



ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ

ВЕСТНИК

СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ

RECENT CONTRIBUTIONS
TO PHYSICS

2(89)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

№2 (89)

Алматы
«Қазақ университеті»
2024



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №2 (89) 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)

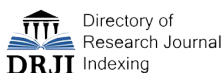
Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

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

Гульмира Шахкозова

Телефон: +7 701 724 2911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

ИБ 15393

Пішімі 60x84/8. Көлемі 7,5 б.т. Тапсыр № 10394.

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**

O.S. Bayakhmetov* , S.K. Sakhiyev 
Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan
*e-mail: bayakhmetov.o.s.92@gmail.com

R-MATRIX CALCULATIONS OF THE DEUTERIUM-TRITIUM FUSION CROSS SECTION BASED ON PRECISE COULOMB FUNCTIONS

Due to the availability of fuel, favorable kinetics, and high output energy, the deuterium-tritium (D-T) fusion reaction is dominantly used in thermonuclear fusion. This paper presents a detailed, step-by-step theoretical calculation of the D-T fusion cross-section within the framework of the phenomenological R-matrix method. The fundamental principles of the phenomenological R-matrix method are outlined. Nuclear and Coulomb interactions are addressed by the R-matrix formalism, which classifies the configuration space into internal and external regions, respectively. Precise Coulomb functions are utilized in the calculations, essential for the accurate determination of the penetration and shift factors. Precise Coulomb functions for the D+T, $^4\text{He}+^{12}\text{C}$ systems have been calculated. The penetration and shift factors for the D+T system for a given angular momentum have been obtained. Two different R-matrix models with parameters from recent scientific papers are employed to calculate D-T fusion cross-sections and reaction rates, which are then compared with those obtained from the ENDF/B-VIII.0 library data. Within a crucial low-energy range (from 0 to 0.1 MeV), important for fusion technology, our results show quite good agreement with experimental data, while in a high-energy range, the obtained results are slightly underestimated due to non-resonant ^5He levels not being taken into account. These findings indicate that the models can be used for future thermonuclear fusion applications.

Key words: thermonuclear fusion, R-matrix, Coulomb functions, penetration factor, shift factor, cross section, reaction rate.

О.С. Баяхметов*, С.К. Сахиев
Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан
*e-mail: bayakhmetov.o.s.92@gmail.com

Нақты Кулон функцияларына негізделген дейтерий-тритий синтезі қимасының R-матрицалық есептеулері

Отынның қолжетімділігіне, қолайлы кинетикасына және жоғары энергия шығымына байланысты дейтерий-тритий (D-T) синтез реакциясы ядролық синтез мәселелері саласында әсіресе қолданылады. Бұл мақалада феноменологиялық R-матрицалық әдіс шеңберінде D-T синтез реакциясы қимасының егжей-тегжейлі, қадамдық теориялық есептеуі берілген. Феноменологиялық R-матрицалық әдістің негізгі принциптері көрсетілді. Ядролық және кулондық өзара әрекеттесу R-матрицалық формализмнің көмегімен өңделеді, оған сәйкес конфигурация кеңістігі сәйкесінше ішкі және сыртқы аймақтарға бөлінеді. Есептеулерде туннельдік және ығысу коэффициенттерін нақты анықтау үшін нақты Кулон функциялары пайдаланады. D+T, $^4\text{He}+^{12}\text{C}$ жүйелері үшін нақты Кулон функциялары есептелді. D+T жүйесі үшін туннельдік және ығысу коэффициенттері берілген бұрыштық импульс үшін анықталды. D-T термоядролық реакцияларының қимасы мен жылдамдығын есептеу үшін қазіргі заманғы ғылыми жұмыстардағы параметрлері бар екі әр түрлі R-матрица моделі пайдаланылады, және олардың нәтижелері ENDF/B-VIII.0 кітапханасының деректерінен алынған эксперименталдық нәтижелермен салыстырылады. Термоядролық синтез технологиясы үшін өте маңызды төмен энергия диапазонында (0-ден 0.1 МэВ-қа дейін) біздің нәтижелер тәжірибелік деректермен жақсы сәйкестігін көрсетеді, ал жоғары энергия диапазонында алынған нәтижелер ^5He ядросының резонанстық емес деңгейлерін есептеулерде есепке алынбауына байланысты біршама төмен бағаланады. Алынған нәтижелер осы мақалада қолданылған моделдердің болашақ термоядролық қосымшалар үшін пайдалануға болатынын көрсетеді.

Түйін сөздер: термоядролық синтез, R-матрица, Кулон функциялары, туннельдеу коэффициенті, ығысу коэффициенті, қима, реакция жылдамдығы.

О.С. Баяхметов*, С.К. Сахиев

Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан

*e-mail: bayakhmetov.o.s.92@gmail.com

R-матричные расчеты сечения дейтерий-тритиевого синтеза на основе точных кулоновских функций

Благодаря доступности топлива, благоприятной кинетике и высокому уровню выхода энергии реакция синтеза дейтерия-трития (D-T) преимущественно используется в области задач термоядерного синтеза. В данной статье представлен подробный, пошаговый теоретический расчет сечения D-T синтеза в рамках метода феноменологической R-матрицы. Изложены фундаментальные принципы феноменологического метода R-матрицы. Ядерные и кулоновские взаимодействия рассматриваются с помощью формализма R-матрицы, согласно которому конфигурационное пространство делится на внутреннюю и внешнюю области, соответственно. В расчетах используются точные кулоновские функции, необходимые для точного определения коэффициентов туннелирования и сдвига. Рассчитаны точные кулоновские функции для систем D+T, $^4\text{He}+^{12}\text{C}$. Получены коэффициенты туннелирования и сдвига для системы D+T для заданного углового момента. Две разные модели R-матрицы с параметрами из современных научных работ используются для расчета сечений и скоростей реакций слияния D-T, результаты которых затем сравниваются с данными, полученными из данных библиотеки ENDF/B-VIII.0. В важном для термоядерной технологии диапазоне низких энергий (от 0 до 0.1 МэВ) наши результаты показывают достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными, тогда как в диапазоне высоких энергий полученные результаты несколько занижены из-за нерезонансных уровней ядра ^5He , которые не учитываются в расчетах. Полученные результаты показывают, что модели могут быть использованы для будущих приложений термоядерного синтеза.

Ключевые слова: термоядерный синтез, R-матрица, кулоновские функции, коэффициент туннелирования, коэффициент сдвига, сечение, скорость реакции.

Introduction

Thermonuclear fusion reactions play a significant and vital role in both fundamental and applied physics [1]. Firstly, these processes are widely recognized as the primary mechanisms responsible for the formation of elements in the Universe, known as nucleosynthesis [2]. Secondly, the significant energy release from thermonuclear fusion reactions has enabled the practical application of nuclear fusion technologies for producing energy [3]. Nuclear fusion has consistently attracted humanity due to several fundamental features: it reaches remarkably high power densities; it depends on plentiful fuel sources; it emits no greenhouse gases throughout its operations and shows minimal carbon impact across its lifecycle [4]; its intrinsic safety arises from the absence of chain reactions (where reactants differ from reaction products, preventing uncontrolled fusion escalation if control is lost). Progressing in our comprehension of nuclear fusion reactions and overcoming technical challenges, nuclear fusion presents the potential to become a new and effective energy source in the future.

Although various thermonuclear fusion fuel options exist, modern fusion reactors mostly use deuterium and tritium as fuel. The main reasons are the abundant availability of these isotopes, favourable reaction kinetics, high energy release, and the relatively lower temperature requirements essential for achieving controlled and efficient nuclear fusion [5]. In addition, taking into account the present level of technological advancement and the particular requirements of controlled fusion reactions, the use of deuterium and tritium enhances the opportunity of nuclear fusion to become a viable energy source.

In this article, we consider a step-by-step calculation of the resonant deuterium-tritium fusion cross section within the framework of the phenomenological R-matrix method. The main formalism of the R-matrix method is presented, precise Coulomb functions for the D+T, $^4\text{He}+^{12}\text{C}$ systems have been calculated, the penetration and shift factors for the D+T system have been obtained, and the cross sections and reaction rates for the deuterium-tritium fusion reaction have been determined by choosing different R-matrix models with parameters obtained from modern scientific papers.

Methods

R-matrix formulation

The general detailed formalism of the R-matrix theory is shown in works [6-7]. In this paper, we consider the main principles of the R-matrix method as well as the main mathematical calculations essential for the determination of the fusion cross sections and reaction rates.

In the framework of the R-matrix method, the configuration space is divided in two parts [8]. The first is the internal region, characterized by a radius a , where it is important to consider the nuclear interaction between the colliding nuclei. The second is the external region, where there is only the Coulomb interaction. The physics of the problem is derived from real and energy-independent parameters E_λ and γ^λ , known as the energy and the reduced width of pole λ [8].

The R-matrix in the case of a multichannel problem with N poles can be expressed as

$$R_{ij}(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_i^\lambda \gamma_j^\lambda}{E_\lambda - E}, \quad (1)$$

where E_λ and γ_i^λ are the energy and reduced width in channel i . As it is shown in work [6], from Eq. (1) one can easily deduce the collision matrix U as follows

$$U(E) = (Z^*(E))^{-1} Z(E), \quad (2)$$

where the matrix $Z(E)$ is expressed as

$$Z_{ij}(E) = I_i(E) \delta_{ij} - a \sqrt{k_i k_j} R_{ij}(E) I_j'(E). \quad (3)$$

In Eq. (3), k_i and k_j are the wave numbers in channels i and j , respectively, and the ingoing Coulomb function $I_i(E)$ is given by

$$I_i(E) = e^{i\omega_i} [G_i(E) - iF_i(E)], \quad (4)$$

$$|U_{12}|^2 = \frac{4a^2 k_1 k_2 R_{11} R_{22}}{(G_1^2 + F_1^2)(G_2^2 + F_2^2) |1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2|^2}. \quad (10)$$

For more convenience, we have omitted the explicit energy dependence of the Coulomb functions and R-matrices in Eq. (10). Now, introducing the formulas for the penetration factors P_1 and P_2

$$|1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2|^2 = (1 - R_{11} S_1 - R_{22} S_2)^2 + (R_{11} P_1 + R_{22} P_2)^2, \quad (12)$$

where ω_i is the Coulomb phase shift, $F_i(E)$ and $G_i(E)$ are the regular and irregular Coulomb functions, respectively, calculated at $k_i a$ (the derivative $I_j'(E)$ is also calculated with respect to this value). The outgoing Coulomb function is defined as

$$O_i(E) = I_i^*(E). \quad (5)$$

In the case of a two-channel reaction using the single-pole approximation ($N = 1$) [8], we can assume that

$$R_{12}^2 = R_{11} R_{22}. \quad (6)$$

Using Eq. (6), we easily obtain the elements of the collision matrix U

$$U_{11} = \frac{I_1}{O_1} \frac{1 - R_{11} L_1^* - R_{22} L_2}{1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2},$$

$$U_{22} = \frac{I_2}{O_2} \frac{1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2^*}{1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2}, \quad (7)$$

$$U_{12} = U_{21} = \frac{2ia \sqrt{k_1 k_2} \sqrt{R_{11} R_{22}}}{O_1 O_2 (1 - R_{11} L_1 - R_{22} L_2)},$$

where the function $L_i(E)$ is given by

$$L_i(E) = k_i a \frac{O_i'(E)}{O_i(E)} = S_i(E) + iP_i(E). \quad (8)$$

In Eq. (8), $S_i(E)$ is the shift-factor, and $P_i(E)$ is the penetration factor.

The nuclear fusion cross section corresponds to the transfer cross section from channel 1 to channel 2, and, in the case of partial wave J^π [8], it can be obtained as

$$\sigma_{1 \rightarrow 2} = \frac{\pi}{k_1^2} \frac{(2J+1)(1+\delta)}{(2J_1+1)(2J_2+1)} |U_{12}|^2, \quad (9)$$

where J_1 and J_2 are the spins of the colliding nuclei, δ is the Kronecker delta, equal to 1 or 0 for symmetric and nonsymmetric systems, respectively. Using Eq. (7), one can easily obtain the value of $|U_{12}|^2$ as

$$P_1 = \frac{k_1 a}{G_1^2 + F_1^2}, \quad P_2 = \frac{k_2 a}{G_2^2 + F_2^2}, \quad (11)$$

and, using Eq. (8), deriving that

we can rewrite Eq. (10) as follows

$$|U_{12}|^2 = \frac{4P_1P_2R_{11}R_{22}}{(1 - R_{11}S_1 - R_{22}S_2)^2 + (R_{11}P_1 + R_{22}P_2)^2}. \quad (13)$$

Choosing the one-pole, two-channel R-matrix, given by Eq. (1), one can simply obtain

$$|U_{12}|^2 = \frac{4P_1P_2\gamma_1^2\gamma_2^2}{(E_1 - E - \gamma_1^2S_1 - \gamma_2^2S_2)^2 + (\gamma_1^2P_1 + \gamma_2^2P_2)^2}. \quad (14)$$

Eq. (14) can be expressed in a more concise form by introducing the total width and the level shift, considered below in this paper.

The penetration and shift factors based on precise Coulomb functions

In this section, we explore the penetration and shift factors, which play an important role in the obtaining of the fusion cross sections at low energies.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu m_N} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) g_l(r) + \frac{Z_1Z_2e^2}{r} g_l(r) = E g_l(r), \quad (15)$$

where \hbar is the reduced Planck's constant, μ is the reduced mass of the colliding nuclei, μ_N is the nucleon mass, Z_1 and Z_2 are the charge numbers, e is the elementary charge, $g_l(r)$ is the radial wave function, which depends on the magnitude of the relative coordinate r .

