20 Ivanova T., Harizanova A., Shipochka M. and Vitanov P., Nickel oxide films deposited by sol-gel method: effect of annealing temperature on structural, Optical, and Electrical Properties // *Materials*. – 2022. – Vol.15 (5). – Art.No 1742.
- 21 Murphy A.R. and Fréchet M.J. Organic semiconducting oligomers for use in thin film transistors // *Chem. Rev*. – 2007. – Vol.107 (4). – P.1066–1096.
- 22 Yang P., Li L., Yu S., Zheng H. and Peng W. The annealing temperature and films thickness effect on the surface morphology, preferential orientation and dielectric property of NiO films // *Appl. Surf. Sci*. – 2019. -Vol.493. - P.396–403.
- 23 Sharma P.K., Singh M.K., Sharma G.D. and Agrawal A. NiO nanoparticles: facile route synthesis, characterization and potential towards third generation solar cell // *Mater. Today Proc*. – 2021. – Vol.43. – P.3061–3065.
- 24 Kumar V. and Agarwal S.K. *Physics of Semiconductor Devices*. – Narosa Publishing House, 1998. – 1358 p.
- 25 Shkir M., Ganesh V., AlFaify S., Yahia I.S. and Zahran H.Y. Tailoring the linear and nonlinear optical properties of NiO thin films through Cr³⁺ doping // *J. Mater. Sci. Mater. Electron*. – 2018. – Vol.29. – P.6446–6457.

References

- 1 M. Imran, H. Coskun, A.N. Khan, and J. Ouyang, *Appl. Phys. A* 127, 117 (2021).
- 2 A.K. Aimukhanov, A.K. Zeinidenov, G.I. Omarbekova, and I.V. Plotnikova, *Eurasian Phys. Tech. J.* 17, 55-60 (2020).
- 3 S. Timoshnev, A. Kazakin, K. Shubina, V. Andreeva, and et al., *Adv. Mater.* 11, 2300815 (2024).
- 4 M.D. Irwin, D.B. Buchholz, and et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 105, 2783-2787 (2008).

- 5 J. Arunodaya, and T. Sahoo, Mater. Res. Express 7, 016405 (2019).
- 6 R. Alkarsifi, J. Ackermann, and O. Margeat, J. Met. Mater. Miner. 32(4), 1-22 (2022).
- 7 Q. Lian, P.-L. Wang, G. Wang, X. Zhang, Y. Huang, and et al., Adv. Sci. 9, 2201543 (2022).
- 8 Y. Nishihara, M. Chikamatsu, S. Kazaoui, T. Miyadera, and Y. Yoshida, Jpn. J. Appl. Phys. 57, 04FS07 (2018).
- 9 I. Porqueras, and E. Bertran, Thin Solid Films 398-399, 41-44 (2001).
- 10 F. Huang, C. Chu, Z. Wang, Y. Zhang, and et al., Appl. Phys. Express 15(8), 084001 (2022).
- 11 A.N. Kazakin, I.M. Komarevtsevm, E.A. Vyacheslavova, and et al., SPbPU J. Phys. Math. 15(3.3) (2022).
- 12 R. Karsthof, Y.K. Frodason, and et al., Adv. Photon. Res. 3, 2200138 (2022).
- 13 S. Lany, J. Osorio-Guillén, and A. Zunger, Phys. Rev. B 75, 241203(R) (2007).
- 14 M. Martínez-Gil, M.I. Pintor-Monroy, and et al., Mater. Sci. Semicond. Process. 72, 37-45 (2017).
- 15 M. Wang, Y. Thimont, L. Presmanes, X. Diao, and A. Barnabe, Appl. Surf. Sci. 419, 795-801 (2017).
- 16 A.E. Jiménez-González, and J.G. Cambray, Surf. Eng. 16(1), 73–76 (2000).
- 17 J. Bisquert, I. Mora-Sero, and F. Fabregat-Santiago, Chemelectrochem 1(1), 289–296 (2013).
- 18 E. Cazzanelli, A. Kuzmin, G. Mariotto, and N. Mironova-Ulmane, J. Phys. Condens. Matter 15, 2045 (2003).
- 19 M.K. Beisembekov, G.I. Omarbekova, and et.al., Opt. Mater. 151, 115398 (2024).
- 20 T. Ivanova, A. Harizanova, M. Shipochka, and P. Vitanov, Mater. 15(5), 1742 (2022).
- 21 A.R. Murphy, and M.J. Fréchet, Chem. Rev. 107(4), 1066–1096 (2007).
- 22 P. Yang, L. Li, S. Yu, H. Zheng, and W. Peng, Appl. Surf. Sci. 493, 396–403 (2019).
- 23 P.K. Sharma, M.K. Singh, G.D. Sharma, and A. Agrawal, Mater. Today Proc. 43, 3061–3065 (2021).
- 24 V. Kumar, and S.K. Agarwal, Physics of Semiconductor Devices (Narosa Publishing House, 1998), 1358 p.
- 25 M. Shkir, V. Ganesh, S. AlFaify, et al. J. Mater. Sci. Mater. Electron. 29, 6446–6457 (2018).

Article history:

Received 21 June 2024

Accepted 29 August 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 21.06.2024

Қабылданды – 28.08.2024

Information about authors:

1. **M.K. Beisembekov** – Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: baiboldy_han@mail.ru

2. **G.I. Omarbekova** – Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: gulnur_130983@mail.ru

3. **S.A. Guchenko** – Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: guchen@mail.ru

4. **S.K. Tazhibayev** – Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: tazh1981@gmail.com

5. **A.K. Aimukhanov** – Cand. of Phys. and Math. Sci., Prof., Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: a_k_aitbek@mail.ru

6. **D.A. Afanasyev** – PhD, Prof., Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: a_d_afanasyev@mail.ru

7. **A.K. Nurmakhanova** – PhD, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan. email: atuletaeva@mail.ru

8. **A.K. Zeinidenov** (corresponding author) – PhD, Prof., Buketov Karaganda University, Scientific Center of nanotechnology and functional nanomaterials, Karaganda, Kazakhstan. email: a.k.zeinidenov@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **М.К. Бейсембеков** – Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан.. email: baiboldy_han@mail.ru

2. **Г.И. Омарбекова** – Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: gulnur_130983@mail.ru

3. **С.А. Гученко** – Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: guchen@mail.ru

4. **С.К. Тәжібаев** – Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: tazh1981@gmail.com

5. **А.К. Аймуханов** – физ.-мат. ғыл. канд., проф., Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: a_k_aitbek@mail.ru

6. **Д.А. Афанасьев** – PhD, проф., Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: a_d_afanasyev@mail.ru

7. **А.К. Нұрмаханова** – PhD, Алматы технологиялық университеті, Алматы қ., Қазақстан. email: atuletaeva@mail.ru

8. **А.К. Зейниденов** (автор-корреспондент) – PhD, проф., Бөкетов ат. Қарағанды университеті, Нанотехнология және функционалдық наноматериалдар ғылыми орталығы, Қарағанды қ., Қазақстан. email: a.k.zeinidenov@gmail.com

IRSTI 29.19.00; 54.05.16

<https://doi.org/10.26577/RCPh.2024v90i3-06>

N.D. Amanova^{1*} , Kh.Kh. Turaev¹ , A.T. Djalilov² , A.K. Nomozov³ ,
E.S. Sottikulov² , Y.A. Makhmudova⁴ 

¹Termez State University, Termez, Uzbekistan²Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan³Termez State University of Engineering and Agrotechnologies, Termez, Uzbekistan⁴National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan

*e-mail: amanova0176@gmail.com

A STUDY ON PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MODIFIED SULFUR CONCRETE

In this article, the polymerization reaction of elemental sulfur with organic modifiers is studied, and the optimal conditions of the modification process are presented. Also, the process of obtaining polymer sulfur concrete from modified sulfur is presented. Initially, elemental sulfur is heated to a temperature of 140-145 °C, aniline hydrochloride is added, and the temperature of the reaction is raised to 160 °C for 45 minutes. The average density of this obtained sulfur concrete sample was 2382 kg/m³. Sulfur-based concrete was obtained using the modified sulfur obtained in this process. Sulfur-based concrete was obtained by taking 56% sand, 14% ash, and 30% modified sulfur. Physico-chemical properties of sulfur concrete obtained based on modified sulfur and modified sulfur were studied and analyzed using X-ray phase analysis, IR-spectroscopy, scanning electron microscope, gamma-spectroscopy, and X-ray analysis. Also, the thermal analysis of modified sulfur-based concrete was studied using differential-thermal and thermogravimetric analysis. It was calculated that the average particle size $d(\text{nm})$ of the obtained polymer sulfur concrete is equal to 84.14 according to the Debaya-Sherrera equation.

Key words: sulfur, sulfur concrete, modifier, Anilinehydrochloride, X-ray phase analysis, diffractogram, electron microscope, IR-spectroscopy, Roman-spectroscopy.

Н.Д. Аманова^{1*}, Х.Х. Тураев¹, А.Т. Джалилов², А.К. Номозов³,
Е.С. Соттикулов², Ю.А. Махмудова⁴

¹Термез мемлекеттік университети, Термез қ., Өзбекстан²Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институты, Ташкент қ., Өзбекстан³Термез мемлекеттік инженерлік және агротехнологиялық университети, Термез қ., Өзбекстан⁴Өзбекстан Ұлттық университети, Ташкент қ., Өзбекстан

*e-mail: amanova0176@gmail.com

Модифицирленген күкіртті бетонның физика-химиялық қасиеттерін зерттеу

Бұл зерттеуде элементарлы күкіртті органикалық модификаторлармен өңдеу арқылы оның полимерлену процесі тереңірек зерттелді. Нәтижесінде, күкірт бетондары үшін жоғары сапалы байланыстырғыш алуға мүмкіндік беретін оңтайлы модификациялау шарттары анықталды. Модификацияланған күкірт негізіндегі күкірт бетондарын алу технологиясы толық сипатталды.

Тәжірибе барысында элементарлы күкіртті 140-145 °C температураға дейін қыздырып, содан кейін анилин гидрохлориді қосылды. Реакцияны толықтыру үшін температураны 160 °C дейін көтеріп, 45 минут бойы сақтады. Алынған күкірт бетонының орташа тығыздығы 2382 кг/м³ құрады. Оның құрамына 56% құм, 14% күл және 30% модификацияланған күкірт кірді.

Модификацияланған күкірт негізіндегі күкірт бетонның физикалық-химиялық қасиеттерін толықтай зерттеу үшін рентгендік фазалық талдау, инфрақызыл спектроскопия, сканерлеуші электронды микроскопия, гамма-спектроскопия және рентгендік флуоресценттік анализ әдістері қолданылды. Сонымен қатар, материалдың жылулық тұрақтылығын бағалау үшін дифференциалды термоанализ және термогравиметриялық анализ әдістері қолданылды. Дебай-Шеррер теңдеуі бойынша есептелген полимерлі күкірт бетонының бөлшектерінің орташа мөлшері 84,14 нм құрады, бұл оның жоғары дисперстілігін көрсетеді. Жүргізілген зерттеулер нәтижесінде жоғары беріктікке

және әртүрлі сыртқы әсерлерге төзімділігі жоғары жаңа құрылыс материалы – күкірт бетон алуға мүмкіндік беретін тиімді әдіс әзірленді.

Түйін сөздер: күкірт, күкіртті бетон, модификатор, анилин гидрохлорид, рентгендік фазалық талдау, дифрактограмма, электронды микроскоп, ИҚ-спектроскопия, Раман спектроскопиясы.

Н.Д. Аманова^{1*}, Х.Х. Тураев¹, А.Т. Джалилов², А.К. Номозов³,
Е.С. Соттикулов², Ю.А. Махмудова⁴

¹Термезский государственный университет, г. Термез, Узбекистан

²Ташкентский научно-исследовательский химико-технологический институт, г. Ташкент, Узбекистан

³Термезский государственный университет инжиниринга и агротехнологий, г. Термез, Узбекистан

⁴Национальный университет Узбекистана, г. Ташкент, Узбекистан

*e-mail: amanova0176@gmail.com

Исследование физико-химических свойств модифицированного серного бетона

В данной статье исследуется реакция полимеризации элементарной серы с органическими модификаторами, а также представлены оптимальные условия для процесса модификации серы для получения высококачественного связующего вещества для серного бетона. Рассматривается процесс получения серного полимербетона на основе модифицированной серы. Сначала элементарная сера нагревается до температуры 140 – 145 °С, затем добавляется гидрохлорид анилина, и температура реакции повышается до 160 °С на 45 минут. Средняя плотность полученного образца серного бетона составила 2382 кг/м³. Для создания серного бетона использовали модифицированную серу, при этом в составе использовалось 56% песка, 14% золы и 30% модифицированной серы. Физико-химические свойства серного бетона на основе модифицированной серы были исследованы с помощью рентгенофазового анализа, ИК-спектроскопии, сканирующего электронного микроскопа, гамма-спектроскопии и рентгеновского анализа. Также проводился термический анализ серного бетона с применением дифференциального термического и термогравиметрического анализа. Расчет среднего размера частиц полимерного серного бетона по уравнению Дебая – Шеррера позволил определить, что он составляет 84,14 нм, что свидетельствует о формировании мелкодисперсной структуры материала.

Ключевые слова: сера, серобетон, модификатор, анилингидрохлорид, рентгенофазовый анализ, дифрактограмма, электронный микроскоп, ИК-спектроскопия, Раман-спектроскопия.

Introduction

The natural resources are exhausting due to the expansive growth in the construction sector, while waste materials are accumulating in the natural environment because of the endless processing and finishing of raw products [1, 2].

The advancement of technology in the petroleum industry and the installation of new oil refineries have caused the large-scale production of sulfur by-products [3]. Owing to special physical, chemical, and mechanical characteristics, sulfur has applications in the fields of agriculture, pharmaceuticals, chemical, and construction industry, and in the process of rubber vulcanization [4]. The utilization of sulfur as a substitute for cement binders can help in minimizing the abiotic depletion caused by the construction industry [5]. Conventional concrete requires water for the hydration of cement (in order to complete the chemical reactions responsible for strength gain) [6]. However, the experience across the world has

shown that SC has significant strength and durability during exposure to chemicals in comparison to PCC. There have been significant applications of SC in the USA and Canada; however, the use in Europe is limited [7]. The utilization of SC on large scales will be economical as compared to cement concrete, and it can alleviate environmental problems and problems related to sulfur storage [8].

Sulfur melts at 120 °C and transfers into a liquid state. When cooled at 114 °C, it changes from liquid to a monoclinic crystalline form. On further cooling to 98 °C, it changes to an orthorhombic state, which is stable at room temperature. This polymerization helps in attaining high strength at normal temperatures [9]. As sulfur is a thermoplastic material, it has some of its limitations to be used as a binder. Despite this, there are several benefits of SC applications which including a high of strength in a short time, resistivity to aggressive chemicals, waterproof characteristics, and recycling potential [10]. Today, sulfur is considered a good

building material alternative for some applications in the construction industry. As an alternative to traditional concrete with cement as a binder, sulfur-solidified concrete is among other construction materials [11]. The first studies on the evaluation of sulfur as construction material were carried out by Bacon and Davis [12]. A material with high acid resistance and strength was obtained from 60% sand and 40% sulfur mix. The use of sulfur as a binder was investigated by experimental studies performed by various researchers [13]. In this study, it is aimed to determine the durability performances of bitumen-modified sulfur polymer concrete (SPC) Portland cement concrete (PCC). Three different bitumen ratios were selected as 2.5%, 5%, and 7.5% by weight of pure sulfur for the modification. The sulfur modification of the modified sulfur sample prepared with 2.5% bitumen addition among the selected bitumen ratios was successful [14]. The mix designs and specimen preparation for the dry process and wet process of sulfur rubber concrete (SRC) were investigated. Although the compressive strength of SRC decreases with increasing rubber content, the toughness increases instead. Adding micro-filler will improve the compressive strength of SRC. There is a threshold value for the sulfur content, at which the compressive strength and the workability of SRC reach an optimum balance. The bond between rubber particles and surrounding sulfur is strong due to the vulcanization process that generates cross-links through S-C bonds [15]. One of the most perspective methods of enhancing durability of building materials and articles exposed to various aggressive media is application of sulfur for their manufacturing. The results of the experiments have proved that in all the impregnated samples the strength had increased by a factor of $2.0 \div 4.8$. The data have also demonstrated that depth of sulfur penetration into capillary-porous article had augmented twofold and more. As seen from these data, strength and resistance to aggressive media of arbolites impregnated with sulfur by-products is rather high. This proves that arbolite blocks impregnated with sulfur by-products could be recommended for masonry of inspection manholes, underground engineering structures [16]. The sulfate resistance of concrete was tested using drying-immersion cycles of varying duration in different sulfate solutions. A matrix of 20 concrete mixtures was tested with this protocol. The test permitted to distinguish the effect of cement type, w/c and paste volume on expansion. Measurements of the dynamic E-modulus made it possible to link expansion and mechanical damage and to define a limit value for expansion [17]. Durability of sulfur concrete with different fillers, as well as Portland cement concrete, was tested in the solutions of HCl,

H₂SO₄, and NaCl. Regarding mass changes, in the solutions of HCl and H₂SO₄ sulfur concrete with talc and fly ash exhibited higher durability, while in NaCl samples with alumina and microsilica were better. Strength loss was higher in the solution of HCl comparing to H₂SO₄, while negligible in NaCl which is in accordance with apparent porosity increase. Portland cement concrete after two months lost 20% of mass [18]. The aim of this study was to predict the corrosion of cement concrete (CC) and sulfur concrete (SC) in sewer systems using three artificial intelligence (AI)-based techniques: Adaptive NeuroFuzzy Inference System (ANFIS), Genetic Programming (GP), and Multi Expression Programming (MEP). Two sets of chemical experiments in acidic solutions and biological tests using *Thiobacillus thiooxidans* were conducted to investigate the corrosion in concrete samples. For both tests, weight loss was used as the indicator of corrosion [19,20]. This paper presents the results of the experimental research and analyses indicating the usefulness of polymer sulphur composites to the protection against corrosion of reinforcement. Presented in paper materials, being also the domain of the personal investigations and the methodology are definite. After analyze of the initial results the optimum compositions have been chosen for the experimental research [21-25].

Purpose of work: It consists of obtaining modified sulfur based on aniline hydrochloride, analyzing their composition and structure using the results of infrared spectroscopy and scanning electron microscope analysis, studying their physical and mechanical properties, improving their properties, and developing polymer concrete with sulfur-based on them.

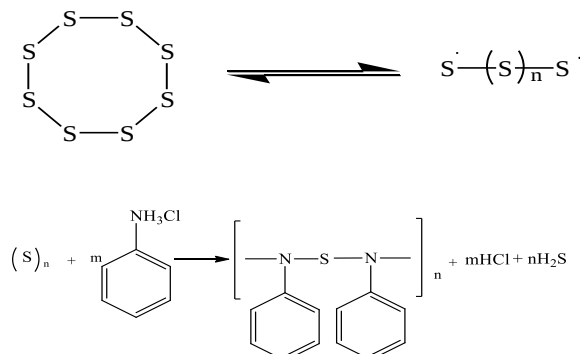
Research methods. The IR-spectrum of modified sulfur was analyzed by a Japanese-made SHIMADZU IR-Fure spectrophotometer in the range of 750-4000 cm⁻¹, a HORIBA scientific novel-spectrometer at 3900-500 cm⁻¹ and MIRA 2 LMU scanning electron microscope (SEM), X-ray phase analysis. Modified concrete was analyzed by differential-thermal and thermogravimetric methods.

Experimental part

Modification of elemental sulfur using aniline hydrochloride

Initially, the raw materials needed to obtain sulfur concrete are measured with high precision in grams. In the process of modification, the first elemental sulfur is heated to a temperature of 140-145 °C. After elemental sulfur changes to a yellowish brown state, aniline hydrochloride is added to the dissolved sulfur phase as an organic

modifier. The temperature of this process is slowly raised to 160 °C for 45 minutes while stirring. This reaction results in a slight decrease in the viscosity of the mixture medium and a dark yellow product characteristic of copolymers of aromatic compounds with sulfur:



Production of sulfur concrete based on modified sulfur

In the production of sulfur concrete, fillers are mixed in different mass ratios. The calculated ratio of the mixture was 56% sand, 14% ash, and 30% modified sulfur. Ash can reduce the carbon binding of the product, in sulfur concrete (together with sand) ash is used as a potential reaction and composition filler for polymerization. Also, the addition of fly ash to sulfur concrete is beneficial in improving strength due to the rounded shape of the mixture and the presence of suitable-sized aggregates. At the initial stage, filler products and organic modifiers are mixed and heated at 160-170 °C for 1 hour. To reduce the particle size, the materials were combined with elemental sulfur and processed through a 1 mm long flow mill. Then the mixture is heated and mixed in a molten state at 170-180 °C for 40 minutes and poured into molds for cooling. The average density of solution samples was 2382 kg/m³.

The sulfur concrete mixture is made on the basis of sulfur, sand, fly ash, and organic modifiers. Raw materials such as sulfur, sand, fly ash, and organic modifier are necessary for the preparation of the sulfur concrete mixture.

Results and discussion

Analysis of IR and Raman spectra of modified sulfur

In the IR spectrum of modified sulfur with aniline hydrochloride, strong absorption lines in the region 3388-3329 cm⁻¹ correspond to absorption lines of valence vibrations of the NH group connected to the benzene ring of aniline hydrochloride. Also, the intense absorption lines in the region of 1454-1417 cm⁻¹ indicate that the

deformation vibrations of the aniline benzene ring are characteristic of the absorption lines. Absorption lines in the IR spectrum of this compound at 1157 cm⁻¹ correspond to the valence vibrations of the C-N bond, while the intense absorption lines at 873 cm⁻¹ correspond to the valence vibrations of the N-H bond of aniline. We can see absorption lines of N-S bonds characteristic of sulfur in the polymerized state with aniline at 1150-1100 cm⁻¹. Also, we can observe that the weak absorption lines in the region of 650-500 cm⁻¹ in the IR spectrum of this modified compound gave characteristic weak absorption lines of the polymerized sulfur-containing S-S bond. In addition, the novel spectrum lines in the range of 470-430 cm⁻¹ confirm compounds containing sulfur in the Ar-S-S-Ar regions.

Analysis of thermal analysis of sulfur concrete obtained on the basis of modified sulfur

Thermal analysis of sulfur concrete modified with aniline hydrochloride. Thermogravimetric analysis was performed to study the thermal properties of the compound. Simultaneous TGA and DTA analyzes were performed in the temperature range of 20-800°C on the SHIMADZU DTG-60 thermal analyzer (Fig. 1).

Thermal analysis of sulfur concretes with new content was carried out in the temperature range of 20-800°C. All the samples of the thermal analysis of the mentioned sulfur concrete were taken in the amount of 25.776 mg and were carried out in specially prepared crucibles in a dynamic mode at a speed of 10 degrees/min in an inert environment with an argon atmosphere (Fig. 2).

It was studied according to thermogravimetric derivatogram (TG) and differential thermogravimetric analysis presented in Fig. 3. Two endothermic effects were observed at temperatures of 122.38 and 304.38°C. The endothermic effect at the first temperature of 122.38 corresponds to the liquefaction of sulfur residues. The second endothermic effect was observed around 300°C, which corresponds to the decomposition temperature of the main organic and sulfur components.

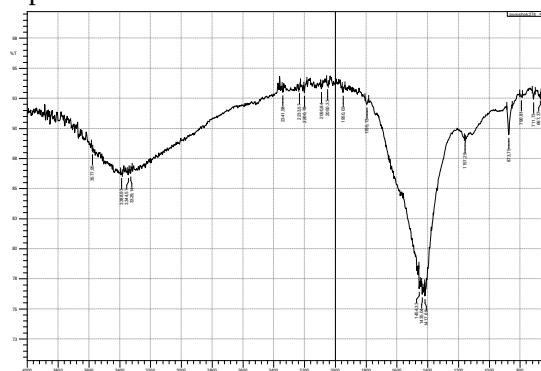
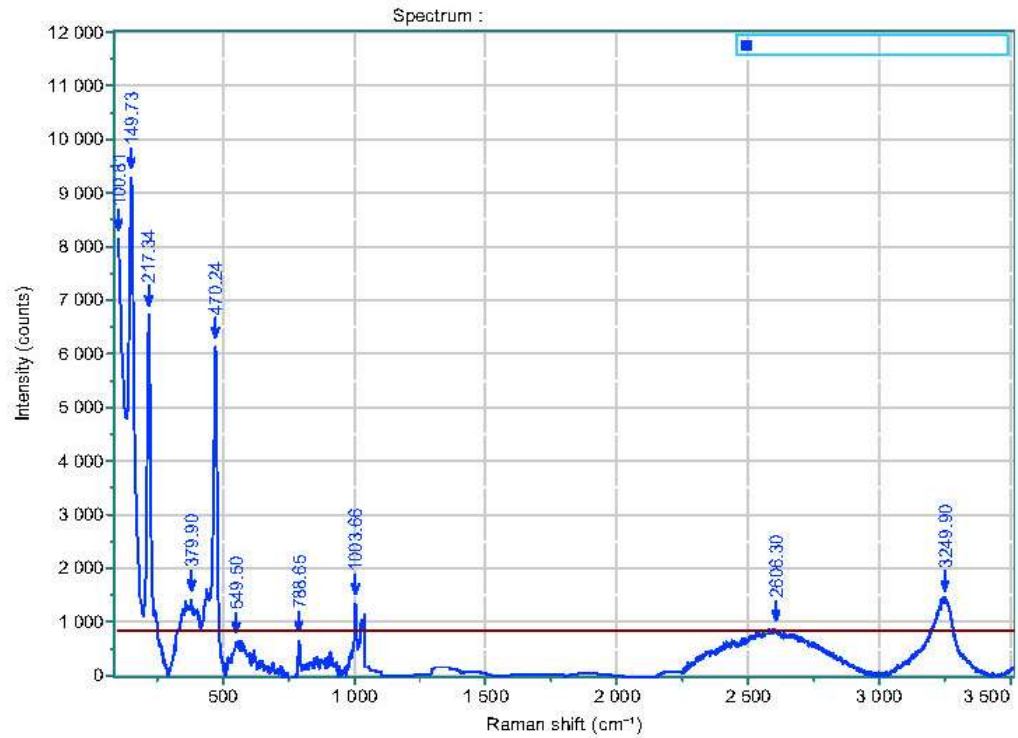


Figure 1 – IR spectrum of Modified Sulfur



Date	08.04.2023 1...	Acq. time (s)	1.13383	Accumulations	1	Laser (nm)	785
Spectro (cm ⁻¹)		Hole		Slit		Grating	685
ND Filter		Objective		ICS correction	Off	Range (cm ⁻¹)	

Figure 2 – Novel spectrum of Modified Sulfur

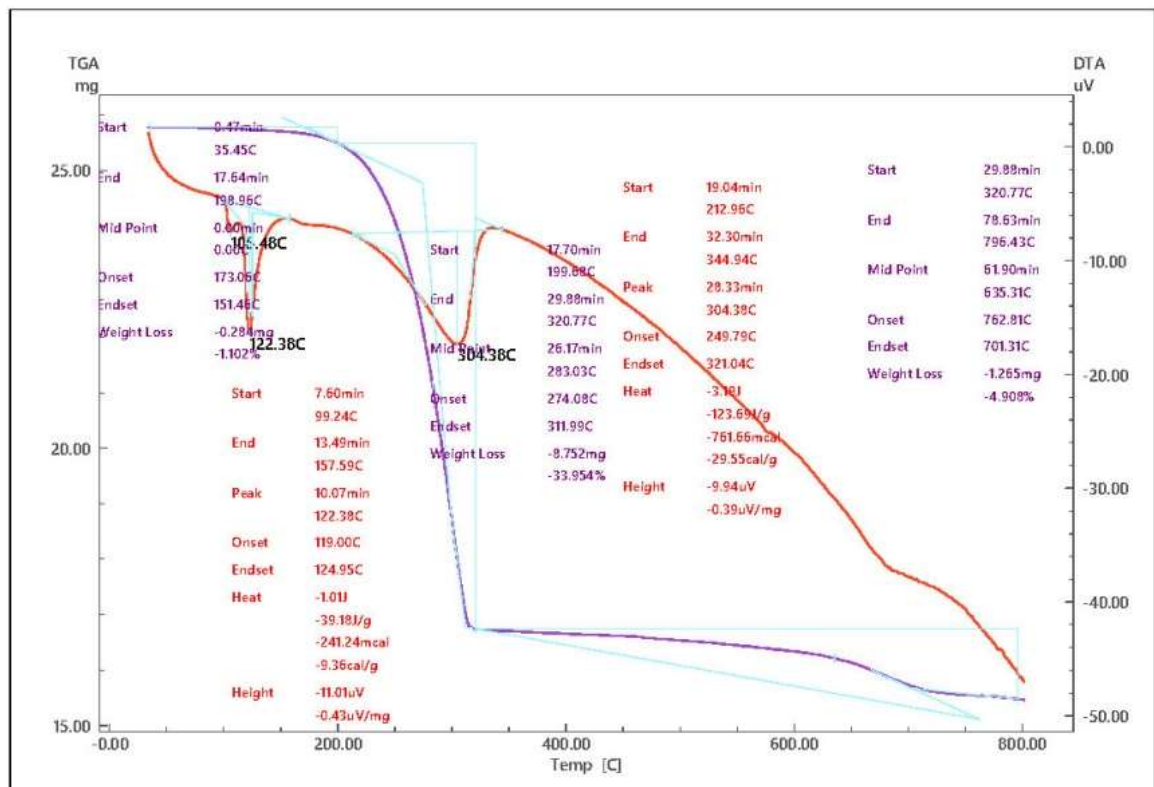


Figure 3 – Derivatogram of modified sulfur concrete

The analysis of the thermogravimetric curve of the organic compound shows that the TG curve mainly takes place in the temperature range of 1 intensive and 2 non-intensive mass losses. The 1st mass loss range is 35.45 - 198.96°C, the 2nd mass loss range is 199.68 - 320.77°C, and the 3rd mass loss range is 320.77 - 796.43° C corresponds to the temperature. The analysis shows that in the mass loss interval 1, a mass loss of 0.284 mg, i.e. 1.102%, is observed, while mass loss 2 is the most intense decay. The main amount of mass loss in this decay is 8.752 mg, i.e. 33.954%. It can be seen that the first mass loss involves the loss of unbound matter. In the second main stage of decomposition, in the case of lower molecular compounds such as hydrogen sulfide, sulfur oxides, and carbon oxides, after the decomposition of the organic and sulfurous part, a mixture of sulfur oxides and partially coal remains.

The results of the thermal analysis show that the field of application of the obtained sulfur concrete is limited to a maximum of 3000 C. This temperature is several times higher than the normal outdoor temperature, which shows the possibility of wide application.

One of the main advantages of modified sulfur concrete over Portland cement is its resistance to acidic and saline environments, especially in industrial environments where traditional cement has a short service life. In addition to industrial enterprises, it is used in freezing and thawing cycles, in food processing enterprises, and in the production of sewage pipes, drainage channels, and marine structures. In terms of sustainability, MOB can be considered an environmentally friendly material as it can replace Portland cement in several construction applications. A few hours after casting, its compressive strength increases to about 80%, and typically 80 to 95% after 24 hours. In this work, studies were conducted on two identical samples hardened for 3, 7, 14, and 28 days. The change in average compressive strength for all samples is presented in Table 1. Table 1 shows that the average compressive strength obtained at 3 days was 32 MPa and 42 MPa at 28 days. The results correspond to a percentage of compressive strength calculated at 80.5% compared to 28 days.

Table 1. Compressive strength indicators of sulfur concrete samples prepared on the basis of modified sulfur

No	Time, day	Average compressive strength, MPa	Standard error, MPa
1	3	32,15	0,16
2	7	37,62	0,67
3	14	39,43	2,23
4	28	42,13	0,98

Durability tests of the samples were carried out by measuring the mass of the sample after 3, 7, 14, and 28 days and comparing it with the initial value (before dissolving); the results are shown in Figures 4, 5, and Table 1. Mass loss was calculated for 10x10x10 mm square samples immersed in a 40% solution of sulfuric acid and ammonium sulfate. The mass changes induced by dissolution were negligible, indicating that the samples obtained did not deteriorate after exposure to acidic and saline environments.

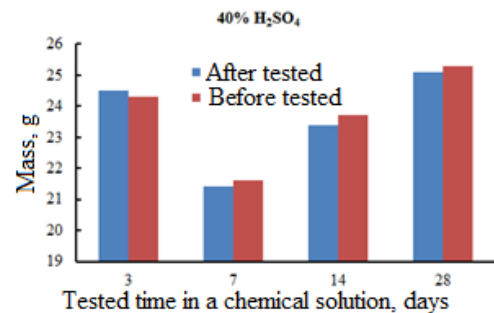


Figure 4 – Mass change after immersion in 40% H₂SO₄

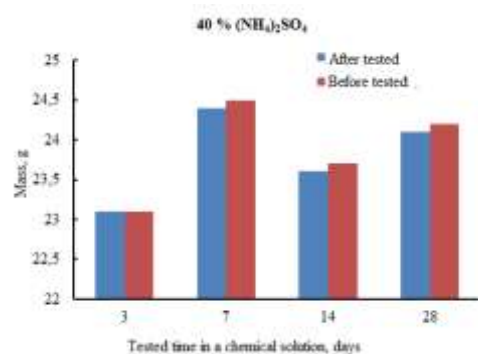


Figure 5 – Mass change after immersion in 40% (NH₄)₂SO₄

SEM photograph and X-ray phase analysis diffractogram of modified sulfur concrete

Figure 6 shows electron microscopic elemental sulfur and fly ash particles, irregularly shaped particle elemental sulfur and sizes (micron diameter or less), and spherical shapes of fly ash particles

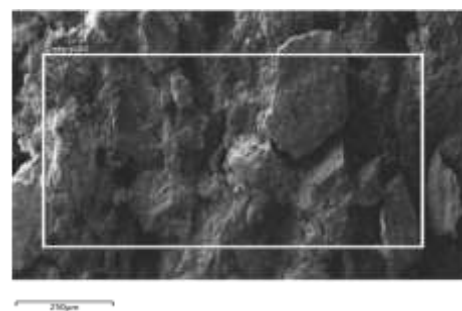


Figure 6 – Photomicrograph of modified sulfur concrete

As can be seen from Figure 7, made on the basis of a roentgenogram, sulfur concrete contains S, SiO₂, CaCO₃, CaSiO₃, Al₂(SiO₄)(OH)₂

molecules. Table 2 below contains data on absorption peaks of sulfur-containing concrete in X-ray phase analysis.

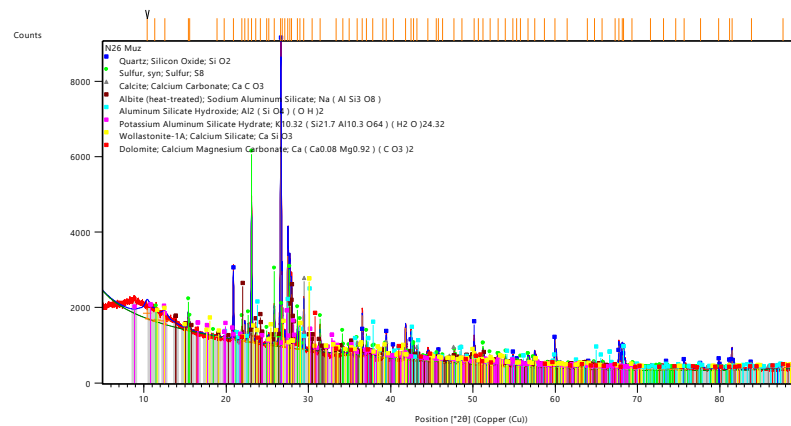


Figure 7 – X-ray phase analysis diffractogram of modified sulfur concrete

Table 2 below contains data on absorption peaks of sulfur-containing concrete in X-ray phase analysis

continuation of Table 2

Table 2 – X-ray phase analysis diffractogram of modified sulfur concrete

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]
10.4168	278.24	1.0527	8.48544	4.52
11.3083	64.93	1.4870	7.81842	1.05
12.5358	180.96	1.3851	7.05550	2.94
15.4043	366.22	0.0854	5.74749	5.94
15.5815	121.19	0.0687	5.68254	1.97
18.8842	35.71	0.0174	4.69549	0.58
19.7809	60.30	0.0218	4.48461	0.98
20.8749	1414.88	0.0959	4.25200	22.97
21.9421	169.68	0.2839	4.04754	2.75
22.2804	452.31	0.0702	3.98685	7.34
22.6988	361.39	0.0811	3.91429	5.87
23.0824	2988.27	0.1045	3.85010	48.50
23.6199	222.51	0.1426	3.76369	3.61
24.1859	249.73	0.0815	3.67688	4.05
24.9453	191.04	0.0983	3.56664	3.10
25.1764	238.99	0.0686	3.53441	3.88
25.8470	841.52	0.1097	3.44422	13.66
26.6462	6161.00	0.1226	3.34270	100.00
26.8198	1097.28	0.0376	3.32146	17.81
27.1260	247.13	0.1120	3.28465	4.01
27.5053	2426.33	0.1327	3.24021	39.38
27.7372	1873.70	0.1011	3.21365	30.41
27.9385	1420.71	0.1377	3.19095	23.06
28.6655	440.30	0.1750	3.11165	7.15
28.9656	465.42	0.0652	3.08009	7.55
29.4408	1076.35	0.1317	3.03146	17.47
30.4535	253.96	0.0594	2.93291	4.12
31.4077	493.17	0.1252	2.84595	8.00
33.3834	0.00	0.0866	2.68190	0.00
34.1777	239.76	0.1367	2.62136	3.89
34.9373	178.09	0.1248	2.56609	2.89
35.9352	176.72	0.2433	2.49709	2.87
36.5570	1075.52	0.0924	2.45603	17.46
37.0633	373.97	0.1030	2.42363	6.07
37.8374	148.97	0.0975	2.37581	2.42
39.0735	281.03	0.0645	2.30344	4.56
39.4445	485.51	0.1742	2.28263	7.88
40.3105	291.06	0.0875	2.23557	4.72

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]
41.8126	845.68	0.1387	2.15866	13.73
42.4746	676.94	0.0911	2.12654	10.99
42.7673	341.60	0.1573	2.11266	5.54
43.1937	223.10	0.1447	2.09279	3.62
44.5266	218.61	0.4349	2.03318	3.55
45.5493	100.11	0.6770	1.98988	1.62
45.8095	213.45	0.0830	1.97919	3.46
46.3318	75.91	0.1210	1.95808	1.23
47.7158	169.55	0.5106	1.90447	2.75
48.6674	50.41	0.6848	1.86943	0.82
50.1297	492.86	0.2369	1.81827	8.00
50.6762	111.09	0.1579	1.79994	1.80
51.2307	363.80	0.1558	1.78175	5.90
52.0720	220.00	0.1440	1.75492	3.57
53.0915	215.12	0.3661	1.72360	3.49
53.9629	190.69	0.1665	1.69781	3.10
54.8758	234.90	0.1190	1.67170	3.81
55.3307	119.32	0.2359	1.65903	1.94
55.8037	110.46	0.3832	1.64608	1.79
56.7051	271.22	0.2112	1.62204	4.40
57.5127	345.16	0.2237	1.60117	5.60
58.7079	93.60	0.3515	1.57139	1.52
59.9677	755.47	0.1092	1.54135	12.26
61.4463	88.31	1.8692	1.50776	1.43
63.9360	56.20	0.7723	1.45492	0.91
64.7657	52.38	0.1737	1.43827	0.85
65.6865	109.93	1.2279	1.42032	1.78
67.2711	56.07	0.3167	1.39066	0.91
67.7508	651.23	0.1081	1.38198	10.57
68.1580	590.92	0.1159	1.37471	9.59
68.3210	309.46	0.1308	1.37183	5.02
69.3452	90.25	1.2107	1.35405	1.46
71.6015	67.43	0.9476	1.31682	1.09
73.1890	60.83	1.4268	1.29213	0.99
74.6452	49.77	2.6351	1.27049	0.81
75.6685	198.87	0.1287	1.25583	3.23
77.6887	74.77	0.6441	1.22814	1.21
79.8904	192.57	0.2219	1.19974	3.13
81.1769	223.36	0.1106	1.18394	3.63
81.5006	526.76	0.1264	1.18006	8.55
83.8430	129.26	0.2145	1.15295	2.10
87.7163	0.00	0.5628	1.11174	0.00

According to table 2, we can quote table 3.

Table 3 – Diffractogram data of sulfur concrete

№	2 theta scan angle [20°]	Peaks [cts]	FWHM left [20°]	d is the distance between planes [Å]	Density of I-peaks
1	20.9291	1152.26	0.0951	4.24110	26.82
2	23.1432	2619.77	0.1398	3.84013	60.97
3	26.7030	4296.72	0.0883	3.33572	100.00
4	27.5641	4247.18	0.06130	3.23348	98.85
5	27.8072	1068.75	0.1858	3.20572	24.87
6	39.5710	4245.56	0.0550	2.27563	98.81
7	75.7682	1162.20	0.0833	1.25442	27.05

When calculating the particle size of sulfur concrete according to the Debye-Scherrer equation, it is calculated according to the values given in the formula. Example:

$$d = K\lambda / \beta \cos\theta$$

$$d = 0.94 \cdot 1.54178 / 0.951 \cdot 0.2 = 76.19.$$

Table 4 – Calculation of the particle size of sulfur concrete according to the Debaya-Sherrera equation

№	2 theta scanning angle [20°]	FWHM left [20°]	average size of d(nm) crystals	d (nm) average
1	20.9291	0.0951	76.19	84.14
2	23.1432	0.1398	51.83	
3	26.7030	0.0883	85.25	
4	27.5641	0.06130	118.21	
5	27.8072	0.1858	39.00	
6	39.5710	0.0550	131.7	
7	75.7682	0.0833	87.30	

It was calculated that the average particle size d (nm) of sulfur concrete is equal to 84.14 according to the Debye-Sherrera equation.

Gamma spectrometer analysis of modified sulfur

Taking into account the advantages and convenience of modified sulfur, we analyzed it in a Gamma spectrometer in order to study its impact on the environment. Accordingly, the test conditions are T-22°C, humidity-63%, light-300 lux, relative activity Bk/kg.

Table 5 – Analysis of radionuclides in modified sulfur using a gamma spectrometer

Product name	Sample order	Ra-226	Th-232	K-40	Aeff. bk/kg	Aeff.mb k/kg
Modified Sulfur	1	4.76	5.44	137	18.7	84.4
	2	5.24	6.34	127	24.4	86.8
	3	3.74	4.53	115	19.5	103
	4	5.34	5.29	126	23.0	96.4
	5	3.54	5.36	119	20.7	36.9
	Av.	4	5	124	Aeff o`r= =108.8	Aeff.m o`rt= =160.8

According to SanPin 0193-06, it is used in construction if it is less than 350 Bk/kg. When we analyzed Modified Sulfur, the radionuclides contained in it corresponded to an average of 160.8 Bq/kg.

The results of the gamma spectrometry examination of the sample taken above meet the requirements of sanitary rules and norms No. 0193-06. The obtained result can be used in housing construction if the gamma spectrometer indicator is up to 300 Bk/kg. If it is < 350 Bk/kg, it can be used for bardyors (fences), ditches, underground pipe protection means, and stone pavements (Bruschatka) on the streets.

Conclusion

In this study, the advantages of obtaining sulfur concrete from modified sulfur were studied. A new sulfur concrete was developed using technical sulfur, ash, and industrial additives extracted during the production of petroleum products. In the production of sulfur concrete, an inexpensive chemical modifier was used, this raw material can be a practical and cost-effective solution for a sustainable building material. Sulfur concrete products obtained on the basis of sulfur, ash, and fillers polymerized at high temperatures have been confirmed to have high strength in a short time, resistance to salty and acidic environments, water absorption, and recyclability. Results of gamma spectrometric studies 0193-06 - meet the requirements of sanitary regulations. The results obtained were less than <350 Bq/kg, indicating that it can be used for street barriers, ditches, underground pipe protection devices, and paved roads.

References

- 1 Kurda R., Silvestre J.D., de Brito J. Life cycle assessment of concrete made with high volume of recycled concrete aggregates and fly ash // Resour Conserv Recycl. – 2018. – Vol.139. – P.407–417.