The regular and irregular Coulomb functions, $F_l(E)$ and $G_l(E)$, respectively, shown in Section 2, are the solutions of Eq. (15). In terms of the dimensionless parameters ρ and η , we have $g_l(\eta, \rho)$, and Eq. (15) becomes

$$g'' + \left[1 - \frac{2\eta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] g = 0, \quad (16)$$

$$F_l(\eta, \rho) = C_l(\eta) \rho^{l+1} e^{i\omega\rho} {}_1F_1(1+l+i\omega\eta; 2l+2; -2i\omega\rho), \quad (18)$$

where $\omega = \pm 1$, and the normalizing Gamow factor $C_l(\eta)$ can be obtained as follows

$$C_l(\eta) = 2^l \exp \left[\frac{-\pi\eta + [\ln(\Gamma(1+l+i\eta)) + \ln(\Gamma(1+l-i\eta))]}{2} - \ln(\Gamma(2l+2)) \right], \quad (19)$$

where the natural logarithm of the gamma function $\ln(\Gamma(z))$ is implied.

The irregular Coulomb function $G_l(\eta, \rho)$ is calculated as follows

$$G_l(\eta, \rho) = \frac{F_l(\eta, \rho) \cos(\chi) - F_{-l-1}(\eta, \rho)}{\sin(\chi)}, \quad (20)$$

These energies correspond to so-called stellar conditions. Generally, in this range of energies the scattering of charged nuclei mostly depends on the Coulomb interaction [2]. Therefore, we can neglect the inner structure of nuclei. Thus, we have a two-body Coulomb problem defined by the following radial Schrödinger equation at the center-of-mass energy E for a given angular momentum l :

where $\rho = kr$, $k = \sqrt{2\mu m_N E / \hbar^2}$, $\eta k = Z_1Z_2e^2\mu/\hbar^2$, and $' \equiv d/d\rho$. Therefore, we can rewrite Coulomb functions as $F_l(\eta, \rho)$ and $G_l(\eta, \rho)$, respectively, defining the Sommerfeld parameter η given by

$$\eta \approx 0.1575Z_1Z_2\sqrt{\frac{\mu}{E}}, \quad (17)$$

where μ is measured in MeV.

The regular Coulomb function $F_l(\eta, \rho)$, expressed with hyper-geometric functions [9], is given by

where $\chi = \sigma_l - \sigma_{-l-1} - (l+1/2)\pi$ and $\sigma_l(\eta) = (\ln(\Gamma(1+l+i\eta)) - \ln(\Gamma(1+l-i\eta)))/(2i)$. Here $\sigma_l(\eta)$ is the Coulomb phase shift [9].

Although the analytical expressions for the Coulomb wave functions in Eq. (18)-(20) may appear to be simple, their numerical computation presents significant challenges. Consequently, numerous papers have explored the computation of the Coulomb wave functions [10-15]. Nonetheless,

significant parts of the complex plane have not been investigated due to both numerical and theoretical limitations. In this paper, we have applied a precise method to compute the Coulomb wave functions with all of its arguments complex, as detailed in [9].

The precise Coulomb functions in the deuterium-tritium (D+T) system are shown in Figure 1. The center-of-mass energy is $E = 0.064$ MeV, the relative orbital momentum of the colliding nuclei is $l = 0$, and the dimensionless parameter ρ is in the range from 0 to 12. In addition, we have used the Coulomb amplitude A_l given by

$$A_l = \sqrt{F_l^2 + G_l^2}. \quad (21)$$

As an additional example, we also provide here the graph for the precise Coulomb functions in the case of the ${}^4\text{He}+{}^{12}\text{C}$ system (see Figure 2). The center-of-mass energy is $E = 3$ MeV, the relative orbital momentum of the colliding nuclei is $l = 0$, and the dimensionless parameter ρ is in the range from 0 to 20.

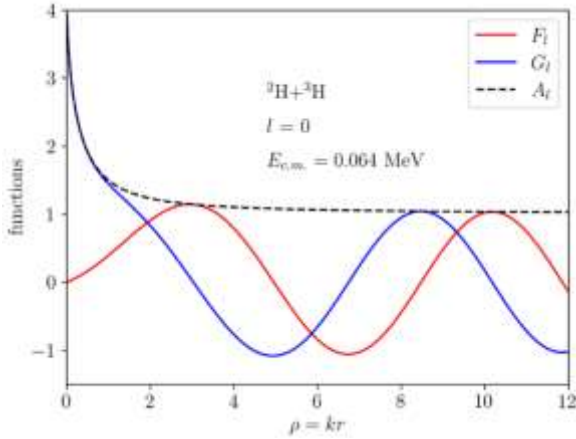


Figure 1 – Precise Coulomb functions for the deuterium-tritium (D+T) system. The red solid line corresponds to $F_l(\eta, \rho)$, the blue solid – to $G_l(\eta, \rho)$, and the black dashed – to the amplitude $A_l(\eta, \rho)$.

Using the parameters, indicated in Eq. (16)-(17), the penetration and shift factors, at a radius a , can be obtained by

$$P_l(E, a) = \frac{ka}{F_l^2(\eta, ka) + G_l^2(\eta, ka)}$$

$$S_l(E, a) = [F_l(\eta, ka)F_l'(\eta, ka) + G_l(\eta, ka)G_l'(\eta, ka)]P_l(E, a), \quad (22)$$

where the derivatives of the Coulomb functions are calculated at ka .

The penetration factors $P_l(E, a)$ for a deuterium-tritium (D+T) system are illustrated in Figure 3. From the Figure 3, it can be inferred that, depending on the increase of the radius a , the penetration factor for the D+T system in the S-wave state ($l = 0$) negligibly varies, and, in contrast, in the D-wave state ($l = 2$) slightly grows.

The shift factors $S_l(E, a)$ for the D+T system in the S-wave ($l = 0$) and D-wave ($l = 2$) states are shown in Figures 4 and 5. As in the case of the penetration factor, it can be noticed from Figure 4 that the values of the S-wave state shift factor

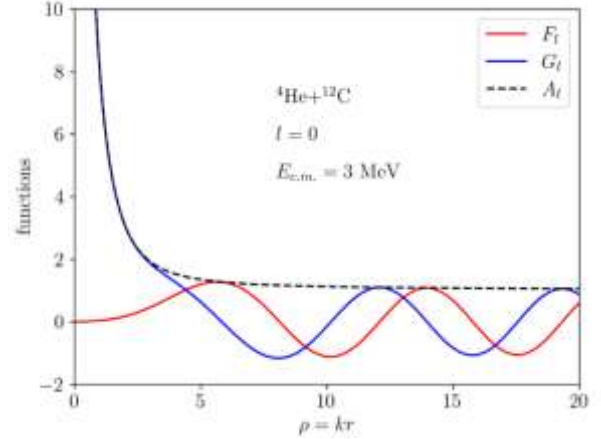


Figure 2 – Precise Coulomb functions for the ${}^4\text{He}+{}^{12}\text{C}$ system. The red solid line corresponds to $F_l(\eta, \rho)$, the blue solid – to $G_l(\eta, \rho)$, and the black dashed – to the amplitude $A_l(\eta, \rho)$.

insignificantly increase depending on the growth of the radius a . In the D-wave state (see Figure 5) the values of the shift factor grow gradually with an increase in the radius a .

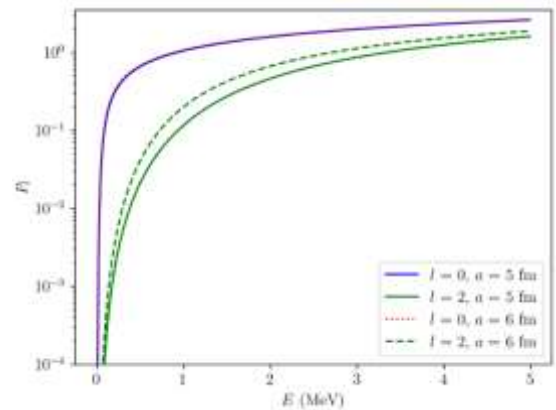


Figure 3 – Penetration factors for the D+T system. The blue solid line corresponds to $l = 0, a = 5$ fm, the green solid – to $l = 2, a = 5$ fm, the red dotted – to $l = 0, a = 6$ fm, and the green dashed – to $l = 2, a = 6$ fm.

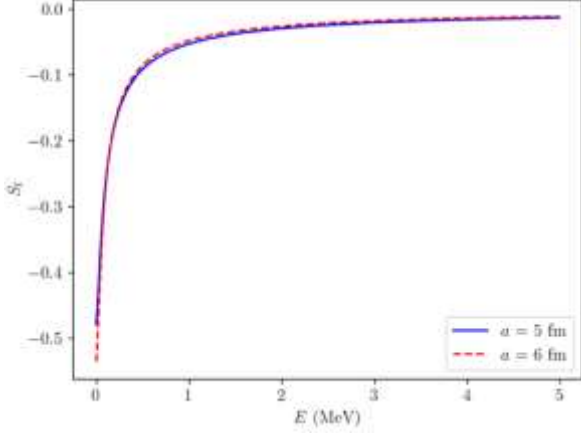


Figure 4 – Shift factors for the D+T system in the S-wave state ($l = 0$). Solid and dashed lines correspond to $a = 5$ fm and $a = 6$ fm, respectively.

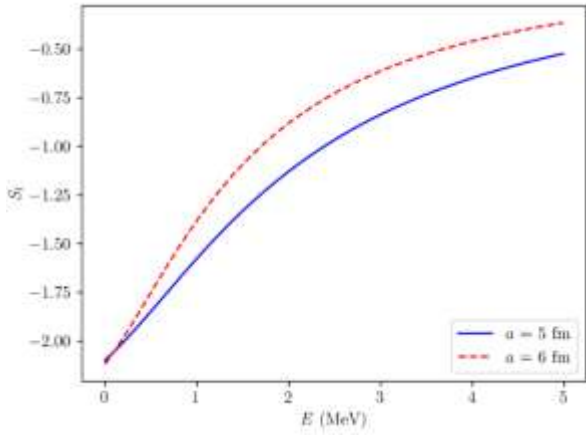


Figure 5 – Shift factors for the D+T system in the D-wave state ($l = 2$). Solid and dashed lines correspond to $a = 5$ fm and $a = 6$ fm, respectively.

Results and Discussion

D-T fusion cross section

The integrated fusion cross section of the $J^\pi = 3/2^+$ ${}^3\text{H}(d,n){}^4\text{He}$ nuclear reaction in the one-level, two-channel R-matrix approximation [16] can be defined as

$$\sigma_{dn}(E) = \frac{\pi}{k_d^2} \frac{2J+1}{(2J_1+1)(2J_2+1)} |S_{dn}|^2, \quad (23)$$

where k_d and E are the center-of-mass deuteron wave number and energy, respectively, $J_1 = 1$ and $J_2 = 1/2$ are the spins of the colliding nuclei (deuteron and tritium), and $J = 3/2$ is the resonance spin, $|S_{dn}|$ is the scattering matrix element.

In Eq. (23), the scattering matrix element [16] is given by

$$|S_{dn}|^2 = \frac{\Gamma_d \Gamma_n}{(E_1 + \Delta - E)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (24)$$

where E_1 is the level eigenenergy, Γ_d and Γ_n are the partial widths of the ${}^3\text{H}+d$ ($l = 0$) and ${}^4\text{He}+n$ ($l = 2$) channels, Γ is the total width, Δ is the level shift. The total width and the level shift are given by

$$\Gamma = \sum_c \Gamma_c, \quad \Gamma_c = 2\gamma_c^2 P_c,$$

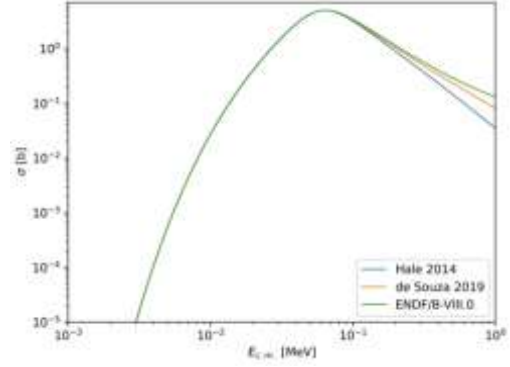
$$\Delta = \sum_c \Delta_c, \quad \Delta_c = -\gamma_c^2 (S_c - B_c), \quad (25)$$

where γ_c^2 is the reduced width, P_c and S_c are the penetration and shift factors, respectively, defined in Section 3, and B_c is the boundary condition parameter. Assuming that $B_c = 0$, the square scattering matrix element $|S_{dn}|^2$ can be easily obtained, using Eq. (14), defined in Section 2. Thus, we have presented the complete step-by-step calculation of the resonant deuterium-tritium nuclear fusion cross section. In addition, it should be noted that we have not shown the results for the penetration and shift factors for the ${}^4\text{He}+n$ system (these properties can be easily calculated as it is shown in Section 3). Nevertheless, we have accurately included these results into our calculations.

In this paper, we have used two different R-matrix models with parameters obtained in recent papers [17-18]. The channel radii were chosen to be equal in model 1 [17], whereas, in model 2 [18], these radii are different. The full list of the R-matrix parameters is shown in Table 1. The obtained deuterium-tritium fusion cross sections are illustrated below in Figure 6. To compare our results with modern evaluated data, we have also included the results obtained from the ENDF/B-VIII.0 library [19]. In the range from 0 to 0.1 MeV, the results of both models are in good agreement with the ENDF/B-VIII.0 library data. However, since our calculations only consider the resonant level $J^\pi = 3/2^+$, fusion cross sections are slightly underestimated for energies exceeding 0.1 MeV. Consequently, it is important to include non-resonant levels of ${}^5\text{He}$ in future calculations. Nevertheless, the energy range from 0 to 0.1 MeV is the most significant for nuclear fusion technology. Therefore, the results from both models are suitable for future considerations within the context of thermonuclear fusion applications.