- 2 Beknazarov Kh.S., Jalilov A.T., Karimov M.U., Sottikulov E.S. Study of modified sulfur concrete to achieve industrial sustainability // *Universum: Technical Sciences*. – 2019. – № 5 (62). – P.65-68. (In Russ).
- 3 Mohamed A.M., El-Gamal M. Sulfur Concrete for the Construction Industry: A Sustainable Development Approach. – J. Ross Publishing, Lauderdale, FL. – 2010. – 448 p.
- 4 Mohammed S., Poornima V. Strength and durability study of sulphur concrete with replaced fine aggregate // *Mater Today Proc.* – 2018. – Vol.5. – P.23888–23897.
- 5 Khademi A.G., Sar H.I.K. Comparison of sulfur concrete, cement concrete and cement-sulfur concrete and their properties and application. // *Curr World Environ.* – 2015. – Vol.10. – P.63–68.
- 6 Moon J., Kalb P.D., Milian L., Northrup P.A. Characterization of a sustainable sulfur polymer concrete using activated fillers. // *Cem Concr Compos.* – 2016. – Vol.67. – P.20–29.
- 7 Vlahovic M.M., Martinovic S.P., Boljanac T.D., et al. Durability of sulfur concrete in various aggressive environments. // *Constr Build Mater.* – 2011. – Vol.25. – P.3926–3934.
- 8 Sabour M., Dezvareh G., Bazzazzadeh R. Corrosion prediction using the weight loss model in the sewer pipes made from sulfur and cement concretes and Response Surface Methodology (RSM). // *Constr Build Mater.* – 2019. – Vol.199. – P.40–49.
- 9 Dugarte M., Martinez-Arguelles G., Torres J. Experimental evaluation of modified sulfur concrete for achieving sustainability in industry applications // *Sustainability*. – 2019. – Vol.11. – P.70.
- 10 Ciak N., Harasymuk J. Sulphur concrete's technology and its application to the building industry. // *Tech Sci Warm Maz Olsztyn*. – 2013. – Vol.16(4). – P.323–331.
- 11 Yue L., Caiyun J., Yunping X. The properties of sulfur rubber concrete (SRC). // *J Wuhan Univ Technol Mater Sci.* – 2006. – Vol.21(1). – P.129–133.
- 12 Bacon R.F., Davis H.S. Recent advances in the American sulfur industry. // *Chem Metallurgical Engs.* – 1921. – Vol.24(2). – P.65–72.
- 13 McKinney P.V. Provisional methods for testing sulfur cements. // *ASTM Bull AB4010-EB*. – 1940. – Vol.96–107. – P.27–30.
- 14 Öztürk O., Öner A. Long-term Durability of Bitumen Modified Sulfur Polymer Concrete Under Freeze–Thaw Cycles. // *Int J Civ Eng* 2022. – Vol.20. – P.529–543.
- 15 Yue L., Caiyun J. & Yunping X. The properties of sulfur rubber concrete (SRC). // *J. Wuhan Univ. Technol.-Mat. Sci. Edit.* – 2006. – Vol.21. – P.129–133.
- 16 Sokolova Y., Akulova M., Isakulov B., Sokolova A., Tukashev Z., Konysbaeva Z. Improvement of Strength Properties of Arbolite Concrete Composites by Impregnation with Sulfur–By-Products of Oil and Gas Industry // *Proceedings of FORM 2022*. – 2023. – P.1–8.
- 17 Loser, R., Leemann, A. An accelerated sulfate resistance test for concrete // *Mater Struct* – 2016. – Vol.49. – P.3445–3457.
- 18 Milica M. Vlahovic, Sanja P. Martinovic, Tamara Dj. Boljanac, Predrag B. Jovanic, Tatjana D. Volkov-Husovic. Durability of sulfur concrete in various aggressive environments // *Construction and Building Materials*. – 2011. – Vol.25 (10). – P. 3926-3934.
- 19 Sabour M.R., Dezvareh G.A. & Niavol K.P. Application of Artificial Intelligence Methods in Modeling Corrosion of Cement and Sulfur Concrete in Sewer Systems // *Environ. Process.* – 2021. – Vol.8. – P.1601–1618.
- 20 Nurilloev Z., Beknazarov K. and Nomozov A, Production of Corrosion Inhibitors Based on Crotonaldehyde and Their Inhibitory Properties // *International Journal of Engineering Trends and Technology*. – 2022. – Vol.70. – P.423-434.
- 21 Hoła J., Książek M. Research on usability of sulphur polymer composite for corrosion protection of reinforcing steel in concrete // *Archiv.Civ.Mech.Eng.* – 2009. – Vol.9. – P.47–59.
- 22 Geldiev Y.A., Turaev Kh.Kh., Umbarov I.A., Eshmurodov Kh.E. Effects of Different Factors on the Kinetics of Modification of Polysilicic Acids with Ethanolamine // *International Journal of Engineering Trends and Technology*. – 2022. – Vol. 70, no. 8. – P 447-452.
- 23 Turaev Kh.Kh., Gafforova Sh., Dzhililov A.T., Sottikulov E, Soatov S. Synthesis and Research of Sorbent Based on Sodium Metasilicate and Thiourea // *International Journal of Engineering Trends and Technology*. – 2022. – Vol. 70, no. 11. – P.99-105.
- 24 Turaev Kh.Kh., Eshankulov Kh.N., Umbarov I.A., Kasimov Sh.A., Nomozov A.K., Nabiev D.A Studying of Properties of Bitumen Modified based on Secondary Polymer Wastes Containing Zinc. // *Inter J. of Engin. Trends and Tech.* – 2023. – Vol.71(9). – P.248-255.
- 25 Nomozov A.K., Beknazarov Kh., Khodjamkulov S., Misirov Z., Yuldashova S. Synthesis of Corrosion Inhibitors Based on (Thio)Urea, Orthophosphoric Acid and Formaldehyde and Their Inhibition Efficiency. // *Baghdad Sci.J.* – 2024. – Vol. 22(4).

References

- 1 R. Kurda, J.D. Silvestre, and J. de Brito, *Resour. Conserv. Recycl.* 139, 407 (2018).
- 2 Kh. S. Beknazarov, A. T. Jalilov, M. U. Karimov, and E. S. Sottikulov, *Universum: Technical Sciences*, No. 5 (62), 65 (2019). (In Russ).

- 3 A.M. Mohamed and M. El-Gamal, Sulfur Concrete for the Construction Industry: A Sustainable Development Approach, J. Ross Publishing, Lauderdale, FL (2010).
- 4 S. Mohammed and V. Poornima, Mater. Today Proc. 5, 23888 (2018).
- 5 A. G. Khademi and H. I. K. Sar, Curr. World Environ. 10, 63 (2015).
- 6 J. Moon, P. D. Kalb, L. Milian, and P. A. Northrup, Cem. Concr. Compos. 67, 20 (2016).
- 7 M. M. Vlahovic, S. P. Martinovic, T. D. Boljanac, et al., Constr. Build. Mater. 25, 3926 (2011).
- 8 M. Sabour, G. Dezvareh, and R. Bazzazadeh, Constr. Build. Mater. 199, 40 (2019).
- 9 M. Dugarte, G. Martinez-Arguelles, and J. Torres, Sustainability 11, 70 (2019).
- 10 N. Ciak and J. Harasymiuik, Tech. Sci. Warm. Maz. Olsztyn 16 (4), 323 (2013).
- 11 L. Yue, J. Caiyun, and X. Yunping, J. Wuhan Univ. Technol. Mater. Sci. 21, 129–133 (2006).
- 12 R. F. Bacon and H. S. Davis, Chem. Metallurgical Engs. 24, 65–72 (1921).
- 13 P. V. McKinney, ASTM Bull. AB4010-EB 96-107, 27–30 (1940).
- 14 O. Öztürk and A. Öner, Int. J. Civ. Eng. 20, 529–543 (2022).
- 15 L. Yue, J. Caiyun, and X. Yunping, J. Wuhan Univ. Technol.-Mat. Sci. 21, 129–133 (2006).
- 16 Y. Sokolova, M. Akulova, et al, Proceedings of FORM 2022, 1–8 (2023).
- 17 R. Loser and A. Leemann, Mater. Struct. 49, 3445–3457 (2016).
- 18 M. Milica, M. Vlahovic, S. P. Martinovic, et al, Constr. Build. Mater. 25, 3926-3934 (2011).
- 19 M. R. Sabour, G. A. Dezvareh, and K. P. Niavol, Environ. Process. 8, 1601–1618 (2021).
- 20 Z. Nurilloev, K. Beknazarov, and A. Nomozov, Int. J. Eng. Trends Technol. 70, 423-434 (2022).
- 21 J. Hoła and M. Książek, Arch. Civ. Mech. Eng. 9, 47–59 (2009).
- 22 Y.A. Geldiev, Kh.Kh. Turaev, I.A. Umbarov, and Kh.E. Eshmurodov, Int. J. Eng. Trends Technol. 70, 447-452 (2022).
- 23 Kh.Kh. Turaev, Sh. Gafforova, A.T. Dzhalilov, E. Sottikulov, and S. Soatov, Int. J. Eng. Trends Technol. 70, 99-105 (2022).
- 24 Kh.Kh. Turaev, Kh.N. Eshankulov, I.A. Umbarov, Sh.A. Kasimov, A.K. Nomozov, and D.A. Nabiev, Int. J. Eng. Trends Technol. 71, 248-255 (2023).
- 25 A.K. Nomozov, Kh. Beknazarov, S. Khodjamkulov, Z. Misirov, and S. Yuldashova, Baghdad Sci. J. 22, (2024).

Article history:

Received 22 August 2024

Accepted 8 September 2024

Мақала тарихи:

Түсті – 22.08.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Information about authors:

1. **N.D. Amanova** (corresponding author) – PhD, associate professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. email: amanova0176@gmail.com

2. **Kh.Kh. Turaev** – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. email: hhturayev@rambler.ru

3. **A.T. Djalilov** – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Director of Tashkent Research Institute of Chemical Technology. Tashkent, Uzbekistan. email: gup_tniixt@mail.ru

4. **A.K. Nomozov** – PhD associate professor, Head Department of Chemical Engineering, Termez State University of Engineering and Agrotechnologies. Termez, Uzbekistan. email: abornomozov055@gmail.com

5. **E.S. Sottikulov** – Associate professor, Head Department of Chemical Engineering Laboratory of Tashkent Research Institute of Chemical Technology. Tashkent, Uzbekistan. email: gup_tniixt@mail.ru

6. **Y.A. Makhmudova** – Student of the Faculty of Chemistry of the National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan. email: amanova0176@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Н.Д. Аманова** (автор-корреспондент) – PhD, доцент, Термез мемлекеттік университетінің химия факультеті, Термез қ., Өзбекстан. email: amanov0176@gmail.com

2. **Х.Х. Тураев** – химия ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез, Өзбекстан. email: hhturayev@rambler.ru

3. **А.Т. Джалилов** – химия ғыл. докт., профессор, Өзбекстан Республикасы Ғылым академиясының академигі, Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институтының директоры. Ташкент қ., Өзбекстан. email: gup_tniixt@mail.ru

4. **А.К. Номозов** – PhD, доцент, Термез мемлекеттік инженерлік және агротехнологиялар университетінің «Химиялық инженерия» кафедрасының меңгерушісі. Термез қ., Өзбекстан. email: abornomozov055@gmail.com

5. **Е.С. Соттикулов** – доцент, Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институтының «Химиялық инженерия» зертханасы кафедрасының меңгерушісі, доцент. Ташкент қ., Өзбекстан. email: gup_tniixt@mail.ru

6. **Я.А. Махмудова** – Өзбекстан Ұлттық университетінің химия факультетінің студенті. Ташкент қ., Өзбекстан. email: amanova0176@gmail.com

А.М. Аханов¹ , Т.В. Кульсартов^{2,3} , Б.Б. Шакиров¹ , Ж.А. Заурбекова^{2,3*} 

¹Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан

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

³Филиал «Институт атомной энергии» НЯЦ РК, г. Курчатов, Казахстан

*e-mail: zzha@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ В УСЛОВИЯХ ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЫ

Представлены экспериментальные результаты по изучению коррозионной стойкости металлического бериллия (МБ) при термоциклировании в условиях паро-аргонной среды при температурах от 600 до 900°C. Цель исследования состояла в определении кинетических параметров коррозионных процессов и скорости взаимодействия паров воды с поверхностью бериллия. Методология включала циклическое нагревание и охлаждение образцов МБ с последующим измерением потерь массы, визуальную инспекцию поверхности и оценку кинетических параметров. В результате экспериментов установлены энергия активации коррозии $Ea = (130 \pm 6) \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ и предэкспоненциальный множитель $k_0 = (0,23 \pm 0,02) \frac{\text{г}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}$. Продемонстрировано значительное увеличение скорости коррозии при повышении температуры, что связано с разрушением оксидной пленки и развитием поверхности образцов. Полученные результаты имеют практическую значимость для обеспечения надежности и безопасности использования бериллия в условиях высоких температур, особенно в ядерных и термоядерных реакторах. Исследование вносит значительный вклад в понимание коррозионного поведения МБ при термоциклировании, предоставляя ценные экспериментальные данные, необходимые для разработки и эксплуатации современных высокотемпературных бериллиевых композиций. Практическое значение работы заключается в повышении безопасности установок и долговечности материалов, применяемых в ядерной энергетике.

Ключевые слова: металлический бериллий, коррозия, термоциклирование, скорость коррозии, дефект массы, паро-аргонная смесь.

A.M. Akhanov¹, T.V. Kulsartov^{2,3}, B.B. Shakirov¹, Zh.A. Zaurbekova^{2,3}

¹The Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²IETP al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³“Institute of Atomic Energy”, Branch of NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

*e-mail: zzha@physics.kz

Study of corrosion resistance of metal beryllium during thermocycling in vapour-argon conditions

Experimental results are presented to study the corrosion resistance of metal beryllium (MB) during thermocycling in a steam-argon environment at temperatures from 600 to 900°C. The aim of the study was to determine the kinetic parameters of corrosion processes and the rate of interaction of water vapour with the beryllium surface. The methodology involved cyclic heating and cooling of MB samples followed by mass loss measurements, visual inspection of the surface and estimation of kinetic parameters. As a result of experiments, the corrosion activation energy $Ea = (130 \pm 6) \frac{\text{J}}{\text{mol}}$ and pre-exponential factor $k_0 = (0,23 \pm 0,02) \frac{\text{g}}{\text{s} \cdot \text{cm}^2}$ were established. A significant increase in the corrosion rate with increasing temperature was demonstrated, which was attributed to the destruction of the oxide film and surface development of the samples. The obtained results have practical significance for ensuring the reliability and safety of beryllium use at high temperatures, especially in fusion and fission reactors. The study makes a significant contribution to the understanding of the corrosion behavior of MB during thermal cycling, providing valuable experimental data required for the design and operation of advanced high-temperature beryllium composites. The practical

significance of the work is to increase the safety of installations and the durability of materials used in nuclear energy.

Key words: metal beryllium, corrosion, thermocycling, corrosion rate, mass defect, vapour-argon mixture.

А.М. Аханов¹, Т.В. Кульсартов^{2,3}, Б.Б. Шакиров¹, Ж.А. Заурбекова^{2,3*}

¹Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан

²ЭТФЭИ Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

³ҚР ҰАО «Атом энергиясы институты» филиалы, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: zzha@physics.kz

Бу-аргон ортасында металл бериллийдің коррозияға төзімділігін термоциклдеу кезінде зерттеу

600-ден 900С-қа дейінгі температурада бу-аргон ортасы жағдайында термоциклдеу кезінде металл бериллийдің (МБ) коррозияға төзімділігін зерттеу бойынша эксперименттік нәтижелер ұсынылған. Зерттеудің мақсаты коррозиялық процестердің кинетикалық параметрлерін және су буының бериллий бетімен әрекеттесу жылдамдығын анықтау болды. Әдістемеге МБ үлгілерін циклдік қыздыру және салқындату, содан кейін массаның жоғалуын өлшеу, бетті визуалды тексеру және кинетикалық параметрлерді бағалау кірді. Тәжірибе нәтижесінде коррозияның белсендіру энергиясы $Ea = (130 \pm 6) \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ және экспоненциал алды фактор $k_0 = (0,23 \pm 0,02) \frac{\text{г}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}$ анықталды. Температураның жоғарылауымен коррозия жылдамдығының едәуір артуы көрсетілді, бұл оксидті пленканың бұзылуымен және үлгілердің беткі қабатының өсуімен байланысты. Алынған нәтижелердің бериллийді жоғары температурада, әсіресе ядролық және термоядролық реакторларда пайдаланудың сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз ету үшін практикалық маңызы бар. Зерттеу заманауи жоғары температуралы бериллий композицияларын әзірлеу және пайдалану үшін қажетті құнды эксперименттік деректерді ұсына отырып, термоциклді МБ коррозиялық әрекетін түсінуге айтарлықтай үлес қосады. Жұмыстың практикалық маңыздылығы қондырғылардың қауіпсіздігін және атом энергетикасында қолданылатын материалдардың беріктігін арттыру болып табылады.

Түйін сөздер: металл бериллий, коррозия, термоциклдеу, коррозия жылдамдығы, масса ақауы, бу-аргон қоспасы.

Введение

Металлический бериллий (МБ) используется в широком спектре ядерных применений, таких как замедлитель, отражатель и оболочка топлива в ядерных реакторах, благодаря своему низкому сечению захвата нейтронов и высокому потенциалу упругого рассеяния нейтронов [1-3]. Кроме того, он также рассматривается в качестве перспективного материала для будущих термоядерных реакторов. Бериллий рассматривается в качестве компонента первой стенки, а также в качестве нейтронного размножителя тритиевого модуля в бланкете термоядерного реактора [4,5]. Например, в концепции засыпного, водоохлаждаемого тритиевого модуля (Water Cooled Pebbled Bed), пзбблы МБ смешиваются с пзбблами метатитаната лития (Li_2TiO_3), что обеспечивает коэффициент воспроизводства трития больше единицы [4,5]. Бериллий должен выдерживать жесткие условия эксплуатации в течение длительного времени без существенных

изменений теплофизических и механических свойств. Однако, несмотря на свои положительные стороны, бериллий подвержен коррозии при высоких температурах, что может ограничить его применение в таких экстремальных условиях [6-10].

Например, в работе [11] представлены результаты исследования влияния высокотемпературной коррозии (600-800°C) в жидком литии на механические свойства бериллия. Результаты исследований показали, что потеря веса бериллия возрастает с повышением температуры и длительности воздействия жидкого лития. Также было обнаружено, что современные марки бериллия обладают более высокой коррозионной стойкостью в жидком литии по сравнению с более старыми марками, что проявляется в минимальных коррозионных повреждениях и в меньшем ухудшении механических свойств.

Целью данного исследования является изучение коррозионной стойкости МБ при термоциклировании в присутствии паро-

аргонной смеси. Эксперименты проводились при различных температурах от 600°C до 900°C, что позволяет получить полное представление о поведении материала в широком диапазоне высоких температур. В процессе экспериментов образцы подвергались циклическому нагреву и охлаждению в паро-аргонной среде при постоянном потоке смеси. Полученные результаты включают измерения потерь массы образцов, визуальную инспекцию поверхности образцов и оценку кинетических параметров коррозионных процессов.

Новизна данного исследования заключается в комплексном подходе к изучению коррозионного поведения МБ при термоциклировании. Важно отметить, что большинство исследований были сосредоточены на статических условиях окисления, в то время как динамические условия термоциклирования остаются малоизученными. Актуальность работы обусловлена потребностью в экспериментальных данных характеризующих кандидатные материалы термоядерных реакторов, где коррозионная стойкость материалов играет критическую роль в обеспечении безопасности и долговечности установок.

Материалы и методы

Исследуемые образцы

В качестве исследуемых образцов были выбраны пэбблы МБ (см. рис. 1) диаметром $(1 \pm 0,2)$ мм. Содержание бериллия не менее 99% (масс.). Основные параметры образцов МБ приведены в таблице 1.

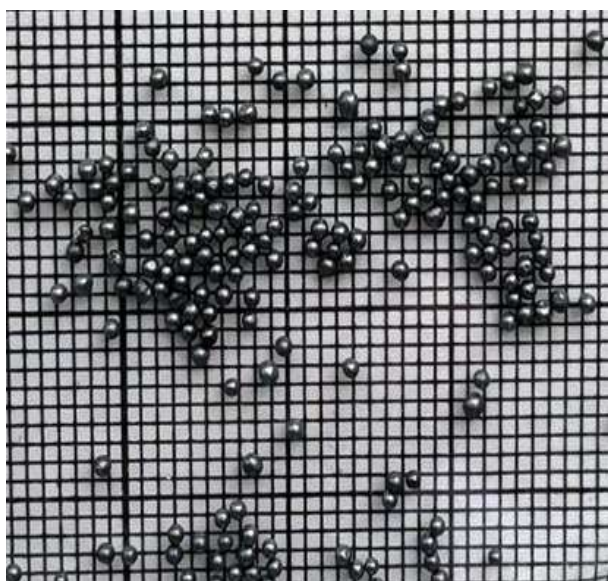


Рисунок 1 – Внешний вид образцов МБ

Таблица 1 – Основные параметры образцов

Параметр	Значение
Исходная масса, г	0,2503
Плотность, г/см ³	1,85
Количество, шт.	242
Общая площадь поверхности, см ²	7,6
Общий объем образцов, см ³	0,13

Описание установки

Разработана вне-реакторная установка для проведения экспериментов по высокотемпературной коррозии [12]. Установка состоит из высоковакуумной горизонтальной трубчатой печи (MTF-T1400-D60), обеспечивающей проведения коррозионных исследований на максимальных температурах до 1300°C при атмосферном давлении. Скорость нагрева варьируется от 1 до 30°C/мин. Система откачки газов установки состоит из откачного поста Agilent TPS-Flexu 304 FS, который в свою очередь состоит из сухого спирального насоса IDP-7 (производительностью 7 м³/ч) и турбомолекулярного насоса TwisTorr 304 (производительностью 250 л/с по азоту). Также, установка снабжена анализатором остаточных газов RGA-100 для контроля газовой компоненты в зоне нагрева образцов. На рисунке 2 приведена принципиальная схема созданной установки для проведения экспериментов по высокотемпературной коррозии.

Измерение массы образцов до и после нагрева осуществлялось с помощью аналитических весов ViBRA HT-224RCE. Диапазон измерения массы составляет от 0.01 г до 220 г. Точность измерения составляет 0.0001 г.

Процедура экспериментов

Процедура коррозионных экспериментов включала следующие этапы:

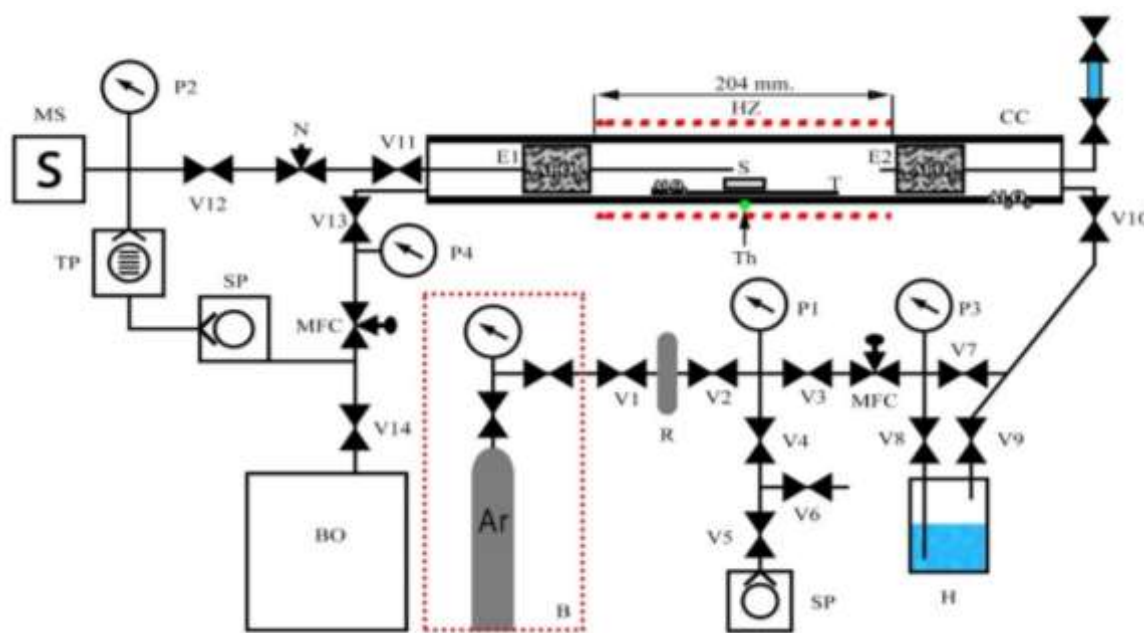
1. Фиксация исходного внешнего вида образцов (фотографирование).
2. Измерение начальной массы образцов.
3. Размещение образцов в тигле в зоне нагрева печи.
4. Организация постоянного потока аргона на уровне 0,1 л/мин с помощью регулятора расхода газа.
5. Линейный нагрев образцов со скоростью 10°C/мин до целевой температуры (600°C, 700°C, 750°C, 800°C, 850°C, 900°C).
6. Подача потока пара аргонной газовой смеси с влажностью 90% на уровне 0,1 л/мин

(расчетное содержание водяного пара в аргоне при такой влажности составляет около 1725 ppm) по достижению очередной целевой температуры. Поддержание таких условий на протяжении 2-3 часов (эффективное время эксперимента).

7. Охлаждение образцов при естественных условиях при постоянной продувке чистым аргонem с расходом 0,1 л/мин.

8. Инспекция внешнего вида образцов и взвешивание.

Этап 5 подразумевает проведение термоциклов на каждой целевой температуре, с последующим взвешиванием и фотофиксацией образцов после каждого цикла. На рисунке 3 представлена типичная диаграмма одного цикла эксперимента, иллюстрирующая временную зависимость изменения температуры образца при продувке рабочим газом для целевой температуры 600°C.



СС – коррозионная камера, Т – тигель, Е – экраны, Th – термопара, HZ – зона нагрева печи, В – баллон аргона с редуктором, R – ресивер, N – натекаль, MFC – регулятор расхода газа, Н – увлажнитель, SP – спиральный насос, BO – бак отстойник, V – вакуумные вентили

Рисунок 2 – Схема установки по высокотемпературной коррозии [14]

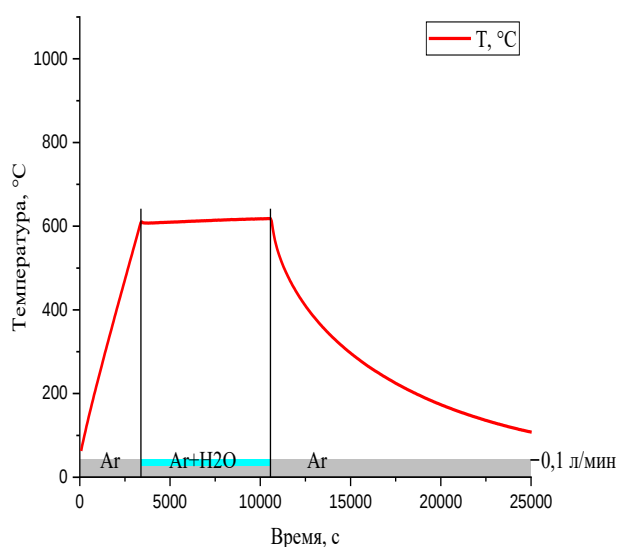


Рисунок 3 – Временная зависимость изменения температуры образца при продувке рабочим газом для целевой температуры 600°C

Результаты и обсуждение

По результатам проведенных коррозионных экспериментов с МБ при термоциклировании в паро-аргонной среде были зафиксированы изменения массы образцов после каждого термоцикла (см. таб. 2), а также визуальные изменения поверхности (см. рис. 4). Полученные данные позволяют оценить кинетические параметры коррозионных процессов и выявить зависимости скорости коррозии от температуры.

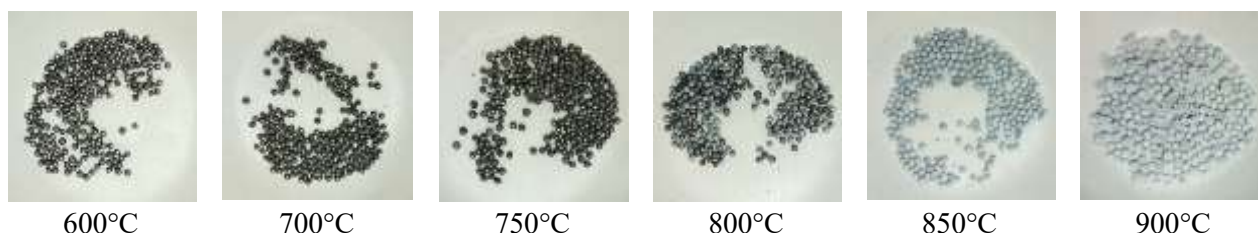
Дельта массы и дефект массы определялись следующим образом. Дельта массы (или изменение массы) образца — это разница между начальной массой образца и его массой после проведения эксперимента. Дельта массы вычислялась по формуле (1).

$$\Delta m = m_{\text{конечная}} - m_{\text{начальная}}, \quad (1)$$

где Δm – дельта массы, $m_{\text{конечная}}$ – масса образца после эксперимента, $m_{\text{начальная}}$ – масса образца перед экспериментом.

Таблица 2 – Сводная таблица результатов экспериментов для каждого цикла

Температура, °C	600	700	750	800	850	900
Эффективное время, ч	2:00	2:00	3:00	3:00	3:00	3:00
Масса МБ, г	0,2503	0,2505	0,2508	0,2518	0,2600	0,3499
Дельта массы МБ, г	0	0,0002	0,0003	0,001	0,082	0,899
Дефект массы МБ, %	0,00	0,08	0,12	0,40	3,28	35,91

**Рисунок 4** – Внешний вид образцов после каждого термоцикла

Дефект массы – это отношение дельты массы образца к исходной массе, которая была в самом начале. Дефект массы вычислялся по формуле (2).

$$Dm = \frac{\Delta m}{m_{\text{исходный}}}, \quad (2)$$

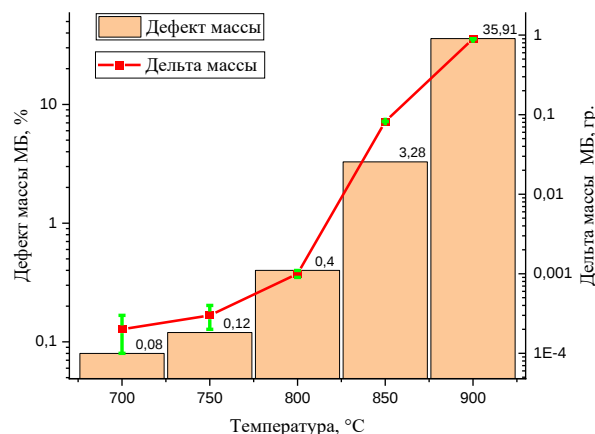
где D_m – дефект массы, Δm – измеренная дельта массы, $m_{\text{исходный}}$ – исходная масса образца.

Из проведенного эксперимента видно (см. рис. 5), что при температурах до 750°C не наблюдается активная химическая реакция воды с образцами. Это подтверждается малыми изменениями массы и видимых изменений внешнего вида образцов после нагревания и охлаждения. Однако при температурах 800°C и выше начинается активная химическая реакция, сопровождающаяся изменениями массы и видимыми изменениями поверхности образцов (см. рис. 4). Эти данные указывают на значительные вариации скорости реакции МБ с водяным паром в зависимости от температуры. Следует отметить, что оксидная пленка, образующаяся на поверхности образцов, выполняет роль диффузионного барьера подавляя химическую активность металла при более низких температурах.

Для оценки скорости взаимодействия паров воды с поверхностью образцов была применена Аррениусовская зависимость. Данное уравнение связывает температурную зависимость скорости реакции с энергией активации:

$$k = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right), \quad (3)$$

где k – константа скорости реакции, k_0 – преэкспоненциальный множитель, Ea – энергия активации реакции, R – универсальная газовая постоянная, T – температура.

**Рисунок 5** – Сводная диаграмма изменения массы образца

Поскольку мы измеряем изменение массы образца от времени, мы можем использовать это для оценки константы скорости реакции k (см. таб. 3) используя следующее уравнение:

$$\frac{dm}{dt} = k \cdot A, \quad (4)$$

где dm/dt – скорость изменения массы, k – константа скорости коррозии, A – площадь поверхности образца. Затем, используя данные о

скорости коррозии при разных температурах, мы можем оценить энергию активации E_a и преэкспоненциальный множитель k_0 (см. рис. 6).

Таблица 3 – Результаты оценки константы скорости реакций МБ с парами воды

Температуры, °C	700	750	800	850	900
Константа скорости реакции, г/с·см ²	3,65E-09	3,65E-09	1,22E-08	9,99E-07	1,10E-05

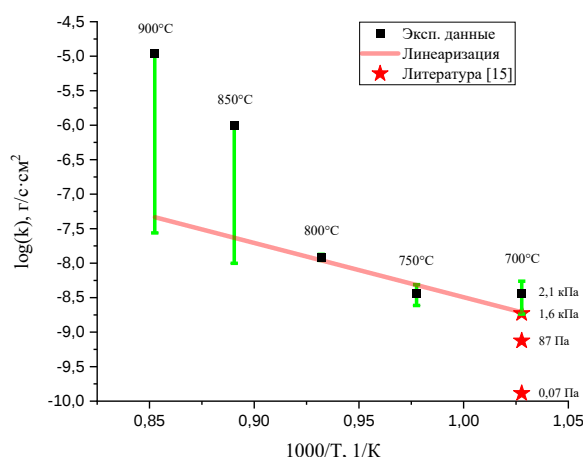


Рисунок 6 – Аррениусовская зависимость константы скорости взаимодействия паров воды с образцами

При оценке параметров Аррениусовской зависимости были учтены погрешности измерения массы (см. рис. 5) и изменения площади поверхности образца (см. рис. 4). Следовательно, полученные экспериментальные данные в диапазоне температур от 700 до 900 °C будут описываться следующим уравнением:

$$k \left[\frac{\text{г}}{\text{с} \cdot \text{см}^2} \right] = 0,23 \cdot \exp \left(- \frac{130 [\text{Дж/моль}]}{RT} \right). \quad (5)$$

Мы сравнили константы скорости реакции (см. рис. 6), полученные в нашем исследовании, с результатами других авторов [13]. Скорость окисления бериллия в водяном паре и в смесях газов с водяным паром значительно зависит от давления, в отличие от реакций в сухих газах (таких как O₂, CO₂ и другие). Что подтверждают данные, приведенные в [13, стр. 43], демонстрируя хорошее согласование с нашими результатами для температуры 700°C.

Таким образом, скорость окисления бериллия определяется не только температурой и концентрацией окислителя, но и рядом других факторов. На неё влияют свойства оксидной пленки, которая формируется на поверхности бериллия и действует как диффузионный барьер,

подавляющий его химическую активность. Кроме того, важную роль играют условия окружающей среды, включая влажность, давление, скорость потока газа. Эти параметры необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных и сравнении их с результатами других исследований.

Заключение

По результатам коррозионных экспериментов с МБ при термоциклировании в паро-аргонной среде при температурах 600°C, 700°C, 750°C, 800°C, 850°C и 900°C были установлены скорости взаимодействия воды с поверхностью бериллия. Сравнение наших данных с результатами других авторов подтвердило, что различия в методиках проведения экспериментов и условиях окружающей среды, в частности давление паров воды, могут существенно влиять на скорость окисления.

Оценены кинетические параметры коррозионных процессов, такие как энергия активации $E_a = (130 \pm 6) \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ и преэкспоненциальный множитель $k_0 = (0,23 \pm 0,02) \frac{\text{г}}{\text{с} \cdot \text{см}^2}$. Полученные результаты демонстрируют существенное увеличение скорости коррозии при повышении температуры, что связано с развитием поверхности образцов и разрушением оксидной пленки. Полученные экспериментальные данные важны для обеспечения надежности и безопасности использования бериллия в условиях высоких температур, особенно в контексте применения в термоядерных реакторах. Исследование вносит значительный вклад в понимание коррозионного поведения бериллия при термоциклировании, предоставляя ценные данные для разработки и эксплуатации современных высокотемпературных бериллиевых композиций.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (программа №BR21881930).

Литература

- 1 Naik B.G., and Sivasubramanian N. Mineral Processing and Extractive // Metallurgy Review. – 1994. – Vol.13. – P.243–251.
- 2 Longhurst G.R., Tsuchiya K., Dorn C.H., Folkman S.L., Fronk T.H., Ishihara M., Kawamura H., Tranter T.N., Rohe R., Uchida M., and Vidal E. Managing Beryllium in Nuclear Facility Applications // Nuclear Technology. – 2011. – Vol.176. – P.430–441.
- 3 Kurosaki K., and Yamanaka S. Neutron Reflector Materials (Be, Hydrides)// Comprehensive Nuclear Materials (2nd ed.). – 2020. – Vol.7. – P.382–399.
- 4 Sakamoto Y., Tobita K., Utoh H., Asakura N., Someya Y., Hoshino K., Nakamura M., and Tokunaga S. DEMO Concept Development and Assessment of Relevant Technologies //Proceedings of 25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg. – 2014. – P.FIP/3–4Rb.
- 5 Someya Y., Takase H., Utoh H., Tobita K., Liu C., and Asakura N. Simplification of Blanket System for SlimCS Fusion DEMO Reactor //Fusion Engineering and Design. – 2011. – Vol.86, no.9–11. – P.2269–2272.
- 6 Smolik G., Merrill B., and Wallace R. Implications of Beryllium: Steam Interactions in Fusion Reactors // Journal of Nuclear Materials. – 1992. – Vol.191-194, part A. – P.153–157.
- 7 Anderl R., Scaffidi-Argentina F., Davydov D., Pawelko R., and Smolik G. Steam Chemical Reactivity of Be Pebbles and Be Powder //Journal of Nuclear Materials. – 2000. – Vol.283-287, part 2. – P.1463–1467.
- 8 Nakamura M., Tobita K., Someya Y., Tanigawa H., Gulden W., Sakamoto Y., Araki T., Watanabe K., Matsumiya H., Ishii K., Utoh H., Takase H., Hayashi T., Satou A., Yonomoto T., Federici G., and Okano K. Study of Safety Features and Accident Scenarios in a Fusion DEMO Reactor // Fusion Engineering and Design. – 2014. – Vol.89, no. 9–10. – P.2028–2032.
- 9 Aylmore W., Gregg S.J., and Jepson W.B. The High Temperature Oxidation of Beryllium. Part IV - In Water Vapour and in Moist Oxygen //Journal of Nuclear Materials. – 1961. – Vol.3, no. 2. – P.190–200.
- 10 Federici G., Doerner R.P., Lorenzetto P., and Barabash V. Beryllium as a Plasma-Facing Material for Near-Term Fusion Devices //Comprehensive Nuclear Materials. – 2012. – Vol.4. – P.621–666.
- 11 Kupriyanov I.B., Kudryavtsev V.N., Kurbatova L.A., and Lyublinski I.E. Effect of High Temperature Corrosion in Liquid Lithium on Mechanical Properties of Beryllium //Fusion Engineering and Design. – 2010. – Vol.85, no. 7–9. –P.1702–1706.
- 12 Shaimerdenov A., Askerbekov S., Akhanov A., Kulsartov T., Sairanbayev D., and Udartsev S. Corrosion Studies of Irradiated Titanium Beryllide: Preliminary Results. //Proceedings of RRFM 2024 Conference, Warsaw, Poland. – 2024. – P.426–434.
- 13 Давыдов, Д.А., Холопова О.В., Колбасов Б.Н. Образование и деградация оксидных пленок на бериллии // БАНТ. – 2010. – Вып. 2. – С.39-49.

References

- 1 B.G. Naik and N. Sivasubramanian, Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review 13, 243–251 (1994).
- 2 G.R. Longhurst, K. Tsuchiya, C.H. Dorn, S.L. Folkman, T.H. Fronk, M. Ishihara, H. Kawamura, T.N. Tranter, R. Rohe, M. Uchida, and E. Vidal, Nuclear Technology 176, 430–441 (2011).
- 3 K. Kurosaki and S. Yamanaka, Comprehensive Nuclear Materials (2nd ed.) 7, 382–399 (2020).
- 4 Y. Sakamoto, K. Tobita, H. Utoh, N. Asakura, Y. Someya, K. Hoshino, M. Nakamura, and S. Tokunaga, Proceedings of 25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg, P. FIP/3–4Rb (2014).
- 5 Y. Someya, H. Takase, H. Utoh, K. Tobita, C. Liu, and N. Asakura, Fusion Engineering and Design 86, 2269–2272 (2011).
- 6 G. Smolik, B. Merrill, and R. Wallace, Journal of Nuclear Materials 191-194, part A, 153–157 (1992).
- 7 R. Anderl, F. Scaffidi-Argentina, D. Davydov, R. Pawelko, and G. Smolik, Journal of Nuclear Materials 283-287, part 2, 1463–1467 (2000).
- 8 M. Nakamura, K. Tobita, Y. Someya, H. Tanigawa, W. Gulden, Y. Sakamoto, T. Araki, K. Watanabe, H. Matsumiya, K. Ishii, H. Utoh, H. Takase, T. Hayashi, A. Satou, T. Yonomoto, G. Federici, and K. Okano, Fusion Engineering and Design 89, no. 9–10, 2028–2032 (2014).
- 9 W. Aylmore, S. J. Gregg, and W. B. Jepson, Journal of Nuclear Materials 3, no. 2, 190–200 (1961).
- 10 G. Federici, R. P. Doerner, P. Lorenzetto, and V. Barabash, Comprehensive Nuclear Materials 4, 621–666 (2012).
- 11 I.B. Kupriyanov, V.N. Kudryavtsev, L.A. Kurbatova, and I.E. Lyublinski, Fusion Engineering and Design 85, no. 7–9, 1702–1706 (2010).
- 12 A. Shaimerdenov, S. Askerbekov, A. Akhanov, T. Kulsartov, D. Sairanbayev, and S. Udartsev, Proceedings of RRFM 2024 Conference, Warsaw, Poland, 426–434 (2024).
- 13 D.A. Davydov, O.V. Kholopova, and B.N. Kolbasov, VANT 2, 39–49 (2010). (In Russ.)

История статьи:

Поступила – 27.05.2024

Принята – 17.08.2024

Article history:

Received 27 May 2024

Accepted 17 August 2024

Сведения об авторах:

1. **А.М. Аханов** – Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан, email: askerbekov@inp.kz

2. **Т.В. Кульсартов** – канд. физ.-мат. наук, ВНС Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан, email: tima@physics.kz

3. **Б.Б. Шакиров** – Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан, email: b.shakirov@inp.kz

4. **Ж.А. Заурбекова** (автор-корреспондент) – PhD, Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан, email: zzha@physics.kz

Information about authors:

1. **A.M. Akhanov** – The Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan, email: askerbekov@inp.kz

2. **T.V. Kulsartov** – Cand. Phys. Math. Sci, Leading Researcher, Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, email: tima@physics.kz

3. **B.B. Shakirov** – The Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan, email: b.shakirov@inp.kz

4. **Zh.A. Zaurbekova** (corresponding author) – PhD Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. email: zzha@physics.kz

А.И. Купчишин , М.Н. Ниязов* 

Казахский национальный педагогический университет им. Абая, г.Алматы, Казахстан

*e-mail: marat-90@mail.ru

Исследование зависимости относительного удлинения от механического напряжения пленок поливинилхлорида различной ширины и длины

Экспериментально исследована зависимость относительного удлинения от механического напряжения в образцах поливинилхлорида различной ширины и рабочей длины. Целью исследования являлось изучение зависимости деформации от механического напряжения пленок поливинилхлорида различных размеров (ширины и длины). Научная и практическая значимость работы заключается в том, что данные могут послужить основой для будущих исследований. В качестве исследуемого материала был выбран пленочный поливинилхлорид толщиной 100 мкм. Листы пленки нарезались на полоски шириной 3, 5, 7, 10 мм с помощью специального нарезного устройства с регулируемой шириной и длиной нарезания образцов. Рабочая длина образцов составила: 4, 5, 6, 7, 8 см.

Испытания проводились на специальной разрывной установке РУ-50. Данная установка предназначена для исследования зависимости деформации (относительного удлинения) ϵ от напряжения σ . Обнаружены существенные изменения механических свойств материала в зависимости для различных геометрических параметров. Полученные данные удовлетворительно описываются моделями авторов. Ценность данного исследования заключается в том, что результаты работы, по мнению авторов, послужат стимулом для усовершенствования механических свойств объекта исследования.

Ключевые слова: поливинилхлорид, механические свойства, деформация, относительное удлинение, механическое напряжение, экспоненциальная модель.

A.I. Kupchishin, M.N. Niyazov*

Abay Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: marat-90@mail.ru

Study of the dependence of relative elongation on mechanical stress of polyvinyl chloride films

The dependence of relative elongation on mechanical stress in polyvinyl chloride samples of various widths and working lengths was experimentally studied. The purpose of the study was to study the dependence of deformation on mechanical stress of polyvinyl chloride films of various sizes (width and length). The scientific and practical significance of the work lies in the fact that the data can serve as the basis for future research. Polyvinyl chloride film with a thickness of 100 microns was chosen as the material under study. The film sheets were cut into strips 3, 5, 7, 10 mm wide using a special cutting device with adjustable sample cutting width and length. The working length of the samples was: 4, 5, 6, 7, 8 cm.

The tests were carried out on a special tensile testing machine RU-50. This setup is designed to study the dependence of strain (relative elongation) ϵ on stress σ . Significant changes in the mechanical properties of the material were discovered depending on various geometric parameters. The data obtained are satisfactorily described by the authors' models. The value of this study lies in the fact that the results of the work, according to the authors, will serve as an incentive to improve the mechanical properties of the research object.

Key words: polyvinyl chloride, mechanical properties, deformation, elongation, mechanical stress, exponential model.

А.И. Купчишин, М.Н. Ниязов*

Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: marat-90@mail.ru

Әртүрлі ені мен ұзындықтағы поливинилхлоридті үлгілердегі салыстырмалы созылуының механикалық кернеуден тәуелділігін зерттеу

Әртүрлі ені мен ұзындықтағы поливинилхлоридті үлгілердегі салыстырмалы ұзарудың механикалық кернеуге тәуелділігі эксперименталды түрде зерттелді. Зерттеудің мақсаты әртүрлі өлшемдегі (ені мен ұзындығы) поливинилхлоридті пленкалардың механикалық кернеуіне деформацияның тәуелділігін зерттеу болды. Жұмыстың ғылыми және практикалық маңыздылығы деректердің болашақ зерттеулерге негіз бола алатынында. Зерттелетін материал ретінде қалыңдығы 100 мкм поливинилхлоридті пленка таңдалды. Үлгіні кесу ені мен ұзындығы реттелетін арнайы кесу құрылғысының көмегімен пленка парақтары ені 3, 5, 7, 10 мм жолақтарға кесілді. Үлгілердің жұмыс ұзақтығы: 4, 5, 6, 7, 8 см. Сынақтар РУ-50 арнайы созылу сынау қондырғысында жүргізілді. Бұл қондырғы деформацияның (салыстырмалы ұзару) ε кернеуге σ тәуелділігін зерттеуге арналған. Әртүрлі геометриялық параметрлерге байланысты материалдың механикалық қасиеттерінің елеулі өзгерістері анықталды. Алынған деректер авторлардың үлгілерімен қанағаттанарлық сипатталған. Бұл зерттеудің құндылығы жұмыс нәтижелері, авторлардың пікірінше, зерттеу объектісінің механикалық қасиеттерін жақсартуға ынталандыру ретінде қызмет ететіндігінде.

Түйін сөздер: поливинилхлорид, механикалық қасиеттер, деформация, созылу, механикалық кернеу, экспоненциалды модель.

Введение

Полимеры – это вещества, обладающие большой молекулярной массой и к их числу, относится поливинилхлорид (ПВХ) [1 – 3], который широко используется для идентификации или рекламы клейких полимерных пленок, применяемых, среди прочего, для обертывания транспортных средств, окон и светофорных сигналов. Эти гибкие пленки ПВХ являются обычным продуктом, регулярно приобретаемым правительствами и частными компаниями, и, следовательно, качество и срок службы в условиях наружного применения должны соответствовать минимальным требованиям. В этом смысле пленка ПВХ обладает улучшенной стабильностью размеров и долговечностью [4]. Одним из основных методов получения ПВХ-пленки является каландрирование для получения однородной пленки ПВХ [5]. Однако для сравнения, методом литья можно получить более тонкие образцы ПВХ с меньшей шероховатостью, чем каландрированием. Таким образом, морфологические параметры могут быть использованы для идентификации процесса производства даже в образцах с одинаковой толщиной [6]. В настоящее время традиционные методы анализа этих материалов основаны на механических испытаниях, проводимых в соответствии со стандартами ABNT NBR 15394: 2015 [7] и ASTM G156: 2017 [8, 9], соответственно. Кроме того, размер образца,

необходимый для предлагаемой методологии, составляет всего несколько мкм, что приводит к минимальному повреждению виниловой пленки и трудности проведения механических испытаний [10]. Данный вид пленок широко применяется в различных отраслях жизнедеятельности человека. Поэтому изучение свойств ПВХ является актуальным направлением в исследовательской деятельности механиков твердых тел. В наше время распространённым является использование полимеров промышленности или композитов на их основе, которые все чаще вытесняют традиционные материалы.

Работа посвящена исследованию зависимости относительного удлинения от механического напряжения пленок поливинилхлорида различной ширины и длины.

Материалы и методы

В качестве исследуемого материала был выбран пленочный поливинилхлорид толщиной 100 мкм. Листы пленки нарезались на полоски шириной 3, 5, 7, 10 мм и длиной 4, 5, 6, 7, 8 см с помощью специального нарезного устройства.

Для проведения опытов нами модернизировано оборудование для механических испытаний на растяжение, сжатие, изгиб при нормальных (комнатных) и повышенных температурах. Установка состоит из механического силового блока до 5 тонн (50 кН) с

различными видами крепления образцов, позволяющего проводить испытания в широком диапазоне нагрузок и скоростей, и проводит регистрацию усилий и деформаций в процессе испытаний. Данная установка предназначена для исследования зависимости деформации (относительного удлинения) ε от напряжения σ . Она состоит из следующих частей: датчик силы (встроен в наконечник напряжения), датчик перемещения реостатного типа (для определения значения деформации), устройство для крепления образца и траверсы (правая и левая опоры), температурная камера, инвентар, датчик температуры, соединительные провода и интерфейс, на который выводятся данные. Все это устанавливается на нижней части разрывной машины РУ-50, которая служит как передвижной механизм. Кроме того, испытания на растяжение проводились в соответствии с ASTM-D882 Стандарт на универсальной разрывной машине модель РУ-50, со скоростью хода 0,83 мм/с при частоте переменного тока 30 Гц, которая управляется инвертером СННТ.

В установке использован интерфейс с датчиками движения и силы фирмы Science Cube. Частота сбора данных по деформации составила $2,5 \text{ мм} \cdot \text{с}^{-1}$.

Результаты и обсуждение

Результаты испытаний на растяжение с использованием разрывной машины РУ-50 необлученных образцов ПВХ приведены на рисунках 1–3 в виде графиков зависимости деформации от механического напряжения. Предел прочности необлученного образца по ГОСТу составил 50 – 65 МПа.

Из полученных результатов следует, что с ростом напряжения деформация материала возрастает экспоненциально. [11–13]. При этом наблюдается существенное увеличение относительного удлинения при росте механического напряжения. По графикам, на которых показаны экспериментальные данные видно, что разница в относительном удлинении образцов приблизительно 50 %. Предел прочности достиг значения 65 МПа (рисунок 1).

При сравнении показаний деформации и механических напряжений образцов разной ширины и длины получены значительные отличия в деформационных характеристиках. Образцы ПВХ с шириной 3 мм оказались прочнее на 5 МПа по отношению к пленкам того же вещества шириной 5 и 10 мм. Характер влияния скорости нагрузки на материал замечен при проведении испытаний с изменением частоты

переменного тока, который вращает двигатель установки [13, 14].

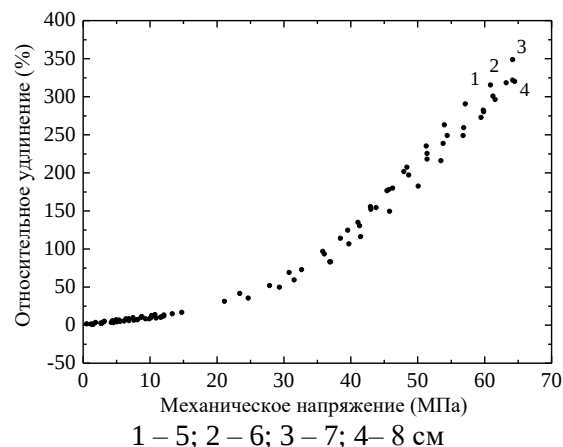


Рисунок 1 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 3 мм и различной длины (экспериментальные данные)

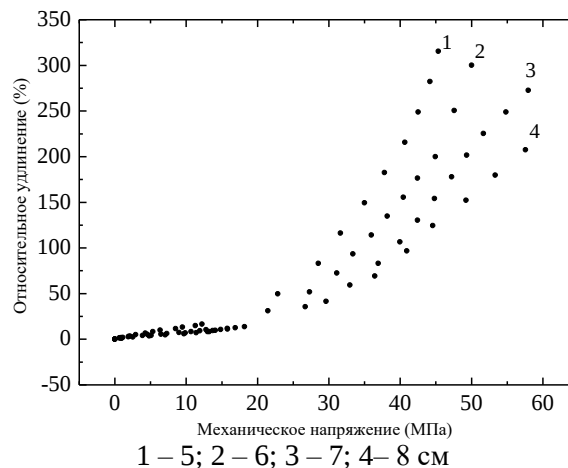


Рисунок 2 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 5 мм и различной длины (экспериментальные данные)

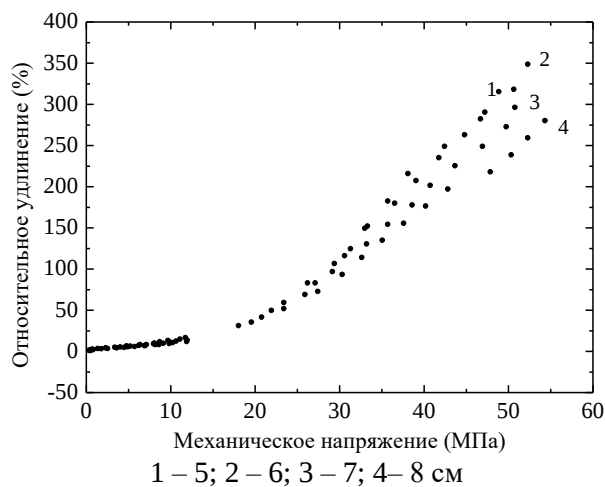


Рисунок 3 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 10 мм и различной длины (экспериментальные данные)

На рисунках 4–6 показаны зависимости относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленок шириной 3, 5 и 10 мм и рабочей длиной 5 и 8 см. На рисунках точками обозначены экспериментальные данные, а линиями расчеты по экспоненциальной модели, которую предложили авторы:

$$\varepsilon = \varepsilon_0(\exp(\sigma/\sigma_0)-1),$$

где ε_0 – это начальное значение относительного удлинения, σ_0 – напряжение, при котором параметр $\log(\varepsilon/\varepsilon_0)+1$ уменьшается в ε раз [14–18].

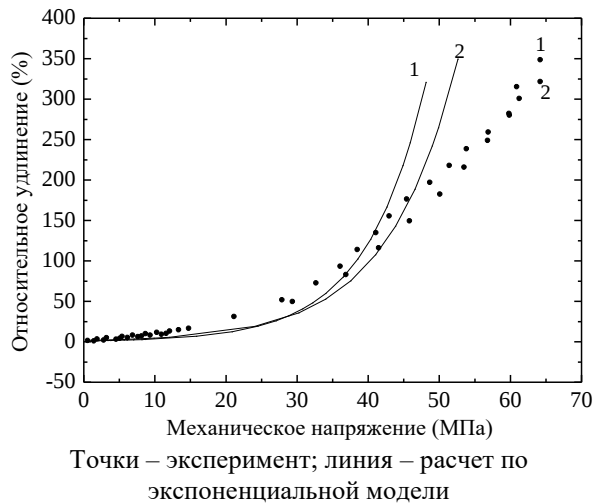


Рисунок 4 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 3 мм и рабочей длиной 50 мм (кривая 1) и 80 мм (кривая 2)

Зависимость $\sigma(\varepsilon)$ не имеет физического смысла, так как механическое напряжение является аргументом, а относительное удлинение – функцией. Поэтому в наших работах представлены графики зависимости деформации от механического напряжения. Из рисунка 5 следует, что существует значительная разница в максимальной деформации образцов длиной 5 и 8 см, и она достигает порядка 100 %.

На рисунках 7 и 8 представлены зависимости деформации от длины и ширины образцов ПВХ. Из рисунков видно, что относительное удлинение убывает по мере увеличения длины образца, хотя абсолютная деформация увеличивается, но незначительно. Уменьшение относительного удлинения образца при увеличении рабочей длины объясняется тем, что рабочая длина существенно влияет на деформационные характеристики полимеров в отличие от металлов.

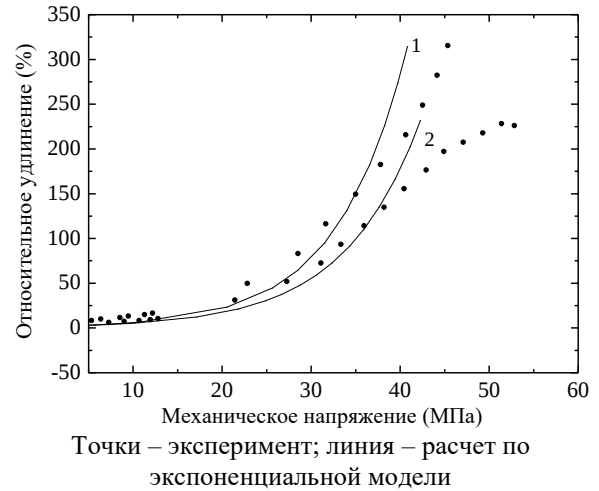


Рисунок 5 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 5 мм и рабочей длиной 50 мм (кривая 1) и 80 мм (кривая 2)

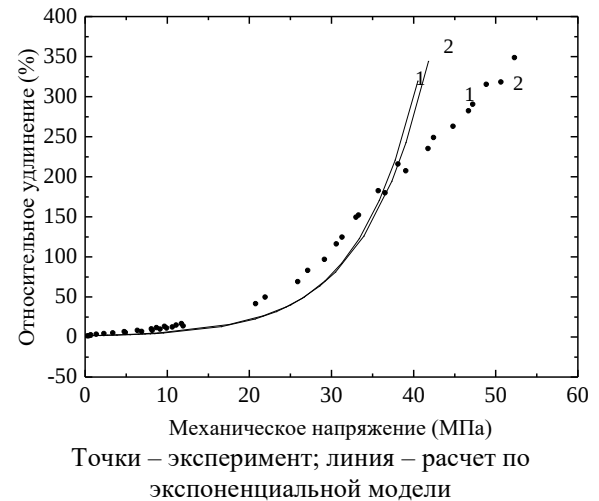


Рисунок 6 – Зависимость относительного удлинения от механического напряжения ПВХ пленки шириной 10 мм и рабочей длиной 50 мм (кривая 1) и 80 мм (кривая 2)

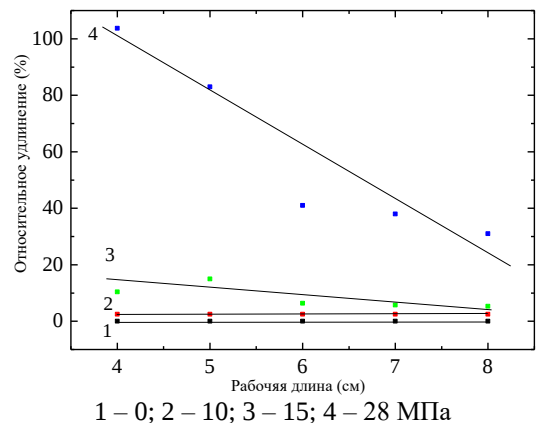


Рисунок 7 – Зависимость относительного удлинения от рабочей длины испытуемых образцов ПВХ пленки шириной 5 мм при различных механических напряжениях

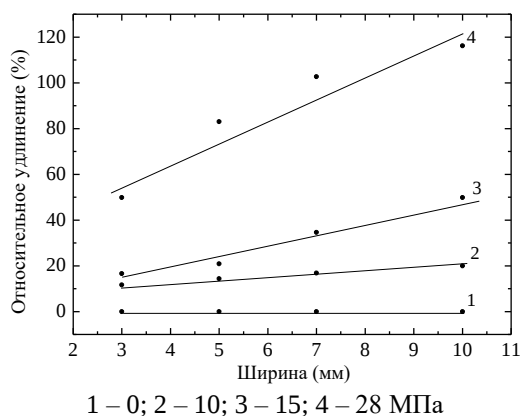


Рисунок 8 – Зависимость относительного удлинения от ширины испытуемых образцов ПВХ пленки рабочей длиной 5 см при различных механических напряжениях

Рассматривая рисунок 8, можно сказать, что относительное удлинение пленки увеличивается с ростом ширины образцов, потому что с возрастанием ширины происходит повышение площади поперечного сечения материала, и это ведет к тому, что количество групп макромолекул, способных выпрямиться и влиять на максимальную деформацию с ростом удлинения – становится больше.

Заключение

1. Проведены испытания на растяжение с использованием разрывной машины РУ-50

необлученных образцов ПВХ-пленки и получены графики зависимости деформации от механического напряжения.

2. Из полученных результатов следует, что с ростом напряжения деформация материала возрастает экспоненциально.

3. При сравнении показаний деформации и механического напряжения образцов разной ширины выявлено, что образцы ПВХ с шириной 3 мм оказались прочнее на 5 МПа по отношению к пленкам того же вещества шириной 5 и 10 мм.

4. Из полученных результатов видно, что присутствует существенная разница в максимальной деформации образцов длиной 5 и 8 см, и она достигает порядка 100 %.

5. Относительное удлинение пленки увеличивается с ростом ширины образцов, потому что при увеличении ширины происходит возрастание площади поперечного сечения материала и это ведет к тому, что групп макромолекул, способных выпрямиться и влиять на максимальную деформацию становится больше.

Благодарность

Работа выполнена в НАО КазНПУ им. Абая по гранту от МОН РК «Исследование влияния электронного и ионного облучений на модифицированные композиты» ИРН AP19677662

Литература

- 1 Peng Z. Peeling behavior of a viscoelastic thin-film on a rigid substrate // *Int. J. Solids Struct.* – 2014. – Vol.51 (25-26). – P.4596-4603.
- 2 Wu H., Li T., Liu B., Chen Ch., Wang Sh., Crittenden J.C. Blended PVC/PVC-g-PEGMA ultrafiltration membranes with enhanced performance and antifouling properties // *Appl. Surf. Sci.* – 2018. – Vol.455. – P.987-996.
- 3 Calcagno B.O., Hart K.R., Crone W.C. Calendaring of metal/polymer composites: An analytical formulation // *Mechan. Mater.* – 2016. – Vol.93. – P.257-272.
- 4 Gavim A.E.X., et al. Water-suspended MoO₃ nanoparticles prepared by LASIS and fast processing as thin film by ultrasonic spray deposition *Solar Energy Mater.* // *Solar Cells.* – 2019. – Vol.200. – Art.No.109986.
- 5 Ali M. Influence of plasticizer content on the transition of electromechanical behavior of PVC gel actuator // *Langmuir.* – 2011. – Vol.27 (12). – P.7902-7908.
- 6 Seguchi T., Tamura K., Ohshima T., Shimada A., Kudoh H. et. al. Degradation mechanisms of cable insulation materials during radiation-thermal ageing in radiation environment // *Radiation Physics and Chemistry.* – 2011. – Vol.80. – Issue 2. – P 268 – 273.
- 7 Clough R.L. High-energy radiation and polymers: A review of commercial processes and emerging applications // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* – 2001. – Vol.185. – Issues 1-4. – P.8.
- 8 Sueo Machi Prospects for the application of radiation processing and the activities of the IAEA // *Radiation Physics and Chemistry.* – 1998. – Vol.52. – Iss.1-6. – P 591-597.
- 9 Berejka Anthony J. Irradiation processing in the '90's: Energy savings and environmental benefits // *Radiation Physics and Chemistry.* – 1995. – Vol.46. – Issues 4-6. – Part 1. P.429-437.
- 10 Clough R.L., Shalaby S.W. (Eds.) *Irradiation of Polymers: Fundamentals and Technological Applications.* – American Chemical Society books, Washington, DC, 1996.
- 11 Komarov F.F., Kupchishin A.I., Pivovarov S.P., Tlebaev K.B., Kusainov A.T., Rukhin A.B., Pozdeeva T.V. Influence of γ -irradiation on the conformation of free radicals in polytetrafluoroethylene // *J. of Engineering Physics and Thermophysics.* – 2012. – Vol. 85. – No.2. – P.455 – 458.

12 Kupchishin A.I., Taipova B.G., Kupchishin A.A., Voronova N.A., Kirdyashkin V.I., Fursa T.V. Catastrophic models of materials destruction// IOP Conf. Series: Material Science and Engineering. – 2016. – Vol.110. – Art.No. 012037.

13 Kupchishin A.I., Muradov A.D., Taipova B.G., Voronova N.A. Catastrophic model of destruction and experimental research o polymer materials irradiated by electrons // Eurasian Physical Tehnical Journal. – 2009. – Vol. 6 № 1(11). – P. 16–22.

14 Kupchishin A.I., Tlebaev K.B. X-ray structural studies of polytetrafluoroethylene // Eurasian Physical Technical Journal. – 2018. – Vol.15. – No.1 (29). – P.29–33.

15 Kupchishin A.I., Taipova B.G., Voronova N.A., Kupchishin A.A. and Shakhanov K. Dose dependences of the mechanical strength of polymer materials // Key Engineering Materials. – 2018. – Vol.781. – P.25–29.

16 Kupchishin A.I., Taipova B.G., Lisitsyn V.M., Niyazov M.N. Study of the influence of the electron irradiation dose on the deformation of mylar films taking into account the processes of destruction and crosslinking. – 2021. – Vol.5. – No.1 (29). – P.129–136.

17 Tlebaev K.B., Kupchishin A.A., Kupchishin A.I. Accumulation of free radicals in irradiated Polytetrafluoroethylene and study of its properties. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol.81. – Art.No.012005.

18 Kupchishin A.I., Taipova B.G., Kupchishin A.A., Voronova N.A., Kirdyashkin V.I., Fursa T.V. Catastrophic models of materials destruction // IOP Conf. Series: Material Science and Engineering. – 2016. – Vol.110. – Art.No. 012037.

References

- 1 Z. Peng, Int. J. Solids Struct. 51, 4596–4603 (2014).
- 2 H. Wu, T. Li, B. Liu, Ch. Chen, Sh. Wang, and J. C. Crittenden, Appl. Surf. Sci. 455, 987–996 (2018).
- 3 B.O. Calcagno, K. R. Hart, and W. C. Crone, Mechan. Mater. 93, 257–272 (2016).
- 4 A.E.X. Gavim et al., Solar Energy Mater. Solar Cells 200, 109986 (2019).
- 5 M. Ali, Langmuir 27, 7902–7908 (2011).
- 6 T. Seguchi, K. Tamura, T. Ohshima, A. Shimada, H. Kudoh et al., Radiation Physics and Chemistry 80, 268–273 (2011).
- 7 R. L. Clough, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 185, 8 (2001).
- 8 S. Machi, Radiation Physics and Chemistry 52, 591–597 (1998).
- 9 A.J. Berejka, Radiation Physics and Chemistry 46, 429–437 (1995).
- 10 R.L. Clough and S.W. Shalaby (Eds.), Irradiation of Polymers: Fundamentals and Technological Applications, (American Chemical Society, Washington, DC, 1996).
- 11 F.F. Komarov, A.I. Kupchishin, S.P. Pivovarov, K.B. Tlebaev, A.T. Kusainov, A.B. Rukhin, and T.V. Pozdeeva, J. Eng. Phys. Thermophys. 85, 455–458 (2012).
- 12 A.I. Kupchishin, B.G. Taipova, A.A. Kupchishin, N.A. Voronova, V.I. Kirdyashkin, and T.V. Fursa, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 110, 012037 (2016).
- 13 A.I. Kupchishin, A.D. Muradov, B.G. Taipova, and N.A. Voronova, Eurasian Phys. Tech. J. 6, 16–22 (2009).
- 14 A.I. Kupchishin and K.B. Tlebaev, Eurasian Phys. Tech. J. 15, 29–33 (2018).
- 15 A.I. Kupchishin, B.G. Taipova, N.A. Voronova, A.A. Kupchishin, and K. Shakhanov, Key Eng. Mater. 781, 25–29 (2018).
- 16 A.I. Kupchishin, B.G. Taipova, V.M. Lisitsyn, and M.N. Niyazov, Mater. Sci. Eng. 5, 129–136 (2021).
- 17 K.B. Tlebaev, A.A. Kupchishin, and A.I. Kupchishin, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 81, 012005 (2015).
- 18 A.I. Kupchishin, B.G. Taipova, et al, IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 110, 012037 (2016).

История статьи:

Получена 12 июня 2024

Поступила в доработанном виде 28 Июня 2024

Принята 17 августа 2024

Article history:

Received 12 June 2024

Received in revised form 28 June 2024

Accepted 17 August 2024

Сведения об авторах:

1. **Купчишин Анатолий Иванович** – докт.физ.-мат.наук, проф., КазНПУ им.Абая, г.Алматы, Казахстан. e-mail: ankupchishin@mail.ru

2. **Ниязов Марат Нурпулатович** (автор-корреспондент) – магистр, КазНПУ им.Абая, г.Алматы, Казахстан. e-mail: marat-90@mail.ru

Information about authors:

1. **Anatoliy Kupchishin** – Dr. Phys. Math Sci, Prof., Abay Kazakh National Pedagogical University Almaty Kazakhstan. e-mail: ankupchishin@mail.ru

2. **Marat Niyazov** (corresponding author) – master, Abay Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: marat-90@mail.ru

А.И. Мухамедова^{1*} , А.Д. Погребняк² , Г.К. Уазырханова¹ , Б.Қ. Рахадиллов¹ 

¹Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Өскемен қ., Қазақстан

²Сумы мемлекеттік университеті, Суми қ., Украина

*e-mail: aminamukhamedova17@gmail.com

КӨП ҚАБАТТЫ ҚАПТАМАЛАРДЫҢ АДГЕЗИЯЛЫҚ ЖӘНЕ ТРИБОЛОГИЯЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫНЫҢ ӨЗГЕРУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ (TiZrNbYAl)N

Жұмыста көп қабатты (TiZrNbYAl)N қаптамалардың адгезиялық және трибологиялық сипаттамалары зерттелді. Бұл жұмыстың негізгі мақсаты 12X18H9T болаттан жасалған төсенішке шөгілген (TiZrNbYAl)N қаптаманың адгезиялық және трибологиялық сипаттамаларына тигізетін қабаттар санының әсерін бағалау болып табылады.

Оже-электронды спектроскопия әдісімен элементтердің қаптама тереңдігі бойынша таралуын зерттеу химиялық элементтердің қаптама қимасы бойынша біркелкі бөлінетінін және элементтердің таралу қисықтарының үшкір төбесі бар екенін көрсетті. Қаптамалар тарапынан 2 мкм-ден астам тереңдікте қаптамалар құрамында темірдің болуы электрлік ығысуының ұлғаюы қаптаманың жабысу беріктігін сынау нәтижелерімен расталатын болат төсемнің сенімді адгезиясын қамтамасыз ететіндігін көрсетеді. Әрбір жеке қабаттың қолдану уақытының ұлғаюы $U_{pp} = -100$ В және $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr болғанда элементтердің қаптамаларының қалыңдығы бойынша біркелкі таралмауына және салыстырмалы түрде кең өтпелі қаптама-төсеніш қабатының пайда болуына әкеледі.

Қаптамалардың адгезиялық беріктігін сынау көрсеткендей, олардың барлығы сызылған кезде желінеді, бірақ қабыршақтанбайды, яғни қаптама материалында пластикалық деформация және қажу жарықтарының пайда болуына байланысты когезиялық механизм арқылы бұзылады. Әр түрлі қамту режимдері жүктемеге байланысты акустикалық эмиссияның (АЭ) әр түрлі мәндеріне сәйкес келеді. $GP = -100$ В; $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr кезінде алынған қаптамалар сынақтың максималды жүктемесі кезінде жоғары адгезия беріктігін және сызаттар аймағында белгілі бір дәрежеде қабыршақтанғаны анықталды.

Трибологиялық зерттеулердің нәтижелері (TiZrNbYAl)N қаптамалардың орташа мәні $\mu = 0,85-0,95$ болатын үйкеліс коэффициенті жоғары екенін көрсетті. Мұндай мәндерді қаптамалардың когезиялық бұзылуына байланысты тозу іздерінің жоғары кедір-бұдырлығымен түсіндіруге болады.

Түйін сөздер: көп қабатты қаптама, (TiZrNbYAl)N, үйкеліс коэффициенті, адгезиялық беріктік, тозу көлемі.

A. Mukhamedova^{1*}, A. Pogrebnyak², G. Uazyrkhanova¹, B. Rakhadilov¹

¹D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

²Sumy State University, Sumi, Ukraine

*e-mail: aminamukhamedova17@gmail.com

Features of changes in adhesive and tribological characteristics of multilayer coatings (TiZrNbYAl)N

In this work, the adhesive and tribological characteristics of (TiZrNbYAl)N multilayer coatings were studied. The main goal of this work is to assess the influence of the number of layers on the adhesive and tribological characteristics of the (TiZrNbYAl)N coating deposited on 12X18H9T steel substrates. A study of the distribution of elements over the depth of coatings using Auger electron spectroscopy showed that chemical elements are distributed quite evenly over the cross section of the coatings and the element distribution curves have sharp peaks. The presence of iron in the coating composition at a depth of more than 2 microns on the coating side indicates that an increase in electrical displacement ensures reliable adhesion of the coating to the steel substrate, which is confirmed by the results of testing the coatings for adhesive strength. An increase in the application time of each individual layer at $U_{pp} = -100$ V and $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr leads to an uneven

distribution of elements throughout the thickness of the coatings and the formation of a relatively wide transition coating-substrate layer.

Tests of the adhesive strength of coatings have shown that all coatings wear out when scratched, but do not peel off, i.e., they are destroyed by a cohesive mechanism associated with plastic deformation and the formation of fatigue cracks in the coating material. Different coating modes correspond to different values of acoustic emission depending on the load. It was determined that the coatings obtained at $U_{pp} = -100$ V; $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr showed high adhesive strength and some degree of delamination in the scratch area at the maximum test load. The results of tribological studies showed that (TiZrNbYAl)N coatings have a high friction coefficient, the average value of which is $\mu = 0.85-0.95$. Such values can be explained by the high roughness of wear tracks due to cohesive destruction of coatings.

Key words: multilayer coating, (TiZrNbYAl)N, friction coefficient, adhesive strength, wear volume.

А.И. Мухамедова^{1*}, А.Д. Погребняк², Г.К. Уазырханова¹, Б.К. Рахадиллов¹

¹Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

²Сумский государственный университет, г.Сумы, Казахстан

*e-mail: aminamukhamedova17@gmail.com

Особенности изменения адгезионных и трибологических характеристик многослойных покрытий (TiZrNbYAl)N

В работе были изучены адгезионные и трибологические характеристики многослойных покрытий (TiZrNbYAl)N. Основной целью данной работы является оценка влияния количества слоев на адгезионные и трибологические характеристики покрытия (TiZrNbYAl)N, осажденные на подложки из стали 12X18H9T.

Исследование распределения элементов по глубине покрытий методом оже-электронной спектроскопии показали, что химические элементы распределяются довольно равномерно по сечению покрытий и кривые распределения элементов имеют острые пики. Наличие железа в составе покрытий на глубине более 2 мкм со стороны покрытий свидетельствует о том, что увеличение электрического смещения обеспечивает надежное сцепление покрытия со стальной подложкой, которое подтверждается результатами испытания покрытий на адгезионную прочность. Увеличение времени нанесения каждого индивидуального слоя при $U_{nn} = -100$ В и $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr приводит к неравномерному распределению элементов по толщине покрытий и образованию сравнительно широкого переходного слоя покрытие-подложка.

Испытания адгезионной прочности покрытий показали, что все покрытия при царапании истираются, но не отслаиваются, т.е. разрушаются по когезионному механизму, связанному с пластической деформацией и образованием усталостных трещин в материале покрытия. Различные режимы покрытий соответствуют различным значениям акустической эмиссии (АЭ) в зависимости от нагрузки. Определено, что покрытия полученные при $U_{nn} = -100$ В; $P = 4 \times 10^{-3}$ Torr показали высокую адгезионную прочность и некоторую степень расслоения в области царапины при максимальной нагрузке испытания.

Результаты трибологических исследований показали, что (TiZrNbYAl)N покрытия обладают высоким коэффициентом трения, среднее значение которого равно $\mu = 0,85-0,95$. Такие значения могут быть объяснены высокой шероховатостью треков износа за счет когезионного разрушения покрытий.

Ключевые слова: многослойное покрытие, (TiZrNbYAl)N, коэффициент трения, адгезионная прочность, объем износа.

Кіріспе

Қазіргі уақытта бу фазасының физикалық тұндыру (PVD) әдісімен орындалған өтпелі металдардың қатты нитридті қаптамалары өнеркәсіптік өндірісте кеңінен қолданылады. Жақсартылған пайдалану сипаттамалары бар

жаңа материалдарды, сондай-ақ аса қатты қаптамаларды жалату технологияларын алу Қазақстан Республикасының индустриялық-инновациялық дамуы үшін өзекті міндет болып табылады. Материалдардың сапасына қойылатын талаптарды арттыру олардың беткі қабаттарының фазалық құрамы мен құрылымын мақсатты түрде

өзгертудің жаңа әдістерін жасауға ықпал етеді. Өте жоғары балку температурасы мен тозуға төзімділігі бар ниобий Nb, цирконий Zr сияқты металдар титан Ti комбинацияларында нитридті қаптамаларында жиі қолданылады, бірақ олардың потенциалы әлі толық ашылмаған. Мұндай металдардың кешенді қосылысын "жоғары энтропиялық қорытпалардан" табуға болады. Мұндай қорытпалардың басты ерекшелігі - бір фазалы тұрақты және термодинамикалық тұрақты берік қасиеті болып табылады.

Мұндай қаптамалар коррозия мен тозудан айтарлықтай қорғаныс қасиеттерін көрсетті және олардың қаттылығы мен беріктігінің жоғарылауына, сондай-ақ жоғары жылдамдықты болатпен салыстырғанда үйкеліс коэффициентінің төмендеуіне байланысты машинажасау нысандарын пайдалануда маңызды рөл атқарады [1]. Осылайша, жоғары энтропиялық қорытпаларда, бір жағынан, жоғары энтропиялық қорытпа кристалданғаннан кейін де, одан кейінгі термомеханикалық өңдеу кезінде де алмастырудың көпэлементті қатты ерітіндісін қалыптастыру және сақтау мүмкіндігі пайда болады, ал екінші жағынан, қатты күйде қорытпа физика-механикалық сипаттамалардың бірегей комбинацияларына ие болады.

Соңғы уақытта жоғары механикалық және трибологиялық сипаттамаларына байланысты көпқабатты құрылымы бар нитридті қаптамаға көбірек көңіл бөлінуде. Алынған қаптамалардың көпқабатты құрылымы кезектесетін қабаттардың модульдеу кезеңін өзгерту арқылы қабаттардың құрылымдық-фазалық күйіне әсер етуге мүмкіндік береді, сонымен қатар олардың жеке қасиеттерін біріктіруге мүмкіндік береді [2, 3].

Өртүрлі қасиеттері бар екі қабаттың кезектесуі бірегей сипаттамалары бар қаптама жасауға мүмкіндік береді [4-6]. Қосқабатты кезеңнің өзгеруі өз кезегінде қаптамалардың қасиеттерінде маңызды рөл атқаратын тұндырылған материалдардың бөліну шекарасының күйіне әсер етеді [7]. Қосқабатты кезең көпқабатты қаптамалардағы ең маңызды параметрлердің бірі болып табылады, өйткені шекті қаттылық әдетте тар ауқымда (5-15 нм) пайда болады [8]. Дислокацияны қабат шекараларымен бұғаттау, Холл-Петч беріктігі, қабат шекараларындағы деформациялық әсерлер және супер модуль эффектісі сияқты бірнеше түсініктемелер ұсынылды [9]. Қаптаманың жалпы қалыңдығының тұрақты мәнінде қосқабаттың қалыңдығын наноөлшемдерге дейін төмендету дислокацияның кезуіне және микросызаттардың таралуына кедергі болатын қабаттар арасындағы интерфейстер санын көбейтуге мүмкіндік береді

[10, 11]. Қарастырылып отырған тақырып бойынша бұрын жүргізілген зерттеулердің көрсетілген нәтижелері функционалды көпқабатты қаптамаларды кейіннен әзірлеу үшін негіз болып табылады.

Сонымен қатар, өтпелі металл нитридтерінен тұратын көпқабатты қаптамалар қазіргі уақытта көптеген өнеркәсіптік талаптарды қанағаттандыратын пайдалы қасиеттеріне, сондай-ақ олардың ерекше ғылыми маңыздылығына байланысты зерттеушілердің мұқият бақылауында [12-14]. Сондықтан бұрын зерттелмеген көпқабатты қаптамаларды алу және зерттеу (TiZrNbYAl)N үлкен қызығушылық тудырады. Бұл жұмыстың негізгі мақсаты - СА-PVD әдісімен болат төсенішке тұндырылған (TiZrNbYAl)N қаптамаларына олардың механикалық және трибологиялық сипаттамаларына қатысты камера қысымы мен қосқабаттар саны және/немесе қосқабаттар кезеңнің әсерін бағалау (TiZrNbYAl) болып табылады.

Материалдар, жабдықтар және зерттеу әдістері

Төсем ретінде болат 12X18H9T пайдаланылды. Өр түрлі қабаттар санымен көп қабатты қаптамалар (ti Zr/Nb)N 1-кестеде көрсетілген режимдерде алынды.

1-кесте. Arc-PVD әдісімен (TiZr/Nb)N қаптамаларды шөктіру шарттары (ti Zr/Nb)N

Үлгі нің атау ы	Id, A	I _ф , A	U _{пп}	P, Topt	Ескертп е	Уақы ты, сағ.
No.1	100 80	0,5 0,5	100	4·10 ⁻³	536 қабаттан бастап интервал 10	1,5
No.2	100 80	0,5 0,5	100	4·10 ⁻³	270 қабаттан бастап интервал 20	1,5

Үлгінің тереңдігі бойынша компоненттердің таралуын анықтауға бағытталған элементтік құрамды талдау Шхунер-2 оже-электронды спектрометрдің көмегімен жүргізілді.

Қаптамалардың механикалық қасиеттері "НаноСкан-4D Компакт" нано-қаттылық өлшегішінде зерттелді. CSEM Micro Scratch Tester өлшеу қондырғысы "тырнау" әдісімен

қаптамалардың адгезиялық сипаттамасын зерттеу үшін пайдаланылды. Скретч-тестілеу 30 Н максималды жүктемеде жүргізілді, үлгідегі қалыпты жүктеменің өзгеру жылдамдығы 29,99 Н/мин, индентордың қозғалыс жылдамдығы - 6,794 мм/мин, сызаттың ұзындығы - 7 мм, ұштың дөңгелектеу радиусы - 100 мкм. Сенімді нәтиже алу үшін әр жабылған үлгінің бетіне үш сызат түсірілді.

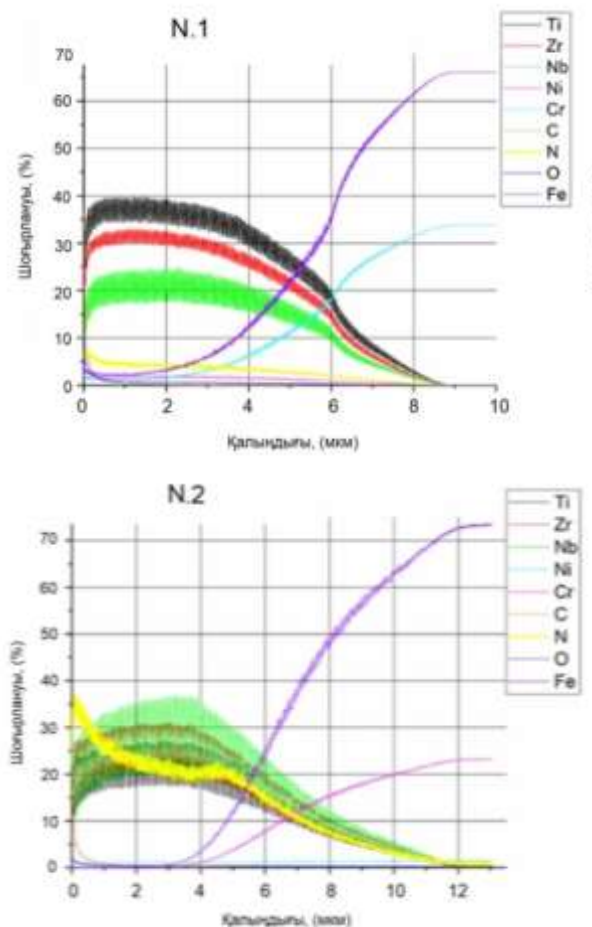
Трибологиялық сынақтар TRB³ трибометрінде стандартты "шар-диск" әдісін қолдана отырып жүргізілді (ASTM G 133-95 және ASTM G99 халықаралық стандарттары). Қарсы дене ретінде диаметрі 3 мм болатын ШХ15 болаттан жасалған шар қолданылды. Сынақтар 5 Н жүктемеде және 15 см/с сызықтық жылдамдықта, 5 мм тозудың қисықтық радиусында, 600 м үйкеліс жолында жүргізілді. Қаптамалардың үйкеліс бетінің профилограммалары және қаптамалардың тозуының көлемдік жоғалуы түйіспесіз 3D-профилометр MICROMEASURE 3D station түйіспесіз 3D-профилометрін қолдану арқылы анықталды. Алынған профильдерді талдау Mountains Map Universal v.2.0.13 компьютерлік бағдарламасын қолдану арқылы жүргізілді.

Эксперименттік нәтижелер және талдау

Элементтерді қаптамалардың қалыңдығына қарай үлестіру нәтижелері бойынша жағу режиміне байланысты олардың пайда болу сипатын талдауға болады. -200 В ығысу потенциалында әр жеке қабаттың тұндыру уақытына байланысты қалыңдығы шамамен 10-20 мкм болатын көпқабатты қаптамалар пайда болады, ал -100 В ығысу потенциалында қаптамалардың қалыңдығы 8-10 мкм құрайды. Қаптамалар тарапынан 2 мкм-ден астам тереңдікте олардың құрамында темірдің болуы электрлік ығысудың ұлғаюы олардың болат төсеммен сенімді адгезияны қамтамасыз ететіндігін көрсетеді (1-сурет, №1 және №2 үлгілер), ол қаптамалардың адгезиялық беріктігін сынау нәтижелерімен расталады (2-сурет). Қаптамалардағы (TiZrNbYAl)N элементтердің химиялық күйлерін талдау нәтижесі ретінде олардың құрамына негізгі үлес қосатын ниобий екенін атап өтуге болады.

Азот қысымының жоғарылауы қаптама құрамындағы азот концентрациясының жоғарылауына әкелетіні атап өтілді, ал металл элементтерінің мөлшері азаяды (1-сурет, №2 үлгі). $U_{nn} = -100$ В және $P = 4 \times 10^{-3}$ Торг кезінде әрбір жеке қабатты жағу уақытының ұлғаюы қаптамалардың қалыңдығы бойынша

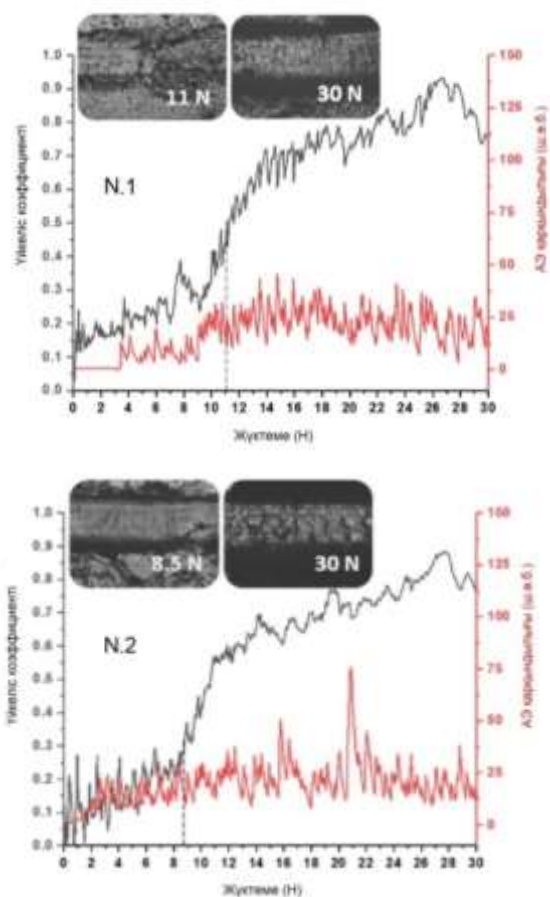
элементтердің біркелкі таралмауына және салыстырмалы түрде қаптама-төсеніштің кең өтпелі қабатының пайда болуына әкеледі (1-сурет, №1 және №2 үлгілер). Мұны әр қабат тұндырылған кезде диффузиялық қабаттағы металл иондарын қайта тарату үшін аз релаксация уақытымен түсіндіруге болады. Осылайша, композициядағы модуляция дұрыс жүрмейді және қаптамалардың сипаттамалары көп қабатты емес құрылымның монолитті қорытпасына жақындайды [15].



1-сурет. Элементтердің қаптамалардың қалыңдығына таралуы (TiZrNbYAl)N

2-суретте (TiZrNbYAl)N қаптамаларының адгезиялық беріктігін скретч-тестілеу әдісімен сынау нәтижелері көрсетілген. Қаптамалардың адгезиялық беріктігін сынау кезінде сыни жүктеменің әртүрлі шектік мәндерін анық ажыратуға болады. Қаптамаларға өткізілген сынақтарға сәйкес $U_{nn} = -100$ В; $P = 4 \times 10^{-3}$ Торг кезінде алынған (TiZrNbYAl)N қаптамалары үшін нәтижелер алынды, бұл сынақтың максималды жүктемесі кезінде жоғары адгезиялық беріктілікті және сызат аймағында белгілі бір дәрежеде қатпарлануын көрсетті (2-сурет, №1, №2 үлгілер). Нәтижелер жұмыста алынған нәтижелермен байланысты [16].

Абразивті және адгезиялық тозуға кедергі келтіру үшін қаптамалар жоғары қаттылыққа және серпімді қалпына келтірудің жоғары мәніне ие болуы керек, бұл әсіресе соққы, абразивті және эрозиялық әсер ету жағдайында маңызды. Материалдың серпімді сыну деформациясына тұрақтылығын сипаттайтын және икемділік индексі деп аталатын H/E сияқты шаманы қаптамалардың тозуға төзімділігін бағалау үшін пайдалануға болады [17]. Өте қатты қаптамалардағы H/E икемділік индексі 0.1-ден жоғары болуы керек [18]. Ол үшін H қаттылығы жоғары қаптаманың салыстырмалы түрде төмен E серпімділік модулі болуы керек. Алайда, барлық зерттелетін $(TiZrNbYAl)N$ қаптамалары үшін $H/E \approx 0.05-0.06$ анықталды.



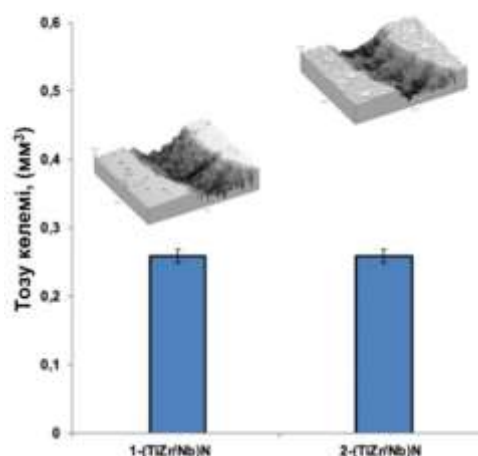
2-сурет. $(TiZrNbYAl)N$ қаптамаларды скретч-тестілеу нәтижелері

Үйкеліс коэффициенті үйкеліс материалдарының ілінісу беріктігін, ал тозу көлемі бойынша қажалуға төзімділігін анықтайды, яғни тозу неғұрлым аз болса, тозуға төзімділік соғұрлым жоғары болады. Тозу ізінің көлденең профилінің ауданы бойынша $(TiZrNbYAl)N$ қаптаманың тозу көлемі есептелді. Трибологиялық зерттеулердің нәтижелері (3-сурет) $(TiZrNbYAl)N$ қаптамаларының үйкеліс

коэффициенті жоғары екенін көрсетті, оның орташа мәні $\mu = 0,85-0,95$ тең (3-сурет). Мұндай мәндерді тозу іздерінің профилограммасына сәйкес қаптамалардың когезиялық бұзылуына байланысты тозу іздерінің жоғары кедір-бұдырлығымен түсіндіруге болады (4-сурет).



3-сурет. Үйкеліс коэффициентінің $(TiZrNbYAl)N$ қаптамаларының қашықтыққа, цикл санына және эксперимент уақытына тәуелділігі



4-сурет. Тозу ізінің көлденең профилі бар $(TiZrNbYAl)N$ қаптамалардың тозу көлемі

Қорытынды

Оже-электронды спектроскопия әдісімен элементтердің қаптама тереңдігі бойынша таралуын зерттеу химиялық элементтердің қаптама қимасы бойынша біркелкі бөлінетінін

және элементтердің таралу қисықтарының үшкір төбесі бар екенін көрсетті. Қаптамалар тарапынан 2 мкм-ден астам тереңдікте олардың құрамында темірдің болуы электрлік ығысуының ұлғаюы қаптаманың жабысу беріктігін сынау нәтижелерімен расталатын болат төсемнің сенімді адгезиясын қамтамасыз ететіндігін көрсетеді. Әрбір жеке қабаттың қолдану уақытының ұлғаюы $U_{nn} = -100$ В және $P = 4 \times 10^{-3}$ Торт болғанда элементтердің қаптамалардың қалыңдығы бойынша біркелкі таралмауына және салыстырмалы түрде кең өтпелі қаптама-төсеніш қабатының пайда болуына әкеледі.