Table 1 – Parameter values for one-level two-channel R-matrix

Model	a_d , fm	a_n , fm	B_d	B_n	E_1 , MeV	γ_d^2 , MeV	γ_n^2 , MeV
Model 1 [17]	7	7	-0.59	-2	0.179	0.324	0.0122
Model 2 [18]	5.56	3.633	-0.2721	-0.3874	0.0420	3.23	0.133


Figure 6 – Deuterium-tritium fusion cross sections in different R-matrix models. The blue solid line corresponds to model 1 [17], the orange solid – to model 2 [18], the green solid – to the results of the ENDF/B-VIII.0 library [19]

Thermonuclear reaction rates

The reaction rate is obtained as follows [20]

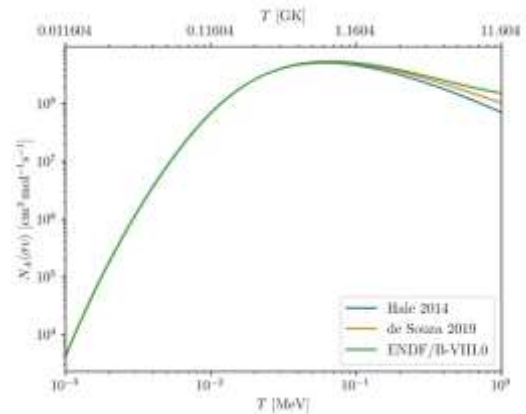
$$N_A \langle \sigma v \rangle = N_A \frac{(8/\pi)^{1/2}}{\mu^{1/2} (k_B T)^{1/2}} \int_0^{\infty} \sigma(E) E \exp(-E/k_B T) dE, \quad (26)$$

where N_A is the Avogadro number, k_B is the Boltzmann constant, T is the temperature, v is the relative velocity. Integration is executed utilizing energies within the center-of-mass framework, while the distribution of nuclei conforms to a Maxwellian pattern.

Thermonuclear reaction rates for the D-T nuclear fusion reaction, obtained in different R-matrix models, are illustrated in Figure 7. As mentioned earlier, we have employed two models and examined the results from the ENDF/B-VIII.0 library [19]. Between temperatures ranging from 0 to 0.1 MeV (0 to $1.1604 \cdot 10^9$ K), the results of both models demonstrate a strong alignment with the ENDF/B-VIII.0 library data. However, at higher temperatures, the models appear to deviate slightly from the reference data. In general, the obtained results are in a good agreement with the ENDF/B-VIII.0 library results.

Conclusion

In this paper, we have presented a detailed analysis of the resonant deuterium-tritium (D-T) fusion cross section in the framework of the phenomenological R-matrix method. The main focus has been on using precise Coulomb functions to accurately determine penetration and shift factors, essential for the calculation of the fusion cross sections and reaction rates. We have outlined the fundamental principles of the R-matrix formalism,


Figure 7 – Thermonuclear reaction rates for the D-T fusion reaction in different R-matrix models. The blue solid line corresponds to model 1 [17], the orange solid – to model 2 [18], the green solid – to the results of the ENDF/B-VIII.0 library [19]

showing step-by-step calculations for the D-T fusion reaction. The precise Coulomb functions for the D+T systems have been calculated. Based on these functions, the penetration and shift factors for the D+T system have been obtained, providing accurate inputs for further calculations of the D-T fusion cross sections and reaction rates. In addition, we have calculated the precise Coulomb functions for the $^4\text{He} + ^{12}\text{C}$ system.

The D-T fusion cross sections and reaction rates have been calculated using different R-matrix

models. Two different models with parameters from recent scientific papers have been used, and the obtained results have been compared with the ENDF/B-VIII.0 library [19] data. The cross sections and reaction rates in the low-energy range from 0 to 0.1 MeV (0 to $1.1604 \cdot 10^9$ K in units of temperature) are in good agreement with the reference data. However, at higher energies the results in both models are slightly underestimated, since non-resonant levels of ^3He have not been considered in our calculations. Nevertheless, as mentioned earlier,

energies in the range from 0 to 0.1 MeV are especially crucial in nuclear fusion technology. Therefore, the results of both models are appropriate for future considerations in thermonuclear fusion applications.

Acknowledgments

This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP14871936).

References

- 1 Lw W., Duan H., Liu J. Enhanced deuterium-tritium fusion cross sections in the presence of strong electromagnetic fields // *Phys. Rev. C*. – 2019. – Vol. 100. – P. 064610.
- 2 Descouvemont P. Nuclear Reactions of Astrophysical Interest // *Front. Astron. Space Sci.* – 2020. – Vol. 7. – № 9. – P. 1-15.
- 3 Meschini S., Laviano F., Ledda F., Pettinari D., Testoni R., Torsello D., Panella B. Review of commercial nuclear fusion projects // *Front. Energy Res.* – 2023. – Vol. 11. – P. 1157394.
- 4 Banacloche S., Gamarra A.R., Lechon Y., Bustreo C. Socioeconomic and environmental impacts of bringing the sun to earth: A sustainability analysis of a fusion power plant deployment // *Energy*. – 2020. – Vol. 209. – P. 118460.
- 5 Abdou M. et al. Physics and technology considerations for the deuterium–tritium fuel cycle and conditions for tritium fuel self sufficiency // *Nucl. Fusion* – 2021. – Vol. 61. – P. 013001.
- 6 Lane A.M., Thomas R.G. R-Matrix Theory of Nuclear Reactions // *Rev. Mod. Phys.* – 1958. – Vol. 30. – P. 257-353.
- 7 Descouvemont P., Baye D. The R-matrix theory // *Rep. Prog. Phys.* – 2010. – Vol. 73. – P. 036301.
- 8 Angulo C., Descouvemont P. R-matrix parametrizations of low-energy transfer reactions // *Nucl. Phys. A*. – 1998. – Vol. 639. – P. 733-747.
- 9 Michel N. Precise Coulomb wave functions for a wide range of complex l , η and z // *Comput. Phys. Comm.* – 2007. – Vol. 176. – P. 232-249.
- 10 Tamura T., Rybicki F. Coulomb functions for complex energies // *Comput. Phys. Comm.* – 1969. – Vol. 1. – P. 25-30.
- 11 Takemasa T., Tamura T., Wolter H.H. Coulomb functions with complex angular momenta // *Comput. Phys. Comm.* – 1979. – Vol. 17. – P. 351-355.
- 12 Barnett A.R. Continued-fraction evaluation of Coulomb functions $F\lambda(\eta, x)$, $G\lambda(\eta, x)$ and their derivatives // *J. Comput. Phys.* – 1982. – Vol. 46. – P. 171-188.
- 13 Thompson I.J., Barnett A.R. COULCC: A continued-fraction algorithm for Coulomb functions of complex order with complex arguments // *Comput. Phys. Comm.* – 1985. – Vol. 36. – P. 363-372.
- 14 Seaton M.J. Coulomb functions for attractive and repulsive potentials and for positive and negative energies // *Comput. Phys. Comm.* – 2002. – Vol. 146. – P. 225-249.
- 15 Noble C.J. Evaluation of negative energy Coulomb (Whittaker) functions // *Comput. Phys. Comm.* – 2004. – Vol. 159. – P. 55-62.
- 16 Barker F.C. $3/2+$ levels of ^5He and ^5Li , and shadow poles // *Phys. Rev. C*. – 1997. – Vol. 56. – P. 2646-2653.
- 17 Hale G.M., Brown L.S., Paris M.W. Effective field theory as a limit of R-matrix theory for light nuclear reactions // *Phys. Rev. C*. – 2014. – Vol. 89. – P. 014623.
- 18 de Souza R.S., Boston S.R., Coc A., Iliadis C. Thermonuclear fusion rates for tritium + deuterium using Bayesian methods // *Phys. Rev. C*. – 2019. – Vol. 99. – P. 014619.
- 19 Brown D.A., Chadwick M., Capote R., Kahler A., Trkov A., Herman M. et al. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data // *Nucl. Data Sheets*. – 2018. – Vol. 148. – P. 1-142.
- 20 Descouvemont P., Adahchour A., Angulo C., Coc A., Vangioni-Flam E. Compilation and R-matrix analysis of Big Bang nuclear reaction rates // *At. Data Nucl. Data Tables*. – 2004. – Vol. 88. – P. 203-236.

References

- 1 W. Lw, H. Duan, J. Liu, *Phys. Rev. C*, 100, 064610 (2019).
- 2 P. Descouvemont, *Front. Astron. Space Sci.*, 7 (9), 1-15 (2020).
- 3 S. Meschini, F. Laviano, F. Ledda, D. Pettinari, R. Testoni, D. Torsello, B. Panella, *Front. Energy Res.*, 11, 1157394 (2023).

- 4 S. Banacloche, A.R. Gamarra, Y. Lechon, C. Bustreo, *Energy*, 209, 118460 (2020).
- 5 M. Abdou et al., *Nucl. Fusion*, 61, 013001 (2021).
- 6 A.M. Lane, R.G. Thomas, *Rev. Mod. Phys.*, 30, 257-353 (1958).
- 7 P. Descouvemont, D. Baye, *Rep. Prog. Phys.*, 73, 036301 (2010).
- 8 C. Angulo, P. Descouvemont, *Nucl. Phys. A*, 639, 733-747 (1998).
- 9 N. Michel, *Comput. Phys. Comm.*, 176, 232-249 (2007).
- 10 T. Tamura, F. Rybicki, *Comput. Phys. Comm.*, 1, 25-30 (1969).
- 11 T. Takemasa, T. Tamura, H.H. Wolter, *Comput. Phys. Comm.*, 17, 351-355 (1979).
- 12 A.R. Barnett, *J. Comput. Phys.*, 46, 171-188 (1982).
- 13 I.J. Thompson, A.R. Barnett, *Comput. Phys. Comm.*, 36, 363-372 (1985).
- 14 M.J. Seaton, *Comput. Phys. Comm.*, 146, 225-249 (2002).
- 15 C.J. Noble, *Comput. Phys. Comm.*, 159, 55-62 (2004).
- 16 F.C. Barker, *Phys. Rev. C*, 56, 2646-2653 (1997).
- 17 G.M. Hale, L.S. Brown, M.W. Paris, *Phys. Rev. C*, 89, 014623 (2014).
- 18 R.S. de Souza, S.R. Boston, A. Coc, C. Iliadis, *Phys. Rev. C*, 99, 014619 (2019).
- 19 D.A. Brown, M. Chadwick, R. Capote, A. Kahler, A. Trkov, M. Herman et al. *Nucl. Data Sheets.*, 148, 1-142 (2018).
- 20 P. Descouvemont, A. Adahchour, C. Angulo, A. Coc, E. Vangioni-Flam, *At. Data Nucl. Data Tables*, 88, 203-236 (2004).

Article history:

Received 01 April 2024

Received in revised form 13 June 2024

Accepted 15 June 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 01.01.2024

Түзетілген түрде түсті – 13.06.2024

Қабылданды – 15.06.2024

Information about authors:

1. **Olzhas Bayakhmetov** (corresponding author) – PhD, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: bayakhmetov.o.s.92@gmail.com).

2. **Sayabek Sakhiyev** – Doct. of Phys. and Math. Sc., Prof. Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: s.sakhi@inp.kz).

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Олжас Баяхметов** (автор корреспондент) – PhD, Ядролық физика институты (Алматы қ., Қазақстан, email: bayakhmetov.o.s.92@gmail.com).

2. **Саябек Сахиев** – физ.-мат.ғыл. докт, проф., (Алматы қ., Қазақстан, email: s.sakhi@inp.kz).

МРНТИ 29.29.25; 29.29.39; 29.29.41

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v89i2-02>Д.Т. Азнабаев^{1,2}, А.К. Бекбаев^{1,2}, В.И.Коробов³¹Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, г.Алматы, Казахстан²Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан³Лаборатория теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова,
Объединенный институт ядерных исследований, г.Дубна, Россия*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ИОН ВОДОРОДА H_2^+ . МАГНИТНЫЕ M1 ПЕРЕХОДЫ

Получены данные о магнитных дипольных переходах в молекулярном ионе H_2^+ для широкого диапазона ν и L , квантовых чисел колебательного и полного орбитального момента. Расчеты выполнены в нерелятивистском приближении. Рассматриваются также эффекты спиновой структуры иона на M1 переходы. Численные расчеты проводились на основе «экспоненциального» вариационного разложения. Одной из простых и наиболее полно разработанных областей применения квантовой механики является теория атомов с одним или двумя электронами. Для водорода и водородоподобных ионов вычисления могут быть выполнены строго как в нерелятивистской волновой механике Шредингера, так и в релятивистской теории электрона Дирака. Точные вычисления являются строгими для электрона в фиксированном кулоновском потенциале. Поэтому водородоподобный атом дает отличный материал для проверки справедливости квантовой механики. Для такого атома поправочные члены, учитывающие движение и структуру атомного ядра, а также квантовоэлектродинамические эффекты, малы и могут быть вычислены с большой точностью. Так как энергетические уровни водорода и водородоподобных атомов можно экспериментально исследовать с поразительной степенью точностью, то оказывается возможной и в какой-то степени точной проверки правильности квантовой электродинамики.

Ключевые слова: молекулярный ион водорода, экзотические атомы, вариационный метод, прецизионные вычисления.

Д.Т. Азнабаев^{1,2}, А.Қ. Бекбаев^{1,2}, В.И. Коробов³¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан²Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан³Н.Н. Боголюбов атындағы Теориялық физика лабораториясы,
Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна қ., Ресей*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

H_2^+ сутегі молекулалық ионы. M1 магниттік ауысулар

Бұл жұмыста кең диапазонды ν және L , тербеліс және толық орбиталық моменттің кванттық сандары үшін H_2^+ молекулалық иондағы магниттік дипольді ауысулар туралы деректер алынды. Есептеулер релятивистік емес жуықтауда орындалды. M1 ауысуларына иондық спин құрылымының әсері де қарастырылады. Сандық есептеулер «экспоненциалды» вариациялық кеңею негізінде жүргізілді. Кванттық механиканы қолданудың қарапайым және толық жетілген салаларының бірі – бір немесе екі электроны бар атомдар теориясы болып табылады. Сутегі және сутегі тәрізді иондар үшін есептеулерді Шредингердің релятивистік емес толқындық механикасында да, Дирактың релятивистік электронды теориясында да қатаң түрде орындауға болады. Дәл есептеулер тіркелген кулондық потенциалдағы электрон үшін қатаң. Сондықтан, сутегі тәрізді атом кванттық механиканың дұрыстығын тексеру үшін табылмас құрал болып табылады. Мұндай атом үшін атом ядросының қозғалысы мен құрылымын, сондай-ақ кванттық электродинамиканың әсерлерді ескеретін түзетулер шағын және өте жоғары дәлдікпен есептелуі мүмкін. Сутегі және сутегі тәрізді атомдардың энергетикалық деңгейлерін эксперименттік түрде жоғары дәлдікпен зерттеуге болатындықтан, кванттық электродинамиканың дұрыстығын белгілі бір дәрежеде тексеруге болатыны белгілі болды.