Қаптамалардың адгезиялық беріктігін сынау көрсеткендей, барлық қаптамалар сызылған кезде тозады, бірақ қабыршақтанбайды, яғни пластикалық деформацияға және қаптама

материалында қажу сызаттарының пайда болуына байланысты когезиялық механизм бойынша бүлінеді. Қаптамалардың әртүрлі режимдері жүктемеге байланысты акустикалық эмиссияның (АЭ) әртүрлі мәндеріне сәйкес келеді.

$GP = -100$ В; $P = 4 \times 10^{-3}$ Торт кезінде алынған қаптамалар сынақтың максималды жүктемесі кезінде жоғары адгезия беріктігін және сызаттар аймағында белгілі бір дәрежеде қабыршақтануды көрсеткені анықталды.

Трибологиялық зерттеулердің нәтижелері (TiZrNbYAl)N қаптамалардың орташа мәні $\mu = 0,85-0,95$ болатын үйкеліс коэффициенті жоғары екенін көрсетті. Мұндай мәндерді қаптамалардың когезиялық бұзылуына байланысты тозу іздерінің жоғары кедір-бұдырлығымен түсіндіруге болады.

Әдебиеттер

- 1 Smyrnova K., Sahul M., Haršani M., Pogrebnjak A., Ivashchenko V., Beresnev V., Stolbovoy V., Caplovic L., Caplovicová M., Vanko L., et. al. Microstructure, mechanical and tribological properties of advanced layered WN/MeN (Me = Zr, Cr, Mo, Nb) nanocomposite coatings. // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol.12 (3). – P.395.
- 2 Du J.W., Chen L., Chen J., Du Y. Mechanical properties, thermal stability and oxidation resistance of TiN/CrN multilayer coatings. // *Vacuum*. – 2020. – Vol.179. – Art.No 109468.
- 3 Pogrebnjak A., Smyrnova K., Bondar O. Nanocomposite multilayer binary nitride coatings based on transition and refractory metals: Structure and properties. // *Coatings*. – 2019. – Vol.9. – P.155.
- 4 Maksakova O.V., Simoës S., Pogrebnjak A. D., Bondar O.V., Kravchenko Y.O., Koltunowicz T.N., Shaimardanov Z.K. Multilayered ZrN/CrN coatings with enhanced thermal and mechanical properties. // *J. Alloys Compd.* – 2019. – Vol.776. – P.679–690.
- 5 Abdeen D., El Hachach M., Koc M., Atieh M.A Review on the Corrosion Behaviour of Nanocoatings on Metallic Substrates. // *Materials (Basel)*. – 2019. – Vol.12. – P.210.
- 6 Pogrebnjak, A.D.; Kong, C.-H.; Webster, R.F.; Tilley, R.D.; Takeda, Y.; Oyoshi, K.; Bondar, O.V.; Buranich, V.V.; Konstantinov, S.V.; Baimoldanova, L.S.; et al. Antibacterial effect of au implantation in ductile nanocomposite multilayer (TiAlSiY)N/CrN coatings. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2019. – Vol.11. – P.48540-48550.
- 7 Bahadormanesh B., Ghorbani M., Kordkolaei N.L. Electrodeposition of nanocrystalline Zn/Ni multilayer coatings from single bath: Influences of deposition current densities and number of layers on characteristics of deposits. // *Applied Surface Science*. – 2017. – Vol.404. – P.101-109.
- 8 Caicedo J.C., Amaya C., Yate L., Gómez M.E., Zambrano G., Alvarado-Rivera J., Muñoz-Saldaña J., Prieto P. // *Applied Surface Science*. – 2010. – Vol.256. – P.5898–5904.
- 9 Yashar P.C., Sproul W.D. Nanometer scale multilayered hard coatings. // *Vacuum*. – 1999. – Vol.55. – P.179–190.
- 10 Ivashchenko V., Veprek S., Pogrebnjak A., Postolnyi B. First-principles quantum molecular dynamics study of $Ti_xZr_{1-x}N$ (111)/SiNy heterostructures and comparison with experimental results // *Science and Technology of Advanced Materials*. – 2014. – Vol.15. – Art.No 025007.
- 11 Pogrebnjak A.D., Ivashchenko V.I., Skrynskyy P.L., Bondar O.V., Konarski P., Załęski K., Jurga S., Coy E. Experimental and theoretical studies of the physicochemical and mechanical properties of multi-layered TiN/SiC. Films: temperature effects on the nanocomposite structure // *Composites Part B: Engineering*. – 2018. – Vol.142. – P.85–94.
- 12 Liu Y., Yu S., Shi Q., Ge X., Wang W. Multilayer coatings for tribology: A mini review. // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol.12. – P.1388.
- 13 Kovalev A.I., Vakhrushev V.O., Beake B.D., Konovalov E.P., Wainstein D.L., Dmitrivskii S.A., Fox-Rabinovich G.S., Veldhuis S. Damage accumulation phenomena in multilayer (TiAlCrSiY)N/(TiAlCr)N, monolayer (TiAlCrSiY)N coatings and silicon upon deformation by cyclic nanoindentation. // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol.12. – P.1312.
- 14 Vengesa Y., Fattah-alhosseini A., Elmkhah H., Imantalab O. Influence of post-deposition annealing temperature on morphological, mechanical and electrochemical properties of CrN/CrAlN multilayer coating deposited by cathodic arc evaporation- physical vapor deposition process. // *Surface and Coatings Technology*. – 2022. – Vol.432. – Art.No 128090.

- 15 Pogrebnjak A.D., Rogoz V.M., Bondar O.V., Erdybaeva N.K., Plotnikov S.V. Structure and physicomaterial properties of NbN-Based protective nanocomposite coatings: A Review //Protection of metals and physical chemistry of surfaces. – 2016. – Vol.52(5). – P.802–813.
- 16 Лякишев Н.П. Диаграммы состояния бинарных металлических систем. – М.: Машиностроение, 2000. – 3968 с.
- 17 Leyland A., Matthews A. On the significance of the H/E ration in wear control: a nanocomposite coating approach to optimized tribological behavior. // Wear. – 2000. – Vol. 246. – P.1-11.
- 18 Musil J., Zeman P., Baroch P. Hard Nanocomposite Coatings. Comprehensive materials processing. // Book edited by M.S.J. Hashmi. - Elsevier Ltd., 2014. – P. 325–353.

References

- 1 K. Smyrnova, M. Sahul, M. Haršáni, A. Pogrebnjak, V. Ivashchenko, V. Beresnev, V. Stolbovoy, L. Caplovic, M. Caplovicová, L. Vanco et al., Nanomaterials 12, 395 (2022).
- 2 J. W. Du, L. Chen, J. Chen, and Y. Du, Vacuum 179, Art. No. 109468 (2020).
- 3 A. Pogrebnjak, K. Smyrnova, and O. Bondar, Coatings 9, 155 (2019).
- 4 O.V. Maksakova, S. Simoës, A.D. Pogrebnjak, O.V. Bondar, Y.O. Kravchenko, T.N. Koltunowicz, and Z.K. Shaimardanov, J. Alloys Compd. 776, 679–690 (2019).
- 5 D. Abdeen, M. El Hachach, M. Koc, and M. A. Atieh, Materials (Basel) 12, 210 (2019).
- 6 A.D. Pogrebnjak, C.-H. Kong, R.F. Webster, R.D. Tilley, Y. Takeda, K. Oyoshi, O. V. Bondar, V. V. Buranich, S. V. Konstantinov, L. S. Baimoldanova et al., ACS Appl. Mater. Interfaces 11, 48540–48550 (2019).
- 7 B. Bahadormanesh, M. Ghorbani, and N. L. Kordkolaei, Appl. Surf. Sci. 404, 101–109 (2017).
- 8 J. C. Caicedo, C. Amaya, L. Yate, M. E. Gómez, G. Zambrano, J. Alvarado-Rivera, J. Muñoz-Saldaña, and P. Prieto, Appl. Surf. Sci. 256, 5898–5904 (2010).
- 9 P. C. Yashar and W. D. Sproul, Vacuum 55, 179–190 (1999).
- 10 V. Ivashchenko, S. Veprek, A. Pogrebnjak, and B. Postolnyi, Sci. Technol. Adv. Mater. 15, Art. No. 025007 (2014).
- 11 A.D. Pogrebnjak, V.I. Ivashchenko, P.L. Skrynsky, O.V. Bondar, P. Konarski, K. Załęski, S. Jurga, and E. Coy, Compos. Part B Eng. 142, 85–94 (2018).
- 12 Y. Liu, S. Yu, Q. Shi, X. Ge, and W. Wang, Nanomaterials 12, 1388 (2022).
- 13 A.I. Kovalev, V.O. Vakhrushev, B.D. Beake, E.P. Konovalov, D.L. Wainstein, S.A. Dmitrivskii, G.S. Fox-Rabinovich, and S. Veldhuis, Nanomaterials 12, 1312 (2022).
- 14 Y. Vengesa, A. Fattah-alhosseini, H. Elmkhah, and O. Imantalab, Surf. Coat. Technol. 432, Art. No. 128090 (2022).
- 15 A.D. Pogrebnjak, V.M. Rogoz, O.V. Bondar, N.K. Erdybaeva, and S.V. Plotnikov, Prot. Met. Phys. Chem. Surf. 52, 802–813 (2016).
- 16 N.P. Lyakishev, Diagrams of Binary Metallic Systems (Mashinostroenie, Moscow, 2000), 3968 p. (In Russ.)
- 17 A. Leyland and A. Matthews, Wear 246, 1–11 (2000).
- 18 J. Musil, P. Zeman, and P. Baroch, Comprehensive Materials Processing, (Elsevier Ltd., 2014), pp. 325–353.

Мақала тарихы:

Түсті – 13.03.2024

Түзетілген түрде түсті – 14.06.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Article history:

Received 13 March 2024

Received in revised form 14 June 2024

Accepted 8 September 2024

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Мухамедова А.И.** (автор-корреспондент) - 8D05301 – Техникалық физика PhD докторанты; Д.Серікбаев ат.Шығыс Қазақстан техникалық университеті; Өскемен қ. Қазақстан; email: aminamukhamedova17@gmail.com

2. **Погребняк А.Д.** – физ.-мат. ғал. докт., проф., Сумы мемлекеттік университеті, Сумы қ. Украина, email: alex@i.ua

3. **Уазырханова Г.К.** – PhD, қауым. проф. Д.Серікбаев ат. Шығыс Қазақстан техникалық университеті; Өскемен қ., Қазақстан, email: guazyrhanova@mail.ru

4. **Рахадиллов Б. Қ.** - Д.Серікбаев ат.Шығыс Қазақстан техникалық университеті; Өскемен қ., Қазақстан; email: bor1988@mail.ru

Information about authors:

1. **Mukhamedova A.** (corresponding author) – PhD student, D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan. email: aminamukhamedova17@gmail.com

2. **Pogrebnyak A.** – Dr. Phys. Math. Sci., Prof.. Sumy State University, Sumy, Ukraine. email: alex@i.ua

3. **Uazyrkhanova G.** – PhD, Ass. Prof., D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan. email: guazyrhanova@mail.ru

4. **Rakhadilov B.** – D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan. email: bor1988@mail.ru

И.Ф. Спивак-Лавров¹ , А.Ш. Амантаева^{1*} , О.А. Байсанов² , Т.Ж. Шугаева¹ 

¹Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан

²Екі мәрте Кеңес Одағының батыры Т. Ж. Бегельдинов ат. ӘҚК Әскери институты, Ақтөбе қ., Қазақстан

*e-mail: amantaeva.80@mail.ru

ЕКІ ӨЛШЕМДІ ӨРІСТЕРГЕ НЕГІЗДЕЛГЕН СТАТИКАЛЫҚ МАСС-АНАЛИЗАТОРЛАРДЫ ЖУЫҚТАП ЕСЕПТЕУ

Статикалық масс-анализаторларында электр және магнит өрістерін ортақ пайдалану жоғары аналитикалық мүмкіндіктерді қамтамасыз ете отырып, бөлшектерді тек масса бойынша тиімді жіктеуге мүмкіндік береді. Ажыратқыштығы жоғары масс-анализаторлар иондар шоғын энергия бойынша фокустау үшін ахроматтандыратын электростатикалық жүйені пайдаланады. Энергияның нөлдік дисперсиясы бар құрылғылар электрлік ахроматтандыру жүйелерінің және анализатордың магнит өрісінің бірлескен әрекеті арқылы жасалады, нәтижесінде шоқтағы иондар тек массалар бойынша жіктеледі. Магнит өрісіне түспес бұрын иондық сәуленің кеңеюі статикалық масса анализаторларының сапасын жақсартады. Бұл мақалада иондар шоғының қос фокусталуы бар статикалық масс-анализаторы қарастырылады. Электродтар шекараларындағы иондардың үдеуі мен баяулау процесі, олардың трансаксиалды линзамен фокусталуы және электростатикалық призманың сыну бетінің масс-анализаторының "сапа" параметріне әсері сипатталған. Масс-анализаторының сызықтық дисперсиясын арттыру үшін сектордың біртекті магнит өрісін екі өлшемді магниттік призма мен үш электродты трансаксиалды фокустық линзаның өрістеріне ауыстыру да қарастырылады. Магнит өрісіне кірер алдында иондар шоғының фокусталуын жақсарту үшін екі өлшемді электростатикалық призманы қолдану ұсынылады, бұл масса анализаторының сызықтық дисперсиясын арттыруға және сонымен қатар магнит өрісіне кірер алдында шоқтың енін кеңейтуге мүмкіндік береді. Бұл жұмыста екі өлшемді электр призмасының зарядталған бөлшектер шоғырына әсері қарастырылып, оның энергия бойынша бұрыштық дисперсиясының жуықталған өрнегі қарастырылды. Екі өлшемді электрлік және магниттік призмалары бар призмалық масс-анализаторының сызықтық дисперсиясын арттырып және оның сызықтық өлшемдерін азайта отырып, энергия бойынша фокустауды жүзеге асыруға болатындығы көрсетілген.

Түйін сөздер: масс-анализатор, энергия бойынша фокустау, «сапа» параметрі, масса бойынша дисперсия, энергия бойынша дисперсия, екі өлшемді магниттік призма.

I.F. Spivak-Lavrov¹, A.Sh. Amantayeva^{1*}, O.A. Baisanov², T.Zh. Shugaeva¹

¹K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

²Military Institute of Air Defense Forces named after twice Hero of the Soviet Union T.Ya.Begeldinov, Aktobe, Kazakhstan

*e-mail: amantaeva.80@mail.ru

Approximate calculation of static mass analyzers based on two-dimensional fields

The concurrent utilization of electric and magnetic fields in static mass analyzers proves highly effective in sparticle separation solely based on their masses, thereby ensuring remarkable analytical capabilities. High-resolution mass analyzers employ an achromatizing electrostatic system to precisely focus ion radiation by energy. Devices featuring zero energy dispersion are created through the collaborative action of electric achromatizing systems and the magnetic field within the analyzer, resulting in ion separation based solely on mass. Expanding the ion beam prior to its magnetic field exposure enhances the overall quality of static mass analyzers. This article delves into a static mass analyzer with dual ion beam focusing, elucidating the ion acceleration and deceleration processes at electrode boundaries, their focalization via a transaxial lens, and the impact of the electrostatic prism's refractive surface on the mass analyzer's "quality" parameter. Additionally, the transition from a sector homogeneous magnetic field to the fields generated by a two-

dimensional magnetic prism and a three-electrode transaxial focusing lens is explored to augment the mass analyzer's linear dispersion. To refine ion beam focus pre-magnetic field entry, the proposed adoption of a two-dimensional electrostatic prism promises heightened linear dispersion in the mass analyzer while expanding the beam pre-magnetic field entry. This study also examines the impact of a two-dimensional electric prism on the charged particle beam, presenting an approximate expression for its angular energy dispersion. It is demonstrated that a prism-based mass analyzer integrating two-dimensional electric and magnetic prisms enables energy-focused operations alongside enhanced linear dispersion and reduced linear dimensions.

Key words: mass analyzer, energy focusing, "quality" parameter, mass dispersion, energy dispersion, two-dimensional magnetic prism.

И.Ф. Спивак-Лавров¹, А.Ш. Амантаева^{1*}, О.А. Байсанов², Т.Ж.Шугаева¹

¹Актюбинский региональный государственный университет им.К.Жубанова, г. Актобе, Казахстан

²Военный институт Сил воздушной обороны им. дважды Героя Советского Союза Т.Я.Бегельдинова, г. Актобе, Казахстан

*e-mail: amantaeva.80@mail.ru

Приближенный расчет статических масс-анализаторов на основе двумерных полей

Совместное использование электрических и магнитных полей в статических масс-анализаторах позволяет эффективно разделять частицы только по массе, обеспечивая высокие аналитические возможности. Масс-анализаторы с высоким разрешением используют ахроматизирующую электростатическую систему для фокусировки ионного излучения по энергии. Устройства с нулевой дисперсией по энергии создаются благодаря совместному действию электрических ахроматизирующих систем и магнитному полю анализатора, в результате ионы в пучке разделяются только по массам. Расширение ионного пучка перед попаданием в магнитное поле также улучшает качество статических масс-анализаторов. В данной статье рассматривается статический масс-анализатор с двойной фокусировкой пучка ионов. Описывается процесс ускорения и замедления ионов на границах электродов, их фокусировка трансаксиальной линзой и влияние преломляющей поверхности электростатической призмы на параметр "качество" масс-анализатора. Также рассматривается замена секторного однородного магнитного поля на поля двумерной магнитной призмы и трехэлектродной трансаксиальной фокусирующей линзы для увеличения линейной дисперсии масс-анализатора. Для улучшения фокусировки ионного пучка перед входом в магнитное поле предложено использовать двумерную электростатическую призму, что позволяет увеличить линейную дисперсию масс-анализатора и одновременно расширить пучок перед входом в магнитное поле. В данной работе было рассмотрено действие двумерной электрической призмы на пучок заряженных частиц и найдено приближенное выражение для ее угловой дисперсии по энергии. Показано, что в призматическом масс-анализаторе с двумерной электрической и магнитной призмами можно осуществить фокусировку по энергии, одновременно увеличив при этом линейную дисперсию масс-анализатора и уменьшив его линейные размеры.

Ключевые слова: масс-анализатор, фокусировка по энергии, параметр «качество», дисперсия по массе, дисперсия по энергии, двумерная магнитная призма.

Kіріспе

Статикалық және уақыт аралық масс-анализаторлары заттардың элементтік, изотоптық және химиялық талдауларының мәселелерін шешу үшін ғылымның, техниканың және өндірістің әртүрлі салаларында қолданылады. Дұрыс физикалық және математикалық теорияларға негізделген және есептеу технологияларының мүмкіндіктерін пайдаланатын осындай анализаторлардың

физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеудің жаңа әдістерін әзірлеу корпускулалық оптика саласындағы маңызды міндет болып табылады. Бұл жетілдірілген әдістер жоғары аналитикалық мүмкіндіктері бар құрылғыларды жасауға мүмкіндік береді [1-5].

Статикалық масс-спектрометрлерді жетілдіруге байланысты негізгі идеялар Астонның [6-8], Матауха мен Герцогтің [9], Демстердің [10] және т.б. жұмыстарынан бастау алады.

Статикалық және уақыт аралық масс-анализаторларының жұмысына негізделген негізгі физикалық заңдар классикалық электродинамика заңдары болып табылады. Электр және магнит өрістеріндегі зарядталған бөлшектің қозғалысы Лоренц күшінің әсерімен анықталады [11]. Бұл жағдайда магнит өрісі зарядталған бөлшектер шоқтарын энергия мен масса бойынша кеңістікте, ал электр өрісін тек энергия бойынша жіктейді. Нәтижесінде статикалық масс-анализаторларында электр және магнит өрістерінің энергиясының бірлескен дисперсиясы нөлге тең болатын электр және магнит өрістерінің комбинациясын таңдауға болады. Бұл жағдайда шоқтағы бөлшектердің бөлінуі тек масса бойынша жүреді. Энергия бойынша фокустауды жүзеге ауыстыру үшін электр және магнит өрістерін бірге қолдану идеясы Астонға тиесілі, оның жұмысы Нобель сыйлығымен марапатталды. Ұшу кезінде масс-анализаторларында электростатикалық айналарды қолдана отырып, уақыт аралығын энергияға бағыттауға болады [12].

Зерттеу әдісі

Ажыратқыштығы жоғары масс-анализаторларда иондық сәуленің энергияға бағытталуын қамтамасыз ететін ахроматтандыратын электростатикалық жүйе бар. Мұндай жүйе ретінде әдетте цилиндрлік, сфералық немесе тороидтық конденсаторлар, сондай-ақ электростатикалық призмалық жүйе қолданылады [13]. Ахроматизациялық жүйелердің электр өрістері анализатордың магнит өрісімен бірге энергиясының нөлдік дисперсиясы бар құрылғыны жасауға мүмкіндік береді. Бұл жағдайда иондық сәуле энергия бойынша фокусталады және масса анализаторының магнит өрісінде иондар тек массалар бойынша бөлінеді.

Статикалық масс-анализаторларын жобалаудың сәтті тәсілдерінің бірі-иондық шоқты магнит өрісіне түспес бұрын кеңейту идеясы. Иондық сәуленің кеңеюі нәтижесінде статикалық масс-анализаторларында шоқ арқылы өтетін магнит ағыны артады [14]. Бұл осы құрылғылардың «сапа» көрсеткішінің жоғарылауына әкеледі.

Масс-анализаторлардың тиімділігін «сапа» параметрімен немесе Q - шамасымен сипаттауға болады [14], ол максималды ажыратқыштың R_{max} , көлденең бағыттағы шоқтың бұрыштық ажырауының $2\alpha_u$ және ион көзінің енінің S_u көбейтіндісімен анықталады:

$$Q = R_{max} 2\alpha_u S_u, \quad (1)$$

мұнда

$$R_{max} = \frac{D_m}{|M|S_u}, \quad (2)$$

D_m – масса бойынша сызықтық дисперсия, M – дисперсия бағытындағы сызықтық ұлғаю, S_u – иондар көзі саңылауының ені. (2)-ге (1)-ді қойып, Q үшін келесі өрнекті алуға болады:

$$Q = \frac{D_m}{|M|} 2\alpha_u. \quad (3)$$

(3)-ші өрнектен бірдей көлденең бағыттағы шоқтың $2\alpha_u$ бұрыштық ажырауында «сапа» $\frac{D_m}{|M|}$ қатынасымен анықталады. Секторлық біртекті магнит өрісі бар масс-спектрометрлер жағдайында бұл қатынасты сандық бағалау үшін өлшемсіз шаманы пайдалану ыңғайлы:

$$K = \frac{D_m}{|M|r_0}, \quad (4)$$

мұнда r_0 – магнит өрісіндегі траекторияның кисықтық радиусы.

Дөңгелек траекториялар жағдайына арналған [14,15] жұмыста, ал жалпы жағдайда Q -статикалық масс-анализаторлардың шамасы нүктелік көзден шығатын біртекті иондық шоқтың қимасына енетін магнит өрісінің ағынымен анықталады деген теорема дәлелденді [16]. Бұл теорема статикалық масс-анализаторларының тиімділігін арттырудың қарапайым эвристикалық принципі береді, мұнда магниттің өзінде және магнитке кірер алдында иондық шоқ мүмкіндігінше кеңейтіледі.

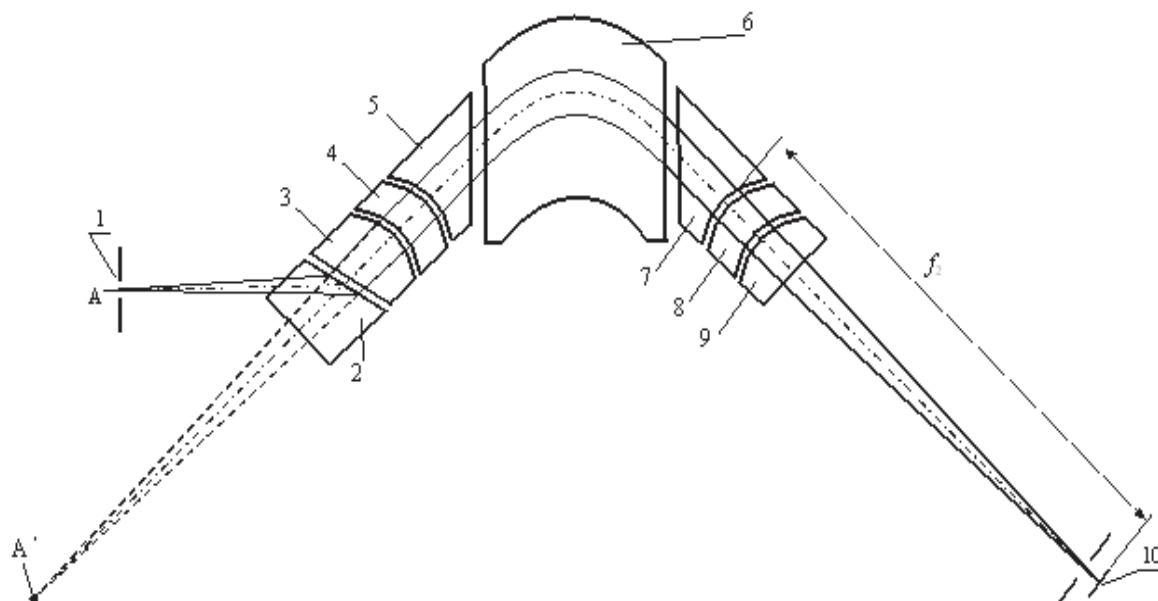
Магнит өрісіне кірер алдында иондық шоқты кеңейту әдістерінің бірі квадрупол линзаларын қолданумен байланысты [14,15]. Сонымен, шағын өлшемді статикалық масс-анализаторында осының арқасында "сапа" параметрі мен ажыратқыштығының рекордтық мәнін алуға болады [17]. Бұл масс-анализаторында секторлық магниттің орта жазықтығындағы сәуленің кеңеюіне 3 квадруполды линзаларды қолдану арқылы қол жеткізіледі, ал энергия мен бағыт бойынша фокустау тороидты конденсатор мен тағы 2 қосымша квадруполды линзалардың көмегімен жүзеге асырылады. Алайда, аралық сызықтық фокустың болуы құрылғының жарық күшін азайтады, ал квадрупол линзаларын қолдану оның құрылысын едәуір қиындатады.

Осы кемшілікті еңсеру үшін секторлық біртекті магниттік өрісті екі өлшемді магниттік призмамен ауыстыру керек, оның массасы бойынша D'_m бұрыштық дисперсия оның сызықтық өлшемдеріне байланысты емес. Бұл жағдайда масс-анализатордың D_m сызықтық дисперсиясын екі өлшемді магниттік призмадан кейін иондарды қабылдағыштың саңылауы осы линзаның фокустық жазықтығында орналасатындай етіп фокустаушы линзаның f_2

фокустық қашықтығын кеңейту есебінен ұлғайтуға болады. Онда масса-анализатордың сызықтық дисперсиясы мынадай формуламен анықталады [18]:

$$D_m = D'_m f_2. \quad (5)$$

Бұл ретте иондар шоғырының жеткілікті жақсы кеңістіктік және энергетикалық фокусталуына қол жеткізуге болады.



1 сурет – Трансаксиалды, екі өлшемді электростатикалық және магниттік өрістерге негізделген статикалық масс-анализатордың схемалық кескіні

Иондар көзінің саңылауынан шығатын иондардың дивергентті сәулесі алдымен 2, 3 электродтарының шекарасында сыну арқылы $\frac{V}{V_0}$ есе үдейді, содан кейін 3, 4 және 4, 5 электродтарының шекарасында баяулайды және екі өлшемді біртекті магнит өрісіне 6 түседі, содан кейін ол ион қабылдағыштың 10 саңылауы 7, 8, 9 электродтары бар трансаксиалды линзамен фокусталады.

Электростатикалық призманың сыну бетінен өткеннен кейін шоқ айтарлықтай кеңейеді, бұл магниттен өтетін шоқтың магнит өрісінің ағынын арттырады, осылайша (3) теңдіктегі "сапа" параметрі немесе Q – статикалық масс-анализаторының шамасы артады. 1-суреттен A' ион көзінің жорамал бейнесі магниттен жеткілікті қашықтыққа алыстайтындығын көруге болады.

Иондар шоғы қосарланып фокусталынатын статикалық масс-анализаторында [16] секторлық біртекті магнит өрісі екі өлшемді магниттік призма өрісімен және оның артына орналастырылған үш электродты трансаксиалды фокустық линзамен ауыстырылады, бұл магниттің сызықтық өлшемдерін өзгертпей,

фокустық линзаның фокустық қашықтығын ұлғайту арқылы масс-анализатордың сызықтық дисперсиясын арттыруға мүмкіндік береді [18].

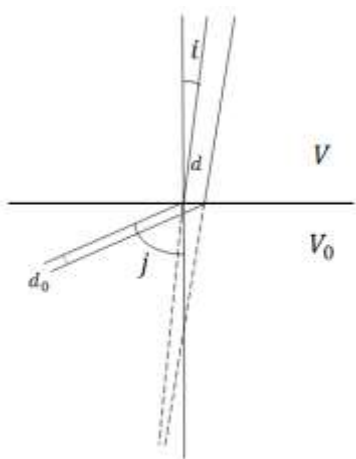
Зерттеу нәтижелері мен талқылау

Бөлшектер шоғы екі өлшемді электр өрісінен өткенде, яғни V потенциалдан V_0 потенциалға өткенде жарық бір ортадан екінші ортаға өткендегідей сынады. V потенциалдан V_0 потенциалға өту шекарасы тиімді сыну шеті деп аталады. 2-суреттен бөлшектер шоғының әрекетіне Снеллиус формуласын қолданып, келесі теңдікті алуға болады:

$$\frac{\sin j}{\sin i} = \sqrt{\frac{V}{V_0}}, \quad (6)$$

$$\frac{\sin j}{\sin(i + \Delta i)} = \sqrt{\frac{V + \Delta U}{V_0 + \Delta U}}, \quad (7)$$

мұндағы j - түсу бұрышы, i – сыну бұрышы, ΔU – энергия бойынша таралу.



2 сурет - Екі өлшемді электр өрісіндегі бөлшектер шоғының схемалық әрекеті

Түбір астындағы қосылғыштарды V_0 -ге бөлсек және $\frac{\Delta U}{V_0} = \varepsilon$ ескерсек, онда:

$$\frac{\sin j}{\sin(i + \Delta i)} = \sqrt{\frac{V}{V_0} + \varepsilon} = \left(\frac{V}{V_0} + \varepsilon\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon\right). \quad (8)$$

$\sin(i + \Delta i) = \sin i \cos \Delta i + \cos i \sin \Delta i$ тригонометриялық теңдеуді, $\cos \Delta i = 1$ ал аз бұрышта $\sin \Delta i = \Delta i$ ескерсек, $\sin(i + \Delta i) = \sin i + \cos i \Delta i$. (8) теңдеуге түрлендірулер енгізіп, аз параметрлерді дәрежелері бойынша жіктеп [19,20], келесі түрге келтіруге болады:

$$\begin{aligned} \frac{\sin j}{\sin i} (1 + \tan i \Delta i)^{-1} &= \sqrt{\frac{V}{V_0}} \left(1 + \frac{V_0}{V} \varepsilon\right)^{\frac{1}{2}} = \\ &= \sqrt{\frac{V}{V_0}} \left(1 + \frac{V_0}{2V} \varepsilon\right) \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Бұдан,

$$\frac{\sin j}{\sin i} (1 - \tan i \Delta i) = \sqrt{\frac{V}{V_0}} \left(1 + \left(\frac{V_0}{2V} - \frac{1}{2}\right) \varepsilon\right) = \sqrt{\frac{V}{V_0}} \left[1 + \left(\frac{V_0}{2V} - \frac{1}{2}\right) \varepsilon\right], \quad (10)$$

$$-\frac{\sin j}{\sin i} \tan i \Delta i = \frac{1}{2} \left(\frac{V_0}{V} - 1\right) \varepsilon, \quad (11)$$

$$\Delta i = -\frac{\tan i}{2} \left(1 - \frac{V_0}{V}\right) \varepsilon. \quad (12)$$

$\Delta i = D_\varepsilon \varepsilon$, $V > V_0$ болғанда:

$$D_\varepsilon = \frac{\tan i}{2} \left(1 - \frac{V_0}{V}\right). \quad (13)$$

(13)-теңдеу энергия бойынша дисперсины береді.

Түскен бөлшектер шоғының ені d_0 , ал тиімді сыну шетінен өткеннен кейінгі ені d деп белгілесек, $d = \frac{d_0}{\cos j} \cos i$ болатындығын көруге болады. Олай болса $d > d_0$, яғни магнит өрісіне кірер кездегі бөлшектер шоғының ені кеңейетіндігі көрінеді. Визуалды түрде жорамал иондық шоқ көзі қашықтайды. Бұл өз кезегінде масс-анализатор өлшемінің кішірею эффектісін береді.

Қорытынды

Екі өлшемді электростатикалық призманың сыну беті мен үш электродты трансаксиалды линзалары, ион көзі мен қабылдағышы бар ахроматикалық статикалық масс-анализаторының ерекшелігі, масс-анализаторының дисперсиясын арттыру үшін сектордың біртекті магнит өрісі екі өлшемді магниттік призма өрісімен және оның артына орналастырылған үш электродты трансаксиалды фокустық линзамен ауыстырылады. Бұл фокустық линзаның фокустық қашықтығын ұлғайту есебінен масс-анализаторының сызықтық дисперсиясын ұлғайтуға мүмкіндік береді.

Сыну шетінен өткен иондық шоқтың енінің кеңеюі нәтижесінде жорамал иондық шоқ көзінің қашықтауы масс-анализатор өлшемінің кішіреюіне мүмкіндік береді.

Қаржыландыру

Жұмыс ҚР ҒЖБМ ҒК «Ғарыштық зерттеулерге арналған энергия және массалық анализаторларды әзірлеу» ЖТН АР22685992 гранты бойынша жүзеге асырылды.

Әдебиеттер

- 1 Kambarova, Z. Expansion of the functional capacities of electrostatic mirror analyzers for electron spectroscopy // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2023. – Vol.5 (5(125)). – P.53–61.
- 2 Saulebekov, A.O., Kambarova, Zh.T., Omarova, G.S. Miniature highly sensitive electron spectrometer for the analysis of corpuscular fluxes // Eurasian Physical Technical Journal. – 2023. – Vol.20 (2-44). – P.112–117.
- 3 Spivak-Lavrov I.F. Analytical Methods for The Calculation and Simulation of New Schemes of Static and Time-of-Flight Mass Spectrometers // Advances in Imaging and Electron Physics. – 2016. – Vol. 193. – P.45–128.

- 4 Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Sharipov S.U. Solutions of the Laplace equation in cylindrical coordinates, driven to 2D harmonic potentials // *Advances in Imaging and Electron Physics*. – Burlington: Academic Press. – 2020. – Vol. 215. – P. 181–193.
- 5 Spivak-Lavrov I.F., Shugaeva T.Zh., Kalimatov T.S. Mass analyzer with conic achromatic prism and transaxial lenses // *International Journal of Mass Spectrometry*. – 2019. – Vol.444. – Art.No.116180.
- 6 Aston F.W. A second-order focusing mass and isotopic weights by the by doublet method // *Proc. Roy. Soc.* – 1937. – Vol.163A. – P.391-404.
- 7 Aston F.W., Fowler R.H. Some problems of the mass spectrograph. // *Phil. Mag.* – 1922. – Vol.43. – P.514-528.
- 8 Aston F.W. A positive ray spectrograph // *Phil. Mag.* – 1919. – Vol. 38. – P.707-714.
- 9 Mattauch J. A doublet- focusing mass spectrograph and the masses of N15 and O18 // *Rev.* – 1936. – Vol. 50. – P. 617-623.
- 10 Dempster A.J. New methods in mass spectroscopy // *Proc. Amer. Phil. Soc.* – 1935. – Vol.75. – P. 755-767.
- 11 Силады М. Электронная и ионная оптика: Пер. с англ. – Москва: Мир, 1990.
- 12 Karataev V.I., Mamirin B.A., Shmikk B. Time-of-Flight mass spectrometer/US Patent № 4072862, 1978; UK Patent № 1474149, 1977; French Patent № 7530831, 1978; FRG Patent № 2532552, 1980. *J Tech Phys.* 1971;41:1458-1465.
- 13 Кельман В.М., Родникова И.В., Секунова Л.М. Статические масс-спектрометры. – Алма-Ата: Наука, 1985. – С. 98-122
- 14 Wolnik H.// *Nucl. Instr, ant Meth.* – 1971. – Vol. 95, N.3. – P. 453-460.
- 15 Вольник Г. Оптика заряженных частиц. – Санкт-Петербург, 1992. – 208 с.
- 16 Гликман Л.Г., Спивак-Лавров И.Ф. Общий критерий качества статических масс-анализаторов с совмещенными электрическим и магнитным полями // *Письма в ЖТФ.* – 1990. – Т.16. Вып. 13. – С. 26–29.
- 17 Ishihara M., Kammei Y., Matsuda H. A high-perfomance mass spectrometr for very small size // *Nucl. Inst. and Meth, in Phys. Res. A.* – 1995. – Vol.363 (1, 2). – P.440-444.
- 18 Байсанов О.А, Спивак-Лавров И.Ф., Амантаева А.Ш. Трансаксиалды, екі өлшемді электростатикалық және магниттік өрістерге негізделген статикалық масса анализаторы // *Пайдалы модельге патент № 8948. «Ұлттық зияткерлік меншік институты» РМК берген, Астана 01.11.2023.*
- 19 Коновалова Е.И., Яблокова. Л.В. Численные методы математического анализа: учебное пособие. – Самара: Издательство Самарского университета, 2022 – 149 с.
- 20 Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. Численные методы анализа. Приближение функций, дифференциальные и интегральные уравнения. - Издательство "Лань", 5-е изд., 2022 – 400 с.

References

- 1 Z. Kambarova, *East.-Eur. J. Enterp. Technol.* 5(125), 53–61 (2023).
- 2 O. Saulebekov, Zh. T. Kambarova, G. S. Omarova, *Eurasian Phys. Tech. J.* 20(2-44), 112–117 (2023).
- 3 F. Spivak-Lavrov, *Adv. Imaging Electron Phys.* 193, 45–128 (2016).
- 4 F. Spivak-Lavrov, T. Zh. Shugaeva, S. U. Sharipov, *Adv. Imaging Electron Phys.* 215, 181–193 (2020).
- 5 F. Spivak-Lavrov, T. Zh. Shugaeva, T. S. Kalimatov, *Int. J. Mass Spectrom.* 444, Art. No. 116180 (2019).
- 6 F. W. Aston, *Proc. Roy. Soc.* 163A, 391–404 (1937).
- 7 F. W. Aston, R. H. Fowler, *Phil. Mag.* 43, 514–528 (1922).
- 8 F. W. Aston, *Phil. Mag.* 38, 707–714 (1919).
- 9 J. Mattauch, *Rev.* 50, 617–623 (1936).
- 10 J. Dempster, *Proc. Am. Phil. Soc.* 75, 755–767 (1935).
- 11 M. Silad'i, *Elektronnaya i ionnaya optika* (Mir, Moscow, 1990). (In Russ.)
- 12 V. I. Karataev, B. A. Mamirin, B. Shmikk, US Patent No. 4072862, UK Patent No. 1474149, French Patent No. 7530831, FRG Patent No. 2532552, *J. Tech. Phys.* 41, 1458–1465 (1971).
- 13 V. M. Kel'man, I. V. Rodnikova, L. M. Sekunova, *Statische mass-spektrometry* (Nauka, Alma-Ata, 1985), pp. 98–122. (In Russ.)
- 14 H. Wolnik, *Nucl. Instr. Meth.* 95(3), 453–460 (1971).
- 15 G. Vol'nik, *Optika zaryazhennykh chastits* (St. Petersburg, 1992), 208 p. (In Russ.)
- 16 L. G. Glikman, I. F. Spivak-Lavrov, *Pisma Zh. Tekh. Fiz.* 16(13), 26–29 (1990). (In Russ.)
- 17 M. Ishihara, Y. Kammei, H. Matsuda, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* 363(1, 2), 440–444 (1995).
- 18 O. A. Baisanov, I. F. Spivak-Lavrov, A. Sh. Amantaeva, Patent No. 8948 (Astana, National Institute of Intellectual Property, 2023). (In Russ.)
- 19 E. I. Konovalova, L. V. Yablokova, *Chislennyye metody matematicheskogo analiza* (Samara Univ. Press, Samara, 2022), 149 p. (In Russ.)
- 20 B.P. Demidovich, I.A. Maron, E.Z. Shuvalova, *Chislennyye metody analiza. Priblizhenie funktsii, differentsial'nye i integral'nye uravneniya* (Lan', 5th ed., 2022), 400 p. (In Russ.)

Мақала тарихы:

Түсті – 03.05.2024

Түзетілген түрде түсті – 17.06.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Article history:

Received 3 May 2024

Received in revised form 17 June 2024

Accepted 8 September 2024

Авторлар туралы мәлімет:

1. **И.Ф. Спивак-Лавров** – физ.мат.ғыл.докт., проф. Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. email: spivakif@rambler.ru

2. **А.Ш. Амантаева** (автор корреспондент) – Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. email: amantaeva.80@mail.ru

3. **О.А. Байсанов** – физ.мат.ғыл.канд., Екі мәрте Кеңес Одағының батыры Т. Ж. Бегельдинов ат. ӘҚК Әскери институты, Ақтөбе қ., Қазақстан email: baisanov@mail.ru

4. **Т.Ж. Шугаева** – PhD, Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. email: tlektres21@mail.ru

Information about authors:

1. **I.F. Spivak-Lavrov** – Dr. Phys. Math. Sci., Prof., K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan. email: spivakif@rambler.ru

2. **A.Sh. Amantayeva** (corresponding author) – K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan. email: amantaeva.80@mail.ru

3. **O.A. Baisanov** – Cand. Phys. Math. Sci., Military Institute of Air Defense Forces named after twice Hero of the Soviet Union T.Ya.Begeldinov, Aktobe, Kazakhstan. email: baisanov@mail.ru

4. **T.Zh. Shugaeva** – PhD, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan. email: tlektres21@mail.ru

МРНТИ 29.05.45

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v90i3-011>Т.А. Тухфатуллин^{1,2*}, В.Ф. Грищенко², Д.В. Исмаилов^{2,3,4}, Г.И. Гордиенко²,Ж.Т. Накысбеков^{2,4}, Б.А. Тронин^{4,5}, С. Белуччи⁶¹Алматинский филиал НИЯУ МИФИ, г. Алматы, Казахстан²ТОО «Институт ионосферы», г. Алматы, Казахстан³Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, г. Алматы, Казахстан⁴Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан⁵ТОО Исследовательский центр «KazAlfaTech», г. Алматы, Казахстан⁶Национальный институт ядерной физики: Фраскати, г. Лацио, Италия*e-mail: tta@tpu.ru

РАСЧЕТ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ В НАНОСТРУКТУРАХ ГРАФЕНА

В настоящее время в Республике Казахстан в рамках стратегических направлений космической отрасли развиваются фундаментальные и прикладные научные космические исследования, а также решаются практические задачи с использованием космических технологий. В данных исследованиях особое внимание уделяется вопросам надежности бортовой аппаратуры в условиях комплексного воздействия факторов космического пространства. При разработке и проектировании таких работ, как стыковка и сборка элементов орбитальных станций, дистанционное управление автоматическими межпланетными станциями и многие другие, используется математическое и компьютерное моделирование, которое является высокоэффективным и относительно низкзатратным методом.

Цель данной работы - исследование зависимости потерь энергии релятивистских ионов космического излучения при прохождении частиц через наноструктуры графена с целью прогнозирования их радиационной стойкости при воздействии частиц космического излучения. В работе выполнено моделирование траекторий и потерь энергии релятивистских ионов при прохождении через кристаллы графита. Получены численные значения критических углов каналирования в кристалле графита. Показано, что потери энергии ионов не зависят от точки влета иона в кристалл и резко возрастают с уменьшением их энергии в диапазоне энергий менее 1000 МэВ/нуклон.

Ключевые слова: космических лучи, ионизационные потери энергии, каналирование.

Т.А. Tukhfatullin^{1,2*}, V.F. Grichshenko², D. Ismailov^{2,3,4}, G.I. Gordienko²,
Zh.T. Nakysbekov^{2,4}, B.A. Tronin^{4,5}, S. Bellucci⁶¹Almaty Branch of NRNU MEPhI, Almaty, Kazakhstan²Ionosphere Institute LLP, Almaty, Kazakhstan³K.I. Satpayev Kazakh National Research Technical University, Almaty, Kazakhstan⁴Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan⁵LLP Research Center "KazAlfaTech", Almaty, Kazakhstan⁶National Institute of Nuclear Physics: Frascati, Lazio, Italy*e-mail: tta@rpu.ru

Ionization energy losses of cosmic rays in graphene nanostructures calculation

Currently, in the Republic of Kazakhstan, within the framework of the strategic directions of the space industry, fundamental and applied scientific space research is being developed, and practical problems are being solved using space technology. In these studies, special attention is paid to the reliability of on-board equipment under the complex influence of outer space factors. In the development and design of such work as docking and assembly of elements of orbital stations, remote control of automatic interplanetary stations and many others, mathematical and computer modeling is used, which is a highly effective and relatively low-cost method.

The purpose of this work is to study the dependence of the energy losses of relativistic ions of cosmic radiation when particles pass through graphene nanostructures in order to predict their radiation resistance when exposed to cosmic radiation particles. The simulation of the trajectories and energy losses of relativistic ions during passing through graphite crystals were performed. Numerical values of the critical channeling angles in a graphite crystal are obtained. It is shown that ion energy losses do not depend on the point of entry of the ion into the crystal and increase sharply with decreasing energy in the energy range less than 1000 MeV/nucleon.

Key words: cosmic rays, ionization energy losses, channeling.