Түйін сөздер: сутегі молекулалық ионы, экзотикалық атомдар, вариациялық әдіс, дәлдік есептеулер.

D.T. Aznabayev^{1,2}, A.K. Bekbaev^{1,2}, V.I. Korobov³¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan²Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan³Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna Russia*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru**Hydrogen molecular ion H_2^+ . Magnetic M1 transitions**

The magnetic dipole transitions in the homonuclear molecular ion H_2^+ are obtained for a range of ν and L , vibrational and total orbital momentum quantum numbers, respectively. Calculations are performed in the nonrelativistic approximation. The effects of the ion spin structure on M1 transitions are also considered. Numerical calculations were carried out on the basis of “exponential” variational expansion. One of the simplest and most fully developed areas of application of quantum mechanics is the theory of atoms with one or two electrons. For hydrogen and hydrogen-like ions, calculations can be performed strictly in both Schrödinger's non-relativistic wave mechanics and Dirac's relativistic electron theory. The exact calculations are rigorous for an electron at a fixed Coulomb potential. Therefore, the hydrogen-like atom provides an excellent material for testing the validity of quantum mechanics. For such an atom, the correction terms that take into account the motion and structure of the atomic nucleus, as well as quantum electrodynamic effects, are small and can be calculated with great accuracy. Since the energy levels of hydrogen and hydrogen-like atoms can be experimentally studied with an amazing degree of accuracy, it turns out that it is possible to test the correctness of quantum electrodynamics to some extent accurately.

Key words: molecular hydrogen ion, exotic atoms, variational method, precision calculations.

Введение

Молекулярный ион водорода представляет собой простейшую стабильную молекулу, которая может быть изучена как теоретически, так и экспериментально с высокой точностью. В последние годы лазерная спектроскопия гетероядерных молекулярных ионов водорода HD^+ достигла впечатляющих успехов [1–3]. Это позволило получить ценную информацию о фундаментальных константах, таких как отношение масс протона к электрону, и установить новые ограничения на возможные проявления новых взаимодействий между адронами, на гипотетическую «пятую силу».

H_2^+ трудно изучать экспериментально из-за отсутствия разрешенных электрических дипольных переходов, тем не менее, новые эксперименты, использующие спектроскопию квантовой логики (QLS), планируются в ближайшее время для решения этой проблемы. [4,5]. Во всех случаях очень важно знать силу различных переходов, которые могут быть вызваны лазерным излучением. В наших предыдущих работах [6,7] исследовались квадрупольные и запрещенные E1-переходы. В настоящей работе мы намерены провести расчеты переходов M1 для молекулярного иона водорода H_2^+ при малых ν и L в нерелятивистском приближении. Квадрупольные переходы также изучались в работах [8-10]

Переходы M1 в молекуле H_2 изучались в [11] в адиабатическом приближении; было обнаружено, что они существенно слабее, чем квадрупольные переходы для низковращательных состояний. Ионы H_2^+ отличаются по магнитным свойствам от молекулы H_2 , поскольку для случая H_2 суммарный спин электрона S равен нулю. Тем не менее, к аналогичному выводу о слабости магнитных переходов мы приходим и для молекулярного иона H_2^+ . Наш расчет основан на ab initio трехчастичной вариационной аппроксимации нерелятивистской волновой функции связанного состояния и прямом вычислении оператора орбитального магнитного момента; см. уравнение (3) ниже. Адиабатическое приближение не используется.

В дальнейшем мы будем использовать атомные единицы: $\hbar = |e| = m_e = 1$.

Методика исследования

В данной работе мы придерживаемся обозначений [12]: ν – колебательное квантовое число, L – полный орбитальный угловой момент нерелятивистской волновой функции. Спиновая часть описывается операторами спина двух протонов, I_1 , I_2 и спина электрона s_e , $\mathbf{I} = \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2$ полный ядерный спин, $\mathbf{F} = \mathbf{I} + s_e$ полный спин иона H_2^+ , и $\mathbf{J} = \mathbf{F} + \mathbf{L}$ полный угловой момент. Поскольку переход M1 сохраняет

пространственную четность, мы будем рассматривать пространственную волновую функцию только в нерелятивистском приближении, таким образом, правило отбора для этих состояний: $L \rightarrow L' = L$.

Нерелятивистский гамильтониан в системе центра масс может быть записан как:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{Z^2}{R}, \quad (1)$$

где $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_e - \mathbf{R}_i$ и $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$ – координаты электронов относительно ядер и вектор межъядерного положения в обозначениях молекулярных координат, $(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_e \equiv \mathbf{R}_3)$ и $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_e \equiv \mathbf{p}_3)$ – положение векторов и импульсов частиц в системе центра масс, $M = m_p$ – масса протона, $Z = 1$ – заряд протона.

Магнитный момент перехода $\mu_{mn'}$ для связанной системы частиц выражается (см. [13], §47):

$$\mu_{mn'} = \langle \psi_n | \hat{\boldsymbol{\mu}} | \psi_{n'} \rangle = \mu_B \left\langle \psi_n \left| g_L(v, v') \mathbf{L} + g_e \mathbf{s}_e + \frac{g_p}{m_p} \mathbf{I} \right| \psi_{n'} \right\rangle, \quad (2)$$

где $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ оператор магнитного момента связанной системы, $g_L(v, v')$ орбитальный g – фактор

перехода, определяемый через равенство

$$g_L(v, v') \mu_B \langle L \| \mathbf{L} \| L \rangle = \sum_a \left\langle \psi_n \left| \frac{z_a |e|}{m_a} [\mathbf{R}_a \times \mathbf{p}_a] \right| \psi_{n'} \right\rangle, \quad (3)$$

$g_e = -2.002319$ g – фактор электрона, $g_p = 5.585694$ – g фактор протона, $\mu_B = |e| \hbar / (2m_e c)$ – магнетон Бора.

Когда $n \neq n'$, функции начального и конечного состояния ортогональны, тогда

спиновые вклады в (2) точно равны нулю. Таким образом, амплитуды перехода определяются исключительно g_L , орбитальным g – фактором перехода. Тогда амплитуды зависимых от спина переходов между сверхтонкими состояниями выражаются:

$$\langle v F L J \| \hat{\boldsymbol{\mu}} \| v' F' L J' \rangle = \delta_{FF'} (-1)^{J+F+L+1} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} L & 1 & L \\ J' & F & J \end{Bmatrix} \langle v L \| \hat{\boldsymbol{\mu}} \| v' L \rangle \quad (4)$$

и у нас есть дополнительное правило отбора для сверхтонких линий перехода: $F \rightarrow F' = F$.

Полная вероятность перехода для спонтанного излучения из состояния n в

состояние n' выражается из амплитуды перехода следующим образом

$$A_{mn'} = \frac{1}{\tau} \frac{4\alpha^3}{3} \omega_{mn'}^3 \frac{|\langle \psi_n \| \hat{\boldsymbol{\mu}} \| \psi_{n'} \rangle|^2}{2J_n + 1} = \frac{1}{\tau} \frac{\alpha^5}{3} \omega_{mn'}^3 \frac{g_L^2(v, v')}{2J_n + 1}, \quad (5)$$

здесь τ — единица времени (в атомных единицах: $\tau = 2.41888 \times 10^{-17} c$).

спонтанного испускания перехода фотона из состояния $n = (v, L, F, J)$ в состояние $n' = (v', L', F', J')$ см. уравнение (5). В таблице 1 представлены результаты наших численных расчетов для переходов $L = 0 \rightarrow 1$. Изменение матричных элементов магнитного диполя при изменении L ожидаемо мало из-за адиабатичности системы, что численно подтверждается в таблице 2.

Результаты и обсуждение

Численные расчеты проводились на основе «экспоненциального» вариационного разложения [14]. Усредняя уравнение (3) по пространственным степеням свободы получаем орбитальные g – факторы перехода, в конечном итоге, коэффициенты Эйнштейна $A_{mn'}$ для

Таблица 1. Орбитальный g – фактор перехода, $g_L(\nu, \nu')$ для орбитальных состояний $L = 1$ и $L = 2$ ($a(b) = a \times 10^b$)

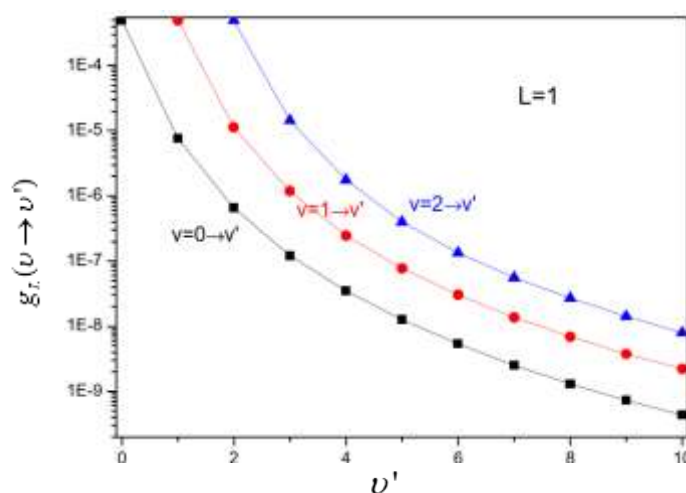
$\nu \rightarrow \nu'$	$L = 1$			$L = 2$		
	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 0$	$\nu = 1$	$\nu = 2$
$\nu' = 0$	5.0113(-4)	-	-	5.0095(-4)	-	-
1	7.6094(-6)	4.9606(-4)	-	7.6324(-6)	4.9587(-4)	-
2	6.5530(-7)	1.1257(-5)	4.9060(-4)	6.5775(-7)	1.1291(-5)	4.9039(-4)
3	1.2180(-7)	1.1844(-6)	1.4421(-5)	1.2221(-7)	1.1892(-6)	1.4465(-5)
4	3.4906(-8)	2.4674(-7)	1.7594(-6)	3.5029(-8)	2.4765(-7)	1.7670(-6)
5	1.2655(-8)	7.7464(-8)	3.9817(-7)	1.2705(-8)	7.7754(-8)	3.9977(-7)
6	5.3465(-9)	3.0371(-8)	1.3402(-7)	5.3693(-9)	3.0498(-8)	1.3456(-7)
7	2.5135(-9)	1.3718(-8)	5.6022(-8)	2.5417(-9)	1.3783(-8)	5.6268(-8)
8	1.3084(-9)	6.8817(-9)	2.6810(-8)	1.3164(-9)	6.9173(-9)	2.6953(-8)
9	7.3091(-10)	3.7398(-9)	1.4170(-8)	7.3522(-10)	3.7732(-9)	1.4225(-8)
10	4.3382(-10)	2.2204(-9)	7.9503(-9)	4.3783(-10)	2.2064(-9)	8.0930(-9)

Таблица 2 - Зависимость g_L от орбитального момента L для двух колебательных переходов.

$\nu \rightarrow \nu'$	$L = 1$	$L = 2$	$L = 3$	$L = 4$
$0 \rightarrow 1$	7.6094(-6)	7.6324(-6)	7.6670(-6)	7.7132(-6)
$0 \rightarrow 9$	7.3091(-10)	7.3522(-10)	7.4243(-10)	7.5216(-10)

Поскольку зависимость от L мала, мы не приводим расчеты для более высоких состояний L . С другой стороны, орбитальный магнитный момент пропорционален $\sqrt{L(L+1)(2L+1)}$ и вероятность перехода $A_{m'}$ увеличивается с ростом

L , как и в случае молекулы H_2 (см. рис. 1, [14])) и при некотором $L > 20$ переход M1 становится доминирующим. На рисунке 1 изображены три серии колебательных переходов для состояний $L = 1$.

**Рисунок 1.** g_L для различных переходов $\nu \rightarrow \nu'$

Заключение

В результате проделанной работы нами получены силы M1 переходов для молекулярного иона водорода H_2^+ . Наряду с нашими предыдущими расчетами квадрупольных переходов E2 и запрещенных дипольных

переходов E1 это завершает исследование скоростей переходов, необходимых для планирования будущих экспериментов и позволяющих оценить интенсивность лазерного излучения, необходимую для прецизионной спектроскопии иона H_2^+ .

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего

образования Республики Казахстан грант, № BR21881941, и В.К. выражает благодарность Российскому научному фонду за поддержку в рамках гранта, № 23-22-00143.