Т.А. Тухфатуллин^{1,2*}, В.Ф. Грищенко², Д.В. Исмаилов^{2,3,4}, Г.И. Гордиенко²,
Ж.Т. Накысбеков^{2,4}, Б.А. Тронин^{4,5}, С. Белуччи⁶

¹Ұлттық ядролық зерттеу университеті МИФИ Алматы қаласындағы филиалы, Алматы қ., Қазақстан

²«Ионосфера институты» ЖШС, Алматы қ., Қазақстан

³Қ.И. Сатпаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы қ., Қазақстан

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

⁵«KazAlfaTech» зерттеу орталығы ЖШС, Алматы қ., Қазақстан

⁶Ұлттық ядролық физика институты: Фраскати, Лацио қ., Италия

*e-mail: tta@tpu.ru

Графен наноқұрылымдарындағы ғарыштық сәулелердің иондалу энергиясының шығындарын есептеу

Қазіргі уақытта Қазақстан Республикасында ғарыш саласының стратегиялық бағыттары мен бағдарларының шеңберінде іргелі және қолданбалы ғылыми ғарыштық зерттеулер дамып бара жатыр, сонымен қатар ғарыштық технологияларды пайдалана отырып практикалық мәселелер де шешіліп жатыр. Бұл зерттеулерде ғарыш кеңістігі факторларының кешенді әсері жағдайында борттық аппаратураның сенімділік мәселелеріне ерекше назар аударылып жатыр. Қазіргі уақытта орбиталдық станция элементтерін қондыру және құрастыру, ғаламшарлық автоматты станцияларды қашықтан басқару және сол сияқты жұмыстарды әзірлеу және жобалау кезінде математикалық және компьютерлік модельдеу қолданылып жатыр, бұл жоғары тиімділікті көрсетеді және салыстырмалы түрде арзан әдіс болып табылады.

Бұл жұмыстың мақсаты - ғарыштық сәулеленуге графен наноқұрылымдарының төзімділігін болжау мақсатында олардан ғарыштық релятивистік бөлшектер өткен кездегі энергия шығындарының тәуелділігін зерттеу. Бұл жұмыста графит кристалдарынан релятивистік иондардың өту кезінде олардың траекториялары мен энергия шығынын модельдеу орындалды. Графит кристалындағы критикалық арналу бұрыштарының сандық мәндері алынды. Ионның энергия шығыны ионның кристалға ену нүктесіне тәуелді емес екендігі және ионның энергиясы 1000 МэВ/нуклоннан аз диапазонында энергия шығыны күрт өсетіні көрсетілді.

Түйін сөздер: ғарыштық сәулелер, иондаушы энергия шығыны, арналу.

Введение

В настоящее время в Казахстане в рамках стратегических направлений отечественной космической отрасли развиваются фундаментальные и прикладные научные космические исследования, а также решаются практические задачи с использованием космических технологий. Выполнен запуск телекоммуникационных спутников «KazSat-2,-3», спутников дистанционного зондирования Земли «KazEOSat-1,-2»; разрабатываются новые космические системы. Поэтому особое внимание уделяется

вопросам надежности бортовой аппаратуры в условиях комплексного воздействия факторов космического пространства (ФКП).

Мировая практика эксплуатации космических аппаратов (КА) различного назначения показала, что в результате воздействия ионизирующего излучения и других факторов космического пространства в системах космической техники происходят нештатные ситуации, которые приводят к их преждевременной деградации, в том числе и прекращению функционирования КА. Так, накоплен значительный статистический материал

по отказам спутников серии «SPOT» [1] других КА. Отмечается корреляция между интенсивностью отказов и изменением радиационной обстановки в околоземном космическом пространстве (КП) [2].

Оценка радиационной обстановки космического пространства

Радиационная обстановка космического пространства характеризуется воздействием в КП солнечных космических лучей (СКЛ), галактических космических лучей (ГКЛ), аномальных КЛ (АКЛ) и частиц радиационных поясов (РПЗ). В работе [3] представлены энергетические спектры потоков частиц ГКЛ для геостационарной орбиты и орбиты МКС в годы минимума и максимума солнечной активности.

Следует отметить, что СКЛ и ГКЛ имеют постоянный зарядовый состав и энергетический спектр. Приведем основные данные по энергетическому и массовому спектрам КЛ.

Солнечные космические лучи. Основными компонентами СКЛ являются протоны и электроны. Кроме них в солнечном спектре присутствуют тяжелые ядра (групп С, N, O, Fe) с энергиями от 10 до 100 МэВ/нуклон, интенсивность которых составляет $(10^{-4} \div 10^{-6}) \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ МэВ}^{-1}$ и средняя энергия не превышает 10^9 эВ .

В СКЛ содержание легких ядер с зарядом $Z \sim 2 \div 5$ на несколько порядков превышает концентрацию других КЛ. В экспериментах, проведенных во время спокойного Солнца, зарегистрированы большие потоки ионов С, N, O и He с энергиями $E = 1 \div 28 \text{ МэВ/нуклон}$. Группа ядер железа ($Z=26 \div 28$) по интенсивности несколько меньше ядер С, N, O, но охватывает больший энергетический диапазон.

Расчеты, выполненные авторами работы, показали, что потоки электронов зависят от уровня солнечной активности. Так, на орбите МКС для электронов с $E = 0,1 \text{ МэВ}$ в годы максимума солнечной активности поток составляет $10^5 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ МэВ}^{-1}$. В то время как на ГСО он составляет $8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ МэВ}^{-1}$. Для протонов, соответственно, $8 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ МэВ}^{-1}$ и $9 \cdot 10^7 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1} \text{ МэВ}^{-1}$. Значения этих величин для ВЭО приближаются к данным на ГСО.

Энергетический интервал протонов простирается от 10 до 200 МэВ на высотах больше 1000 км. Но максимум интенсивности попадает на протоны с энергией 30 МэВ на высоте 500 км и составляет $\Phi = 10^6 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$, а на высоте 350 км $\Phi = 10^4 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ [3, 4].

Галактические космические лучи. В зарядовом составе первичных ГКЛ значительно выделяются по интенсивности группы ядер С, N, O и Fe, Ni. Зарядовый состав тяжелых ядер КЛ охватывает большую часть известных элементов, а энергетический спектр простирается от 0,1 МэВ/нуклон до более чем 1 ГэВ/нуклон. Общепринято, что энергетический спектр ГКЛ заканчивается в области энергий $10^{17} \div 10^{18} \text{ эВ}$.

Энергетический интервал протонов простирается от 10 до 200 МэВ на высотах больше 1000 км. Но максимум интенсивности на высоте 500 км попадает на протоны с энергией 30 МэВ и составляет $\Phi = 10^6 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$, а на высоте 350 км $\Phi = 10^4 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$.

На этапе выведения на орбиту материалы и конструкции всех КА подвергаются воздействию частиц *радиационных поясов Земли* (РПЗ), в том числе электронами, протонами и более тяжелыми ионами, которые возникают во время солнечных вспышек и захватываются геомагнитным полем. РПЗ разделяются на внутренний, центр которого в экваториальной плоскости находится на высоте около 3 000 км, и внешний с центром на высоте 15-20 тыс. км. Энергетический интервал электронов в РПЗ составляет от 0.3 МэВ до 100 МэВ. Максимальная интенсивность приходится на электроны с энергией 250 КэВ и составляет $\Phi = 10^7 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. Поток электронов с энергией 3.0 МэВ достигает значений $\sim 10^5 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. В таблице 1 представлена радиационная компонента факторов космического пространства.

Таблица 1 – Радиационная обстановка в околоземном космическом пространстве

Вид корпускулярного излучения	Состав излучения	Энергия частиц, МэВ	Плотность потока, $\text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$
ГКЛ	протоны	$10^2 \div 10^{15}$	$1,5 \cdot 10^4$
	ядра гелия	(для всех групп ядер)	$1,0 \cdot 10^3$
	более тяжелые ядра		$1,2 \cdot 10^1$
СКЛ	протоны	$1 \div 10^4$	$10^7 \div 10^8$
РПЗ	протоны	$1 \div 30$	$3 \cdot 10^{11}$
		> 30	$2 \cdot 10^8$
	электроны	$0,1 \div 1,0$	$1 \cdot 10^{12}$
		$> 1,0$	$1 \cdot 10^{10}$
Горячая Магнитосферная плазма	протоны, электроны	$10^{-3} \div 10^{-1}$	$10^{11} \div 10^{14}$

Следует отметить, что имеющиеся прогнозируемые значения отказов и вероятностные распределения потоков КЛ на различных орбитах КА значительно расходятся между собой [5]. Также необходимо отметить, что в наземных моделирующих условиях невозможно создать испытательные стенды, которые бы имитировали комплексное воздействие всех факторов космического пространства (ФКП). Поэтому прогнозирование надежности космических систем, основываясь только на наземных данных, может привести к значительным ошибкам в системе управления и работе бортовых вычислительных комплексов при эксплуатации в реальных условиях.

В настоящее время при разработке и проектировании таких работ, как стыковка и сборка элементов орбитальных станций, дистанционное управление автоматическими межпланетными станциями и многие другие, когда принятие решений требует предварительного “проигрывания” нескольких вариантов развития событий и их последствий используется математическое и компьютерное моделирование, являющееся высокоэффективным и относительно низкзатратным методом. Известно, что при прохождении релятивистских заряженных частиц через монокристалл может происходить ряд явлений, отражающих периодическое расположение атомов в кристалле. Если частицы входят в кристалл почти параллельно кристаллографическим осям или плоскостям, они захватываются соответствующим потенциалом, совершая колебательное движение в поперечном к плоскости или оси направлении. Этот процесс называется каналированием. Для моделирования процессов, связанных с каналированием, был разработан компьютерный код – “Basic Channeling with Mathematica” BCM-2.0 [6]. Данный компьютерный код позволяет рассчитывать траектории легких (электронов и позитронов) [7, 8], тяжелых (ионов) релятивистских заряженных частиц в кристаллах [9, 10], а также излучение, возникающее при каналировании [11, 12]. Компьютерный код учитывает процессы многократного рассеяния и торможения частиц в кристалле [13]. Результаты, полученные с помощью данного кода, хорошо согласуются с экспериментами по взаимодействию релятивистских частиц с кристаллами [13-16].

Целью данной работы является исследование зависимости потерь энергии релятивистских ионов космического излучения при прохождении частиц через наноструктуры графена, который широко используется в конструкциях

космических аппаратов для прогнозирования их радиационной стойкости.

Моделирование траекторий ионов при рассеянии в кристалле графита

Для расчета траекторий движения частиц в кристаллах можно с хорошей точностью заменить потенциал взаимодействия частицы с кристаллом усредненным потенциалом кристаллической плоскости $V(z)$.

$$V(z) = \sum_i \frac{1}{S} \int_S V(\mathbf{r}) dxdy, \quad (1)$$

где $V(\mathbf{r})$ – потенциал отдельного атома, S – площадь, приходящаяся на один атом плоскости. Суммирование ведется по всем плоскостям перпендикулярным направлению Z .

Для расчета потенциала атома используется атомный фактор рассеяния электронов, который связан с потенциалом атома следующим соотношением [18]:

$$f_e(s) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \int_0^\infty V(\mathbf{r}) r^2 \frac{\sin 4\pi sr}{4\pi sr} dr, \quad (2)$$

где m_0 – масса электрона, $s = \sin \theta_r / \lambda$, θ_r – угол рассеяния электрона с длиной волны λ . Для получения значений $f_e(s)$ использовалась подгонка по методу наименьших квадратов к табличным значениям из [19] по шести Гауссианам [20]:

$$f_e(s) = \sum_{i=1}^6 a_i \exp(-b_i s^2). \quad (3)$$

Для модельных расчетов был выбран кристалл графита, имеющий структуру сходную с графеном. Результаты расчета потенциала кристаллических плоскостей кристалла графита представлены на рис. 1. (а – для отрицательно заряженных частиц, б – для положительно заряженных частиц). Глубина потенциальной ямы составляет $U_0 = 19,97$ эВ, а период изменения потенциала равен межплоскостному расстоянию в кристалле графита $d_p = 2,13 \text{ \AA}$. Следует отметить, что для положительно заряженных частиц потенциал близок к параболическому, поэтому период колебаний для любой точки влета частицы в кристалл будет постоянным.

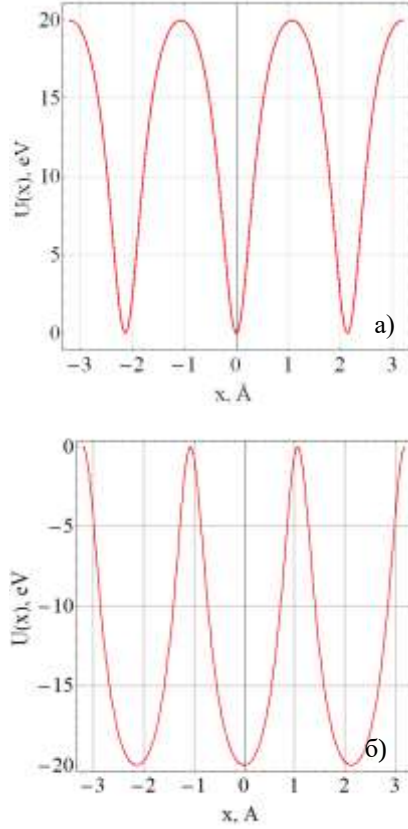


Рисунок 1 – Потенциал кристаллических плоскостей кристалла графита

В приближении каналирования уравнения движения релятивистских ионов в периодическом потенциале кристаллической решетки $U(x)$ имеют следующий вид

$$\begin{aligned} \gamma M \ddot{x} &= F_x = -Z_e \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}, \\ \gamma M \ddot{z} &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

здесь M – масса иона, Z_e – зарядовое число иона, γ – Лоренц фактор, F_x – сила, действующая на ион в периодическом поле кристалла. Пусть ось OZ параллельна плоскостям каналирования, а вектор скорости иона при влете в кристалл лежит в плоскости XOZ . В этом случае ион движется с постоянной скоростью $v_z = \text{const}$ вдоль плоскостей каналирования (параллельно оси OZ) и колеблется в направлении оси OX . Начальными условиями для системы уравнений (4) являются точка влета в кристалл $x(t=0) = x_0$ и начальная скорость $v_x(t=0) = v \sin \theta$ (θ – угол влета, то есть угол между вектором начальной скорости и осью OZ).

Численное решение уравнений движения (4) было выполнено с использованием компьютерного кода ВСМ–2.0 [6], разработанного авторами. Начальные точки влета равномерно распределялись в пределах одного периода

изменения потенциала $U(x)$. Если угол падения иона на кристалл меньше критического угла каналирования θ_c , то ион совершает периодическое (финитное) движение между плоскостями каналирования. Критический угол каналирования ионов определяется следующей формулой:

$$\theta_c = \sqrt{\frac{2ZU_0}{\beta^2 E}}, \quad (5)$$

где U_0 – глубина потенциальной ямы, $E = \gamma M c^2$ – полная энергия иона, $\beta = \frac{v}{c}$ (c – скорость света). Значения критического угла каналирования для различных ионов и кинетических энергий T приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Критический угол каналирования релятивистских ионов в кристалле графита

Ион	$T = 10$ МэВ/нуклон θ_c , мрад	$T = 100$ МэВ/нуклон θ_c , мрад	$T = 1000$ МэВ/нуклон θ_c , мрад
^1H	0.0811	0.0262	0.0094
^7Li	0.1403	0.0445	0.0145
^{12}C	0.1983	0.0628	0.0202
^{14}N	0.2143	0.0679	0.0218
^{16}O	0.2291	0.0725	0.0232
^{56}Fe	0.4129	0.1306	0.0414

Ионизационные потери энергии релятивистских ионов при прохождении через кристаллы рассчитывались с использованием программного пакета АТИМА, разработанного в GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Germany) [21]. Данный пакет позволяет рассчитать потери энергии иона на единицу длины пробега в зависимости от энергии иона. В пакете учитываются поправки Линдхарда – Соренсена [22] к известной формуле Бете-Блоха (см., например, [23]). При проведении численных расчетов кристалл делился на несколько частей. После прохождения каждой i -ой части кинетическая энергия T_i иона уменьшалась на величину ионизационных потерь на предыдущем шаге ΔT_i , вычисленную при помощи пакета АТИМА. После этого вычислялись Лоренц-фактор и скорость иона при влете в следующую часть кристалла

$$T_{i+1} = T_i - \Delta T_i,$$

$$\gamma_{i+1} = 1 + T_{i+1} / M c^2, \quad (6)$$

$$\beta_{i+1} = \sqrt{1 - 1/\gamma_{i+1}^2}$$

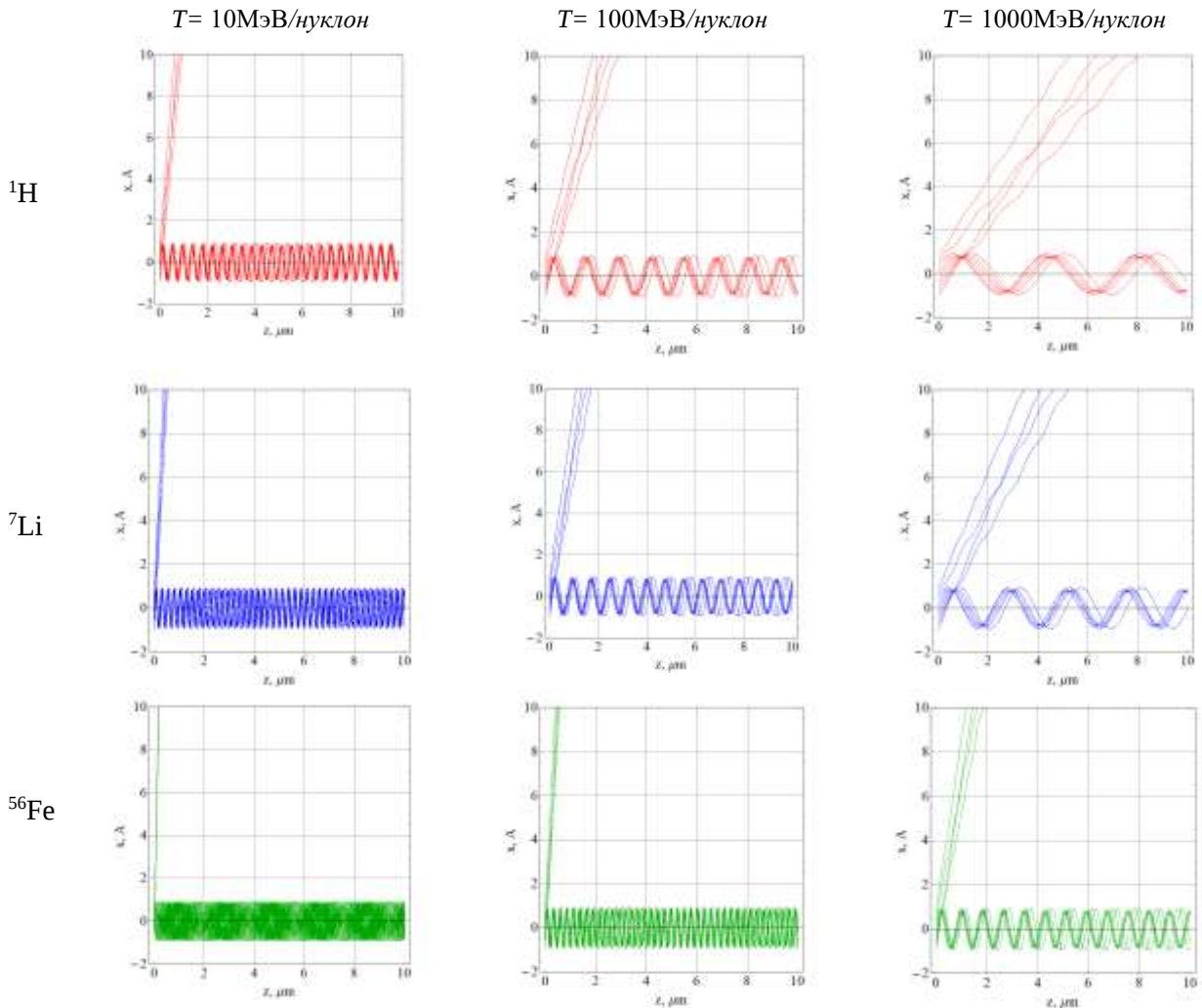


Рисунок 2 – Типичные траектории релятивистских ионов при каналировании в кристалле графита. Угол влета ионов кристалл равен $0,8 \theta_c$

Результаты моделирования траекторий и потерь энергии ионов при рассеянии в кристалле графита. Обсуждение

Для расчетов были выбраны легкие ионы ^1H , ^7Li , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , а также тяжелые ионы ^{56}Fe , составляющие большую часть космического излучения. Кинетическая энергия ионов выбиралась в интервале от 1 МэВ до 0,1 ГэВ на нуклон. Толщины кристаллов варьировались от 5 до 20 мкм.

Типичные траектории релятивистских ионов при каналировании в кристалле графита показаны на рисунке 2. Угол падения всех ионов на кристалл был равен $0,8 \theta_c$. Если энергия поперечного движения иона меньше, чем глубина потенциальной ямы U_0 , то ион совершает колебательное движение между плоскостями кристалла. Также на графиках видно, что с увеличением кинетической энергии иона

уменьшается число колебаний ионов, совершаемых в поперечном направлении.

Результаты расчета потерь энергии релятивистских ионов ^1H , ^7Li , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{56}Fe представлены на рисунке 3. Угол влета также равен углу $0,8 \theta_c$ для соответствующей кинетической энергии ионов.

Начало графиков ограничено равенством потерь энергии ионов при пролете через кристалл и начальной кинетической энергии ионов. Расчеты показывают, что потери энергии иона не зависят от точки влета иона в кристалл, что объясняется тем, что длина пути слабо зависит от координаты x_0 точки влета иона. Потери энергии ионов резко возрастают с уменьшением энергии в диапазоне энергий менее 1000 МэВ. Также потери энергии увеличиваются с ростом зарядового числа ионов. При увеличении толщины кристалла потери энергии также увеличиваются (см. рис. 3б), так как в этом случае растет длина пробега иона в кристалле.

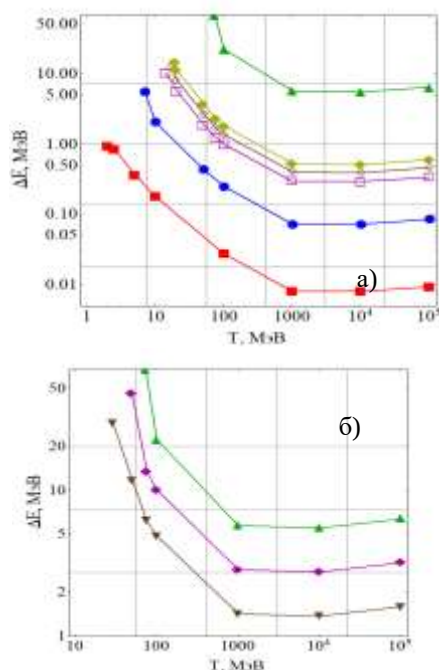


Рисунок 3 – Зависимость потерь энергии релятивистских ионов в кристалле графита от энергии ионов. (а) толщина кристалл $L = 20 \mu\text{м}$, $\blacksquare$ – ^1H , $\bullet$ – ^7Li , $\square$ – ^{12}C , $\diamond$ – ^{14}N , $\blacklozenge$ – ^{16}O , $\blacktriangle$ – ^{56}Fe ; (б) ионы ^{56}Fe , $\blacklozenge$ – $L = 5 \mu\text{м}$, $\diamond$ – $L = 10 \mu\text{м}$, $\blacktriangle$ – $L = 20 \mu\text{м}$

Заключение

Таким образом, в работе выполнено моделирование траекторий и потерь энергии релятивистских ионов при прохождении через кристалл графита. Получены численные значения критических углов каналирования в графите. Показано, что потери энергии иона не зависят от точки влета иона в кристалл и резко возрастают с уменьшением энергии в диапазоне энергий менее 1000 МэВ/нуклон.

Благодарности

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № BR21882375 «Создание и модернизация изделий космической техники повышенной надежности наземного и космического сегментов и исследование ионосферы»).

Литература

- 1 Белов А.В., Виллорези Дж., Дорман Л.И. Влияние космической среды на функционирование искусственных спутников Земли// Геомагнетизм и аэронавигация. – 2004. – Т. 44. – № 4. – С. 502.
- 2 Грищенко В.Ф. Изучение причин и механизма отказов модулей памяти на пилотируемых комплексах// Состояние и перспективы научной и инновационной деятельности в космической сфере Республики Казахстан: Материалы научно-практической конференции, Алматы, 2005. – С. 380.
- 3 Кузнецов Н.В., Панасюк М.И. Космическая радиация и прогнозирование сбоев- и отказоустойчивости интегральных микросхем в бортовой аппаратуре космических аппаратов// Вопросы атомной науки и техники, сер. Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру. – 2001. – №. 1-2. – С. 3.
- 4 Кузнецов Н.В., Панасюк М.И., Подзолко М. В. Сравнение измеренных и прогнозируемых значений поглощенных доз при воздействии Галактических космических лучей// Космические исследования. – 2019. – Т. 57. – № 1. – С. 57.
- 5 Доценко О.В., Дмитренко В.Я., Тарасов В.Б., Шовкопляс Ю.А. Метод расчета интенсивности одиночных событий с учетом реальной защищенности ИС в местах их размещения внутри космического аппарата// Космічна наука і технологія. – 2007. – Т.13. – № 3. – С. 19.
- 6 Abdrashitov S.V. et al. BCM-2.0 – The new version of computer code “Basic Channeling with Mathematica©”// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2017. – Vol. 402. – P. 106.
- 7 Takabayashi Y. et al. Channeling of Relativistic Electrons in Half-Wave Silicon Crystal and Corresponding Radiation// J. Phys. Conf. Ser. – 2015. – Vol. 635. – Art. No 062007.
- 8 Pivovarov Y. L., Tukhfatullin T. A. Flux dynamics and angular distributions of relativistic electrons and positrons passing through a half-wave crystals// J. Phys. Conf. Ser. – 2014 –Vol. 517. – Art. No 012028.
- 9 Bogdanov O.V. et al. Half-wave-crystal channeling of relativistic heavy ions at super-FRS GSI/FAIR// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2021. – Vol. 486. – P. 22.
- 10 Bogdanov O.V., Tukhfatullin T.A. Half-wavelength-crystal channeling of relativistic ions and its possible application for a beam deflection// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. – 2024. – Vol. 1061. – Art. No 169122.
- 11 Korotchenko K. B. et al. Angular distributions of DCR from axially channeled electrons in 110 LiF crystals// J. Phys. Conf. Ser. – 2010. – Vol. 236. – Art. No 012016.
- 12 Korotchenko K.B., Pivovarov Yu.L., Takabayashi Y., Dabagov S.B. Cherenkov-Channeling radiation from sub-GeV relativistic electrons// Phys. Lett. B. – 2019. – Vol. 795. P. 592.

- 13 Fiks E.I. et al. Slowing-down of relativistic heavy ions and its influence on angular distributions of Vavilov–Cherenkov radiation// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2013. – Vol. 314. P. 51.
- 14 Takabayashi Y., Bagrov V.G., Pivovarov Y.P., Bogdanov O.V., Tukhfatullin T.A. Angular distributions of relativistic electrons under channeling in half-wavelength crystal and corresponding radiation// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2015. – Vol. 355. – P. 188.
- 15 Takabayashi Y. et. al. Channeling and parametric X-ray studies at the SAGA Light Source// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2013. – Vol. 315. – P. 105.
- 16 Takabayashi Y., Pivovarov Yu.L., Tukhfatullin T.A. Observation of sub-GeV electrons mirrored by ultrathin crystalline Si// Phys. Lett. B. – 2015. – Vol. 751. – P. 453.
- 17 Dalkarov O. D. et. al. Orientation effect in the neutron yield in deuterated Pd target bombarded by deuterium ion beam// Phys. Rev. Accel. and beams. – 2019. – Vol. 22. – Art. No 034201.
- 18 Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – Москва: Наука, 1978. – 780 с.
- 19 Вайнштейн Б. К. Структурная электронография. Москва: Академии наук СССР, 1956. – 342 с.
- 20 Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree–Fock X-ray and electron scattering factors// Acta Crystall. A. – 1968. – Vol. 24. – P. 390.
- 21 <http://www-linux.gsi.de/~weick/atima>
- 22 Lindhard J., Sorensen A.H. Relativistic theory of stopping for heavy ions// Phys. Rev. A. – 1996. – Vol. 53. – P. 2443.
- 23 Bichsel H., Groom D.E., Klein S.R. Passage of particles through matter// Rev. of Part. Phys., Phys. Lett. B. – 2008. – Vol. 667. – P. 267.

References

- 1 A.V. Belov, D. Villorezy, L.I. Dorman, Geomagnetism and Aeronomy 4, 502 (2004). (In Russ.)
- 2 V.F. Grishchenko, The state and prospects of scientific and innovative activities in the space sphere of the Republic of Kazakhstan: Proc. of the sci. and pract. conf., (Almaty, 2005) p. 380. (In Russ.)
- 3 N.V. Kuznetsov, M.I. Panasuk, Issues of atomic science and technology, Physics of radiation effects on electronic equipment, 1-2, 3 (2001). (In Russ.)
- 4 N.V. Kuznetsov, M.I. Panasuk, M.V. Podzolko, Space exploration, 1, 57 (2019). (In Russ.)
- 5 O.V. Dotsenko, V.Ya. Dmitrienko, V.B. Tarasov, Yu.A. Shovkoplyas, Space science and technology 3. 19 (2007). (In Russ.)
- 6 S.V. Abdrashitov et al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 402, 106 (2017).
- 7 Y. Takabayashi et al., J. Phys. Conf. Ser. 635, 062007 (2015).
- 8 Y.L. Pivovarov, T.A. Tukhfatullin, J. Phys. Conf. Ser. 517, 012028 (2014).
- 9 O.V. Bogdanov et al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 486., 22 (2021).
- 10 O.V. Bogdanov, T.A. Tukhfatullin, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A 1061, 169122 (2024).
- 11 K. B. Korotchenko et al., J. Phys. Conf. Ser. 236, No 012016 (2010).
- 12 K.B. Korotchenko, Yu.L. Pivovarov, Y. Takabayashi, S.B. Dabagov, Phys. Lett. B 795, 592 (2019).
- 13 E.I. Fiks et al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 314, 51 (2013).
- 14 Y. Takabayashi, V.G. Bagrov, Y.P. Pivovarov, O.V. Bogdanov, T.A. Tukhfatullin, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 355, 188 (2015).
- 15 Y. Takabayashi et. al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 315, 105 (2013).
- 16 Y. Takabayashi, Yu.L. Pivovarov, T.A. Tukhfatullin, Phys. Lett. B 751, 453 (2015).
- 17 O. D. Dalkarov et. al., Phys. Rev. Accel. and beams 22, 034201 (2019).
- 18 Ch. Kittel, Introduction to Solid State Physics, (John Wiley & Sons, Inc., 2005), 700 p.
- 19 B. K. Weinstein, Structural electron diffraction, (Moscow: USSR Academy of Sciences, 1956, 342 p. (In Russ.)
- 20 P.A. Doyle, P.S. Turner, Acta Crystall. A 24, 390 (1968).
- 21 <http://www-linux.gsi.de/~weick/atima>
- 22 J. Lindhard, A.H. Sorensen, Phys. Rev. A 53, 2443 (1996).
- 23 H. Bichsel, D.E. Groom, S.R. Klein, Rev. of Part. Phys., Phys. Lett. B 667, 267 (2008).

История статьи:

Поступила – 07.06.2024

Принята – 18.08.2024

Article history:

Received 7 June 2024

Accepted 18 August 2024

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Тимур Тухфатуллин** (автор корреспондент) – канд.физ.-мат.наук., доцент, Алматинский филиал НИЯУ МИФИ г. Алматы, Казахстан, email: tta@tpu.ru.

2. **Валентина Грищенко** – канд.физ.-мат.наук., доцент, ТОО «Институт ионосферы» г. Алматы, Казахстан, email: labreab@mail.ru

3. **Данияр Исмаилов** – PhD, ТОО «Институт ионосферы», Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, Казахстан, email: ismailov_daniyar_v@bk.ru.

4. **Галина Гордиенко** – канд.физ.-мат.наук., доцент, ТОО «Институт ионосферы» г. Алматы, Казахстан, email: ggordiyenko@mail.ru

5. **Жасулан Накысбеков** – PhD, ТОО «Институт ионосферы», Казахский национальный университет им. аль-Фараби г. Алматы, Казахстан, email: Zhassulan.Nakysbekov@gmail.com

6. **Борис Тронин** – Казахский национальный университет им. аль-Фараби, ТОО Исследовательский центр «KazAlfaTech» г. Алматы, Казахстан, email: troninboris@mail.ru

7. **Стефано Беллуччи** – PhD, профессор, Национальный институт ядерной физики г. Фраскати, Италия, email: stefano.bellucci@lnf.infn.it

Information about authors:

1. **Timur Tukhfatullin** (corresponding author) – PhD (candidate of sciences), Almaty Branch of NRNU MEPhI (Almaty, Kazakhstan, email: tta@tpu.ru

2. **Valentina Grichshenko** – PhD (candidate of sciences), Ionosphere Institute LLP Almaty, Kazakhstan, email: labreab@mail.ru

3. **Daniyar Ismailov** – PhD, Ionosphere Institute LLP, Al-Farabi Kazakh National University, Satpayev University Almaty, Kazakhstan email: ismailov_daniyar_v@bk.ru

4. **Galina Gordienko**, PhD, Ionosphere Institute LLP Almaty, Kazakhstan, email: ggordiyenko@mail.ru

5. **Zhassulan Nakysbekov** – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, email: Zhassulan.Nakysbekov@gmail.com

6. **Boris Tronin** – Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, email: troninboris@mail.ru

7. **Stefano Bellucci** – PhD, Laboratori Nazionali di Frascati Frascati, Italy, email: stefano.bellucci@lnf.infn.it

В.М. Юров^{1*} , В.И. Гончаренко² , В.С. Олешко² , К.Н. Жангозин¹ 

¹ТОО «ТСК Восток», г. Караганда, г. Астана, Казахстан

²Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

*e-mail: exciton@list.ru

КВАНТОВАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МЕТАЛЛОВ

В настоящей работе предлагается модель определения толщины поверхностного слоя металлов и квантовая структура этого слоя. Атомно-гладкий металл представляется в виде схемы: нанослой $\rightarrow$ мезослой $\rightarrow$ объемная фаза, которые отличаются друг от друга природой размерных эффектов. В объемной фазе размерного эффекта нет. Толщина поверхностного слоя металлов $R(l)$ имеет размер от 1 нм до 10 нм, кроме цезия, т.е. представляют собой наноструктуру. Показано, что уровни энергии E_n нанослоя определяются одним фундаментальным параметром – постоянной кристаллической решетки металла $\dot{a}$. Как только параметр $\dot{a}$ перестает изменяться, спектр квантовых состояний переходит в непрерывный спектр.

Нанослой $R(l)$ представляет собой по E_n ступенчатую функцию, которую нетрудно привести к интегралу Лебега, играющему важную роль в квантовой теории. Квантовые нити (квантовые плоскости) в нанослое $R(l)$ можно трактовать как солитоны, краудионы, дискретные бризеры, переходящие в нанотрещины. Квантовые нити в нанослое $R(l)$ и сам нанослой можно представить как наночастицу диаметром $R(l)$ и в ней происходит предплавление ступенчатым способом. Окончательно показано, все монослои металла существенно отличаются друг от друга.

Ключевые слова: нанослой, мезослой, наноструктура, металл, квантовая структура, квантовая нить, солитон, краудион.

V.M. Yurov^{1*}, V.I. Goncharenko², V.S. Oleshko², K.N. Zhangozin¹

¹TSC Vostok LLP, Karaganda, Astana, Kazakhstan

²Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia

*e-mail: exciton@list.ru

Quantum structure of the surface layer of metals

In this paper, we propose a model for determining the thickness of the surface layer of metals and the quantum structure of this layer. An atomically smooth metal is represented as a diagram: nanolayer $\rightarrow$ mesolayer $\rightarrow$ bulk phase, which differ from each other in the nature of size effects. There is no size effect in the bulk phase. The thickness of the surface layer of metals $R(l)$ has a size from 1 nm to 10 nm, except for cesium, i.e. they represent a nanostructure. It is shown that the energy levels E_n of the nanolayer are determined by one fundamental parameter - the lattice constant of the metal $\dot{a}$. As soon as the parameter $\dot{a}$ stops changing, the spectrum of quantum states passes into a continuous spectrum.

The nanolayer $R(l)$ is a step function in E_n , which can be easily reduced to the Lebesgue integral, which plays an important role in quantum theory. Quantum threads (quantum planes) in the nanolayer $R(l)$ can be interpreted as solitons, crowdions, discrete breathers turning into nanocracks. Quantum threads in the $R(l)$ nanolayer and the nanolayer itself can be represented as a nanoparticle with a diameter of $R(l)$ and pre-melting occurs in it in a stepwise manner. It is finally shown that all metal monolayers differ significantly from each other.

Key words: nanolayer, mesolayer, nanostructure, metal, quantum structure, quantum thread, soliton, crowdion.

В.М. Юров^{1*}, В.И. Гончаренко², В.С. Олешко², К.Н. Жанғозин¹¹TSK Vostok ЖШС, Қарағанды қ., Астана қ., Қазақстан²Мәскеу авиациялық институты (Ұлттық зерттеу университеті), Мәскеу қ., Ресей*e-mail: exciton@list.ru

Металдардың беттік қабатының кванттық құрылымы

Бұл жұмыс металдардың беткі қабатының қалыңдығын және осы қабаттың кванттық құрылымын анықтау моделін ұсынады. Атомдық тегіс металл диаграмма түрінде берілген: наноқабат → мезоқабат → көлемді фаза, бір - бірінен өлшемдік әсер ету сипаты бойынша ерекшеленеді. Жаппай фазада өлшем әсері болмайды. Металдардың беткі қабатының қалыңдығы $R(l)$ цезийден басқа 1 нм - ден 10 нм - ге дейінгі өлшемге ие, яғни олар наноқұрылымды білдіреді. Наноқабаттың E_n энергетикалық деңгейлері бір іргелі a параметрмен – металдың кристалдық тор константасымен анықталатыны көрсетілген. a параметрінің өзгеруі тоқтаған бойда кванттық күйлер спектрі үздіксіз спектрге айналады. $R(l)$ наноқабатты E_n -ге қатысты қадамдық функция болып табылады, оны кванттық теорияда маңызды рөл атқаратын Лебег интегралына оңай келтіруге болады. $R(l)$ наноқабаттағы кванттық жіптерді (кванттық жазықтықтар) нанокректарға айналатын солитондар, краудиондар, дискретті тыныс алулар ретінде түсіндіруге болады. $R(l)$ наноқабаттағы кванттық жіптер мен наноқабаттың өзі диаметрі $R(l)$ нанобөлшек ретінде ұсынылуы мүмкін және онда алдын ала балқыту кезеңді түрде жүреді. Соңында, барлық металл моноқабаттары бір-бірінен айтарлықтай ерекшеленетіні көрсетілген.

Түйін сөздер: наноқабат, мезоқабат, наноқұрылым, металл, кванттық құрылым, кванттық жіп, солитон, краудион.

Введение

Все тела, находящиеся в пространстве, имеют поверхность. По Гиббсу Дж. В. [1] поверхность не имеет толщины и рассматривается как геометрический объект. Согласно подходам Ван-дер-Вальса [2], Гуттенгейма [3] и Русанова [4] поверхностный слой рассматривается как слой конечной толщины. Согласно современным представлениям [5, 6] под поверхностной фазой γ_1 понимают сверхтонкую пленку (поверхностный слой), находящуюся в равновесном состоянии с кристаллической основой (подложкой), свойства и структура которой отличны от объемных свойств γ_2 твердого тела. Экспериментально измерить толщину поверхностного слоя твердых тел научились в 70-80-х годах XX века, например, методом рентгеновской дифракции под скользящими углами (РДСУ) [7]. Принципиальная схема метода РДСУ показана на рис. 1а.

Пучок X-лучей 2 из источника 1 попадает на образец 3 под углом α , равного от долей до одного градуса, Дифрагированный пучок под углом 2θ попадает на детектор 4. Несмотря на простоту схемы метода РДСУ, провести измерение толщины поверхностного слоя чистых металлов $R(l)$ довольно сложно и под силу не каждой лаборатории и в не каждой стране и вот почему. Для германия $R(l) = 3,1$ нм ($1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$), а для золота – $R(l) = 1,2$ нм. Чтобы измерить $R(l)$ нужно довольно мощный источник X-лучей, в качестве

которого в методе РДСУ используют синхротронное излучение (СИ), испускаемое релятивистскими заряженными частицами при повороте в магнитном поле (рис. 1 б) [8].

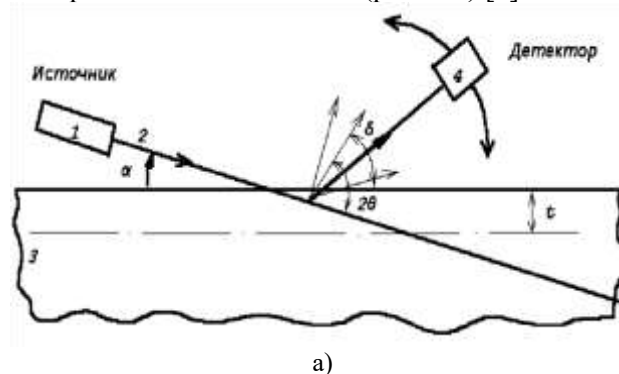


Рисунок 1 – Схема метода РДСУ (а) бустерный синхротрон (б)

Страны, где есть такие источники СИ – это США, Россия, Япония, Англия, Франция, Швейцария, Австралия. На следующем этапе, дело касается образца для измерения $R(I)$. Для образца нужна атомно-гладкая поверхность (АГП) (рис. 2 а) [9]. АГП, иначе их называют сверхгладкие поверхности с высотой шероховатости менее 1 нм (рис. 2 б), являются одним из основных компонентов элементной базы современных нанотехнологий.

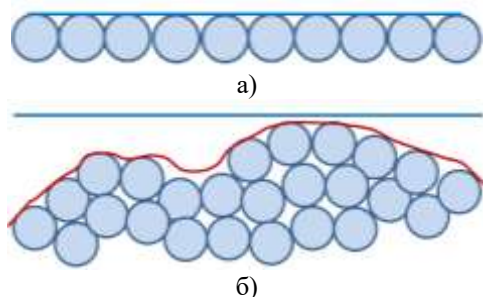


Рисунок 2 – Атомно-гладкая поверхность (а); шероховатая поверхность (ШП) (б)

Различие между АГП и ШП дается критерием Джексона [10] – $\alpha = \Delta H/kT$, где ΔH – энтальпия, k – постоянная Больцмана, T – температура. Считается, что критерий $\alpha > 4$ свидетельствует об АГП, $\alpha < 2$ – об ШП, значения же $2 \leq \alpha \leq 4$ соответствуют промежуточному типу поверхности. В таблице 1 обозначены: $\alpha > 4$ – жирным шрифтом; $\alpha < 2$ – подчеркиванием. Из 54 металлов к ШП относятся 11 металлов; к АГП – 30 металлов; к промежуточному типу – 13 металлов. Большинство сталей относятся к АГП.

По мнению многих авторов [5, 6, 9, 11] под поверхностью понимают несколько атомных

монослоев твердого тела толщиной ~ 1 нм, которые расположены на границе раздела твердого тела с вакуумом, газом, жидкостью, другим твердым телом (рис. 3 а).

В работе [12] вводится понятие естественного поверхностного слоя металла, который по механическим, физическим, а иногда и химическим свойствам, отличается от основного объема металла (рис. 3 б). В этом слое возникают большие напряжения за счет следующих технологических операций: термическая обработка (например, закалка, отпуск, отжиг); химическая обработка (например, карбонизация, азотирование); электрохимическая обработка (например, электролитическое покрытие); физическая обработка (например, имплантация ионов).

Исследование таких поверхностных слоев, основной характеристикой которых является шероховатость поверхности, привело к созданию научного направления – инженерия поверхности [13]. Эта отрасль знаний уделяет повышенное внимание вопросам коррозии металла, трибологии, процессам износа материала и его разрушения. Назовем этот слой металла – технологическим слоем, толщина которого может иметь значения от долей до сотен микрона.

На рис. 3 представлены следующие обозначение: а) 1 – поверхность (1 нм, 1-3 атомных слоя); 2 – ультратонкая пленка (от 1 до 10 нм, 3-30 атомных слоев); 3 – тонкая пленка (от 10 нм до 1 мкм, 30-300 атомных слоев); 4 – объем; б) 1 - адсорбированный слой; 2 - оксидный слой (1-10 микрон); 3 - переходный уровень (10-30 нм); 4 - технологический слой (несколько мм); 5 – объем металла.

Таблица 1 – Критерий Джексона для 54 металлов (М)

М	α	М	α	М	α	М	α	М	α
Li	<u>1.2</u>	In	<u>1.3</u>	Cd	2.5	Pr	2.5	Ac	4.2
Na	<u>1.1</u>	Tl	<u>1.7</u>	Hg	<u>0.9</u>	Nd	2.9	Th	6.5
K	<u>0.9</u>	Si	20.4	Cr	8.5	Sm	3.6	U	5.1
Rb	<u>0.9</u>	Ge	14.8	Mo	11.3	Eu	3.7	Np	3.9
Cs	<u>0.8</u>	Sn	2.9	W	331.7	Gd	4.0	Pu	<u>1.1</u>
Be	4.9	Pb	<u>1.9</u>	Mn	5.4	Tb	4.1	Am	4.0
Mg	3.7	Se	2.1	Tc	9.6	Dy	4.5	Bk	-
Ca	3.7	Te	7.2	Re	13.7	Ho	6.8	-	-
Sr	3.7	Cu	5.2	Fe	5.6	Er	8.0	-	-
Ba	3.1	Ag	4.8	Co	6.2	Tm	6.8	-	-
Al	4.3	Au	5.1	Ni	7.1	Yb	<u>1.3</u>	-	-
Ga	2.3	Zn	2.9	Ce	2.1	Lu	8.9	-	-

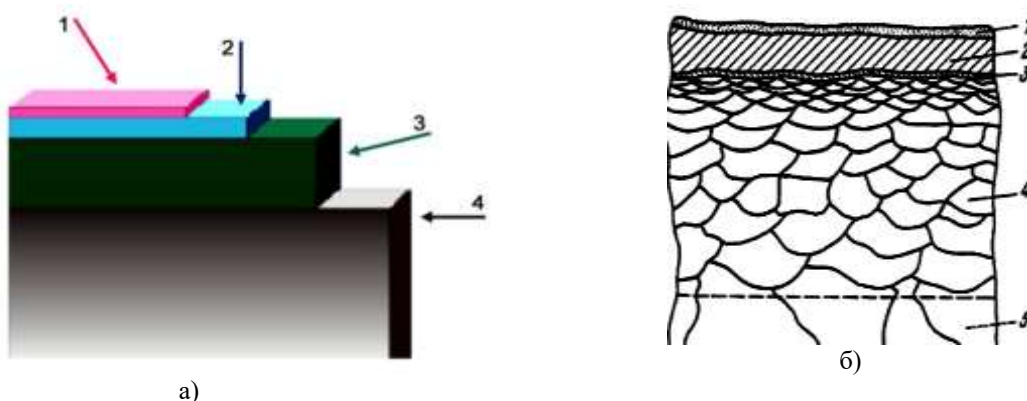


Рисунок 3 – Поверхность, тонкая пленка, покрытие, объем твердого тела [11] (а); естественный поверхностный слой металла [12] (б)

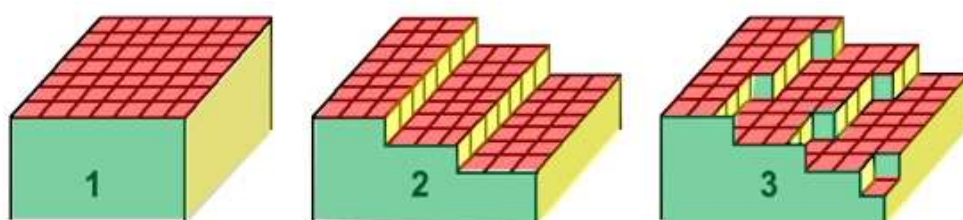


Рисунок 4 – Три типа поверхностей: сингулярные (атомно-гладкие) - 1, вицинальные (ступенчатые) - 2, несингулярные (диффузные) поверхности - 3

Существует несколько методов получения АГП [14]: 1 - химико-механическое полирование; 2 - отжиг в вакууме; 3 - эпитаксиальные методы; 4 - термическое выглаживание; 5 – раскалывание кристаллов в сверх высоком вакууме.

При раскалывании монокристаллов в вакууме по плоскости спайности могут образовываться три типа поверхностей: сингулярные (атомно-гладкие), вицинальные (ступенчатые), несингулярные (диффузные) поверхности (рис. 4) [5, 6].

На сингулярных поверхностях переход от твердой фазы к парообразной фазе осуществляется в пределах одного слоя, на вицинальных – переход осуществляется через несколько плоскостей, отделенных моноатомными ступеньками, а на диффузионных – переход от твердого тела к парообразной фазе осуществляется на протяжении нескольких атомных слоев. Однако толщина слоя неизвестна.

Мы будем рассматривать поверхностный слой как атомно-гладкую поверхность. Модель этого слоя предложена в работах [15, 16] (смотри, ниже).

Цель исследования

В настоящей работе предлагается модель определения толщины поверхностного слоя металлов и квантовая структура этого слоя.

Модель поверхностного слоя металлов

За основу модели мы возьмем наши работы [15, 16], где для толщины поверхностно слоя $R(I)$ твердого тела предложена уравнение:

$$R(I) = \beta \cdot 0.17 \cdot 10^{-9} \vartheta(i), \quad (1)$$

где β – коэффициент $\beta = 1 \text{ (кг/м}^3\text{) ат.}\% \cdot \text{м}$.

Уравнение (1) показывает, что толщина поверхностного слоя атомно-гладкого кристалла (без учета шероховатости поверхности) $R(I)$ определяется одним фундаментальным параметром – атомным объемом элемента ($v = M/\rho$, M – молярная масса, ρ – плотность элемента), который периодически изменяется в соответствие с таблицей Д.И. Менделеева. Схематически эта модель показана на рис. 5 а.

Толщина поверхностного слоя некоторых металлов показана в таблице 2.

В табл. 2 жирным выделения металлы с АГП, согласно таблицы 1. В скобках табл. 2 выделены количества монослоев металла – $n = R(I)/a$ (a – постоянная кристаллической решетки). Из табл. 2 и рис. 5 б следует, что АГП наблюдается в металлах с $1 < n < 6$, а ШП имеет место при $n > 6$. На рис. 5 б показано, что самый нижний ряд занимает углерод, у которого $n = 1$ (для алмаза) и $n = 3$ (для графита), вычисленные по уравнению 1.

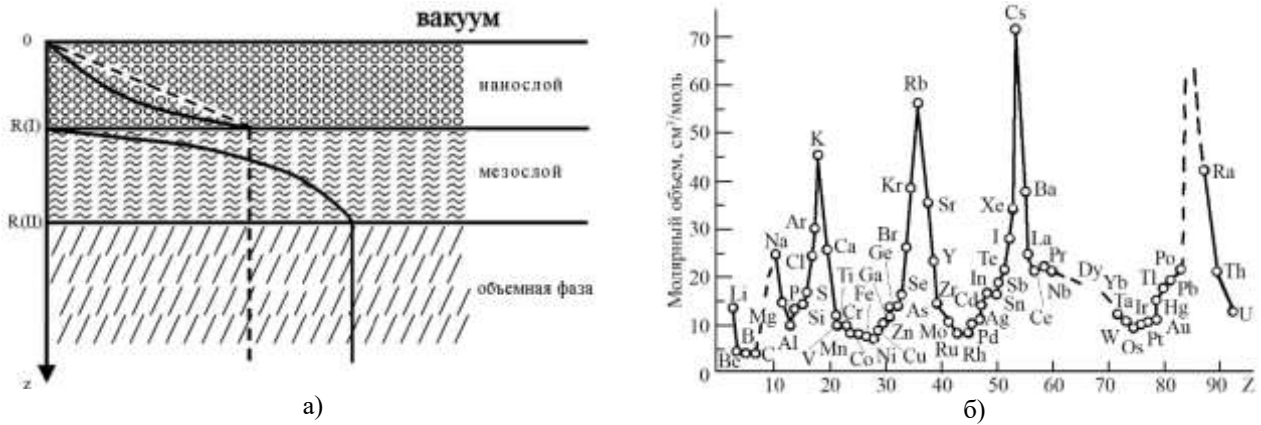


Рисунок 5 – Схема металла: нанослой → мезослой → объемная фаза (а);
периодическое изменение атомного объема элементов (б)

Таблица 2 – Толщина поверхностного слоя чистых металлов (М)

М	R(I), nm	М	R(I), nm	М	R(I), nm	М	R(I), nm	М	R(I), nm
Li	2.2 (6)	Sr	5.9 (10)	Sn	2.8 (5)	Cd	3.4 (11)	Fe	1.2 (4)
Na	4.5 (11)	Ba	6.6 (13)	Pb	3.1(6)	Hg	1.8 (5)	Co	1.1 (4)
K	7.7 (15)	Al	1.6 (4)	Ce	2.8 (5)	Cr	1.2 (4)	Ni	1.1 (3)
Rb	10 (18)	Ga	2.0 (4)	Te	3.5 (8)	Mo	1.8 (5)	Ce	3.6 (7)
Cs	12 (20)	In	2.7 (8)	Cu	1.2 (3)	W	1.6 (5)	Pr	3.5 (10)
Be	0.8 (3)	Tl	2.9 (8)	Ag	1.7 (4)	Mn	1.1 (2)	Nd	3.4 (9)
Mg	2.4 (7)	Si	2.0 (4)	Au	1.7 (4)	Tc	1.4 (5)	Sm	3.4 (9)
Ca	4.4 (8)	Ge	2.4 ((4)	Zn	1.6 (6)	Re	1.5 (5)	Eu	5.0 (11)

Из табл. 2 следует, что толщина поверхностного слоя металлов R(I) имеет размер от 1 нм до 10 нм, кроме цезия, т.е. представляют собой наноструктуру (рис. 5 а). Если обратиться к рис. 3 а, то слой R(I) = поверхность + ультратонкая пленка. Размерные эффекты в слое R(I) определяются всем коллективом атомов в системе (коллективные процессы). Такие размерные эффекты наблюдаются только в наночастицах и наноструктурах [17]. В наноструктурном слое R(I) с атомами чистых металлов происходит реконструкция или релаксация, связанная с перестройкой поверхности (рис. 6) [5].

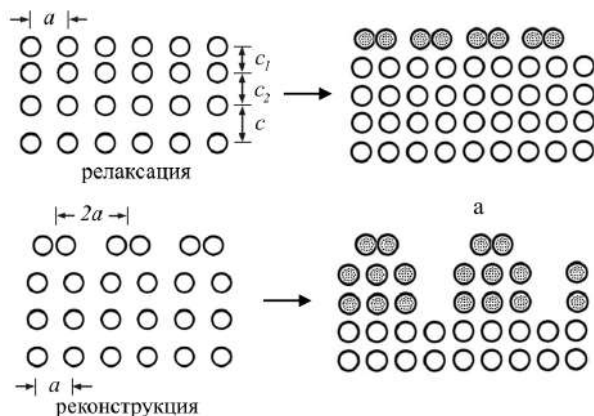


Рисунок 6 – Преобразование поверхности металла

На релаксированной поверхности наблюдается изменение межплоскостных расстояний c , а на реконструированной же поверхности может изменяться расположение приповерхностных атомов a (рис. 6). Для поверхностей ГЦК металлов (таких, как Al, Au, Ni) характерны процессы релаксации, а ОЦК металлов (Fe, W, Mo) – процессы реконструкции. Слой R(I) является неупорядоченной наноструктурой, где возникают значительные внутренние напряжения, приводящие к возникновению дислокаций и нанотрещин [18]. Поверхностный слой R(I) представляет собой синергетическую систему, фундаментальные свойства которой подвержены саморегулированию и самоорганизации.

При $h = R(I)$ происходит фазовый переход II рода (по Эренфесту), где происходит скачок теплоемкости (рис. 5 а). Этот эффект рассмотрен нами в работе [19].

Слой R(II), который назовем мезоструктурой (рис. 5 а), простирается примерно до размера $h \approx 9 R(I)$, где начинается объемная фаза. С этого размера ($< 9 R(I)$) начинаются размерные эффекты другого типа. Отличие мезоструктур от наноструктур и объемной фазы заключается в том, что только в этих системах наблюдаются

фликкер-шумы со спектром типа $1/f^b$ [20]. Слой R(II) относится к наноматериалам. Под наноматериалами принято понимать материалы, основные структурные элементы которых не превышают нанотехнологической границы ~ 100 нм, по крайней мере, в одном направлении [21]. Ряд исследователей высказывает мнение, что верхний предел (максимальный размер элементов) для наноструктур должен быть связан с неким критическим характерным параметром: длиной свободного пробега носителей в явлениях

переноса, размерами доменов/доменных стенок, диаметром петли Франка-Рида для скольжения дислокаций и т.п. [22]. Значит в слое R(II) должно быть много размерных эффектов, связанных с температурой (рис. 7 а), магнетизмом (рис. 7 б), оптикой (рис. 7 с) и другими свойствами.

Таким образом, металл представляет собой структуру: нанослой $\rightarrow$ мезослой $\rightarrow$ объемная фаза, которые отличаются между собой зависимостью всех физических свойств.

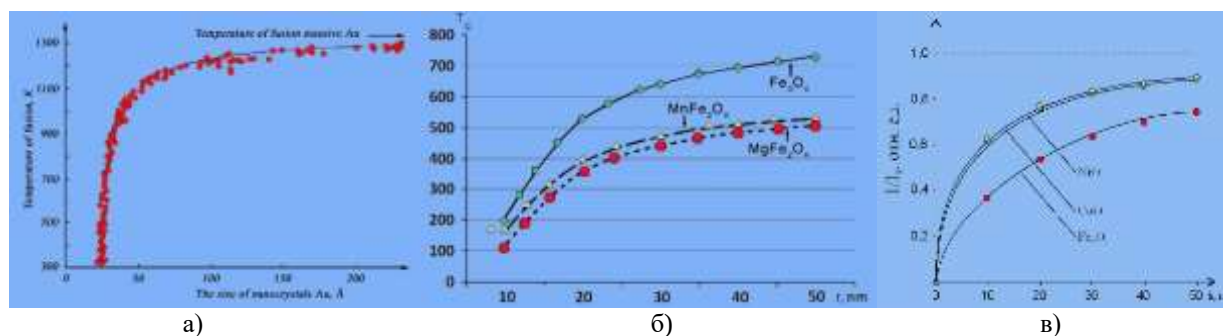


Рисунок 7 – Размерная зависимость температуры Au (а) [23], температуры Кюри T_c [24] (б), люминесценции оксидов [25] (в)

Квантовая структура нанослоя металла

Сначала мы обратимся к работе [26], где приводится краткий обзор результатов исследований квантово-размерных эффектов в тонких пленках металлов (Au, Ag) на поверхности тугоплавких металлов (W(110), Mo(110)) и d-металлов (Ni(111)), начиная с субмонослойных покрытий и до толщин порядка десяти монослоев, полученных методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением.

Из рис. 8 следует, что квантовые состояния серебра изменяются ступенчатым способом для основных ветвей. В монослое (1ML) в спектре ФЭ наблюдается одно квантовое sp -состояние при энергии $\sim 4,2$ эВ. Остальные квантовые состояния обусловлены d -состояниями. Для объяснения спектров ФЭ в работе [26] используется расширенная фазовая модель, графическое решение которой дает удовлетворительное согласие с экспериментом. Там же показано, что при толщинах $\sim 15ML$ спектр ФЭ переходит в непрерывный спектр.

В более поздней работе [27] также получены аналогичные [26] результаты. Однако, здесь рассматривается движение частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими «стенками», изложенному во всех учебниках по квантовой механике. Уровни энергии E_n в такой яме равны:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e L^2}, \quad (2)$$

где n – число квантовых состояний одномерной ямы (пленки); L – толщина этой пленки. Если учесть, что $L = R(I)$, а $n = R(I)/\tilde{a}$ ($\tilde{a}$ – постоянная кристаллической решетки), то формула (2) будет выглядеть так:

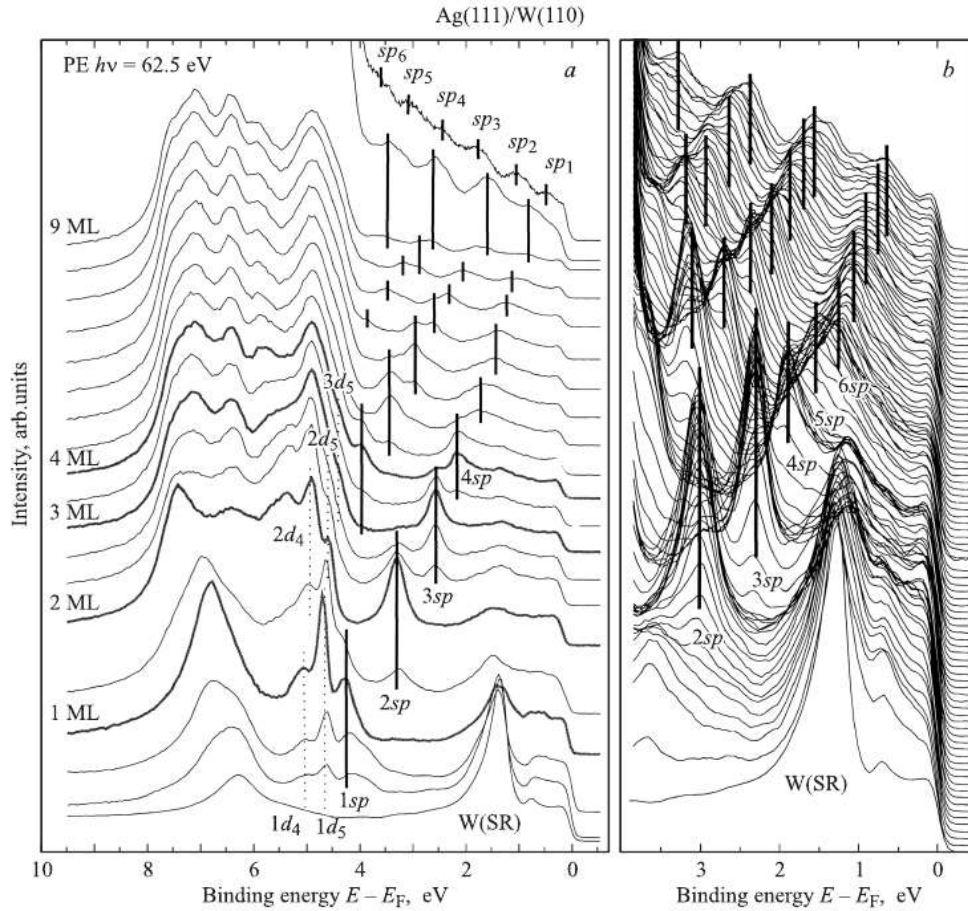
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e \tilde{a}^2}, \quad (3)$$

где $n = 1, 2, 3 \dots$. Если учесть, что нами получена формула [15, 16]:

$$\begin{aligned} A(r) &= A_0 \left(1 - \frac{R(I)}{r} \right), R(I) < r < R(II), \\ A(r) &= A_0 \left(1 - \frac{R(I)}{R(I) + r} \right), 0 < r < R(I), \end{aligned} \quad (4)$$

где $A(r)$ – физическое свойство нано- и мезослоя; A_0 – физическое свойство объема; $r = z$ (рис. 5 а). Если принять $A(r) = E_n$ – уровню энергии, то при $1 - R(I)/R(I) + r \approx \exp[-(R(I)/R(I) + r)]$ будет в нанослое $E_n(r) = E_n/\exp[-(R(I)/R(I) + r)]$. После этого уровень E_n , то есть при $r = 0$ и при $r = R(I)$ будет равно: $E_n(r = 0) = E_n/e$; $E_n[r = R(I)] = E_n/e^{0.5}$. Уровень E_n уменьшается на поверхности металла в 2,72 раза, а на границе слоя $R(I)$ – в 1,65 раза. Все это показано на рис. 9 а. В мезослое уровень

E_n будет зависеть по формуле 1 в уравнении (4), $= E_n(1/e^{0.9}) \approx E_n$ и уровень энергии будет выглядеть при этом $1-R(I) \approx \exp(-R(I)/r)$. Тогда $E_n[R(I)/9R(I)]$ так, как на рис. 9 б.



На части *a* выборочно показано от одного до трех спектров на формируемый монослой в полном диапазоне существования *sp*-ид-состояний. На части *b* представлены непрерывные изменения спектров в диапазоне *sp*-состояний, показывающие дискретность формирования пиков квантовых состояний [26].

Рисунок 8 – Серии фотоэлектронных (ФЭ) спектров, измеренных по нормали к поверхности в процессе напыления пленок Ag(111) на поверхность W(110), показывающие формирование соответствующих спектров квантовых состояний как *sp*-, так и *d*-характера при изменении толщины напыляемой пленки

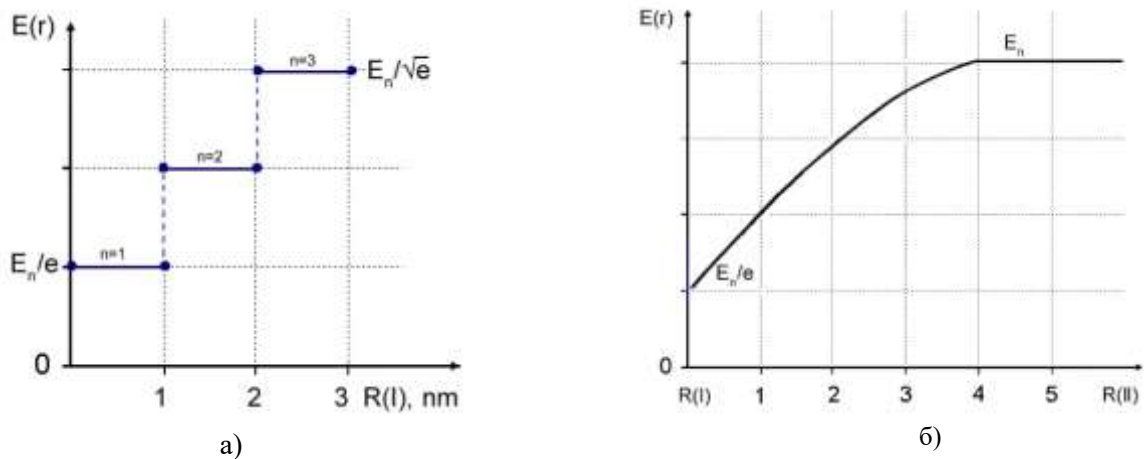


Рисунок 9 – Зависимость уровня энергии E_n , которое пропорционально числу Лоренца [28], в нанослое (а) и в мезослое (б).

Из формул (3) и (4), а также из рис. 9 следует квантовая структура поверхностного нанослоя, которая может быть представлена уровнями Ландау (рис. 10).

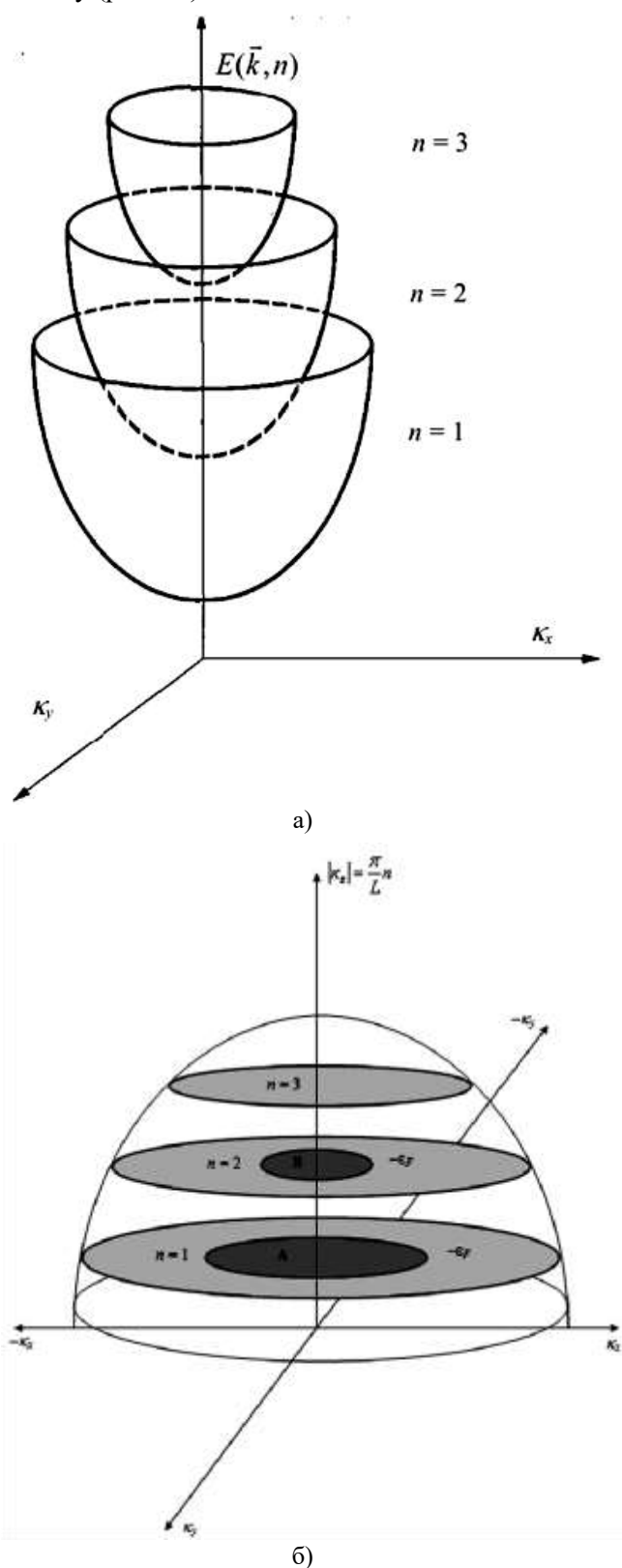


Рисунок 10 – Квазидискретный спектр электронов в квантовой яме (а); распределение электронных состояний в импульсном пространстве (б) [27]

Из уравнения (3) следует, что уровни энергии E_n нанослоя определяются одним фундаментальным параметром – постоянной кристаллической решетки металла $\dot{a}$:

$$E_n = 10^{-37} \frac{n^2}{\dot{a}}. \quad (5)$$

Постоянная кристаллической решетки $\dot{a}$ изменяется в слое R(I) из-за реконструкции или релаксации поверхности металла (рис. 6). Это значит, что монослой металла можно представлять как квантовые нити (или квантовые плоскости) с энергией E_n . Как только параметр $\dot{a}$ перестает изменяться, спектр квантовых состояний переходит в непрерывный спектр, где для металла выполняются классические законы Друде–Лоренца [29].

Нанослой R(I) представляет собой по E_n (и всех $A(r)$ из уравнения (4)) ступенчатую функцию (рис. 9), которую нетрудно привести к интегралу Лебега [30], играющему важную роль в квантовой теории [31]. В частности, квантовые нити в нанослое R(I) можно трактовать как солитоны (рис. 11) [32].

На рис. 11 (вверху) а) представлено развитие поля во времени. Набор линий изображает конфигурации поля в последовательные промежутки времени. На рис. 11 (вверху) б) изображено распределение энергии, соответствующее данной конфигурации поля. В начальный момент времени солитон и антисолитон движутся навстречу друг другу, причем антисолитон движется быстрее и, следовательно, имеет большую энергию. Столкновение двух волн приводит к их аннигиляции, а энергия их немедленно идет на рождение новой солитон-антисолитонной пары. Такое одномерное поле называется полем синус-Гордона. Всюду вне области, занятой солитоном и антисолитоном, поле принимает значение, соответствующее нулевой энергии.

На рис. 11 (внизу) показано, что из-за дисперсии амплитуда обычной волны при движении уменьшается и расплывается, и в конце концов волна полностью исчезает. Солитон (б) — это волна, которая не диссипирует, поскольку дисперсия подавлена другими эффектами волнового движения. Солитон представляет собой сгусток энергии, который может двигаться от точки к точке, но не может распределиться по всему пространству.

Более подробно о солитоне можно ознакомиться в монографии [33].

В работе [34] на основе модифицированного одномерного уравнения Шредингера произведена

оценка энергии связи солитона от его размера b вблизи поверхности металла. Было получено, что $E_n \sim 1/b^2$ и при $a = b$ совпадает с уравнением (5). Отсюда следует, что нанослой R(I) металла представляет собой нелинейную наноструктуру, которой присуща анизотропия.

В работе [18] нами показано, что нанослой R(I) металла подвержен значительным внутренним напряжениям, которые вызывают большое число дефектов и нанотрещин. Эти дефекты могут в металле превращаться (помимо солитона) в краудион, даже при комнатной

температуре [35]. Краудионы, которые относятся к топологическим солитонам, в металлах являются очень подвижными, иногда сверхзвуковыми (обеспечивая массоперенос) по сравнению с другими точечными дефектами. Теоретически методом молекулярной динамики показано на ГЦК металле (медь и никель), что при их сильной деформации краудионная конфигурация типа (110) собственного междоузельного атома оказывается стабильной в широком диапазоне температур [35].

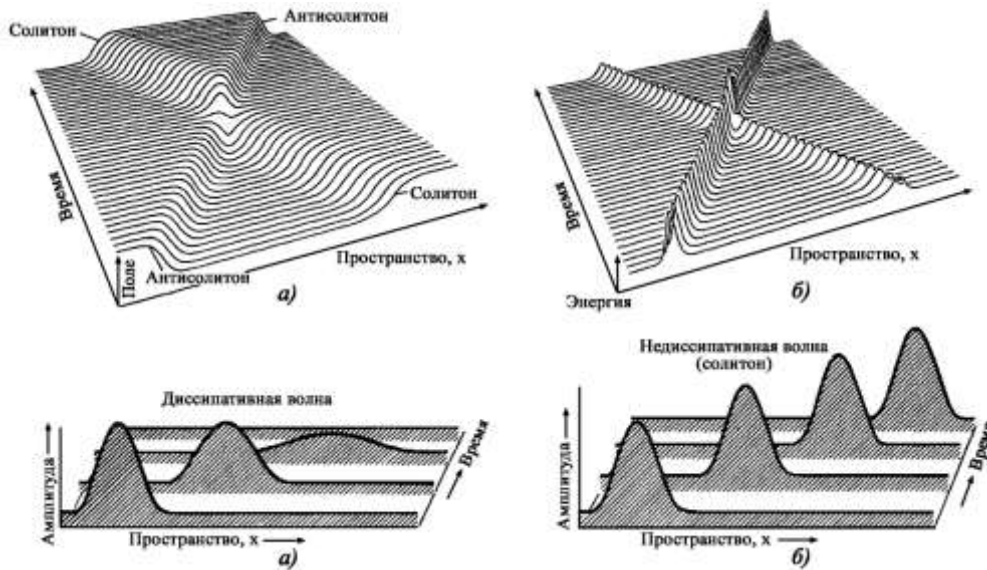


Рисунок 11 – Солитон и антисолитон похожи на направленные в противоположные стороны складки в структуре поля; неизменность волны ограничена главным образом дисперсией, процессом, благодаря которому гармоники, имеющие различные длины волн, распространяются с различными скоростями [32]

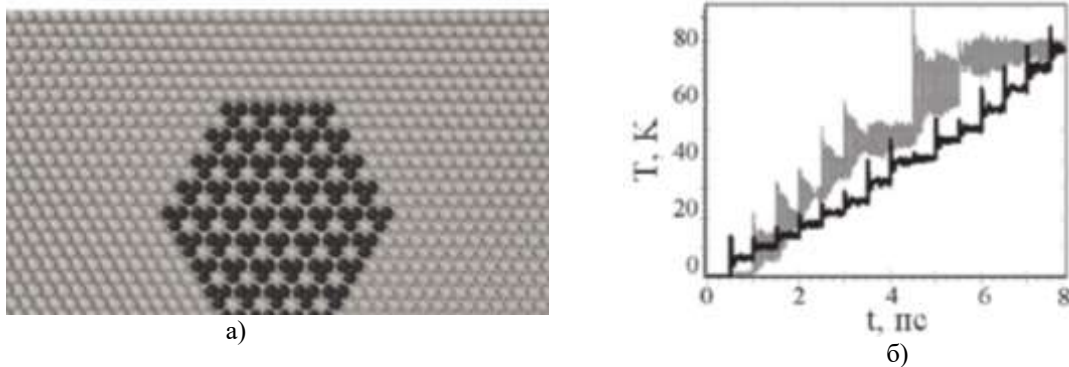


Рисунок 12 – Локализация колебаний атомов дискретного брэггера в плоскости [111] в ГЦК меди (а); локализация энергии дискретного брэггера температурные кривые подрешеток Pt (черный цвет) и Al (серый цвет) при взаимодействии кристаллической решетки сплава Pt_3Al с частицами с энергией 1 эВ (б) [37, 38]

Обратимся теперь к корпускулярно-волновому дуализму. Квантовые нити в нанослое R(I) и сам нанослой можно представить как наночастицу диаметром $R(I)$. Соответствие поверхностного слоя твердого тела его наночастице было предложено А.И. Русановым в

работе [39]. По его мнению, если размер наночастицы соизмерим с толщиной поверхностного слоя, то такая наночастица не может содержать внутри себя объемную фазу. Уточним подход А.И. Русанова в следующей редакции: если размер наночастицы соизмерим с толщиной

монослоя твердого тела, то такая наночастица не может содержать внутри себя объемную фазу. Приведем пример: алмаз содержит в слое R(I) один монослой углерода по уравнению (1); графен представляет один слой графита. Значит, все они представляют собой наночастицы без объемной фазы, поэтому о плавлении и предплавлении у алмаза и графена не может быть и речи без экстремальных условий (в частности,

высоких давлений и высоких температур). Размер такой наночастицы будет равен постоянной кристаллической решетки.

Если же размер наночастицы больше толщины поверхностного слоя, то внутри наночастицы присутствует сеть квантовых нитей (квантовых плоскостей) и речь может идти о плавлении и предплавлении кристалла (рис. 13) [40].

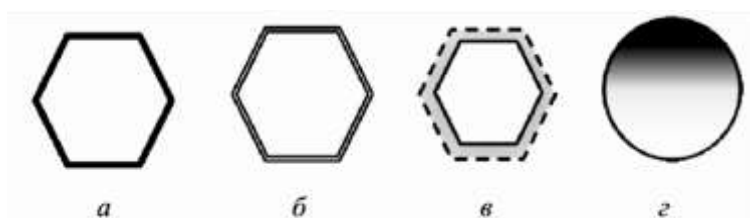


Рисунок 13 – Плавление наночастицы: а – исходная наночастица; б – наночастица при температуре плавления поверхностного слоя T_{sm} (слой R(I)); в – наночастица при промежуточной температуре (слой R(II)) $T_{sm} < T < T_m$; г – расплавленная наночастица при температуре плавления T_m [40]

Плавление твердых тел обычно начинается с образования тонкого слоя «квазижидкости» на поверхности при температуре ниже точки их объемного плавления. Этот эффект называют также поверхностным плавлением или предплавлением (premelting). Предплавление твердых тел остается пока вопросом дискуссионным, поскольку разные авторы придерживаются противоположных суждений [41]. Это связано еще с тем, что до наших работ [18, 19] не научились еще четко определять толщину поверхностного слоя твердых тел. Предплавление было замечено в начале 19 века Фарадеем на кристаллах льда. Рис. 14 а показывает, что предплавление в нанослое R(I) происходит ступенчатым способом, а в мезослое оно выглядит так (рис. 14 б).

В мезослое R(II) структура несколько иная, чем в нанослое R(I) и объемной фазе, из-за различия в размерных эффектах (рис. 9 б). Это наглядно продемонстрировано в работе [42], где экспериментально исследованы зависимость удельного сопротивления и коэффициента отражения от толщины пленок металлов.

На рис. 15 методом вакуумного осаждения на полимерной подложке выращены аморфные пленки серебра, меди, золота и железа толщиной 6-60 нм, т.е. толщиной больше R(I), но в пределах слоя R(II), поэтому ступенчатая структура этих зависимостей не наблюдается, как это видно из рис. 8. Физика мезоструктур [43, 44] отлична от физики нанослоя, где проявляются квантовые эффекты. О ней мы будем говорить позже. Как теперь влияют монослои твердого тела на свойства объемной фазы? Этот вопрос остается пока

неисследованным. Рассмотрим, в качестве примера, графит (рис. 16 а).

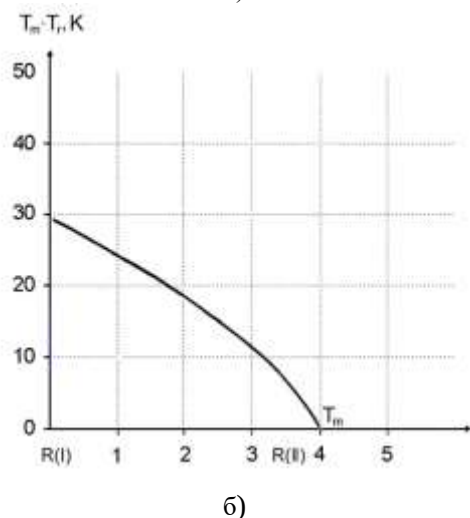
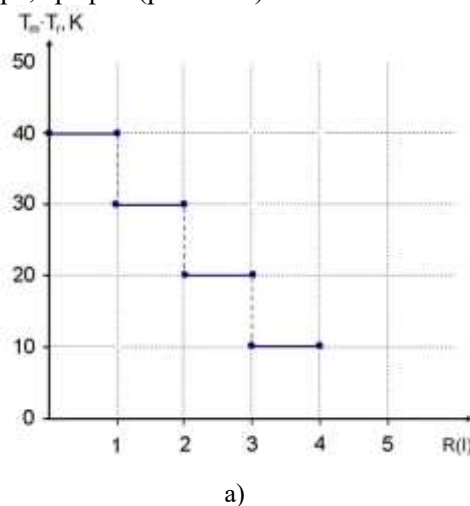
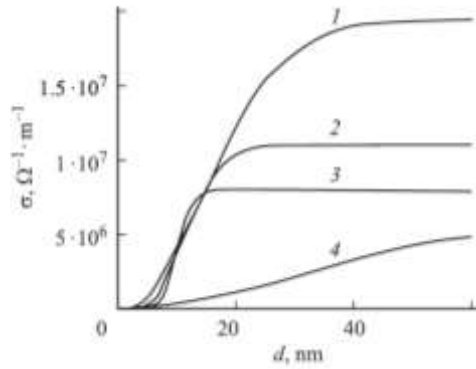
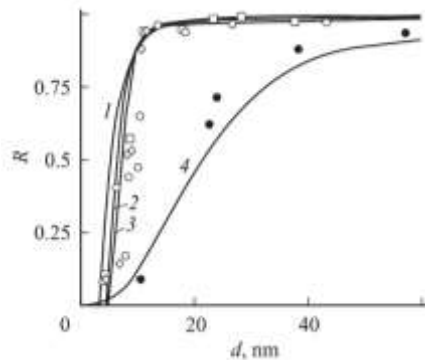


Рисунок 14 – Предплавление металлов: в нанослое R(I) (а); мезослое R(II) (б)

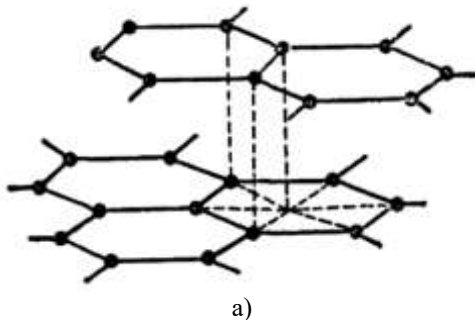


а)

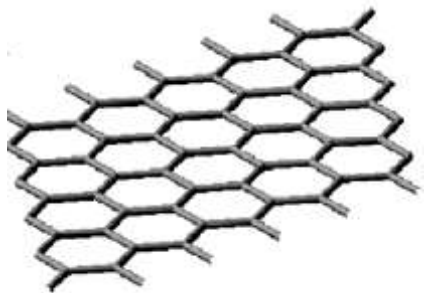


б)

Рисунок 15 – Зависимость удельной проводимости от толщины пленок различных металлов: 1 – серебро; 2 – медь; 3 – золото; 4 – железо (а); теоретические (сплошные кривые) и экспериментальные (значки) зависимости коэффициента отражения от толщины пленки: 1, светлые кружки – серебро; 2, светлые квадратики – медь; 3, светлые ромбики – золото; 4, темные кружки – железо.

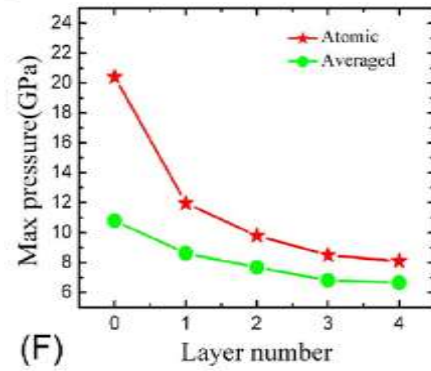


а)

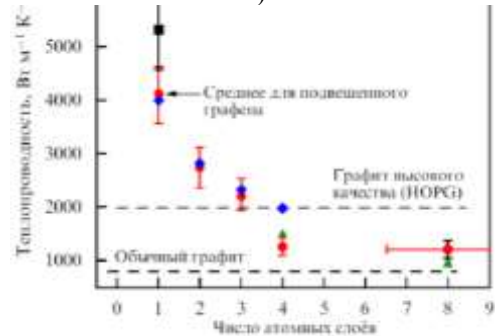


б)

Рисунок 16 – Кристаллическая структура графита (а) и графена (б)



а)



б)

Рисунок 17 – Изменение максимального атомного напряжения (красная линия) и максимального среднего давления (зеленая линия) в зависимости от количества слоев графена (а) [49]; зависимость коэффициента теплопроводности пленок, составленных из нескольких графеновых слоев, от их числа (б) [50]

Графит является аллотропной модификацией углерода с атомной массой 12,0107 г/моль, плотностью 2,26 г/см³ и sp^2 -гибридизацией атомов углерода [45]. Он относится к слоистым кристаллам. Если отщепить у графита один монослой, то получается графен (рис. 16 б), обладающим уникальными свойствами [46]. Если использовать формулу (1), то для графита получаем, что поверхностный слой составляет $R(I)_a = 0,9$ (3) нм и $R(I)_c = 2,46$ (3) нм [47, 48]. Итак, графит обладает 3 монослоями, которые подтверждены экспериментально в работах [49, 50] (рис. 17).

Оба рисунка наглядно показывают, что слой $R(I)$ для графита содержит 3 слоя, что говорит о справедливости предложенной нами модели (1). Больше трех слоев графен превращается в графит и значения величин на рис. 17 перестают зависеть от числа слоев.

Первый монослой графита – графен, имеет прочные ковалентные σ -связи С-С в плоскости графенового листа в сочетании с π -электронами вне его определяет уникальные физико-химические свойства графена, такие как большая теоретическая удельная поверхность (~ 2600 м²/г), высокая подвижность носителей заряда ($\sim$

200000 см²/В·с), высокий модуль Юнга (~ 1000 ГПа), тепловая проводимость (~ 5000 Вт/м К), оптическая прозрачность (~ 97.7%), механическая прочность и т. д. [45-50].

Двухслойный графен отличается от однослойного графена и графита. Он активно исследуется [51] в связи с управляемой шириной запрещенной зоны. Аналогом двухслойного графена является графен Стоуна-Уэльса или SW-графен, по структуре более стабильный, чем графен [52].

Трехслойный графен отличается от двух последних подвижностью и проводимостью [53]. Особенность трехслойного графена состоит в том, что после его кручения под магическим углом у него возникает сверхпроводимость, которая выдерживает магнитные поля в 2-3 раза превышающие предел Паули для спин-синглетного спаривания [54].

Таким образом, все монослои в нанослое твердого тела существенно отличаются в соответствии с их энергетическом положением, выраженного на рис. 9 а и следующих уравнениям (1) – (5).

Заключение

Нанослой R(I) для большинства металлов не превышает 10 нм и представляет собой квантовую наноструктуру. Слой R(II) представляет собой мезоструктуру не превышающую для металлов размер в 100 нм, которая по Гайтлеру относится к наноструктурам. Отличие мезоструктур от нанослоя заключается в том, что у них наблюдаются другие размерные эффекты, но присутствует фазовая когерентность и разные мезоскопические эффекты, которым мы посвятим следующую статью.

Благодарности

Данная научная статья опубликована в рамках выполнения грантового финансирования на 2024-2026 годы ИРН № AP32488258 «Разработка инновационной технологии получения графена интеркаляцией графита микрокластерной водой и модификация графеном ВТСП керамики» (исследование финансируется МОН РК).

Литература

- 1 Гиббс Дж.В. Термодинамические работы. – Москва: ГИТТЛ, 1950. – 303 с.
- 2 Van der Waals I.D. Thermodynamische Theorie der Capillarität. – Amsterdam: Verh. Kon. Acad., 1893. – 529p.
- 3 Guggenheim B.A. Thermodynamics. – Amsterdam: North-Holland Publishing Co., 1967. – 390 p.
- 4 Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. – Ленинград: Химия, 1967. – 388 с.
- 5 Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. – Москва: Наука, 2006. – 490 с.
- 6 Bracco G., Holst B. Surface Science Techniques. – Springer-Verlag: Berlin Heidelberg, 2013. – 663 p.
- 7 Daillant J., Gibaud A. X-ray and Neutron Reflectivity. – Springer: Berlin Heidelberg, 2009. – 348 p.
- 8 Левичев Е.Б. ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН/ИЯФ СО РАН. – Школа по физике и технике ускорителей, ОИЯИ, Дубна, 3-8 июля 2023. – 28 с.
- 9 Щербакова Е.Н. Физика поверхности. – Минск: БНТУ, 2023. – 151 с.
- 10 Jackson K.A. Interface kinetics, in Growth and Perfection of Crystals. – New York: John Wiley, 1958. – P.319-324.
- 11 Кузнецов М.В. Современные методы исследования поверхности твердых тел: фотоэлектронная спектроскопия и дифракция, СТМ-микроскопия. – Екатеринбург, 2010. – 43 с.
- 12 Starzynski G. and Gambin W. Natural surface layer of metals // Acta Physica Polonica. – 1996. – Vol. 89. No.3. – P. 377-381.
- 13 Dearnley P.A. Introduction to Surface Engineering. – Cambridge University Press, 2017. – 314 p.
- 14 Characterization of amorphous and crystalline rough surface: principles and applications. Editors: Zhao Y., Wang G.-C., Lu T.-M. Academic Press, 2000. – Vol. 37. – 417 p.
- 15 Юров В.М. Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких кристаллов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019, вып. 11. – С.389-397.
- 16 Yurov V.M., Goncharenko V.I., Oleshko V.S., Sha Mingun. Anisotropy of the surface of carbon materials // Eurasian Physical Technical Journal. – 2021. – Vol. 18, No. 3(37). – P.15-24.
- 17 Уваров Н.Ф., Болдырев В.В. Размерные эффекты в химии гетерогенных систем // Успехи химии. – 2001. – Т. 70 (4). – С.307–329.
- 18 Юров В.М., Гончаренко В.И., Олешко В.С. Исследование первичных нанотрещин атомарно-гладких металлов // Письма в ЖТФ. – 2023. – Т.49, вып. 8. – С. 35-38.
- 19 Yurov V.M., Guchenko S.A., Laurinas V.Ch., Zavatskaya O.N. Structural phase transition in a surface layer of metals // Bulletin of the Karaganda Univ., “Physics Series”. – 2019. – Vol.1 (93). – P.50-60.
- 20 Машкина Е.С. Спектральный анализ тепловых флуктуаций в переходных областях предплавления KI // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2020. – Т. 22(2). – С. 238-244.