Литература

- 1 Alighanbari S., Giri G.S., Constantin F.L., Korobov V.I., and Schiller S. Precise test of quantum electrodynamics and determination of fundamental constants with HD^+ ions // *Nature*. – 2020. – Vol.581. – P.152.
- 2 Patra S., Germann M., Karr J.-Ph., Haidar M., Hilico L., Korobov V.I., Cozijn F.M.J., Eikema K.S.E., Ubachs W., and Koelemeij J.C.J. Proton-electron mass ratio from laser spectroscopy of HD^+ at the part-per-trillion level // *Science*. – 2020. – Vol.369. – P.1238.
- 3 Kortunov I., Alighanbari S., Hansen M.G., Giri G.S., Schiller S., and Korobov V.I. Proton-electron mass ratio by high-resolution optical spectroscopy of ion ensemble in the resolved-carrier regime // *Nature Phys.* – 2021. – Vol.17. – P.569.
- 4 Alighanbari S., Kortunov I.V., Giri G.S., and Schiller S. Test of charged baryon interaction with high-resolution vibrational spectroscopy of molecular hydrogen ions // *Nat. Phys.* – 2023. – Vol.19. – P.1263.
- 5 Schwegler N., Holzzapfel D., Stadler M., Mitjans A., Sergachev I., Home J.P., and Kienzler D. Trapping and ground-state cooling of H_2^+ // *Phys. Rev. Lett.* – 2023. – Vol.131. – Art.No 133003.
- 6 Korobov V.I., Danev P., Bakalov D., and Schiller S. Laser-stimulated electric quadrupole transitions in the molecular hydrogen ion H_2^+ // *Phys. Rev. A* – 2018. – Vol.97. – Art.No 032505.
- 7 Korobov V.I. and Bakalov D. Forbidden ortho-para electric dipole transitions in the H_2^+ ion // *Phys. Rev. A* 107. – 2023. – Art.No 022812.
- 8 Bates D.R. and Poots G. Properties of the hydrogen molecular ion I: quadrupole transitions in the ground electronic state and dipole transitions of the isotopic ions // *Proc. Phys. Soc. A*. – 1953. – Vol.66. – P.784.
- 9 Posen A.G., Dalgarno A., and Peek J.M. The quadrupole vibration-rotation transition probabilities of the molecular hydrogen ion // *At. Data Nucl. Data Tables*. – 1983. – Vol. 28. – P.265.
- 10 Pilón H.O. and Baye D. Quadrupole transitions in H_2^+ // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2012. – Vol.45. – Art.No 065101.
- 11 Pachucki K. and Komasa J. Magnetic dipole transitions in the hydrogen molecule // *Phys. Rev. A*. – 2011. – Vol.83. – Art.No 032501.
- 12 Korobov V.I., Hilico L., and Karr J.-Ph. Hyperfine structure in the hydrogen molecular ion // *Phys. Rev. A*. – 2006. – Vol.74. – Art.No 040502(R).
- 13 Berestetsky V.B., Lifshitz E.M., and Pitaevskii L.P. *Theoretical Physics IV, Quantum Electrodynamics*. Pergamon Press, 1982. – 652 p.
- 14 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A*. – 2000. – Vol.61. – Art.No 064503.

References

- 1 S. Alighanbari, G.S. Giri, F.L. Constantin, V.I. Korobov, and S. Schiller, *Nature* **581**, 152 (2020).
- 2 S. Patra, M. Germann, J.-Ph. Karr, M. Haidar, L. Hilico, V.I. Korobov, F.M.J. Cozijn, K.S.E. Eikema, W. Ubachs, and J.C.J. Koelemeij, *Science* **369**, 1238 (2020).
- 3 I. Kortunov, S. Alighanbari, M.G. Hansen, G.S. Giri, S. Schiller, and V.I. Korobov, *Nature Phys.* **17**, 569 (2021).
- 4 S. Alighanbari, I. V. Kortunov, G. S. Giri, and S. Schiller, *Nat. Phys.* **19**, 1263 (2023).
- 5 N. Schwegler, D. Holzzapfel, M. Stadler, A. Mitjans, I. Sergachev, J.P. Home, and D. Kienzler, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 133003 (2023).
- 6 V.I. Korobov, P. Danev, D. Bakalov, and S. Schiller, *Phys. Rev. A* **97**, 032505 (2018).
- 7 V.I. Korobov and D. Bakalov, *Phys. Rev. A* **107**, 022812 (2023).
- 8 D. R. Bates and G. Poots, *Proc. Phys. Soc. A* **66**, 784 (1953).
- 9 A. G. Posen, A. Dalgarno, and J. M. Peek, *At. Data Nucl. Data Tables* **28**, 265 (1983).
- 10 H. O. Pilón and D. Baye, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 065101 (2012).
- 11 K. Pachucki and J. Komasa, *Phys. Rev. A* **83**, 032501 (2011).
- 12 V.I. Korobov, L. Hilico, and J.-Ph. Karr, *Phys. Rev. A* **74**, 040502(R) (2006).
- 13 V.B. Berestetsky, E.M. Lifshitz, and L.P. Pitaevskii, *Theoretical Physics IV, Quantum Electrodynamics*, (Pergamon Press, 1982), 652 p.
- 14 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* **61**, 064503 (2000).

История статьи:

Поступила 09 февраля 2024 г.
Поступила в доработанном виде 26 марта 2024
Принята 10 апреля 2024 г.

Article history:

Received 09 February 2023
Received in revised form 26 March 2024
Accepted 10 April 2024

Информация об авторах:

1. **Дамир Азнабаев** – PhD, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Институт ядерной физики (г.Алматы, Казахстан, email: buski_dn@mail.ru)

2. **Асхат Бекбаев** (автор корреспондент) – PhD, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: bekbaev-askhat@mail.ru)









3. **Владимир Коробов** – докт.физ.-мат.наук, проф., Лаборатория теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований (Россия, г.Дубна, email: korobov@theor.jinr.ru)

Information about authors:

1. **Damir Aznabayev** – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: buski_dn@mail.ru).

2. **Askhat Bekbaev** (corresponding author) – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: email:bekbaev-askhat@mail.ru).

3. **Vladimir Korobov** – Dr. of Phys. and Math. Sc., Prof., Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research (Russia, Dubna, email: korobov@theor.jinr.ru).

N.Sh. Alimgazina¹ , N.A. Sharipbay² , M.T. Kyzgarina^{1*} ,
 A.B. Manapbayeva^{3,4} , K.M. Turekhanova¹ , A.Zh. Omar¹ ,
 A.M. Demessinova¹ , A.A. Alibek³ 

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²Galaxy International School, Almaty, Kazakhstan

³Academy of Logistics and Transport, Almaty, Kazakhstan

⁴Institute of Experimental and Theoretical Physics, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: meir83physics@gmail.com

Study of the N126 dust bubble in the infrared wavelength range

In recent years, the research of bubbles, partially circular structures in the interstellar medium, consisting of dust and gas, has received the considerable attention. The analysis of the structure and evolution of bubbles provides insight into the conditions under which stars and planets form in the interstellar medium. Dust bubbles are inextricably linked with star formation regions and are powerful tools for studying the interaction of young stellar objects with their environment at various stages of evolution.

The main goal of this article is to study the region of the N126 dust bubble, search for and identify young stellar objects. Identification of young stellar objects by their fluxes at infrared wavelengths is relatively recent, and identification criteria are still at the stage of improvement. Therefore, in this article, the criteria for identifying young stellar objects were used according to the works of Koenig X.P. (2012), Koenig X.P. & Leisawitz D.V. (2014) and Fischer W.J. (2016), which are based on analysis of WISE observational data in the near- and mid-infrared bands W1 (3.4 μm), W2 (4.6 μm), W3 (12 μm), and W4 (22 μm). The data from the 2MASS and AllWISE catalogs with reliable non-zero fluxes of infrared radiation sources were used in that work. For the researched dust bubble, young stellar objects of class 0 (protostars) and class I were not detected. 4 objects of class II, 1 object of the class of transition disks and 48 objects of class III were identified. Energy distributions in the spectra for class II objects were constructed, which also confirmed their evolutionary status. For all identified YSOs, color diagrams were constructed showing the locations of the found objects with their corresponding areas of evolution. Maps of the distribution of YSOs in space are analyzed, which indicate possible signs of an initiated star formation process in the N126 dust bubble.

Key words: bubble, infrared radiation, WISE, young stellar objects, evolutionary stage.

Н.Ш. Алимгазина¹, Н.А. Шарипбай², М.Т. Кызгарина^{*1}, А.Б. Манапбаева^{3,4},
 К.М. Түреханова¹, А.Ж. Омар¹, А.М. Демесина¹, А.Ә. Әлібек³

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

²Galaxy халықаралық мектебі, Алматы қ., Қазақстан

³Логистика және көлік академиясы, Алматы қ., Қазақстан

⁴Эксперименттік және теориялық физика институты, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: meir83physics@gmail.com

N126 тозақ көпіршігін толқын ұзындығының инфрақызыл диапазонында зерттеу

Соңғы жылдары шаң мен газдан тұратын жұлдызаралық кеңістіктегі көпіршіктерді, соның ішінде жартылай сақиналы құрылымдарды зерттеуге көп көңіл бөлінуде. Көпіршіктердің құрылымы мен эволюциясын талдау жұлдызаралық кеңістікте жұлдыздар мен планеталардың пайда болу жағдайларын түсінуге мүмкіндік береді. Шаң көпіршіктері жұлдыз түзілу аймақтарымен тығыз байланысты және эволюциялық дамудың әртүрлі кезеңдерінде жас жұлдызды объектілердің олардың қоршаған ортамен әрекеттесуін зерттеудің басты құралы болып табылады.

Бұл зерттеудің негізгі мақсаты N126 шаң көпіршігі аймағын зерттеу, жас жұлдызды объектілерді іздеу және анықтау болды. Жас жұлдызды объектілерді инфрақызыл толқын ұзындығындағы ағындары бойынша сәйкестендіру жүргізілгеніне салыстырмалы түрде көп уақыт өтпеді, ал сәйкестендіру

критерийлері әлі де жетілдіру сатысында. Сондықтан, бұл зерттеудегі жас жұлдызды объектілерді анықтау критерийлері Koenig X.P. (2012), Koenig X. P. & Leisawitz D. V. (2014) және Fischer W.J. (2016), олар W1 (3,4 мкм), W2 (4,6 мкм), W3 (12 мкм) және W4 (22 мкм) жақын және орта инфрақызыл жолақтарындағы WISE бақылау деректерін талдауға негізделген. Зерттеу барысында инфрақызыл сәулелену көздерінің сенімді нөлдік емес ағындары бар 2MASS және AllWISE каталогтарындағы деректер пайдаланылды. Зерттелетін шаң көпіршігі үшін 0 класындағы (алғашқы жұлдыздар) және I класстағы жас жұлдызды объектілер анықталмады. II класы 4 объект, өтпелі дискілер класының 1 объектісі және III класы 48 объект анықталды. II класы объектілерге арналған спектрлердегі энергияның таралулары құрастырылды, бұл олардың эволюциялық статусын растады. Барлық анықталған ЖЖО үшін эволюцияның сәйкес аймақтарымен табылған объектілердің орналасу орындарын көрсететін түсті диаграммалар құрастырылды. N126 шаң көпіршігінде басталған жұлдыз түзілу процесінің мүмкін белгілерін көрсететін ЖЖО-тің ғарышта таралу карталары талданды.

Түйін сөздер: көпіршік, инфрақызыл сәулелер, WISE, жас жұлдызды объектілер, эволюциялық кезең.

**Н.Ш. Алимгазина¹, Н.А. Шарипбай², М.Т. Кызгарина*¹, А.Б. Манапбаева^{3,4},
К.М. Түреханова¹, А.Ж. Омар¹, А.М. Демесинова¹, А.А. Алибек³**

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

²Международная школа Galaxy, г. Алматы, Казахстан

³Академия логистики и транспорта, г. Алматы, Казахстан

⁴Институт экспериментальной и теоретической физики, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: meir83physics@gmail.com

Исследование пылевого пузыря N126 в инфракрасном диапазоне длин волн

В последние годы большое внимание уделяется исследованиям пузырей - частично кольцевым структурам в межзвездном пространстве, состоящим из пыли и газа. Анализ структуры и эволюции пузырей дает представление об условиях, при которых звезды и планеты образуются в межзвездном пространстве. Пылевые пузыри неразрывно связаны с областями звездообразования и являются мощными инструментами для изучения взаимодействия молодых звездных объектов с окружающей средой на различных стадиях эволюционного развития.

Основной целью данного исследования было изучение области пылевого пузыря N126, поиск и идентификация молодых звездных объектов. Идентификация молодых звездных объектов по их потокам на длинах волн инфракрасного диапазона ведется относительно недавно и критерии идентификации находятся еще на стадии совершенствования. Поэтому в данном исследовании были использованы критерии идентификации молодых звездных объектов согласно работ Koenig X.P. (2012), Koenig X. P. & Leisawitz D.V. (2014) и Fischer W.J. (2016), которые основаны на анализе данных наблюдений WISE в полосах ближнего и среднего инфракрасного диапазона W1 (3,4 мкм), W2 (4,6 мкм), W3 (12 мкм) и W4 (22 мкм). В исследовании были использованы данные из каталогов 2MASS и AllWISE, имеющие надежные ненулевые потоки источников инфракрасного излучения. Для исследуемого пылевого пузыря молодые звездные объекты 0 (протозвезды) и I класса не были обнаружены. Идентифицированы 4 объекта II класса, 1 объект – класс переходных дисков и 48 объектов – III класса. Построены распределения энергий в спектрах для объектов II класса, которые также подтвердили их эволюционный статус. Для всех идентифицированных МЗО построены цветовые диаграммы, показывающие расположения найденных объектов с соответствующими им областями эволюции. Проанализированы карты распределения МЗО в пространстве, которые указывают на возможные признаки инициированного процесса звездообразования в пылевом пузыре N126.

Ключевые слова: пузырь, инфракрасное излучение, WISE, молодые звездные объекты, эволюционная стадия.

Introduction

Researches of objects in the interstellar medium provide the explanation of star formation processes, galaxy formation and the general structure of the

Universe. The improved radiation detection techniques, new technologies and data processing techniques allow to obtain increasingly reliable information and detailed images of the interstellar

medium, opening new horizons for scientific research.

In recent years, much attention has been paid to the study of bubbles, partially circular structures in interstellar medium, consisting of dust and gas, which are inextricably linked with star formation regions [1-3], so analysis of the structure and evolution of bubbles provide insight into the conditions under which stars and planets form in interstellar space. Bubbles have a morphology that indicates the presence of advanced or stimulated star formation process. The star formation process can occur due to the expansion of the bubble, when the leading shock front overtakes and compresses the pre-existing molecular cloud core. The gravitational collapse of the core occurs at this moment, which is an initiated mechanism of star formation in bubbles. Therefore, the research of it is currently still in its early stages and subject of great interest to researchers in the star formation field.

Since studies of infrared dust bubbles are a powerful tool for studying of star-forming regions, the identification of young stellar objects plays an important role in to understand their interaction with the environment at different stages of evolutionary development.