- 21 Gleiter H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure // *Acta mater.* – 2000. – Vol.48. – P.1-29.
- 22 Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – Москва: Физматлит, 2005. – 412 с.
- 23 Buffat P., Borel J.P. Size effect on the melting temperature of gold particles // *Phys. Rev. A.* – 1976. – Vol. 13. – P.2287–2294.
- 24 Юров В.М., Лауринас В.Ч., Гученко С.А. Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких магнитных наноструктур // *Нано- и микросистемная техника.* – 2019. – №6. – С.347-352.
- 25 Юров В.М. Размерные эффекты в люминесценции кристаллофосфоров // *Сборник статей Международной LXXIV научно–практической конференции (памяти А.Л. Чижевского).* – Москва: ЕФИР, 2020. – С.6-12.
- 26 Шикин А.М., Адамчук В.К. Квантово-размерные эффекты в тонких слоях металлов на поверхности монокристаллов и их анализ // *ФТТ.* – 2008. – Т. 50, №6. – С.1121-1137.
- 27 Кревчик В.Д. Квантовый размерный эффект и квантовое туннелирование с диссипацией как основа представлений современной наноэлектроники. Часть I. Классические и квантовые размерные эффекты // *Инжиниринг и технологии.* – 2016. – Vol. 1(1). – С.1-18.
- 28 Yurov V.M., Goncharenko V.I., Oleshko V.S. Deviations from the Wiedman-Franz law // *Proc. of the Intern. Conf. «Scientific research of the SCO countries: synergy and integration»*, April 26, 2024, Beijing, PRC. – P.203-209.
- 29 Ливанов Д.В. Физика металлов. – Москва: МИСиС, 2006. – 280 с.
- 30 Лазарева Е.Г., Емельянова Т.В. Теорема о замене переменной в интеграле Лебега. Избранные лекции. – Томск: Издательский Дом ТГУ, 2019. – 40 с
- 31 Frolov I., Schwarz A. Quantum mechanics and quantum field theory. Algebraic and geometric approaches // *arXiv: 2301.03804v1 [quant-ph]-10 Jan 2023.* – 100 p.
- 32 Ребб К. Солитоны // *УФН.* – 1980. – Т.130, вып. 2. – С.329-356.
- 33 Борисов А.Б., Киселев В.В. Двумерные и трехмерные топологические дефекты, солитоны и текстуры в магнетиках. – Москва: Физматлит, 2022. – 456 с.
- 34 Князем М.А., Русакевич Д.А. Оценка энергии связи солитона вблизи поверхности металла // 10-я Международная научно-техническая конференция «Приборостроение– 2017». Минск, БНТУ. – С.267-269.
- 35 Стариков С.А., Кузнецов А.Р., Сагарадзе В.В. Краудион в деформируемом ГЦК-металле. Атомистическое моделирование // *Физика металлов и металловедение.* – 2021. – Т. 122, № 12. – С.1296-1301.
- 36 Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баимова Ю.А., Веларде М.Г. Дискретные бризеры в кристаллах // *УФН.* – 2016. – Том. 186, №5. – С.471-488.
- 37 Корзникова Е.А., Фомин С.Ю., Дмитриев С.В. Локализованные колебания в двумерных решетках: монография. – СПб.: Научное издание, 2018. – 130 с
- 38 Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Дискретные бризеры.. ГЦК и ГЦТ-кристаллах // *Известия АлтГУ. Физика.* – 2019. – № 4 (108). – С. 49-60.
- 39 Русанов А.И. Удивительный мир наноструктур // *Журнал общей химии.* – 2002. – Т. 72, вып. 4. – С.532-549.
- 40 Боряняк Л.А., Чернышев А.П. Метод расчета эквивалентной температуры спекания нанопорошков // *Обработка металлов.* – 2013. – № 2 (59). – С.39-43.
- 41 Fan X., Chen X., Pan D., Liu Y., Liu P. and Li M. Localization and delocalization of surface disordering in surface mediated melting // *Phys. Rev. B.* – 2021. – Vol.104. – Art.No 134204.
- 42 Антонец И.В., Котов Л.Н., Некипелов С.В., Карпушов Е.Н. Проводящие и отражающие свойства тонких металлических пленок // *Журнал технической физики.* – 2004. – Том 74, вып. 11. – С.102-106.
- 43 Панин В.Е., Гриняев Ю.В. Физическая мезомеханика – новая парадигма на стыке физики и механики деформируемого твердого тела // *Физическая мезомеханика.* – 2003. – Т.6, № 4. – С.9-36.
- 44 Москалец М.В. Основы мезоскопической физики. – Харьков: НТУ – ХПИ, 2010. – 180 с.
- 45 Jäger H., Frohs W. (Eds.) *Industrial Carbon and Graphite Materials: Raw Materials, Production and Applications (Two Volume Set).* - Wiley-VCH, 2022. – 991 p.
- 46 Новоселов К.С. Графен: материалы Флатландии // *УФН.* – 2011. – Т. 181, № 12. – С. 1299-1311.
- 47 Yurov V.M., Zhangozin K.N. At the mechanism of graphite splitting bouby aqueous solutions // *Znanstvena misel journal.* – 2024, №86. – P.41-49.
- 48 Yurov V., Zhangozin K. About the mechanism of graphite splitting // *International independent scientific journal.* – 2024, №58. – P.29-40.
- 49 Xu Q., Li X., Zhang J., Hu Y., Wang H., Ma T. Suppressing nanoscale wear by graphene/graphene interfacial contact architecture: a molecular dynamics study // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* – 2017. – Vol.9. – Art.No 40959.
- 50 Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // *УФН.* – 2011. – Т.181, №3. – С.233-268.
- 51 Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Noria F. Electronic properties of graphene-based bilayer systems // *Physics Reports.* – 2016. – Vol. 648, №1. – P.1-104.
- 52 Подливаев А.И. Двухслойный графен - Стоун-Уэльсовский графен: структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность // *Письма в ЖЭТФ.* – 2022. – Vol. 115, №6. – P.384-391.

53 Craciun M.F., Russo S., Yamamoto M., Oostinga J.B., Morpurgo A.F. and Tarucha S. Trilayer graphene is a semimetal with a gate-tunable band overlap // *Nature Nanotechnology*. – 2009. – Vol. 4. – P.383-388.

54 Devakul T., Ledwith P.J., Xia L.-Q., Uri A., de la Barrera S., Jarillo-Herrero P., and Fu L. Magic-angle helical trilayer graphene// *Science Advances*. – 2023. – Vol.9 (36): eadi6063.

References

- 1 J.V. Gibbs, *Thermodynamicheskie raboty* (GITTL, Moscow, 1950), 303 p. (In Russ.)
- 2 I.D. Van der Waals, *Thermodynamische Theorie der Capillaritat* (Verh. Kon. Acad., Amsterdam, 1893), 529 p.
- 3 B.A. Guggenheim, *Thermodynamics* (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1967), 390 p.
- 4 A.I. Rusanov, *Fazovyie ravenovesiya i poverkhnostnye yavleniya* (Khimiya, Leningrad, 1967), 388 p. (In Russ.)
- 5 K. Oura, V.G. Lifshits, A.A. Saranin, A.V. Zotov, M. Katayama, *Vvedenie v fiziku poverkhnosti* (Nauka, Moscow, 2006), 490 p. (In Russ.)
- 6 G. Bracco and B. Holst, *Surface Science Techniques* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2013), 663 p.
- 7 J. Daillant and A. Gibaud, *X-ray and Neutron Reflectivity* (Springer, Berlin Heidelberg, 2009), 348 p.
- 8 E.B. Levichev, CKP “SKIF” IK SO RAN/IYaF SO RAN (Dubna, OIYaI, 2023), 28 p. (In Russ.)
- 9 E.N. Shcherbakova, *Fizika poverkhnosti* (BNTU, Minsk, 2023), 151 p. (In Russ.)
- 10 K.A. Jackson, in *Growth and Perfection of Crystals* (John Wiley, New York, 1958), pp. 319–324.
- 11 M.V. Kuznetsov, *Sovremennye metody issledovaniya poverkhnosti tverdykh tel: fotoelektronnaya spektroskopiya i difraktsiya, STM-mikroskopiya* (Yekaterinburg, 2010), 43 p. (In Russ.)
- 12 G. Starzynski and W. Gambin, *Acta Phys. Pol.* 89, 377 (1996).
- 13 P.A. Dearnley, *Introduction to Surface Engineering* (Cambridge University Press, Cambridge, 2017), 314 p.
- 14 Y. Zhao, G.-C. Wang, and T.-M. Lu, *Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surface: Principles and Applications* (Academic Press, 2000), 417 p.
- 15 V.M. Yurov, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* 11, 389 (2019). (In Russ.)
- 16 V.M. Yurov, V.I. Goncharenko, V.S. Oleshko, and M. Sha, *Eurasian Phys. Tech. J.* 18, 15 (2021).
- 17 N.F. Uvarov and V.V. Boldyrev, *Uspekhi Khimii* 70, 307 (2001). (In Russ.)
- 18 V.M. Yurov, V.I. Goncharenko, and V.S. Oleshko, *Pis'ma v ZhTF* 49, 35 (2023). (In Russ.)
- 19 V.M. Yurov, S.A. Guchenko, V.Ch. Laurinas, and O.N. Zavatskaya, *Bull. Karaganda Univ. “Phys. Ser.”* 1(93), 50 (2019).
- 20 E.S. Mashkina, *Spektral'nyi analiz teplovykh fluktuatsii v perekhodnykh oblastiakh predplavleniya KI (Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy, 2020)*, 22(2), 238–244. (In Russ.)
- 21 H. Gleiter, *Acta Mater.* 48, 1 (2000).
- 22 A.I. Gusev, *Nanomaterialy, nanostrukturny, nanotekhnologii* (Fizmatlit, Moscow, 2005), 412 p. (In Russ.)
- 23 P. Buffat and J.P. Borel, *Phys. Rev. A* 13, 2287 (1976).
- 24 V.M. Yurov, V.Ch. Laurinas, and S.A. Guchenko, *Nano- i Mikrosistemnaya Tekhnika* 6, 347 (2019). (In Russ.)
- 25 V.M. Yurov, *Razmernye efekty v lyuminesstentsii kristallofosforov*, in *Sb. st. Mezhdunarodnoi LXXIV nauchno-prakticheskoi konferentsii (pamyati A.L. Chizhevskogo)* (EFIR, Moscow, 2020), pp. 6–12. (In Russ.)
- 26 A.M. Shikin and V.K. Adamchuk, *FTT* 50, 1121 (2008). (In Russ.)
- 27 V.D. Krevchik, *Kvazyi i kvantovoe tunnelirovanie s dissipatsiei (Inzhiniring i Tekhnologii, 2016)*, 1(1), 1–18. (In Russ.)
- 28 V.M. Yurov, V.I. Goncharenko, and V.S. Oleshko, *Proc. Intern. Conf. “Scientific Research of SCO Countries: Synergy and Integration”* (Beijing, 2024), pp. 203–209.
- 29 D.V. Livanov, *Fizika Metallov (MISiS, Moscow, 2006)*, 280 p. (In Russ.)
- 30 E.G. Lazareva and T.V. Emelyanova, *Teorema o zamene peremennoi v integrale Lebega. Izbrannye lektsii (Izdatel'skii Dom TGU, Tomsk, 2019)*, 40 p. (In Russ.)
- 31 Frolov and A. Schwarz, *Quantum mechanics and quantum field theory*, arXiv:2301.03804v1 [quant-ph] (2023), 100 p.
- 32 K. Rebbe, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 130, 329 (1980). (In Russ.)
- 33 A.B. Borisov and V.V. Kiselev, *Dvumer i trekhmer topologicheskie defekty* (Fizmatlit, Moscow, 2022), 456 p. (In Russ.)
- 34 M.A. Knyazem and D.A. Rusakevich, *Otsenka energii svyazi solitona vblizi poverkhnosti metalla* (BNTU, Minsk, 2017), pp. 267–269. (In Russ.)
- 35 S.A. Starikov, A.R. Kuznetsov, and V.V. Sagaradze, *Fiz. Met. Met.* 122, 1296 (2021). (In Russ.)
- 36 S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, Y.A. Baimova, and M.G. Velarde, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 186, 471 (2016). (In Russ.)
- 37 E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, and S.V. Dmitriev, *Lokalizovannye kolebaniya v dvumernykh reshetkakh (Naukoemkie Tekhnologii, Saint Petersburg, 2018)*, 130 p. (In Russ.)
- 38 M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, and N.N. Medvedev, *Izv. AltGU* 108, 49 (2019). (In Russ.)

- 39 A.I. Rusanov, Zh. Obshch. Khim. 72, 532 (2002). (In Russ.)
- 40 L.A. Borinyak and A.P. Chernyshov, Metod rascheta ekvivalentnoi temperatury spekaniya nanoporoshkov (Obrabotka Metallov, 2013), 2(59), 39–43. (In Russ.)
- 41 X. Fan, X. Chen, D. Pan, Y. Liu, P. Liu, and M. Li, Phys. Rev. B 104, 134204 (2021).
- 42 I.V. Antonets, L.N. Kotov, S.V. Nekipelov, and E.N. Karpushov, ZhTF 74, 102 (2004). (In Russ.)
- 43 V.E. Panin and Y.V. Grinyaev, Fizicheskaya Mezomekhanika 6, 9 (2003). (In Russ.)
- 44 M.V. Moskal'yets, Osnovy mezoskopicheskoi fiziki (NTU - KhPI, Kharkiv, 2010), 180 p. (In Russ.)
- 45 H. Jäger and W. Frohs, Industrial Carbon and Graphite Materials (Wiley-VCH, 2022), 991 p.
- 46 K.S. Novoselov, Uspekhi Fizicheskikh Nauk 181, 1299 (2011). (In Russ.)
- 47 V.M. Yurov and K.N. Zhangozin, Znanstvena misel 86, 41 (2024).
- 48 V. Yurov and K. Zhangozin, Intern. Indep. Sci. J. 58, 29 (2024).
- 49 Q. Xu, X. Li, J. Zhang, Y. Hu, H. Wang, and T. Ma, ACS Appl. Mater. Interfaces 9, 40959 (2017).
- 50 A.V. Eletskiy, I.M. Iskandarova, A.A. Knizhnik, and D.N. Krasikov, Uspekhi Fizicheskikh Nauk 181, 233 (2011). (In Russ.)
- 51 A.V. Rozhkov, A.O. Sboyshakov, A.L. Rakhmanov, and F. Noria, Phys. Rep. 648, 1 (2016).
- 52 A.I. Podlivaev, Pis'ma v ZhETF 115, 384 (2022). (In Russ.)
- 53 M.F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto, J.B. Oostinga, A.F. Morpurgo, and S. Tarucha, Nature Nanotechnol. 4, 383 (2009).
- 54 T. Devakul, P.J. Ledwith, L.-Q. Xia, A. Uri, S. de la Barrera, P. Jarillo-Herrero, and L. Fu, Sci. Adv. 9, eadi6063 (2023).

История статьи:

Поступила – 06.06.2024

Принята – 18.08.2024

Article history:

Received 6 June 2024

Accepted 18 August 2024

Информация об авторах:

1. **В.М. Юров** (автор-корреспондент) – док.физ.-мат.наук., профессор, ТОО «ТСК Восток», г. Караганда, г.Астана, Казахстан, e-mail: exciton@list.ru
2. **В.И. Гончаренко** – Докт.тех.наук, профессор, Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия, e-mail: vladimirgonch@mail.ru
3. **В.С. Олешко** – канд.тех.наук, доцент, Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия, e-mail: OleshkoVS@mai.ru
4. **К.Н. Жангозин** – ТОО «ТСК Восток», г. Караганда, г.Астана, Казахстан, e-mail: exciton@list.ru

Information about authors:

1. **V.M. Yurov** (corresponding author)– Dr. of Phys. and Math. Sc., Prof., TSC Vostok LLP, Karaganda, Astana, Kazakhstan, e-mail: exciton@list.ru
2. **V.I. Goncharenko** – Dr. Tech.Sci., Prof., Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia, e-mail: vladimirgonch@mail.ru
3. **V.S. Oleshko** – Cand. Tech.Sci., Ass. Prof., Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia, e-mail: OleshkoVS@mai.ru
4. **K.N. Zhangozin** – TSC Vostok LLP, Karaganda, Astana, Kazakhstan, e-mail: exciton@list.ru

4-бөлім

**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ
ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

Section 4

**THERMOPHYSICS
AND THEORETICAL HEAT ENGINEERING**

Раздел 4

**ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
ТЕПЛОТЕХНИКА**

IRSTI 29.03.77

<https://doi.org/10.26577/RCPh.2024v90i3-013>

M.K. Skakov¹ , V.V. Baklanov² , G.S. Nurpaissova^{2,3*} , K.O. Toleubekov^{2,3} ,
A.S. Akaev² , M.K. Bekmuldin² 

¹National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan

²Institute of Atomic Energy Branch, RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

³NJSC Shakarim University of Semey, Semey, Kazakhstan

*e-mail: nurpaissova@nnc.kz

EFFECIENCY OF SIMULATING DECAY HEAT IN THE CORIUM OF A NUCLEAR REACTOR BY THE OHMIC HEATING METHOD

Most commonly, in consequence of a severe accident at a nuclear power plant (NPP) followed by a meltdown of the reactor core, corium is formed. Decay heat is one of the features of it and highly affects the thermal field of the entire corium. Thus, taking into account the decay heat is a central to physical modeling of severe accidents. For this reason, methods for simulating decay heat must meet at least two requirements of physical modeling: intensity and uniformity of heating throughout the entire volume of the melt.

This paper provides studies on the efficiency of using ohmic heating as a method for simulating decay heat in a corium prototype during experiments at the LAVA-B test-bench. Melt heating data using an ohmic heater was obtained by computer modeling based on a software package ANSYS. To assess the efficiency of using ohmic heating, the obtained calculation parameters were compared with the parameters of other existing methods for simulating decay heat in the melt under similar conditions, such as induction heating and plasmatron heating.

Key words: corium, LAVA-B test-bench, decay heat, ANSYS, ohmic heating method.

М.К. Скаков¹, В.В. Бакланов², Г.С. Нұрпаисова^{2,3*}, К.О. Төлеубеков^{2,3}, А.С. Акаев², М.К. Бекмулдин².

¹Ұлттық ядролық орталық, Курчатов қ., Қазақстан

²ҚР ҰАО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов қ., Қазақстан

³«Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті» КеАҚ, Семей қ., Қазақстан

*e-mail: nurpaissova@nnc.kz

Ядролық реактор кориумындағы қалдық энергияны омдық қыздыру әдісімен имитациялаудың тиімділігі

Әдетте, реактордың белсенді аймағының балқуымен бірге жүретін атом электр станциясында (АЭС) ауыр апат салдарынан кориум – балқыған ядролық отын реактордың құрылымдық материалдарымен әрекеттескенде пайда болатын күрделі қоспа – пайда болады. Оның сипаттамаларының бірі – бүкіл кориумның жылу өрісіне айтарлықтай әсер ететін қалдық энергия бөлу болып табылады. Демек, қалдық энергия шығынын есепке алу ауыр апаттарды физикалық модельдеу процестерінде шешуші рөл атқарады. Осы себептен қалдық энергияны имитациялау әдістері физикалық модельдеудің кем дегенде екі талабына сәйкес келуі керек: балқыманың бүкіл көлеміндегі жылудың қарқындылығын қамтамасыз ету және біркелкі таралу.

Бұл мақала LAVA - Б сынақ стендіндегі эксперименттер кезінде корум прототипінде ыдырау жылуын модельдеу әдісі ретінде омдық қыздыруды пайдаланудың тиімділігі туралы зерттеулерді ұсынады. Омдық қыздырғышты пайдаланып балқыманы қыздыру туралы деректер ANSYS бағдарламалық қаптамасына негізделген компьютерлік модельдеу арқылы алынды. Омдық қыздыруды пайдаланудың тиімділігін бағалау үшін алынған есептеу параметрлері ұқсас жағдайларда балқымада ыдырау жылуын модельдеудің басқа да бар әдістерінің параметрлерімен салыстырылды, мысалы, индукциялық қыздыру және плазматронды қыздыру процесстері.

Түйін сөздер: кориум, LAVA-Б қондырғысы, қалдық энергия, ANSYS, омдық қыздыру әдісі.

М.К. Скаков¹, В.В. Бакланов², Г.С. Нурпаисова^{2,3*}, К.О. Толеубеков^{2,3}, А.С. Акаев², М.К. Бекмулдин².

¹Национальный ядерный центр Республики Казахстан, Казахстан, г. Курчатов

²Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Казахстан, г. Курчатов

³НАО «Университет имени Шакарима города Семей», Казахстан, г. Семей

*e-mail: nurpaissova@nnc.kz

Эффективность имитации остаточного энерговыделения в корииуме ядерного реактора методом омического нагрева

Как правило, в следствии возникновения тяжелой аварии на атомной электростанции (АЭС), которая сопровождается расплавлением активной зоны реактора, образуется корииум – сложная смесь материалов, когда расплавленное ядерное топливо взаимодействует с конструкционными материалами реактора. Одним из его характеристик является остаточное энерговыделение, что достаточно сильно влияет на тепловое поле всего корииума. Следовательно учет остаточного энерговыделения играет ключевую роль в процессах физического моделирования тяжелых аварий. По этой причине методы имитации остаточного энерговыделения должны соответствовать как минимум двум требованиям физического моделирования: интенсивности и равномерности нагрева по всему объему расплава.

В данной работе изучается эффективность применения омического нагрева, как метода имитации остаточного энерговыделения в прототипе корииума во время проведения экспериментов на установке ЛАВА-Б. Данные нагрева расплава при применении омического нагревателя были получены методом компьютерного моделирования на базе программного комплекса ANSYS. Для оценки эффективности применения омического нагрева было проведено сравнение полученных параметров расчета с параметрами других существующих способов имитации остаточного энерговыделения в расплаве при аналогичных условиях, таких как, индукционный нагрев и нагрев плазматронами.

Ключевые слова: корииум, установка ЛАВА-Б, остаточное энерговыделение, ANSYS, метод омического нагрева.

Introduction

As it is known, during a severe accident at a NPP, the reactor core melts and a corium is formed, consisting of a mixture of the reactor core and structural materials. Decay heat is a feature of corium, which is described by long-term heat release, even after the cessation of radioactive decay in the melt [2]. This occurs due to the transition of fission product nuclei to a more stable state, as a result of which a significant amount of energy is released. Hence, when conducting experiments on physical modeling of severe accidents at NPPs, it is important to take this feature into account, since it affects the overall thermal field of the melt.

There are several experimental installations in the world that simulate the decay heat in a corium prototype (a mixture of uranium dioxide natural enrichment, zirconium oxide, zirconium and steel). The purpose of such experimental installations is the same - to study the nature of interaction between corium prototype (corium) and the structural materials of the melt trap. However, methods for simulating decay heat are different. Thus, at the installation of a series of NEA-MCCI experiments, the principle of direct passage of electric current through the melt was used as a simulator of decay

heat, and the experimental test-benches VULCANO, LAVA-B, VESTA, VESTA-S, BETA, COMET, COMETA, SICOPS use induction heating. Along with this, in a series of MOCKA experiments, the decay heat was modeled using the reaction of thermite mixtures [3-7].

Research object and methods

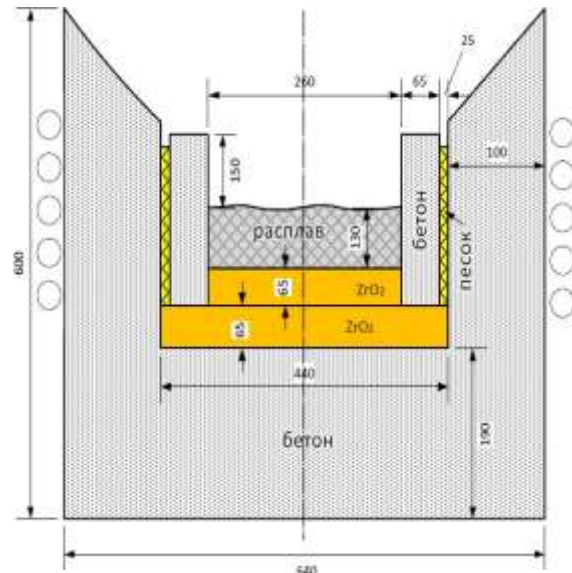
Of the settings listed above, it is necessary to note the LAVA-B test-bench [8], which is operated at the Institute of Atomic Energy Branch of the Republican State Enterprise “National Nuclear Center Republic Kazakhstan” and provides the opportunity to conduct experiments with a corium prototype. The external view of this device is shown in Figure 1 (a). The test-bench consists of two main parts - an electric melting furnace (EMF), in which a burden with a volume of up to 60 kg is melted using the induction method, and a melt receiver (MR), into which the melt from the EMF is poured from a height of about 1.7 meters. The MR is an experimental section with an internal volume of 5.3 m³, in which a melt trap with thermocouples is installed. Constructive scheme of melt trap with refractory blocks is shown in Figure 1 (b).

This test-bench was used for conducting experiments to study the interaction between corium and structural elements of the reactor (reactor vessel, containment shell, etc.). Depending on the specifics of the experiment, induction and plasmatron heating

methods were used to simulate the heat decay in the melt [9-10]. Using computer modeling in the ANSYS software package, the heating parameters of the melt and trap elements were determined for each method (Fig. 2).

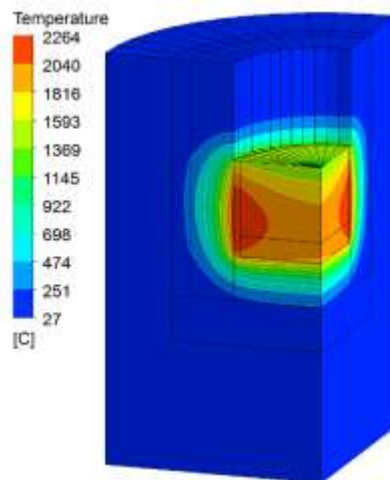


a)

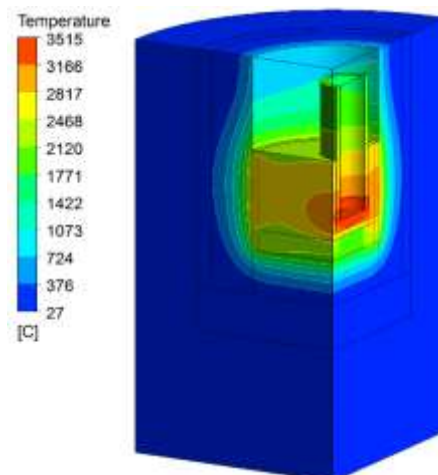


b)

Figure 1 – External view of the LAVA-B test-bench (a) and melt trap diagram (b).



a)



b)

Figure 2 – Temperature field of the melt trap model with induction (a) and plasmatron (b) heating methods

The results of computer modeling showed that the plasmatron heating method, although it helps to achieve higher temperatures, however, creates a large temperature gradient throughout the entire volume of the melt, heating it locally at the location of the plasmatrons. The induction method creates a more

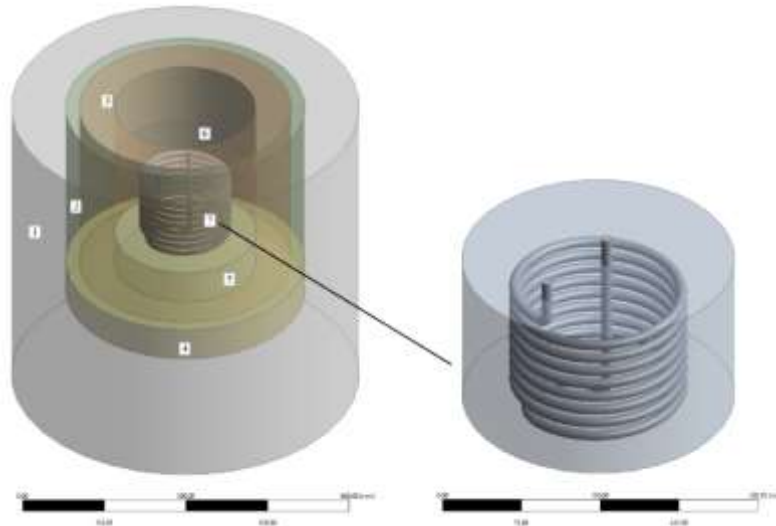
uniform heating pattern, and at the same time, due to the skin effect, for the most part, only the side surface of the corium is heated [11]. In addition, the heating temperature of the melt directly depends on the skin effect, the thickness of which depends on the inductor power. It turns out that to heat the melt to a certain

temperature using the induction method, it is needed a more powerful source of electricity than is required for other methods. As is evident, both methods have some disadvantages and are not always suitable for conducting experiments with corium, where the key factor is creating uniform heating throughout the entire volume of the melt and achieving a high temperature. Thus, it would be impossible to study the interaction between corium and melt trap materials, where parts of the trap be made of electrically conductive materials. In addition, with the materials of the reactor vessel bottom model, the use of the induction method as a way to simulate the decay heat in the melt would also be impossible, since the inductor will heat not only the melt, but primarily all parts of the melt trap and the bottom model, thereby distorting the thermophysical parameters of the experiment.

In [12], a comparative analysis of all known methods for simulating decay heat in a corium prototype was implemented. It has been shown that one of the optimal methods is ohmic heating.

The purpose of this study was to determine the efficiency of using the ohmic heating method as a simulator of decay heat in a prototype corium in comparison with induction and plasmatron methods. To achieve this goal, the computer modeling method was chosen as the main tool.

The thermophysical model for calculations was created in the ANSYS software based on the design of an experimental melt trap (see Fig. 1 (b)), which was used in one of the experiments at the LAVA-B test-bench. A specially designed ohmic heater was used as a thermal heating simulation method. Figure 3 shows a computer model of a melt trap with such a heater.



1, 3 - concrete, 2 - sand, 4.5 - zirconia disks, 6 - corium, 7 - tungsten heater.

Figure 3-View of a computer model of a melt trap with an ohmic heater

The heater parameters are presented in Table 1.

It should be noted that one of the main advantages of a spiral heater is that its geometric parameters can be changed depending on the specifics of the experiment to provide the desired heating pattern scenario.

Table 1 - Parameters of the spiral heater

Options	Values
Diameter of tungsten wire spiral, mm	10
Length, mm	2497.3
Internal radius of the spiral, mm	94
Number of turns	8
Surface area, mm ³	1.3804*10 ⁵
Volume, mm ³	3.4473*10 ⁵

To compare the chosen method of simulating decay heat with the above studies of the efficiency of using plasmatron and induction heating methods, the dimensions and materials of the trap, as well as the initial conditions and all other parameters will be identical:

- Initial corium temperature: 2511 °C;
- Melt composition: uranium dioxide (UO₂) -33 kg, zirconium (Zr) -15 kg, zirconium dioxide (ZrO₂) - 3 kg, steel 12X18H10T -9 kg;
- Heater power: 35 kW;
- Heating time: 30 minutes;

The thermophysical parameters of corium and tungsten are presented in Tables 2 and 3, respectively.

Table 2 - Thermophysical options of corium [9]

Temperature, K	Heat capacity J/kg·K	Thermal conductivity, W/(m·K)	Density, kg/m ³
373	326.25	12.63	5451
573	357.4	11.66	5420
773	380.6	11.67	5387
1073	390.7	12.23	5342
1273	398.7	13.5	5299
1573	412.8	14.6	5243

Table 3 - Thermophysical options of tungsten [13]

Temperature, K	Heat capacity J/kg·K	Thermal conductivity, W/(m·K)	Density, kg/m ³
300	132.4	162.8	19260
500	138.3	145.9	19210
700	141.9	130.2	19150
900	145.7	120.2	19100
1200	152.2	113.5	19010
1400	157.1	111.2	18950
1600	162.5	110.1	18890
1800	166.0	109.0	18820
2000	174.7	108.3	18720
2200	181.6	107.2	18620
2400	189.1	106.8	18520
2600	197.6	107.4	18420
2800	207.0	108.8	18320
3000	217.8	107.5	18220

Results of computer decay heat modeling in the melt at the LAVA-B test-bench

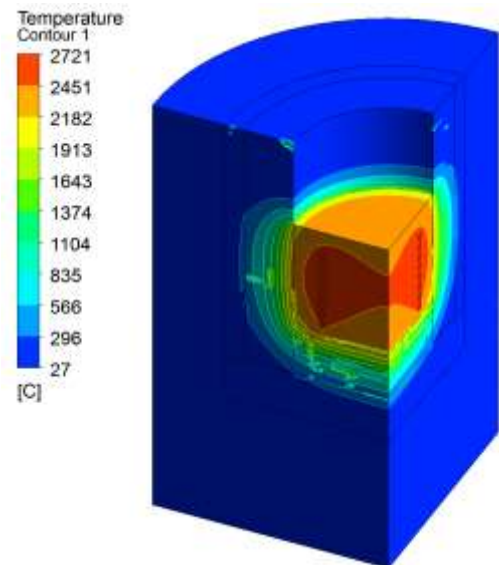
Based on the results of computer modeling, data on the thermal field of the trap and melt were obtained when using an ohmic heater as a method for simulating decay heat in the corium. The maximum and minimum temperatures of the melt when heated by the ohmic method were 2748°C and 2443°C respectively.

As Figure 4 shows, the temperature field of the corium is distributed evenly throughout the entire volume. The maximum and minimum temperature indicators of the melt when heated by the ohmic method were 2721 °C and 2486 °C respectively.

To compare the intensity and uniformity of heating of the melt when using an ohmic heater, plasmatron and induction methods for simulating decay heat, a comparison was made of the distribution of temperature values over the melt cross section for each of the methods (Figure 5).

Figure 5 shows that during ohmic heating of the corium, the difference in temperature of the melt in the center and near the walls of the trap is relatively small (about 300 °C), and the distribution pattern of the thermal field of the corium melt more uniform compared to the data of plasmatron and induction

heating. In addition, the temperatures achieved by ohmic heating are significantly higher than those achieved by induction heating. In addition, by changing the internal radius of the heater, it is possible to obtain a more uniform temperature field (temperature distribution in the volume of the corium).

**Figure 4** - Temperature field of the MR when heated by the ohmic method

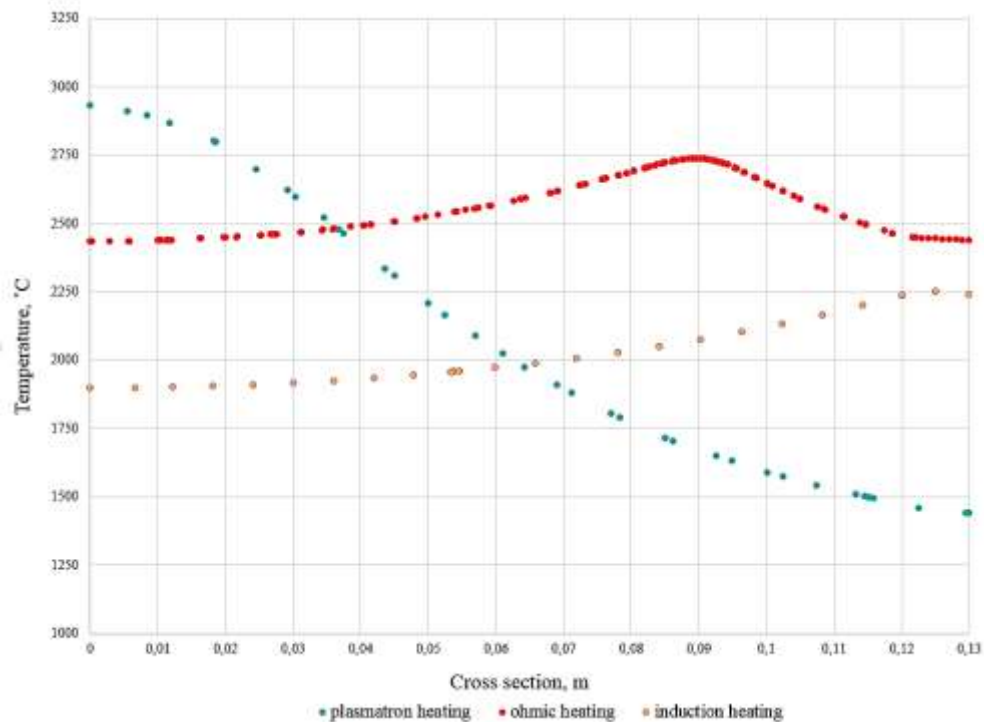


Figure 5 - Graph of distribution of temperature values in the melt when heated by plasmatron, ohmic and induction methods [10]

Figure 6 presents a graph of changes in corium temperature values (average over volume) over 30 minutes when the melt is heated by the ohmic method. Over a heating period of about 8 minutes, the average temperature drops to a critical level of 2244 °C. The sharp temperature drop can be explained by the process of heat transfer from the melt to the walls of the trap,

which are at room temperature before draining it from the EMF. In such a short time, the corium prototype melt does not have time to receive a large amount of heat from the heater due to its low thermal conductivity. Further, according to the calculation results, a uniform increase in the average temperature is observed to 2352 °C in 22 minutes.

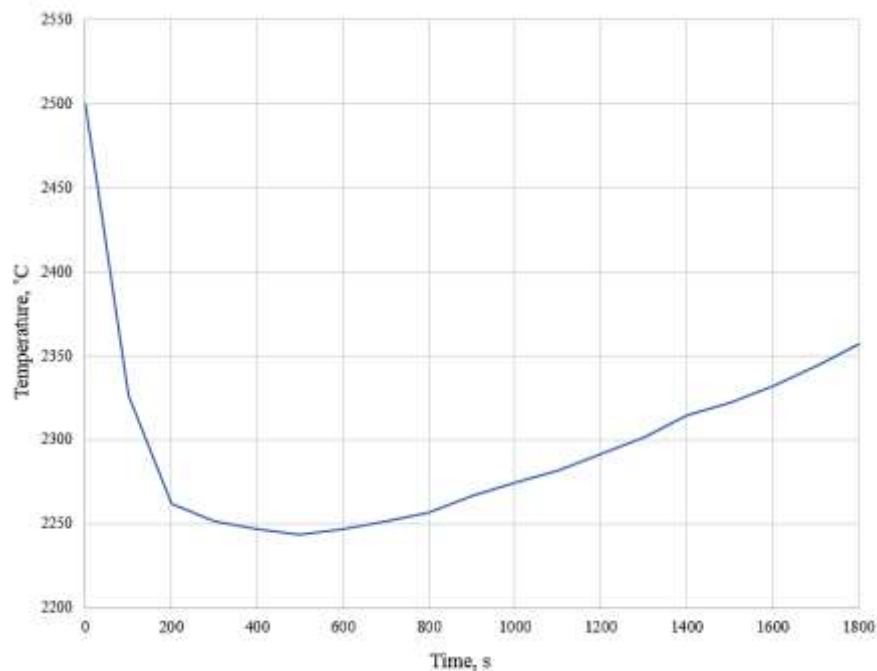


Figure 6 - Graph of changes in the volume-averaged temperature of the corium during ohmic heating

Conclusion

This paper presents the results of computer modeling in the ANSYS software of the process simulating decay heat in the corium at the LAVA-B test-bench using the ohmic heating method. The distribution of the thermal field in the volume of the melt has been established. In comparison with plasmatron and induction heating methods, the study shows the efficiency of using ohmic heating to simulate the decay heat in the corium when studying the processes of an beyond the vessel accident at a NPP when the corium is localized in a melt trap. The calculation results showed that when an ohmic heater (spiral shape) is used to simulate decay heat, the melt

is heated more uniformly compared to induction and plasmatron methods.

An important advantage of the ohmic method is the variability of the heater design. Due to its variability, the ohmic method can be used in many experiments to simulate a severe accident at a NPP, since it allows one to change the nature of melt heating, changing the geometric parameters of the heater and its location in the trap

Acknowledgement

This research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP14870512).

References

- 1 Morales J.P. World major nuclear accidents and their negative impact in the environment, human health and public opinion //International Journal of Energy, Environment and Economics. – 2013. – Vol.21. – P.1-23.
- 2 Vasiliev Yu.S. Studies of the consequences of severe accidents of water-cooled nuclear power reactors under the COTELS project // Bulletin NNC RK. – 2022. – V.1. – P.5-17.
- 3 Fink J. K., Thompson D. H., Spencer B. W., Sehgal B. R. Aerosol and melt chemistry in the ACE molten core-concrete interaction experiments//High Temperature and Materials Science. – 1995 – Vol.33(1). – P.51-76.
- 4 Journeau C., Piluso P., Haquet J.F. Two-dimensional interaction of oxidic corium with concretes: The VULCANO VB test series//Annals of Nuclear Energy. – 2009. – V.36. – P.1597-1613.
- 5 Farmer M.T., Kilsdonk D.J., and Aeschlimann R.W. Corium Coolability under Ex-Vessel Accident Conditions for LWRs // Nuclear Eng. Technology. – 2009. – Vol. 41. – P.575-602.
- 6 Miassoedov A., Cron T., Gaus-Liu X., Palagin A., Schmidt-Stiefel S., Wenz T. LIVE experiments on melt behavior in the reactor pressure vessel lower head //8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics. Pointe Aux Piments, Mauritius. – 2011. – P.793-801.
- 7 Kim H.Y., An S.M., Jung J., Ha K.S., Song J.H. Corium melt researches at VESTA test facility //Nuclear Engineering and Technology. – 2017. – Vol. 49. – P.1547-1554.
- 8 Bekmuldin M.K., Ganovichev D.A., Akayev A.S. Issledovaniye teploizolyatsionnykh svoystv korpusa priyema rasplava eksperimental'noy ustanovki LAVA-B//Vestnik NYATS RK. – 2019. – Vol.1. – P.66-71. (In Russ.)
- 9 Toleubekov K.O., Khazhidinov A.S., Akayev A.S. Modelirovaniye induktsionnogo nagreva pri imitatsii ostatochnogo energovydeleniya v koriume pri vzaimodeystvii s zharoprochnymi materialami //Vestnik NYATS. – 2021. – Вып.1. (In Russ.)
- 10 Baklanov V.V., Zhdanov V.S., Malysheva Ye.V. Eksperimental'noye issledovaniye protsessov pri uderzhanii rasplava koriuma v korpuse reaktora (INVECOR) //Vestnik NYATS RK. – 2009. – Vyp.1(37). – P.55-66. (In Russ.)
- 11 Toleubekov K.O., Baklanov V.V., Akayev A.S., Bekmuldin M.K. Modeling the process of decay heat imitation in the corium at the «Lava-B» facility //Recent Contributions to Physics. – 2022. – Vol.2 (81). – P.97-105.
- 12 Skakov M.K., Baklanov V.V., Nurpairova G.S. Analysis of methods for simulating the decay heat in corium when modeling a severe accidents at nuclear power plant //Eurasian Physical Technical Journal. – 2024. – Vol.21, N.1 (47). – P.57-66.
- 13 Zinov'ev. V.Ye. Teplofizicheskiye svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh //Metallurgiya. – 1989. – Tom 20, vyp.3. (In Russ.)

References

- 1 J.P. Morales, International Journal of Energy, Environment and Economics, 21, 1-23 (2013).
- 2 Yu.S. Vasiliev, Bulletin NNC RK, 1, 5-17 (2022).
- 3 J.K. Fink, D.H. Thompson, B.W. Spencer and B.R. Sehgal, High Temperature and Materials Science, 33(1), 51-76 (1995).
- 4 C. Journeau, P. Piluso and J.F. Haquet, Annals of Nuclear Energy, 36, 1597-1613 (2009).
- 5 M.T. Farmer, D.J. Kilsdonk, and R.W. Aeschlimann, Nuclear Eng. Technology, 41, 575-602 (2009).
- 6 A. Miassoedov et al., Proc. of the 8th Int. Conf. on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics

(Pointe Aux Piments, 11 – 13 July, 2011), p.793-801

7 H.Y. Kim, S.M. An, J. Jung, K.S. Ha and J.H. Song, Nuclear Engineering and Technology, 49, 1547-1554 (2017).

8 M.K. Bekmuldin, D.A. Ganovichev and A.S. Akaev, Bulletin of the National Scientific Center of the Republic of Kazakhstan, 1, 66-71 (2019). (In Russ.)

9 K.O. Toleubekov, A.S. Khazhidinov and A.S. Akaev, Bulletin of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, 1 (2021). (In Russ.)

10 V.V. Baklanov, V.S. Zhdanov and E.V. Malysheva, Bulletin of the National Scientific Center of the Republic of Kazakhstan, 1(37), 55-66 (2009). (In Russ.)

11 K.O. Toleubekov, V.V. Baklanov, A.S. Akaev, and M.K. Bekmuldin Recent Contributions to Physics, 2(81), 97-105 (2022).

12 M.K. Skakov, V.V. Baklanov, G.S. Nurpaissova, Eurasian Physical Technical Journal, 21, 57-66 (2024).

13 V. Ye. Zinoviev. Thermophysical properties of metals at high temperatures, (Metallurgy, 1989). (In Russ.)

Article history:

Received 12 July 2024

Received in revised form 22 June 2024

Received in revised form 5 September 2024

Accepted 8 September 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 12.05.2024

Түзетілген түрде түсті – 22.06.2024

Түзетілген түрде түсті – 05.09.2024

Қабылданды – 08.09.2024

Information about authors:

1. **M.K. Skakov** – Doct. Phys.-Math. Sci, Prof, Chief Researcher, National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan; e-mail: skakov@nnc.kz

2. **V.V. Baklanov**– PhD, First Deputy Director, Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan; e-mail: baklanov@nnc.kz

3. **G.S. Nurpaissova** (corresponding author)– PhD student, Shakarim University, Semey, Kazakhstan; Engineer, Laboratory of Experimental Thermophysics, Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov; Kazakhstan; e-mail: nurpaissova@nnc.kz

4. **K.O. Toleubekov** – PhD student, Shakarim University, Semey, Kazakhstan; Junior Researcher, Laboratory of Experimental Thermophysics, Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan; e-mail: toleubekov@nnc.kz

5. **A.S. Akaev** – Head of the Department of non-reactor tests, Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan; e-mail: akaev@nnc.kz

6. **M.K. Bekmuldin**– PhD student, Shakarim University, Semey, Kazakhstan; Head of the group of the Laboratory of Experimental Thermophysics, Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan; e-mail: bekmuldin@nnc.kz

Information about authors:

1. **М.К. Скаков** – Физ.-мат.ғыл.докт., проф., БҒҚ, Ұлттық ядролық орталық, Курчатов қ., Қазақстан; e-mail: skakov@nnc.kz

2. **В.В. Бакланов** – PhD, ҚР Ұлттық ядролық орталығының Атом энергиясы институты директорының бірінші орынбасары, Курчатов қ., Қазақстан; e-mail: baklanov@nnc.kz

3. **Г.С. Нұрпаисова** (автор корреспондент) – PhD студенті, «Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті» КеАҚ, Семей қ., Қазақстан; ҚР Ұлттық ядролық орталығының Атом энергиясы институтының тәжірибелік жылуфизика зертханасының инженері, Курчатов қ., Қазақстан; e-mail: nurpaissova@nnc.kz

4. **К.О. Төлеубеков** – PhD студенті, «Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті» КеАҚ, Семей қ., Қазақстан; ҚР Ұлттық ядролық орталығының Атом энергиясы институтының Эксперименттік жылуфизика зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Курчатов қ., Қазақстан; e-mail: toleubekov@nnc.kz

5. **А.С. Акаев** – ҚР Ұлттық ядролық орталығының Атом энергиясы институтының реакторлық емес сынақтар бөлімінің бастығы, Курчатов қ., Қазақстан; e-mail: akaev@nnc.kz

6. **М.К. Бекмулдин** – PhD студенті, «Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті» КеАҚ, Семей қ., Қазақстан; ҚР Ұлттық ядролық орталығының Атом энергиясы институтының реакторлық емес сынақтар бөлімінің бастығы, Курчатов қ., Қазақста; e-mail: bekmuldin@nnc.kz

IRSTI 29.17.15; 29.17.35; 29.03.77

<https://doi.org/10.26577/RCPh.2024v90i3-014>O.V. Fedorenko^{1*} , I.V. Poyarkov² ¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan²Moscow State University of Civic Engineering, Moscow, Russia*e-mail: fedor23.04@mail.ru

INSTABILITY OF MECHANICAL EQUILIBRIUM IN NON-IDEAL GAS MIXTURES

To describe phenomena caused by the spatial heterogeneity of density, as well as the processes of natural gas purification, separation and enrichment of gas mixtures with certain components, it is necessary to take into account not only diffusion processes, but also convective currents that arise in the presence of a concentration gradient. Under certain conditions, in multicomponent gas mixtures, a violation of the stability of mechanical equilibrium is possible, i.e. a transition from a stable diffusion process to a convective one is realized in the systems under consideration. The use of linear stability analysis permits to determine on the plane of partial Rayleigh numbers the boundary of the transition of the diffusion process to convective, as well as the values of the thermophysical and geometric characteristics at which this transition is possible. When using this approach to describe experimental data obtained for gas systems containing components with pronounced non-ideal properties, discrepancies are observed. Therefore, the purpose of this work is to develop a method for determining the boundary of loss of stability of mechanical equilibrium in non-ideal gas mixtures. To achieve this goal, the mathematical model describing the change of regimes uses an equation of state in virial form. Based on the developed approach, stability maps were obtained for the $C_3H_8 + CO_2 - N_2O$ and $C_3H_8 + N_2O - CO_2$ systems. A comparison of the calculation results with experimental data showed that the proposed technique could be used to determine the conditions for changing mixing modes in three-component gas mixtures containing components with real properties.