The main goal of this study is to investigate the region near the dust bubble N126, to search and to identify young stellar objects (YSO).

Methods

Data

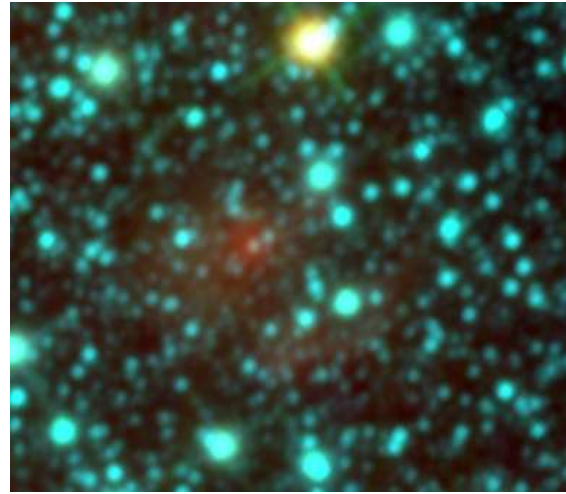
The given research used the large-scale surveys in the infrared wavelength range: 2MASS and WISE (Wide-Field Infrared Survey Explorer). Near-infrared sky observations of J (1.25 μm), H (1.65 μm) and Ks (2.17 μm) obtained by 2MASS were presented in the 2MASS All-Sky Catalog of Point Sources (2003) [4]. WISE observations were presented in the AllWISE catalog [5], which contains radiation fluxes in the near and mid-infrared range at wavelengths $W1$ (3.4 μm), $W2$ (4.6 μm), $W3$ (12 μm) and $W4$ (22 μm).

For this investigation, the following data from catalogs with reliable non-zero fluxes was selected: the flux error should be less than 0.2 mag; signal-to-noise ratio - w_{SNR} greater than 3.

Infrared dust bubble N126

N126 is one of the small galactic infrared bubbles cataloged by Churchwell [6]. N126 is a dust bubble centered at $l = 59,606^\circ$, $b = 0,330^\circ$ with an average radius of about $0,03^\circ$ (1.87 arcmin) and an average shell thickness of $0,008^\circ$ (0,5 arcmin). In terms of its morphology, N126 is type B and Fl , which means that the bubble is a broken or incomplete ring,

the structure of it is flocculent or lumpy (Figure 1). The scientific work [7] mentions the diffuse morphology of N126.



a) WISE



b) Spitzer

Figure 1 - Image of N126 at near and mid-infrared wavelengths

According to [8], the distance to N126 is 6.3 kpc. The coordinates of the central position and radius of the galactic IR bubble N126 estimating on a circular scale were refined in [9]. According to that work, the galactic coordinates are $l = 59,601^\circ$, $b = 0,319^\circ$, and the radius of the bubble is 1.98 arcmin. In addition, the component brightness distributions were also obtained:

$$\log(L_{PAH}/L_{Sun}) = 3.83 \pm 0.12,$$

$$\log(L_{warm}/L_{Sun}) = 4.04 \pm 0.20 \text{ and}$$

$$\log(L_{cold}/L_{Sun}) = 3.42 \pm 0.15.$$

Based on the brightness of the PES, warm and cold dust, the authors calculated the total IR brightness of the dust bubble $\log(L_{TIR}/L_{Sun}) = 4.31 \pm 0.11$. According to the information on the flux densities

obtained using ($< 2R$) circular aperture photometry, Figure 2 shows the energy distribution in the spectrum of the N126 dust bubble.

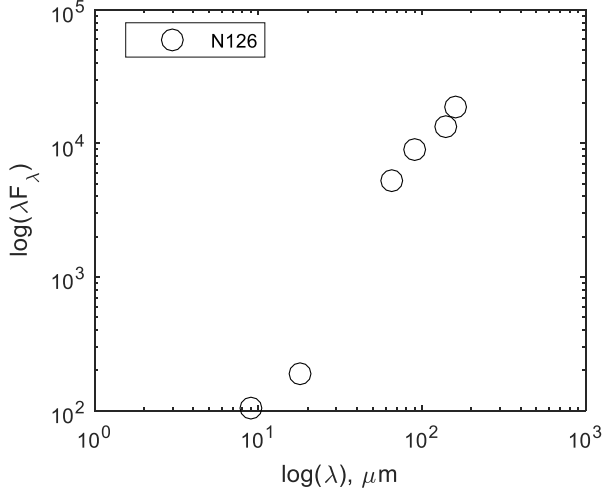


Figure 2 – Energy distribution in the spectrum of the N126 dust bubble

Results and Discussion

The search for young stellar objects was carried out in the astronomical database SIMBAD Astronomical Database - CDS (Strasbourg) using the catalogs describing above on this paper. Basic

information on the region and the sources finding within the search radius are shown in Table 1.

Table 1 – Parameters for searching of objects

Region	R.A. range (deg)	Decl. range (deg)	Search radius (arcmin)	Number of found objects
N126	$295,364 \leq \alpha \leq 295,447$	$23,712 \leq \delta \leq 23,741$	5	463

The algorithm for identifying young stellar objects is used according to the scheme [10, 11]. The young stellar objects are grouped on dependence of evolution's stage: *class 0* (protostars), *class I* and *II*, *transition disks* and *class III* [12-15]. Therefore, identification is carried out in the same manner in that study. First of all, it is necessary to remove polluting factors (*AGN; stationary stars; sources corresponding to PAH emission and particle emission at the leading edge of shock waves*).

The young stellar objects of class 0 (protostars) and class I were not detected. 4 objects of class II, 1 object of the class of transition disks and 48 objects of class III were identified for the investigating dust bubbles. Information on flows for 20 YSOs was presented in Table 2.

Table 2 – YSOs

Class YSO	RA(J2000) h:m:s	DE(J2000) d:m:s	AllWISE	W1, mag	W2, mag	W3, mag	W4, mag
II	19 41 49	+23 42 07	J194149.48+234207.9	13.602	13.467	10.873	7.068
II	19 41 44	+23 41 19	J194144.43+234119.9	10.388	10.009	7.592	5.257
II	19 41 47	+23 45 21	J194147.40+234521.4	11.188	10.933	8.949	8.667
II	19 41 46	+23 38 34	J194146.58+233834.1	6.902	6.126	5.161	5.642
Tr.disc	19 41 45	+23 46 11	J194145.53+234611.1	9.805	9.561	8.708	4.029
III	19 41 47	+23 43 26	J194147.00+234326.5	11.204	10.826	8.052	5.394
III	19 41 45	+23 42 20	J194145.11+234220.8	13.042	13.483	10.864	7.823
III	19 41 47	+23 41 55	J194147.14+234155.5	10.796	10.680	10.284	7.241
III	19 41 52	+23 42 55	J194152.21+234255.6	12.060	11.980	8.783	5.281
III	19 41 51	+23 42 00	J194151.00+234200.3	13.729	14.296	10.871	5.602
III	19 41 46	+23 41 42	J194146.88+234142.2	9.516	9.531	10.623	7.040
III	19 41 49	+23 41 40	J194149.45+234140.9	13.736	14.695	10.656	8.409
III	19 41 44	+23 41 54	J194144.32+234154.4	13.219	13.642	10.505	8.089
III	19 41 52	+23 43 02	J194152.91+234302.0	10.537	10.517	8.471	5.566
III	19 41 48	+23 41 30	J194148.88+234130.7	13.844	14.968	10.626	8.408
III	19 41 50	+23 41 39	J194150.78+234139.2	13.264	13.804	10.859	8.818
III	19 41 54	+23 42 54	J194154.34+234254.6	13.113	13.195	10.316	6.062
III	19 41 54	+23 43 17	J194154.26+234317.1	13.003	13.085	9.906	6.619
III	19 41 55	+23 42 32	J194155.08+234232.5	13.074	12.949	8.813	5.463
III	19 41 42	+23 41 31	J194142.39+234131.2	10.393	10.357	7.970	5.970

For all finding YSOs, the color indicators were determined and their diagram was constructed in Figure 3. The green squares indicated class II YSOs,

the blue triangles indicate class “transition disk” YSOs, and class III objects were marked with black stars. Since existing methods for separating YSOs

into evolution classes on color diagrams are still at the stage of improvement. There were selected the criteria for dividing areas to famous and used for WISE flows for analyzation of finding YSOs' location. In Figure 3, the dotted lines showed the criteria for YSO having the various classes of evolution [11]. The boundaries of the areas in the diagram were indicated in accordance with the classification presented in [16].

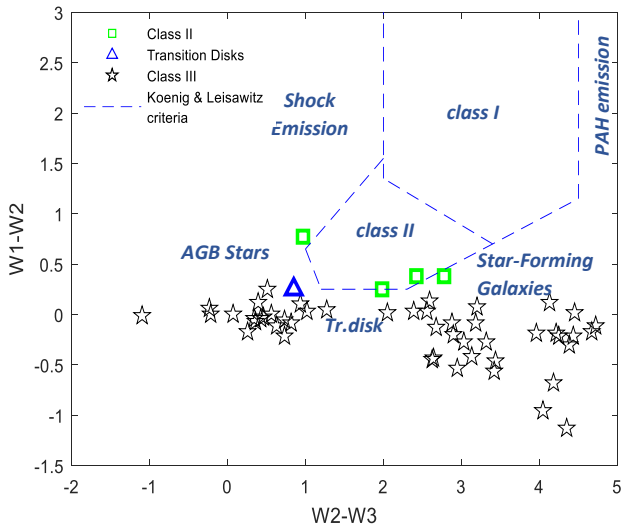


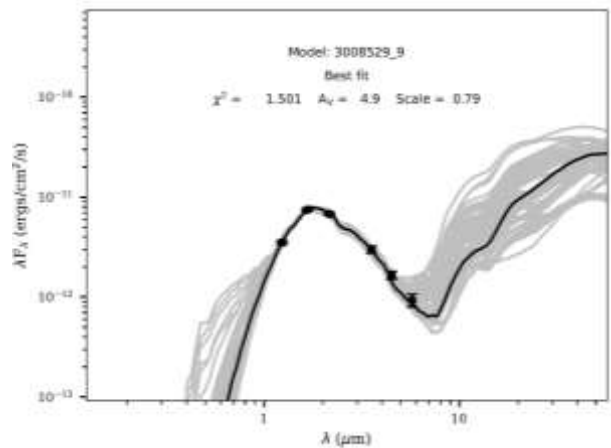
Figure 3 – Color-color diagram for the YSOs in the region of the N126 dust bubble

Figure 3 illustrates that objects of class II are located at the edges of the corresponding evolution region, which indicates the correct identification of the evolution class of these objects. An object of the “Transition disks” class is located near its corresponding evolution region. The location of the evolutionary stage of transition disks is currently unknown with certainty. Therefore, taking into account the assumptions of recent relevant research it is an intermediate stage between classes II and III and the location of this object near the group of class III YSOs is quite understandable. The objects on class III are practically formed young stars, so their location on the diagram corresponds to their evolution class. It is interesting that YSOs with class III are located in small groups on both sides of the “transition disks” region, which indicates a direct connection between the evolutionary development of objects with “transition disks” and class III.

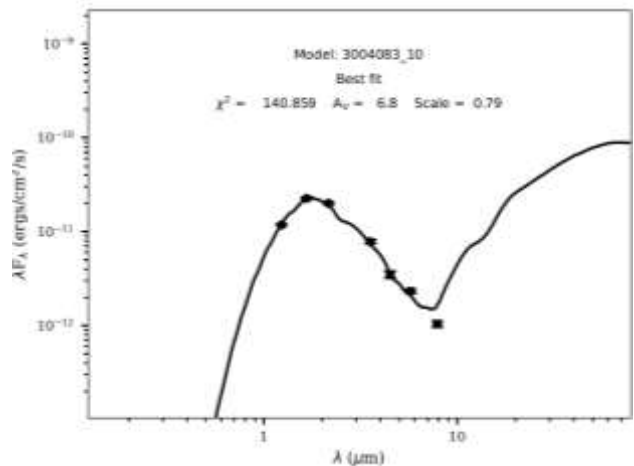
Moreover, for all of finding objects there were searched for information in astronomical databases in order to identify previously unidentified objects. As a result of the search, no information on the evolutionary status and spectral type of the object was found in the catalogs for the receiving young stellar objects.

For three class II YSOs, the astronomical catalogs GLIMPSE Source Catalog (I + II + 3D) (IPAC 2008) [17] and MIPS GAL 24 μ m point source catalog (Gutermuth+, 2015) [18] contain information on fluxes, on the basis of it the distributions were constructed energy in the spectra with suitable models according to [19]. Figure 4 shows that YSOs have an IR excess in the spectrum, which corresponds to our previously determined evolutionary status of these objects.

The map of the integrated intensity of infrared radiation at near and mid-range wavelengths is shown in Figure 5, where the locations of found and identified candidates for young stellar objects are plotted. The white triangle corresponds to the YSO of the “transition disks” class, the red circles to the YSO of class II and the yellow stars to the YSO of class III. The white cross is the coordinates of the center of the dust bubble in accordance of the Churchwell catalog [6].



a) J194149.48+234207.9



b) J194146.58+233834.1

Figure 4 – DES for YSOs on class II: points – observational data, lines – theoretical models (black line – the most suitable model)

Figure 5 illustrates that the YZO distribution has a thread-like structure. Class II YSOs are located near large sources of infrared radiation, and the bulk of the found class III YSOs lies in the southern region of bubble's circular structure. Most objects are placed at the edges of flocculent structures and are observed in small groups.