Key words: diffusion, convection, instability of mechanical equilibrium, stability theory, nonideal gases.

O.B. Федоренко^{1*}, И.В. Поярков²¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан²Мәскеу мемлекеттік құрылыс университеті, Мәскеу қ., Ресей*e-mail: fedor23.04@mail.ru

Идеалды емес газ қоспаларындағы механикалық тең-теңдіктің орнықтылығы

Тығыздықтың кеңістіктік біркелкі еместігінен туындаған құбылыстарды, сондай-ақ табиғи газды тазарту, газ қоспаларын белгілі бір компоненттермен бөлу және байыту процестерін сипаттау үшін диффузиялық процестерді ғана емес, сонымен қатар концентрация градиенті болған кезде пайда болатын конвективті ағындарды да ескеру қажет. Белгілі бір жағдайларда көпкомпонентті газ қоспаларында механикалық тепе-теңдіктің орнықтылығы бұзылуы мүмкін, яғни қарастырылып отырған жүйелерде тұрақты диффузиялық процестен конвективтіге көшу жүзеге асырылады. Орнықтылыққа сызықтық талдауды қолдану Рэлейдің парциал сандарының жазықтығында диффузиялық процестің конвективтіге өту шекарасын, сондай-ақ осы ауысу мүмкін болатын жылуфизикалық және геометриялық сипаттамалардың мәндерін анықтауға мүмкіндік береді. Құрамында идеалды емес қасиеттерге ие компоненттері бар газ жүйелері үшін алынған тәжірибелік деректерді сипаттау үшін осы тәсілді қолдану кезінде сәйкессіздіктер байқалады. Сондықтан, бұл жұмыстың мақсаты идеалды емес газ қоспаларында механикалық тепе-теңдік орнықтылығының жоғалу шекарасын анықтау әдістемесін жасау болып табылады. Қойылған мақсатқа жету үшін режимдердің өзгеруін сипаттайтын математикалық модельде күй теңдеуі вириалдық түрде қолданылады. Әзірленген тәсілдің негізінде $C_3H_8 + CO_2 - N_2O$ және $C_3H_8 + N_2O - CO_2$ жүйелері үшін орнықтылық карталары алынды. Есептеу нәтижелерін тәжірибелік деректермен салыстыруда ұсынылған әдістемені құрамында нақты қасиеттерге ие компоненттері бар үшкомпонентті газ қоспаларында араласу режимдерін өзгерту шарттарын анықтау үшін қолдануға болатынын көрсетті.

Түйін сөздер: диффузия, конвекция, механикалық тепе-теңдіктің орнықсыздығы, орнықтылық теориясы, идеалды емес газдар.

О.В. Федоренко^{1*}, И.В. Поярков²

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

²Московский государственный строительный университет, г.Москва, Россия

*e-mail: fedor23.04@mail.ru

Устойчивость механического равновесия в неидеальных газовых смесях

Для описания явлений, обусловленных пространственной неоднородностью плотности, а также процессов очистки природного газа, разделения и обогащения газовых смесей определенными компонентами необходимо учитывать не только диффузионные процессы, но и конвективные течения, возникающие при наличии градиента концентрации. При определенных условиях в многокомпонентных газовых смесях возможно нарушение устойчивости механического равновесия, т.е. в рассматриваемых системах реализуется переход от устойчивого диффузионного процесса к конвективному. Использование линейного анализа на устойчивость позволяет на плоскости парциальных чисел Рэлея определить границу перехода диффузионного процесса на конвективный, а также значения теплофизических и геометрических характеристик, при которых этот переход возможен. При использовании данного подхода для описания экспериментальных данных, полученных для газовых систем, содержащих компоненты с ярко выраженными неидеальными свойствами, наблюдаются расхождения. Поэтому целью данной работы является разработка методики определения границы потери устойчивости механического равновесия в неидеальных газовых смесях. Для достижения поставленной цели в математической модели, описывающей смену режимов, используется уравнение состояния в вириальной форме. На основе разработанного подхода для систем $C_3H_8 + CO_2 - N_2O$ и $C_3H_8 + N_2O - CO_2$ получены карты устойчивости. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными показало, что предложенная методика может быть использована для определения условий смены режимов смешения в трехкомпонентных газовых смесях, содержащих компоненты с реальными свойствами.

Ключевые слова: диффузия, конвекция, неустойчивость механического равновесия, теория устойчивости, неидеальные газы.

Introduction

Solving problems of mass transfer in chemical technology (for example, in the synthesis of ammonia from natural gas, purification of natural gases, separation and enrichment of gas mixtures with certain components), as well as understanding natural phenomena caused by the spatial heterogeneity of density ("salt fingers" in the ocean, the presence of air pockets in the atmosphere, etc.) is associated not only with molecular transport, but also with convective currents that arise during mixing in some multicomponent gas systems.

The mutual influence of components on each other in multicomponent gas mixtures (in particular three-component ones) under certain conditions leads to phenomena that do not occur in ordinary binary diffusion. An example is problems in which molecular diffusion results in the mechanical equilibrium instability of the mixture with the subsequent initiation of natural convection, which noticeably intensifies the total mass transfer [1].

Experiments on studying multicomponent mixing in gases at elevated pressure and the diffusion of a mixture of solution vapors into an inert gas have recorded convective flows leading to a synergistic effect associated with a significant increase in the rate of mixing of the system components. The peculiarity of the observed change in the "diffusion – convection" modes is the fact that it is not realized under traditional conditions corresponding to the thermal problems of Rayleigh-Benard [2-4] and Rayleigh-Taylor [5-7], but occurs with an initial hydrostatically stable stratification, which involves a decrease in the mixture density with height. In this case, the process of diffusion instability depends on a number of conditions and parameters, for example, pressure, concentration, temperature, viscosity, geometric dimensions of the diffusion channel, etc. [1].

Diffusion instability refers to phenomena similar to convection caused by the "double diffusion" [8-10]. To describe this class of phenomena, one can apply linear stability analysis

[11], in which the state of a three-component gas mixture is described by a system of hydrodynamic equations, which includes the Navier-Stokes equation of motion and the conservation equations for the number of mixture particles and components. The indicated system of equations must be supplemented with an equation of medium state in the form $\rho = \rho(c_1, c_2, p)$, $T = \text{const}$. As a result of solving this system of equations for a certain geometry of the diffusion channel and taking into account the corresponding boundary conditions, a boundary relation is obtained for monotonic instability with two critical Rayleigh numbers [12]. In this case, the loss of stability of mechanical equilibrium and the occurrence of diffusion instability is analyzed by the position of the experimental partial Rayleigh numbers relative to the stability lines on the plane of partial Rayleigh numbers (Ra_1 , Ra_2). As a rule, such a comparison shows satisfactory agreement between experimental and theoretical data. However, for mixtures containing components with real properties (for example, CO_2 , N_2O , C_3H_8), discrepancies are observed in the various stages of combined multicomponent mixing. In [13], by experimentally studying the pressure and concentration dependence of the interdiffusion coefficients in the systems $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{CO}_2$, $\text{C}_3\text{H}_8 - \text{CH}_4$, it was found that the dependence on pressure differs from traditional kinetic concepts [14]. Similar trends were found for the solubility of CO_2 in aqueous of NaCl [15]. Significant differences were noted in the diffusion coefficient of CO_2 in brines at different NaCl contents compared to Stokes-Einstein predictions [14]. In particular, a significant decrease in the diffusion coefficient was observed at high CO_2 concentrations. It was shown in [16] that as the pressure increases, the density and thermophysical properties of CO_2 change significantly compared to those calculated in the ideal approximation. Other features of combined mixing are reflected in reviews (see, for example, [17, 18]). One of the reasons for the identified inconsistencies is the application of the assumption that gases are ideal.

This paper proposes a technique for solving the problem of stability in isothermal three-component gas mixtures containing components with real properties based on the use of a virial equation of state with one virial coefficient.

Materials and methods

Consider an isothermal three-component gas system $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{CO}_2 - \text{N}_2\text{O}$ or $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{N}_2\text{O} - \text{CO}_2$, containing components with real properties. The gases under consideration are characterized by the different types of symmetry [19], which affects their

diffusion properties during the mixing process, as well as the change in the density of pure gas depending on pressure [20], which is shown in Figure 1. In accordance with Figure 1, the densities of the gases under study change nonlinear as pressure increases. Up to a pressure of 1.6 MPa, CO_2 is the lightest in the system under consideration. At pressures above 1.6 MPa, CO_2 becomes heavier compared to N_2O . Nitrous oxide has the highest density up to a pressure of 0.65 MPa, and above this pressure the heaviest component is propane. This behavior of the density of the real gases under consideration affects the nature of the occurrence of convective flows.

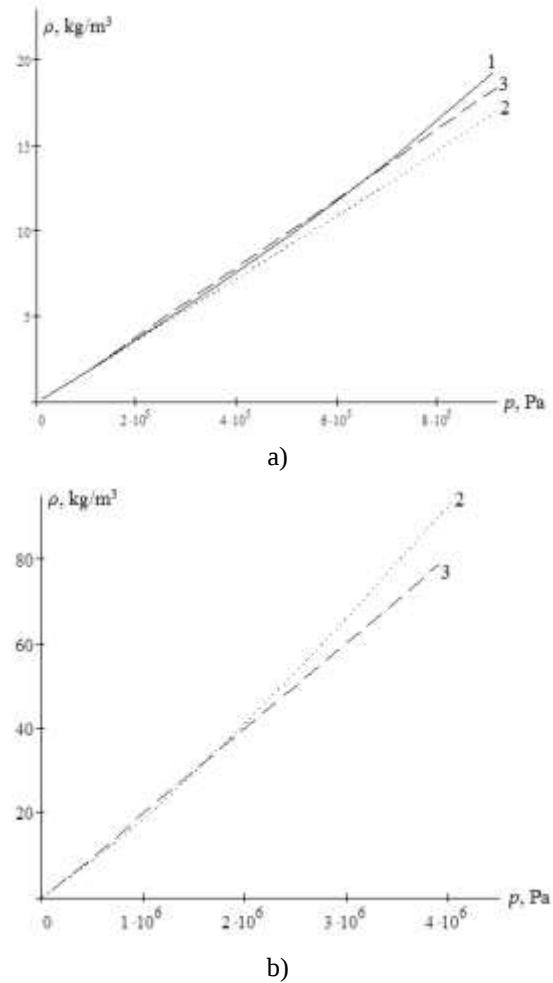


Figure 1 – Dependence of the density of C_3H_8 , CO_2 and N_2O on pressure at $T = 298.0 \text{ K}$:
1 – C_3H_8 , 2 – CO_2 , 3 – N_2O

To describe the behavior of real gases, we will use the virial equation in powers of volume [21]:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B_0}{V} + \frac{C_0}{V^2} + \frac{D_0}{V^3} + \dots, \quad (1)$$

where B_0 , C_0 , D_0 are the virial coefficients depending on temperature, p is the pressure, V is the volume, R

is the universal gas constant, T is the temperature.

Equation (1) can be converted in terms of number density to the following form:

$$\frac{p}{nkT} = 1 + Bn + Cn^2 + Dn^3 + \dots, \quad (2)$$

where $B = \frac{B_0}{N_0}$, $C = \frac{C_0}{N_0}$, $D = \frac{D_0}{N_0}$, ..., N_0 is the Avogadro number. When only the first virial coefficient is taken into account, Equation (2) is transformed into the following form:

$$n^2 + \frac{n}{B} - \frac{p}{kTB} = 0. \quad (3)$$

Solving Equation (3), one can obtain:

$$n = \frac{p}{kT} - \frac{p^2 B}{(kT)^2} = n_0 \left(1 - \frac{pB}{kT} \right), \quad (4)$$

where $n_0 = p/kT$.

The component density can be determined using the following formula:

$$\rho = nm_0 = \left(\frac{p}{kT} - \frac{p^2 B}{(kT)^2} \right) m_0, \quad (5)$$

where m_0 is the mass of one molecule.

The density for a three-component mixture is found according to the formula:

$$\rho_{mix} = \left(\frac{p}{RT} - \frac{p^2}{(RT)^2} B_{mix} \right) * [c_1 m_1 + (1 - c_1 - c_3) m_2 + c_3 m_3], \quad (6)$$

where m_i is the molar mass of the i -th component, c_i is the concentration of the i -th component, index 1 corresponds to CO_2 , 2 – N_2O , 3 – C_3H_8 ,

$$B_{mix} = c_1^2 B_1 + (1 - c_1 - c_3)^2 B_2 + c_3^2 B_3 + 2c_1 c_3 B_{13} + 2(1 - c_1 - c_3)(c_1 B_{12} + c_3 B_{23}). \quad (7)$$

The dependence of the interdiffusion coefficient (IDC) of gases on density can be presented in the following form:

$$D_{ij} = D_{ij}^0 \frac{\rho^0}{\rho}, \quad (8)$$

where D_{ij}^0 is the interdiffusion coefficient under normal conditions, ρ^0 and ρ is the density of the mixture under normal conditions and experimental pressure, respectively. Taking into account formula (6), the expression for the IDC subject to the real

properties of the components is written in the following form:

$$D_{ij} = D_{ij}^0 \frac{p}{p_0} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{1}{1 - \frac{B_{mix}}{RT}}, \quad (9)$$

where p , p_0 , p , T are the pressure and temperature under normal and experimental conditions.

The mathematical description of the occurrence of convection is based on the analysis of a system of equations of continuum mechanics for multicomponent systems with respect to small perturbations [4]. The macroscopic motion of the isothermal ternary gas mixture is described by the general system of hydrodynamic equations, which includes the Navier-Stokes equation, the conservation equations of the number of mixture particles and components.

Taking into account the condition of independent diffusion, in which for the isothermal gas mixture $\sum_{i=1}^3 \vec{j}_i = 0$; $\sum_{i=1}^3 c_i = 1$, this system of equations has the following form [11, 12]:

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla \vec{u}) \right] &= \\ &= -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla \text{div} \vec{u} + \rho \vec{g}, \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(n \vec{v}) &= 0, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} + \vec{v} \nabla c_i &= -\text{div} \vec{j}_i, \\ \vec{j}_1 &= -(D_{11}^* \nabla c_1 + D_{12}^* \nabla c_2), \\ \vec{j}_2 &= -(D_{21}^* \nabla c_1 + D_{22}^* \nabla c_2). \end{aligned} \quad (10)$$

Here $\vec{u}$ is the vector of weight-average velocity; $\vec{v}$ is the vector of number-average velocity; ρ is the density; p is the pressure; η and ζ are the shear and bulk viscosity coefficients; $\vec{g}$ is the free fall acceleration vector; n is the number density; t is the time; c_i is the concentration of the i -th component; $\vec{j}_i$ is the vector of the diffusion flux density of the i -th component; D_{ij}^* are the practical diffusion coefficients, which are determined through the interdiffusion coefficients (IDC):

$$\begin{aligned}
 D_{11}^* &= \frac{D_{13} [c_1 D_{32} + (c_2 + c_3) D_{12}]}{D}, \\
 D_{12}^* &= -\frac{c_1 D_{23} (D_{12} - D_{13})}{D}, \\
 D_{22}^* &= \frac{D_{23} [c_2 D_{13} + (c_1 + c_3) D_{12}]}{D}, \\
 D_{21}^* &= -\frac{c_2 D_{13} (D_{12} - D_{23})}{D}, \\
 D &= c_1 D_{23} + c_2 D_{13} + c_3 D_{12}.
 \end{aligned}$$

Equations (10) are supplemented with the equation of medium state:

$$\rho = \rho(c_1, c_2, p), \quad T = \text{const.}$$

When solving the system of Equations (10), the method of small perturbation was used [4], which assumed the concentration of the i -th component c_i and the pressure p to be represented as follows:

$$c_i = \langle c_i \rangle + c_i', \quad p = \langle p \rangle + p',$$

where $\langle c_i \rangle$, $\langle p \rangle$ are the constant average values taken as a reference point.

Considering that for $L \gg r$ (L and r are the length and radius of the diffusion channel, respectively), the differences between the perturbations of the number-average and weight-average velocities in the Navier-Stokes equation will be insignificant [12], and also assuming that the non-stationary disturbances of mechanical equilibrium are small, neglecting quadratic members in terms of the perturbations, and choosing the appropriate scales of measurement units (the distance is d , the time is d^2/ν , the velocity is D_{22}^*/d , the concentration of the i -th component is $A_i d$, the pressure is $\rho_0 \nu D_{22}^*/d^2$), one can obtain a system of equations of gravitational concentration convection for the perturbed values in dimensionless quantities (primes are omitted):

$$\begin{aligned}
 \text{Pr}_{22} \frac{\partial c_1}{\partial t} - (\vec{u} \vec{e}_z) &= \tau_{11} \nabla^2 c_1 + \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \nabla^2 c_2, \\
 \text{Pr}_{22} \frac{\partial c_2}{\partial t} - (\vec{u} \vec{e}_z) &= \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \nabla^2 c_1 + \nabla^2 c_2, \\
 \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} &= -\nabla p + \nabla^2 \vec{u} + (\text{Ra}_1 \tau_{11} c_1 + \text{Ra}_2 c_2) \vec{e}_z, \\
 \text{div} \vec{u} &= 0,
 \end{aligned} \quad (11)$$

where $\vec{e}_z$ is the unit vector in the z -axis direction; $\text{Pr}_{ii} = \nu/D_{ii}^*$ is the diffusion Prandtl number; $\text{Ra}_i = g \beta_i A_i d^4 / \nu D_{ii}^*$ is the partial Rayleigh number; $\tau_{ij} = D_{ij}^*/D_{22}^*$ are the parameters determining the relationship between the practical diffusion coefficients; $\beta_i = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c_i} \right)_{p,T}$; $A_i \vec{e}_z = -\nabla c_{i0}$ (subscript 0 refers to the average values).

Solving the system of Equations (11) for a flat channel with mass-impermeable walls made it possible to obtain, in terms of Rayleigh numbers, a boundary relation that determines the change in the “diffusion – convection” modes in the form [12]:

$$\begin{aligned}
 \tau_{11} \left(1 - \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \right) \text{Ra}_1 + \left(\tau_{11} - \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \right) \text{Ra}_2 &= \\
 = \gamma^4 (\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21}), & \quad (12)
 \end{aligned}$$

where $\gamma = \text{Ra}^{1/4}$, i.e. $\gamma = (\text{Ra}_1 \tau_{11} K_1 + \text{Ra}_2 K_2)^{1/4}$;

$$K_1 = \frac{\left(1 - \frac{A_2}{A_1} \tau_{12} \right)}{(\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21})}, \quad K_2 = \frac{\left(\tau_{11} - \frac{A_1}{A_2} \tau_{21} \right)}{(\tau_{11} - \tau_{12} \tau_{21})};$$

A_i is the partial concentration gradient of the i -th component.

In accordance with Equation (11), the partial Rayleigh numbers for the flat channel with mass-impermeable walls can be determined as follows:

$$\begin{aligned}
 \text{Ra}_1 &= \frac{g a^3 b}{\nu D_{11}^*} \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c_1} \right) \left(\frac{\partial c_1}{\partial z} \right), \\
 \text{Ra}_2 &= \frac{g a^3 b}{\nu D_{22}^*} \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c_2} \right) \left(\frac{\partial c_2}{\partial z} \right). \quad (13)
 \end{aligned}$$

where a and b are the thickness and width of the diffusion channel.

For the case under consideration, the partial concentration gradient of the i -th component can be represented as $A_i = -\frac{\partial c_i}{\partial z}$. Then the ratio A_1/A_2 , taking into account Formulas (13), is determined as follows:

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{\text{Ra}_1 \tau_{11} \partial \rho / \partial c_2}{\text{Ra}_2 \partial \rho / \partial c_1}. \quad (14)$$

After substituting Equation (14) into (12), one can obtain:

$$\begin{aligned} & \text{Ra}_1 \left(1 - \tau_{21} \frac{\partial \rho / \partial c_2}{\partial \rho / \partial c_1} \right) + \\ & + \text{Ra}_2 \left(1 - \frac{\tau_{12}}{\tau_{11}} \frac{\partial \rho / \partial c_1}{\partial \rho / \partial c_2} \right) = . \quad (15) \\ & = \gamma^4 \left(1 - \frac{\tau_{12} \tau_{21}}{\tau_{11}} \right) \end{aligned}$$

The mixture density, taking into account equations (4), (6) and (7), can be represented as:

$$\begin{aligned} \rho = n_0 \left[1 - n_0 \left(\begin{aligned} & c_1^2 B_1 + c_2^2 B_2 + c_3^2 B_3 + \\ & + 2c_1 c_2 B_{12} + 2c_1 c_3 B_{13} + \\ & + 2c_2 c_3 B_{23} \end{aligned} \right) \right] * , \quad (16) \\ * (c_1 \Delta m_1 + c_2 \Delta m_2 + m_3) \end{aligned}$$

where $\Delta m_1 = m_1 - m_3$, $\Delta m_2 = m_2 - m_3$. Since the gases under consideration have almost equal molecular masses, we assume that $\Delta m_1 = \Delta m_2 = 0$.

Differentiating expression (16) with respect to c_1 and c_2 and taking into account that $c_3 = 1 - c_1 - c_2$, one can obtain:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial c_1} &= n_0^2 m_3 (B_3 - B_1), \\ \frac{\partial \rho}{\partial c_2} &= n_0^2 m_3 (B_3 - B_2). \quad (17) \end{aligned}$$

Substituting Equations (17) into (15), one can obtain the following expression for the stability line:

$$\begin{aligned} & \text{Ra}_1 \left(1 - \tau_{21} \frac{B_3 - B_2}{B_3 - B_1} \right) + \\ & + \text{Ra}_2 \left(1 - \frac{\tau_{12}}{\tau_{11}} \frac{B_3 - B_2}{B_3 - B_1} \right) = . \quad (18) \\ & = \gamma^4 \left(1 - \frac{\tau_{12} \tau_{21}}{\tau_{11}} \right) \end{aligned}$$

The second virial coefficients depend on pressure, therefore, in contrast to the consideration of the stability problem for ideal gases, the position of the stability line (18) will also depend on pressure.

Results and discussion

Figure 2 shows the stability map at $p = 0.28$ MPa for the system $0.804 \text{ CO}_2 + 0.196 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{N}_2\text{O}$, experimentally studied in [22]. The MM line corresponds to the first perturbation mode $n = 1$, and the M_1M_1 line was obtained for the $n = 3$ mode, which characterizes a change in the type of convective flow. The region lying below the MM line corresponds to diffusion I, and the area above this line refers to convection II with the different types of motion. In the area between the MM and M_1M_1 lines, a current-countercurrent movement is observed, and above the M_1M_1 line there are two currents and two countercurrents.

In Figure 2, the sign “x” marks the point corresponding to a pressure of 0.28 MPa, at which, as experimental studies have shown, a violation of the stability of mechanical equilibrium is observed in the system under consideration and subsequently a convective process is realized in the system. According to experimental data, at a pressure of 1.20 MPa, the maximum intensity of the convective process is observed in the system under consideration. In Figure 2, point 8, corresponding to this pressure, lies near the line M_1M_1 . Thus, the calculation results for the system $0.804 \text{ CO}_2 + 0.196 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{N}_2\text{O}$ are consistent with the experimental data given in [22].

Figure 3 shows the calculation results for the system $0.812 \text{ N}_2\text{O} + 0.188 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{CO}_2$. The stability lines shown in Figure 3 were obtained at a pressure $p = 0.3$ MPa. According to Figure 3, the points displaying experimental data for the system $0.812 \text{ N}_2\text{O} + 0.188 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{CO}_2$ are located in the first quadrant of the stability map. This indicates that the density of the mixture $0.812 \text{ N}_2\text{O} + 0.188 \text{ C}_3\text{H}_8$ is greater than the density of the pure CO_2 component. Point 5, corresponding to a pressure $p = 0.8$ MPa, lies near the M_1M_1 line, which corresponds, as experimental studies have shown [23], to maximum mass transfer.

Comparison of the calculation results shown in Figures 2 and 3 indicates that when nitrous oxide is located at the top, a change in the type of convective flow occurs at a lower pressure than when a mixture of propane and carbon dioxide is located at the top.

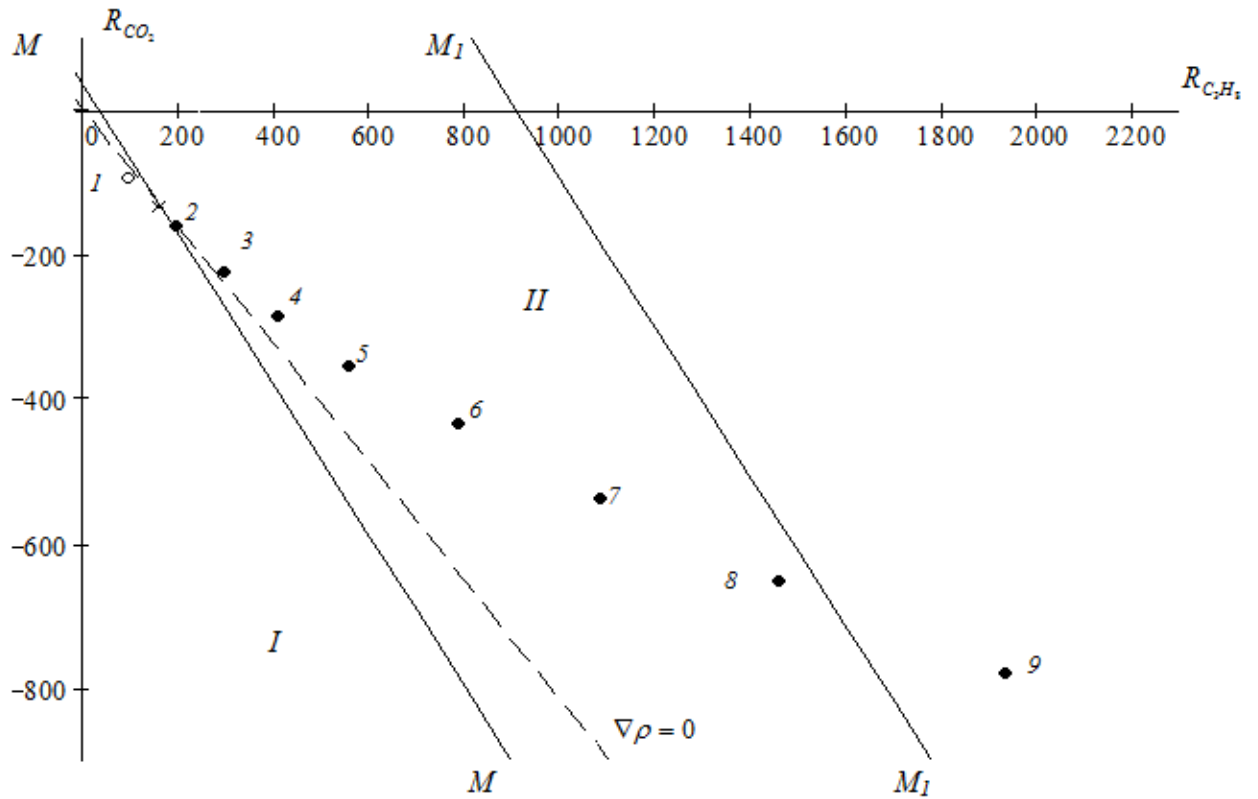


Figure 2 – Regions of diffusion I and convective mixing II for the system $0.804 \text{ CO}_2 + 0.196 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{N}_2\text{O}$.

The points correspond to the following pressure values:

1 – 0.23; 2 – 0.30; 3 – 0.40; 4 – 0.50; 5 – 0.60; 6 – 0.80; 7 – 1.00; 8 – 1.20; 9 – 1.40 MPa

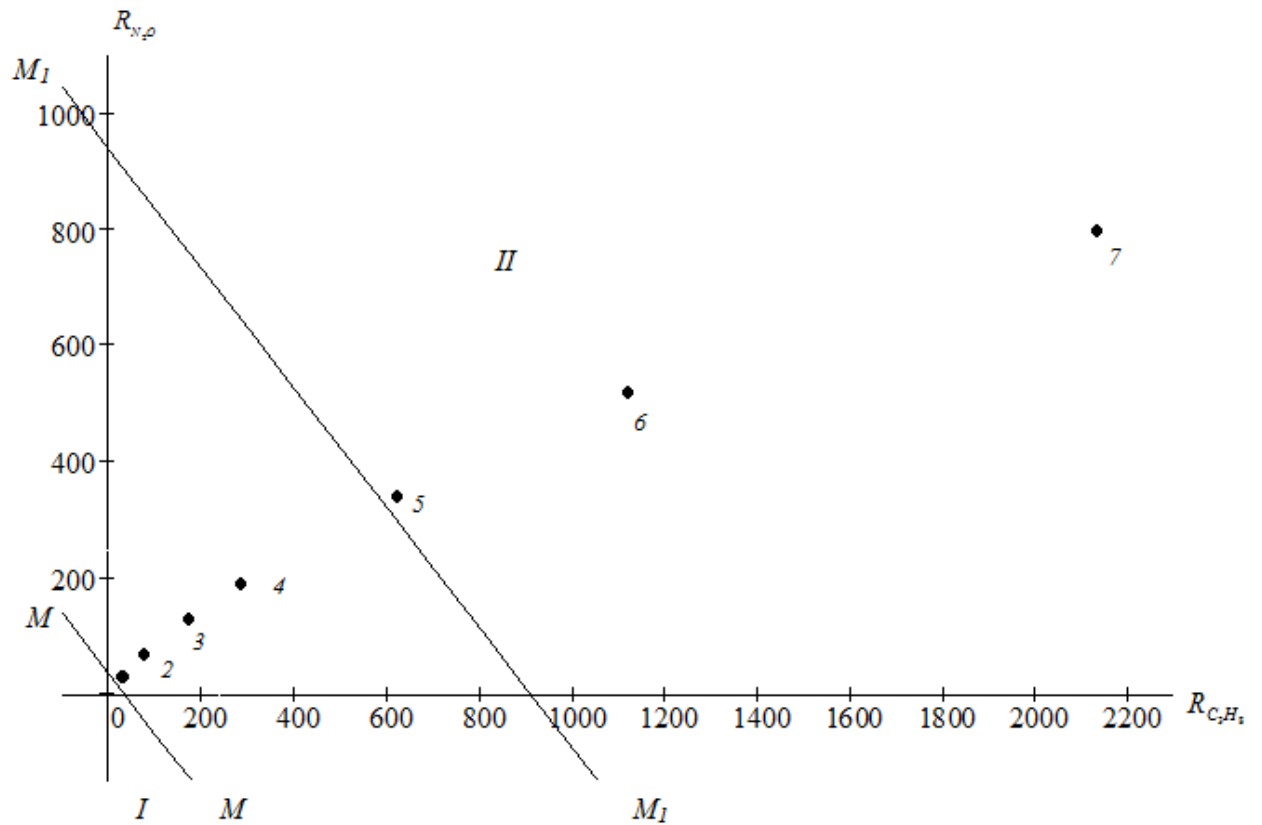


Figure 3 – Areas of diffusion I and convective mixing II for the system $0.812 \text{ N}_2\text{O} + 0.188 \text{ C}_3\text{H}_8 - \text{CO}_2$.

The points correspond to the following pressure values:

1 – 0.30; 2 – 0.40; 3 – 0.50; 4 – 0.60; 5 – 0.80; 6 – 1.00; 7 – 1.50 MPa

Conclusion

The stability of mechanical equilibrium in isothermal three-component gas mixtures containing components with real properties is studied numerically. It is shown that to determine the areas of stable diffusion and convection, as well as the conditions under which the stability of mechanical equilibrium is violated when non-ideal gases are mixed, it is possible to use the equation of state in virial form with one virial coefficient in the mathematical model that describes the occurrence of convection. For the flat diffusion channel with mass-impermeable walls, a method for determining the

position of the stability line has been developed. Analysis of the obtained stability maps and their correlation with experimental data shows that the proposed technique can be used to study changes in the nature of convective flows when mixing nonideal gases.

Acknowledgment, conflict of interest

Some of the results were received as part of the project AP14870237 supported by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan.

The authors have declared no conflict of interest.

References

- 1 Kossov V., Altenbach H. Diffusion mechanisms of convective instability in liquid and gas mixtures // *Z Angew Math Mech.* – 2023. – Vol. 103, No. 11. – e202300801.
- 2 Huang J.M., Zhang J. Rayleigh–Bénard thermal convection perturbed by a horizontal heat flux. *J. Fluid Mech.* – 2023. – Vol. 954. – R2.
- 3 O'Connor L., Lecoanet D., Anders E.H. Marginally stable thermal equilibria of Rayleigh–Bénard convection // *Phys. Rev. Fluids.* – 2021. – Vol. 9, No. 6. – 093501.
- 4 Feireisl E., Świerczewska-Gwiazda A. The Rayleigh–Bénard Problem for compressible fluid flows // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 2023. – Vol. 247. – 9.
- 5 Cherng K., Lele S., Livescu D. Heat transfer and transport property contrast effects on the compressible Rayleigh–Taylor instability // *Phys. Rev. Fluids.* – 2024. – Vol. 9, No. 4. – 043904.
- 6 Olsthoorn J., Tedford E.W., Lawrence G.A. Diffused-interface Rayleigh–Taylor instability with a nonlinear equation of state // *Phys. Rev. Fluids.* – 2019. – Vol. 4, No.9. – 094501.
- 7 Wei T., Zhang M. Rayleigh–Taylor unstable condensing liquid layers with nonlinear effects of interfacial convection and diffusion of vapour // *J. Fluid Mech.* – 2020. – Vol. 904. – A1.
- 8 Radko T. Double-diffusive convection. – Cambridge: Cambridge University Press, 2013. – 344 p.
- 9 Garaud P. Double-diffusive convection at low Prandtl number // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2018. – Vol. 50. – P. 275-298.
- 10 Howland C.J., Verzicco R., Lohse D. Double-diffusive transport in multicomponent vertical convection // *Phys. Rev. Fluids.* – 2023. – Vol. 8, No. 1. – 013501.
- 11 Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. Convective stability of incompressible fluids. – Jerusalem: Keter Publishing House, 1976. – 338 p.
- 12 Kossov V., Fedorenko O., Asembaeva M., Mukamedenkyzy V., Moldabekova M. Intensification of the separation of isothermal ternary gas mixtures containing carbon dioxide // *Chem. Eng. Technol.* – 2021. – Vol. 44, No. 11. – P. 2034-2040.
- 13 Zangi P., Rausch M.H., Fröba A.P. Binary diffusion coefficients for gas mixtures of propane with methane and carbon dioxide measured in a Loschmidt cell combined with holographic interferometry // *Int. J. Thermophys.* – 2019. – Vol. 40. – 18.
- 14 Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport phenomena / Revised Second ed. – New York: John Wiley & Sons, 2007. – 895 p.
- 15 Perera P.N., Hang D., Schuck P.J., Gilbert B. Diffusivity of carbon dioxide in aqueous solutions under geologic carbon sequestration conditions // *J. Phys. Chem. B.* – 2018. – Vol. 122. – P. 4566-4572.
- 16 Vilarrasa V., Bolster D., Dentz M., Olivalla S., Carrera J. Effects of CO₂ compressibility on CO₂ storage in deep saline aquifers // *Trans. Porous Media.* – 2010. – Vol. 85, No. 2. – P. 619-639.
- 17 Huppert H.E., Neufeld J.A. The fluid mechanics of carbon dioxide sequestration // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2014. – Vol. 46. – P. 255-272.
- 18 Fruton P., Nauruzbaeva A., Bataller H., Giraudet C., Vailati A., Croccolo F. Convective dissolution of carbon dioxide into brine in a three-dimensional free medium // *Phys. Rev. Fluids.* – 2023. – Vol. 8, No. 2. – 023503.
- 19 Herzberg F. Molecular spectra and molecular structure. II. Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules. – Malabar FL: Krieger Publishing Company, 1991. – 647 p.
- 20 Vargaftik N.B. Handbook of physical properties of liquids and gases. Pure substances and mixtures. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2014. – 758 p.

21 Richard E.J., Diky V., Knotts IV T.A., Wilding W.V. Properties of gases and liquids. 6th ed. – New York: McGraw Hill, 2023. – 784 p.

22 Поярков И.В. Диффузия и неустойчивость механического равновесия в изотермической газовой смеси $0,196 \text{ C}_3\text{H}_8 + 0,804 \text{ CO}_2 - \text{N}_2\text{O}$ // Вестник КарГУ. Серия «Физика». – 2008. – № 4(52). – С. 34-37.

23 Zhavrin Yu.I., Moldabekova M.S., Poyarkov I.V., Mukamedenkyzy V. Experimental study of diffusion instability in three-component gas mixture without density gradient // Tech. Phys. Letters. – 2011. – Vol. 37, No. 8. – P. 721-723.

References

- 1 V. Kossov and H. Altenbach, Z. Angew. Math. Mech. 103, e202300801 (2023).
- 2 J.M. Huang and J. Zhang, J. Fluid Mech. 954, R2 (2023).
- 3 L. O'Connor, D. Lecoanet, and E.H. Anders, Phys. Rev. Fluids 9, 093501 (2021).
- 4 E. Feireisl and A. Świerczewska-Gwiazda, Arch. Rational Mech. Anal. 247, 9 (2023).
- 5 K. Cherng, S. Lele, and D. Livescu, Phys. Rev. Fluids 9, 043904 (2024).
- 6 J. Olsthoorn, E.W. Tedford, and G.A. Lawrence, Phys. Rev. Fluids 4, 094501 (2019).
- 7 T. Wei and M. Zhang, J. Fluid Mech. 904, A1 (2020).
- 8 T. Radko, Double-Diffusive Convection (Cambridge University Press, Cambridge, 2013), p. 344.
- 9 P. Garaud, Annu. Rev. Fluid Mech. 50, 275-298 (2018).
- 10 C.J. Howland, R. Verzicco, and D. Lohse, Phys. Rev. Fluids 8, 013501 (2023).
- 11 G.Z. Gershuni and E.M. Zhukhovitskii, Convective Stability of Incompressible Fluids (Keter Publishing House, Jerusalem, 1976), p. 338.
- 12 V. Kossov, O. Fedorenko, M. Asembaeva, V. Mukamedenkyzy, and M. Moldabekova, Chem. Eng. Technol. 44, 2034-2040 (2021).
- 13 P. Zangi, M.H. Rausch, and A.P. Fröba, Int. J. Thermophys. 40, 18 (2019).
- 14 R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot, Transport Phenomena, Revised Second Edition (John Wiley & Sons, New York, 2007), p. 895.
- 15 P.N. Perera, D. Hang, P.J. Schuck, and B. Gilbert, J. Phys. Chem. B 122, 4566-4572 (2018).
- 16 V. Vilarrasa, D. Bolster, M. Dentz, S. Olivalla, and J. Carrera, Trans. Porous Media 85, 619-639 (2010).
- 17 H.E. Huppert and J.A. Neufeld, Annu. Rev. Fluid Mech. 46, 255-272 (2014).
- 18 P. Fruton, A. Nauruzbaeva, H. Bataller, C. Giraudet, A. Vailati, and F. Croccolo, Phys. Rev. Fluids 8, 023503 (2023).
- 19 F. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules (Krieger Publishing Company, Malabar FL, 1991), p. 647.
- 20 N.B. Vargaftik, Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases: Pure Substances and Mixtures (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2014), p. 758.
- 21 E.J. Richard, V. Diky, T.A. Knotts IV, and W.V. Wilding, Properties of Gases and Liquids, 6th Edition (McGraw Hill, New York, 2023), p. 784.
- 22 I.V. Poyarkov, Vestnik KarGU. Seriya «Fizika» 52, 34-37 (2008).
- 23 Yu.I. Zhavrin, M.S. Moldabekova, I.V. Poyarkov, and V. Mukamedenkyzy, Tech. Phys. Lett. 37, 721-723 (2011).
- 24

Article history:

Received 4 June 2024

Accepted 18 August 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 04.06.2024

Қабылданды – 18.08.2024

Information about authors:

1. **O.V. Fedorenko** (corresponding author) – Cand. Phys.Math.Sci., Ass.Prof, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan email: Abhinav.fedor23.04@mail.ru

2. **I.V. Poyarkov** – Cand. Phys.Math.Sci., Ass.Prof., Moscow State University of Civic Engineering, Moscow, Russia. email: p-igor@inbox.ru

Авторлар туралы мәлімет:

1. **О.В. Федоренко** (автор-корреспондент) – физ.-мат.ғыл. канд., доцент, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан; email: fedor23.04@mail.ru

2. **И.В. Поярков** – физ.-мат.ғыл. канд., доцент, Мәскеу мемлекеттік құрылыс университеті, Мәскеу қ., Ресей; email: p-igor@inbox.ru

МАЗМҰНЫ – CONTENTS – СОДЕРЖАНИЕ

1-Бөлім Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика	Section 1 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics	Раздел 1 Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика
<i>Bissekenov A.A., Kalambay M.T., Abylkairov Y.S., Shukirgaliyev B.T.</i> Exploring open star cluster memberships with N-body simulations and machine learning 4		
<i>Kuvatova D.B., Panamarev T.P., Ishchenko M.V., Gluchshenko A.P., Berczik P.P.</i> Estimating gamma-ray flux from millisecond pulsars originating in globular clusters near the galactic center 14		
<i>Садыков Т.Х., Махмет Х.К., Новолодская О.А., Пискаль В.В., Аргынова А.Х., Аргынова К.А., Алменова А.М., Жуков В.В., Осенмук В.И.</i> Основные параметры широких атмосферных ливней на высоте гор 21		
2-Бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Онайбергенов Ж.Е., Абдрахманов А.Е., Оразбаев С.А., Рамазанов Т.С., Утегенов А.У.</i> Исследование температуры электронов в плазме тлеющего разряда при постоянном токе Ar и Ar/C ₂ H ₂ 29		
3-Бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Наноаука
<i>Beisembekov M.K., Omarbekova G.I., Guchenko S.A., Tazhibayev S.K., Aimukhanov A.K., Afanasyev D.A., Nurmakhanova A.K., Zeinidenov A.K.</i> Evolution of structural, optical properties and electrical transport of NiO _x films annealed in different environment 38		
<i>Amanova N.D., Turaev Kh.Kh., Djalilov A.T., Nomozov A.K., Sottikulov E.S., Makhmudova Y.A.</i> A study on physico-chemical properties of modified sulfur concrete..... 46		
<i>Аханов А.М., Кульсартов Т.В., Шакиров Б.Б., Заурбекова Ж.А.</i> Исследование коррозионной стойкости металлического бериллия при термоциклировании в условиях паро-аргонной среды 56		
<i>Купчишин А.И., Ниязов М.Н.</i> Исследование зависимости относительного удлинения от механического напряжения пленок поливинилхлорида различной ширины и длины 64		
<i>Мухамедова А.И., Погребняк А.Д., Уазырханова Г.К., Рахадиллов Б.Қ.</i> Көп қабатты қаптамалардың адгезиялық және трибологиялық сипаттамаларының өзгеру ерекшеліктері (TiZrNbYAl)N..... 70		
<i>Спивак-Лавров И.Ф., Амантаева А.Ш., Байсанов О.А., Шугаева Т.Ж.</i> Екі өлшемді өрістерге негізделген статикалық масс-анализаторларды жуықтап есептеу..... 77		
<i>Тухфатуллин Т.А., Грищенко В.Ф., Исмаилов Д.В., Гордиенко Г.И., Накысбеков Ж.Т., Тронин Б.А., Белуччи С.</i> Расчет ионизационных потерь энергии космических лучей в наноструктурах графена 84		

Юров В.М., Гончаренко В.И., Олешко В.С., Жангозин К.Н.

Квантовая структура поверхностного слоя металлов 93

4 Бөлім

**Жылу физикасы және
теориялық жылу техникасы**

Section 4

**Thermophysics and Theoretical
Heat Engineering**

Раздел 4

**Теплофизика и
теоретическая теплотехника**

Skakov M.K., Baklanov V.V., Nurpaisova G.S., Toleubekov K.O., Akaev A.S., Bekmuldin M.K.

Effeciency of simulating decay heat in the corium of a nuclear reactor by the ohmic heating method 108

Fedorenko O.V., Poyarkov I.V.

Instability of mechanical equilibrium in non-ideal gas mixtures 116