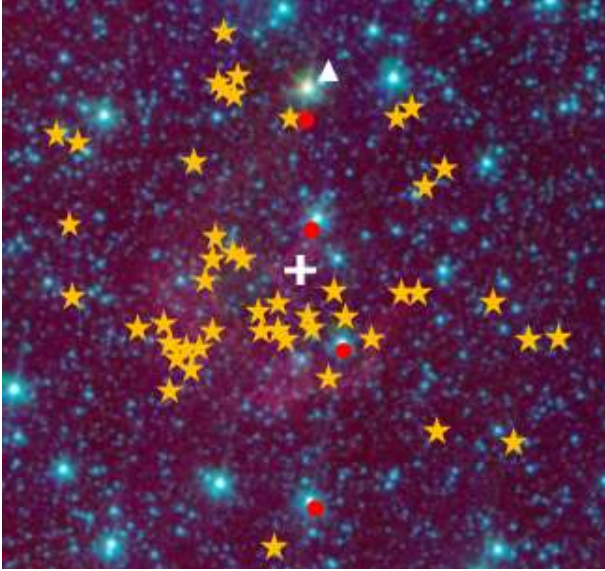


Figure 5 – Distribution of YSOs in space in the Spitzer image. Denoted: «+» – coordinates of the center of the bubble, « Δ » – “transition disks”, « \circ » – II class, « \star » – III class

Figure 6 shows the number of YSOs on the dependence of distance from the center of the dust bubble. The crumpled structure is observed near the center of the dust bubble, and there are shown that any YSOs are not detected in this area. In addition, there are noticed the maximum number of YSOs at a distance of approximately 145 to 155 arcseconds, i.e. in the inner region of the dust bubble between the flocculent structures. However, there are not observed any YSOs at a distance of approximately 180 arcseconds, which is a region of flocculent structures. Furthermore, the number of YSOs decreases with increasing of distance.

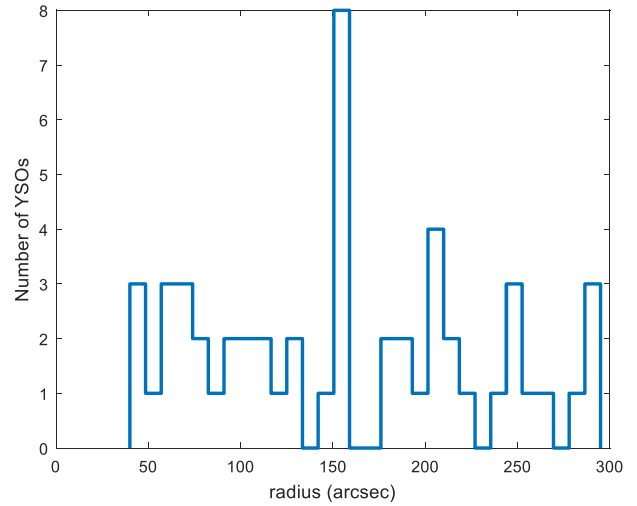


Figure 6 – Distribution of the number of YSOs on the dependence of distance to the bubble's center coordinate

Conclusion

In the present research the region near the N126 dust bubble was investigated. The search and identification of YSOs at various stages of evolution were carried out on the basis of applied infrared radiation fluxes near and mid-wavelength ranges. As a result of the study, 4 objects of class II, 1 object of the class of transition disks and 48 objects of class III were found. The color-color diagrams were constructed showing the correspondence of the location of the finding objects with the areas of evolution. A search for information was carried out in astronomical catalogs, and on the basis of it the energy distributions in spectra with the most suitable theoretical models were constructed for class II YSOs. The DES diagrams show that YSOs have an IR excess in the spectrum corresponding to the evolutionary status of these objects which were previously determined. Maps of the distribution of small objects in space were also analyzed, which indicated the presence of initiated star formation process in the N126 dust bubble.

Acknowledgment

The author associate professor, Dr. Turekhanova K.M. is grateful to the "500 Scientists" project by the Bolashak Scholarship Programme for supporting the research internship at the Cambridge University.

References

- 1 Manapbaeva A.B., Esimbek J., Alimgazinova N.Sh., Kyzgarina M.T., Atamurat A.B. N22 shan kopirshikteri zhanyndagy zhas zhuldyz obektlerin anyqtau // *Izvestija Nacional'noj Akademii nauk Respubliki Kazahstan. Ser. Fiz-mat.* – 2021. -T. 3. - № 337. - C. 96-105. (in Kaz.)
- 2 Nazar A.B., Manapbayeva A.B., Alimgazinova N.SH., Kyzgarina M.T., Demessinova A.M. Identification of young star objects near dust bubble N10 // *Recent contributions to physics.* – 2022. - №4 (83). - P.13-20.
- 3 Alisher A.M., Aslan D., Turekhanova K.M. Search and identification of young stellar objects in infrared dust bubbles N19// *Recent Contributions to Physics.* – 2023. – No3 (86). – P.12-20.
- 4 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=II/246/out&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sexa
- 5 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=II/328/allwise&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sexa
- 6 Churchwell E., Povich, M.S., Allen, D. et al. The Bubbling Galactic Disk // *The Astrophysical Journal.* – 2006. – Vol.649, Iss.2. – P.759-778.
- 7 Russeil D., Pestalozzi M. et al. Giving physical significance to the Hi-GAL data: determining the distance of cold dusty cores in the Milky Way // *A&A.* – 2011. — Vol.526. – P. A151.
- 8 Watson C., Hanspal U., Mengistu A. Triggered Star Formation and Dust Around Mid-infrared-identified Bubbles // *The Astrophysical Journal.* – 2010. – Vol.716, Iss.2. – P.1478-1492.
- 9 Yasuki Hattori, Hidehiro Kaneda, et al. Mid- and far-infrared properties of Spitzer Galactic bubbles revealed by the AKARI all-sky surveys // *Publications of the Astronomical Society of Japan.* – 2016. – Vol.68, Iss.3. – P.37.
- 10 Koenig X.P. et al. Wide-field infrared survey explorer observations of the evolution of massive star-forming regions // *The Astrophysical Journal.* – 2011. – Vol. 744. – №. 2. – P. 130.
- 11 Koenig X. P., Leisawitz D. V. A classification scheme for young stellar objects using the wide-field infrared survey explorer AllWISE catalog: revealing low-density star formation in the outer galaxy // *The Astrophysical Journal.* – 2014. – Vol. 791. – №. 2. – P. 131.
- 12 Lada C. J. Star formation: from OB associations to protostars // *Symposium-International astronomical union.* – Cambridge University Press, 1987. – Vol. 115. – P.1-18.
- 13 Robitaille V.P. A modular set of synthetic spectral energy distributions for young stellar objects // *Astronomy & Astrophysics.* – 2017. – Vol. 600. – P. A11.
- 14 Allen et al. Initial Results from the Spitzer Young Stellar Cluster Survey // *The Astrophysical Journal Supplement Series.* – 2004. – Vol. 154. – №. 1. – P. 367.
- 15 Gutermuth R. A. et al. The Spitzer Gould belt survey of large nearby interstellar clouds: discovery of a dense embedded cluster in the Serpens-Aquila Rift // *The Astrophysical Journal.* – 2008. – Vol. 673. – №. 2. – P. L151.
- 16 Fischer W. J. et al. A WISE Census of Young Stellar Objects in Canis Major // *The Astrophysical Journal.* – 2016. – Vol. 827. – №. 2. – P. 96.
- 17 <https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-2>
- 18 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=J/AJ/149/64/catalog&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sexa
- 19 Robitaille V.P. et al. Interpreting spectral energy distributions from young stellar objects. II. Fitting observed SEDs using a large grid of precomputed models // *The Astrophysical Journal Supplement Series.* – 2007. – Vol. 169. – №. 2. – P. 328.

References

- 1 A.B. Manapbaeva, J. Esimbek, N.Sh. Alimgazinova, M.T. Kyzgarina, A.B. Atamurat, *Izvestija Nacional'noj Akademii nauk Respubliki Kazahstan. Ser. Fiz-mat*, 3 (337), 96-105 (2021). (in Kaz.)
- 2 A.B. Nazar, A.B. Manapbayeva, N.SH. Alimgazinova, M.T. Kyzgarina, A.M. Demessinova, *Recent Contributions to Physics*, 4 (83), 13-20 (2022).
- 3 A.M. Alisher, D. Aslan, K.M. Turekhanova, *Recent Contributions to Physics*, 3 (86), 12-20 (2023).
- 4 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=II/246/out&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sexa
- 5 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=II/328/allwise&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sexa
- 6 E. Churchwell, M.S. Povich, D. Allen, et al. *The Astrophysical Journal*, 649 (2), 759-778 (2006).
- 7 D. Russeil, M. Pestalozzi et al., *A&A*, 526, A151 (2011).
- 8 C. Watson, U. Hanspal, A. Mengistu, *The Astrophysical Journal*, 716(2), 1478-1492 (2010).
- 9 Yasuki Hattori, Hidehiro Kaneda, et al., *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 68 (3), 37 (2016).
- 10 X.P. Koenig et al., *The Astrophysical Journal*, 744 (2), 130 (2011).
- 11 X.P. Koenig, D.V. Leisawitz, *The Astrophysical Journal*, 791 (2), 131 (2014).
- 12 C.J. Lada, *Star formation: from OB associations to protostars* // *Symposium-International astronomical union*, Cambridge University Press, 115, 1-18 (1987).

- 13 V.P. Robitaille, *Astronomy & Astrophysics*, 600, A11 (2017).
- 14 Allen et al., *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 154(1), 367 (2004).
- 15 R.A. Gutermuth et al., *The Astrophysical Journal*, 673 (2), L151 (2008).
- 16 W.J. Fischer et al. *The Astrophysical Journal*, 827(2), 96 (2016).
- 17 <https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-2>
- 18 https://vizier.cds.unistra.fr/viz-bin/VizieR-3?-source=J/AJ/149/64/catalog&-out.max=50&-out.form=HTML%20Table&-out.add=_r&-out.add=_RAJ,_DEJ&-sort=_r&-oc.form=sex
- 19 V.P. Robitaille et al., *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 169(2), 328 (2007).

Article history:

Received 26 March 2024

Accepted 25 April 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 26.03.2024

Қабылданды – 25.04.2024

Information about authors:

1. **Nazgul Alimgazinoва** – Cand. of Phys. and Math. Sc., Al Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: nazgul.alimgazinoва@kaznu.kz).

2. **Nursultan Sharipbay** – schoolboy, Galaxy International School (Almaty, Kazakhstan, email: sharipbaynurs@gmail.com).

3. **Meiramgul Kyzgarina** (corresponding author) – PhD, Al Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: meir83physics@gmail.com).

4. **Arailym Manapbayeva** – PhD, Institute of Experimental and Theoretical Physics, Academy of Logistics and Transport, (Almaty, Kazakhstan, email: manapbayeva.arailym@gmail.com).

5. **Kundyz Turekhanova** – Cand. of Phys. and Math. Sc., Ass.Prof., Al Farabi Kazakh National University (Almaty Kazakhstan, email: kundyz@physics.kz).

6. **Aruzhan Omar** – PhD student, Al Farabi Kazakh National University (Almaty Kazakhstan, email: omaruzhan@gmail.com).

7. **Aizat Demessinoва** – PhD, Al Farabi Kazakh National University (Almaty Kazakhstan, email: aizat.dem@gmail.com).

8. **Akmaral Alibek** – PhD, Ass.Prof., Academy of Logistics and Transport, (Almaty Kazakhstan, email: Alibek_akmaral@list.ru).

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Назгуль Алимгазинова** – физ.-мат.ғыл. канд., әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: nazgul.alimgazinoва@kaznu.kz).

2. **Нұрсұлтан Шарипбай** – оқушы, Galaxy халықаралық мектебі, (Алматы қ., Қазақстан, email: sharipbaynurs@gmail.com).

3. **Мейрамгуль Кызгарина** (автор корреспондент) – PhD, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: meir83physics@gmail.com).

4. **Арайлым Манапбаева** – PhD, Эксперименттік және теориялық физика институты, Логистика және көлік академиясы (Алматы қ., Қазақстан, email: manapbayeva.arailym@gmail.com).

5. **Кұндыз Түреханова** – физ.-мат.ғыл. канд., қауымд.проф., әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: kundyz@physics.kz).

6. **Аружан Омар** – PhD студенті, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: omaruzhan@gmail.com).

7. **Айзат Демесинова** – PhD, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: aizat.dem@gmail.com).

8. **Ақмарал Әлібек** – PhD, қауымд.проф., Логистика және көлік академиясы, (Алматы қ., Қазақстан, email: Alibek_akmaral@list.ru).

2-бөлім

ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2

PLASMA PHYSICS

Раздел 2

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

А.Т. Нұралы¹ , М.М. Сейсембаева^{1,2,*} 

¹Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы қ., Қазақстан

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

*e-mail: seisembayevamm@gmail.com

Сутегі атомының байланысқан күйлерінің қозу процесін зерттеу

Плазма физикасының маңызды салаларының бірі - элементар процестердің физикасы, яғни, молекулалардың, атомдардың, иондардың, электрондардың және фотондардың соқтығысы кезінде орын алатын процестердің физикасы болып табылады. Плазманың құрамы, оның термодинамикалық, транспорттық, оптикалық және басқа да қасиеттері плазмалық жүйеде болып жатқан процестермен, сонымен қатар олардың жылдамдықтарымен анықталады. Сол себепті, соқтығысу процестерін сараптау арқылы плазманың белгілі бір қасиеттерін зерттеуге болады. Дәстүрлі түрде, алғашқы бағалаулар қарапайым әдістермен орындалған кезде белгілі бір моделдің шеңберінде элементар процестерді зерттеу шашырау қимасын зерттеуден басталады. Осы әдістердің қатарына тәжірибеде қолданылуы міндетті болып келетін Борн әдісі жатады.

Бұл жұмыста плазмадағы сутегі атомы және сутегі тәрізді иондардың күйлеріне, энергияларына, сондай-ақ қозу процестеріне плазмадағы ұжымдық эффектілердің әсері зерттелінген. Жұмыс барысында кванттық механикалық әдістер, оның ішінде вариациялық әдіс пен ұйытқу теориясы, сонымен қатар серпімсіз шашырау процесі үшін Борн жуықтауы пайдаланылды. Электрондық соққымен сутегі атомын қоздыру процесі үшін Борн жуықтауы негізінде зерттеу нәтижелері алынды. Жоғары энергиялық соқтығысулар жағдайы үшін Борн жуықтауы жақсы нәтиже көрсетеді. Зерттеу барысында алынған нәтижелер ғылыми және тәжірибелік мәнге ие, себебі шашырау қималарын анықтау арқылы жылдамдық коэффициенттерін анықтауға мүмкіндік береді. Өз кезегінде бұл жылдамдық коэффициенттері плазма бөлшектерінің қоныстануын (концентрациясын) сипаттауға қолданылатын кинетикалық теңдеуді шешу үшін қажет.

Түйін сөздер: серпімсіз соқтығыстар, экрандалу эффектісі, кванттық механикалық дифракция эффектісі, эффективті потенциалдар, қозу қимасы, Борн жуықтауы.

А.Т. Nuraly¹, М.М. Seisembayeva^{1,2,*}

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

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

*e-mail: seisembayevamm@gmail.com

Investigation of the processes of excitation of bound states of a hydrogen atom

One of the most important areas of plasma physics is the physics of elementary processes, that is, the physics of processes occurring during collisions of molecules, atoms, ions, electrons and photons. The composition of plasma, its thermodynamic, transport, optical and other properties are determined by the processes occurring in the plasma system, as well as their speeds. For this reason, by analyzing collision processes, it is possible to investigate certain properties of the plasma. Traditionally, the study of elementary processes within a specific model begins with the study of the scattering cross section, when the first estimates are made using simple methods. These methods include the Born method, which can and should be applied in practice.

In this work, studies were carried out of the influence of collective effects in plasma on the states and energies of hydrogen atoms and hydrogen-like ions, as well as on excitation processes. Quantum mechanics methods were used in the research process, including the variational method and the perturbation theory, especially the Born approximation for inelastic scattering processes. As a result of the work, data were obtained based on the Born approximation for the process of excitation of a hydrogen atom by electron impact. The Born approximation shows better results in the case of high-energy collisions. The results obtained

during the study have scientific and experimental significance, since they make it possible to determine the velocity coefficients through the calculation of scattering cross sections. These coefficients, in turn, are necessary to solve the kinetic equation used to describe the sedimentation (concentration) of particles in the plasma.

Key words: inelastic collisions, screening effect, quantum mechanical diffraction effect, effective potentials, excitation cross section, Born approximation.

А.Т. Нуралы¹, М.М. Сейсембаева^{1,2,*}

¹Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, г.Алматы, Казахстан

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

*e-mail: seisembayevamm@gmail.com

Исследование процесса возбуждения связанных состояний атома водорода

Одной из важнейших областей физики плазмы является физика элементарных процессов, то есть физика процессов, происходящих при столкновении молекул, атомов, ионов, электронов и фотонов. Состав плазмы, её термодинамические, транспортные, оптические и другие свойства определяются процессами, происходящими в плазменной системе, а также их скоростями. По этой причине, анализируя процессы столкновений, можно исследовать определённые свойства плазмы. Традиционно изучение элементарных процессов в рамках конкретной модели начинается с изучения сечения рассеяния, когда первые оценки выполняются простыми методами. Эти методы включают метод Борна, который можно и нужно применять на практике.

В данной работе были проведены исследования влияния коллективных эффектов в плазме на состояния и энергии атомов водорода и водородоподобных ионов, а также на процессы возбуждения. В процессе исследования использовались методы квантовой механики, включая вариационный метод и теорию закрутки, особенно приближение Борна для процесса неупругого рассеяния. В результате работы были получены данные на основе приближения Борна для процесса возбуждения атома водорода электронным ударом. Приближение Борна демонстрирует лучшие результаты в случае высокоэнергетических столкновений. Полученные в ходе исследования результаты имеют научное и экспериментальное значение, так как позволяют определить коэффициенты скорости через измерение сечений рассеяния. Эти коэффициенты, в свою очередь, необходимы для решения кинетического уравнения, используемого для описания оседания (концентрации) частиц в плазме.

Ключевые слова: неупругие столкновения, эффект экранировки, квантовомеханический эффект дифракции, эффективные потенциалы, сечение возбуждения, приближение Борна.

Кіріспе

Гелий-позитрон соқтығысуының иондалу кимасының толқындық функцияларды қолдануымен бірінші реттік Борн жуықтауында алғашқы кванттық механикалық зерттеуі [1] жұмысында жасалған. Борн жуықтаулары [2-3], әдетте, жоғары энергиялардағы шашырау процестерін жақсы сипаттайды.

Бірінші Борн жуықтауы (FBA) үшін Φ_0^+ функциясы импульсі k_i болатын позитронның бастапқы толқындық функциясы мен нысананың бастапқы күйінің ϕ_0 толқындық функциясының көбейтіндісі болатын Φ_0 функциясымен алмастырылады. Бұл жерде T-матрица элементі келесі түрде жазылады:

$$T_{f_0} = \langle \Phi_f | V | \Phi_0 \rangle. \quad (1)$$

Екінші ретті амплитуданы қатарға жіктеуді ескере отырып, Борн жуықтауын жақсартуға болады және бұл екінші Борн жуықтауын береді.

Бұрмаланған толқындары бар Борн жуықтауы (DWBA) бастапқы және соңғы күйде де позитронның толқындық функциясының бұрмалануын ескеру арқылы жасалған. Статикалық әсерлесуден бөлек атом-нысананың поляризациялық эффектісі әсерлесу потенциалына енуі мүмкін.

Төмен энергиялы позитрон мен гелийдің серпімді соқтығысуы үшін МакЭхран [4] жұмысы эксперименттік нәтижелермен жақсы сәйкес келеді. Парселл [5-6] гелийдің позитрондармен 2S және 2P қозу процесін 150 эВ-қа дейінгі энергияларда DWBA әдісімен зерттеген. Олардың зерттеулерінде позитроний пайда болу каналы қарастырылмаған. Алайда бұл жұмыс нәтижелері

эксперименттік нәтижелермен жақсы үйлеспесе де, DWBA әдісі төмен энергияларда қозу каналына поляризациялық потенциалды қосудың маңыздылығын көрсетті. Шашырау бұрышы функциясы ретіндегі бағдар және түзету параметрлері DWBA әдісімен Мэдисон және Уинтерс [7] жұмысында есептелген. Бірінші немесе екінші ретті ауыспалы потенциалдың әртүрлі бұрмалау ретімен эффектілері зерттелді. Шривастава және б. [8] бұрмаланған толқындық орбиталдық тәсіл көмегімен гелийдің 2S қозу процесі үшін дифференциалдық және толық қималарды есептеген. Иондалу процесі туралы айтар болсақ, DWBA әдісімен неғұрлым жүйеленген зерттеулер Кампану және б. [9-10] жұмыстарында жүргізілген болатын. Олардың моделінде кулондық және жазық толқындар пайдаланылған, сонымен қатар алмасу эффектілері ескерілген. Жүйенің соңғы күйінің шынайы сипаттамасы шашыраған позитрон мен соқтығыстан кейін бөлінген электронның салыстырмалы жылдамдығына тәуелділігімен пайдаланылған. Есептелген иондалу қималары жақын табалдырықтан 500 эВ-қа дейінгі энергиялар үшін эксперименттік нәтижелермен өте жақсы үйлеседі [6,11-13].

Әдістеме

Плазма бөлшектерінің әсерлесу потенциалдары

Сызықтық диэлектрлік өтімділік әдісін пайдалана отырып, [14-17] жұмыстарында аз қашықтықтарда кванттық механикалық дифракция эффектісін, үлкен арақашықтықтарда экрандалу эффектілерін ескеретін эффективті потенциал үшін аналитикалық формула алынған:

$$\Phi_{ab}(r) = \frac{Z_a Z_b e^2}{r \sqrt{1 - 4\lambda_{ab}^2 / r_D^2}} (e^{-A_{ab}r} - e^{-B_{ab}r}), \quad (2)$$

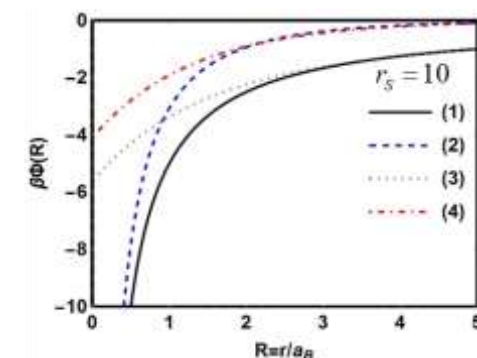
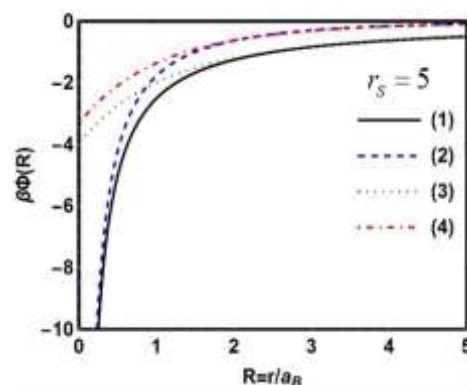
$$A_{ab}^2 = \left(1 - \sqrt{1 - 4\lambda_{ab}^2 / r_D^2}\right) / (2\lambda_{ab}^2),$$

$$B_{ab}^2 = \left(1 + \sqrt{1 - 4\lambda_{ab}^2 / r_D^2}\right) / (2\lambda_{ab}^2).$$

Көрсетілген өрнектерден осы потенциалдың $4\lambda_{ab}^2 / r_D^2 < 1$ кезінде орынды екенін көруге болады. Бұл эффективті потенциал аз қашықтықтарда шекті мәнге ие болады, ал үлкен қашықтықтарда Дебай-Хюккель потенциалына ұмтылады. Эффективті потенциалдың қашықтықтан тәуелділік графигі Дойч потенциалы графигінен төмен жатады.

1-суретте электрон-ион әсерлесуі потенциалдарының тығыздық параметрінің әр

түрлі және байланыс параметрінің тұрақты мәні үшін тәуелділіктері көрсетілген. Бұл графиктен тығыздық параметрі азайған сайын электрон-ион әсерлесу потенциалдарының жоғары жылжитынын (потенциалдар теріс мәнге ие болғандықтан) және Кулон потенциалы мен Дебай-Хюккель потенциалы графиктерінің, Дойч потенциалы мен эффективті потенциал графиктерінің бір-біріне жақындай түсетінін байқауға болады. Бұл келесідей түсіндіріледі, тығыздық параметрінің мәні кішіреген сайын, яғни тығыз плазма жүйесінде, Дебай радиусы кіші мәнге ие болады, сол себепті экрандалу күшейеді.



1-сурет. Электрон-ион арасындағы әсерлесу потенциалдары, $\Gamma=1$. (1) – Кулон потенциал негізінде алынған; (2) – Дебай-Хюккель потенциал негізінде алынған; (3) – Дойч потенциал негізінде алынған; (4) – (2) потенциал негізінде алынған

Нәтижелер мен пікірталас

Сутегі атомын электрондық соққымен қоздыру қимасы үшін Борн жуықтауы

Электронның атоммен әсерлесуі үшін (2) потенциалы мына түрде жазылады [18]:

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = -\frac{Ze^2}{rC_{ei}} (\exp(-A_{ei}r) - \exp(-B_{ei}r)) + \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|C_{ee}} (\exp(-A_{ee}|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) - \exp(-B_{ee}|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|)), \quad (3)$$

бұл жерде $C_{ee} = \sqrt{1 - 4\lambda_{ee}^2 / r_D^2} = \sqrt{1 - 8x^2 y^2}$,
 $A_{ee} = \sqrt{(1 - C_{ee}) / (2\lambda_{ee}^2)}$, $B_{ee} = \sqrt{(1 + C_{ee}) / (2\lambda_{ee}^2)}$.

1s негізгі күйінен 2s қозған күйге ауысу жағдайы үшін $S(\mathbf{r})$ шамасы:

$$S_{2s,1s}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{C_{ee}} \int \psi_{2s}^*(r_1) \psi_{1s}(r_1) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} (\exp(-A_{ee}|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) - \exp(-B_{ee}|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|)) d^3 r_1 =$$

$$= \frac{e^2}{C_{ee}} \left(\int_0^r R_{2s}(r_1) R_{1s}(r_1) r_1^2 (A_{ee} k_0(A_{ee} r) i_0(A_{ee} r_1) - B_{ee} k_0(B_{ee} r) i_0(B_{ee} r_1)) dr_1 + \right.$$

$$\left. + \int_r^\infty R_{2s}(r_1) R_{1s}(r_1) r_1^2 (A_{ee} k_0(A_{ee} r_1) i_0(A_{ee} r) - B_{ee} k_0(B_{ee} r_1) i_0(B_{ee} r)) dr_1 \right). \quad (4)$$

Осы өрнекті интегралдайтын болсақ, келесі формуланы аламыз:

$$W_{2s,1s}(q) = - \frac{4\sqrt{2}\pi e^2 (A_{ee}^2 - B_{ee}^2) (\eta_{1s} \eta_{2s})^{3/2} (\eta_{2s} (q^2 - 3\beta^2) + 2a_z \beta (q^2 + \beta^2))}{C_{ee} a_z^4 (A_{ee}^2 + q^2) (B_{ee}^2 + q^2) (q^2 + \beta^2)^3}, \quad (5)$$

бұл жерде $\eta_{1s} = \left(\frac{(2+y)^3}{4(2+3y)} \right)^{-1}$,

$\eta_{2s} = \frac{(1+y)^5}{1+5y-2y^2+6y^3}$, $\beta = \left(\eta_{1s} + \frac{\eta_{2s}}{2} \right) a_z^{-1}$.

Матрицалық элементтің өлшемсіз түрін көмегімен табылған қима формуласы келесідей:

$$Z^4 \sigma_{2s,1s} = \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{64\pi a_B^2 (\eta_{1s} \eta_{2s})^3 (G^2 - H^2)^2 ((\eta_{1s} + \eta_{2s}) Q^2 + (\eta_{1s} - \eta_{2s}) (\beta a_z)^2)^2}{C_{ee}^2 K (G^2 + Q^2)^2 (H^2 + Q^2)^2 (Q^2 + (\beta a_z)^2)^6} Q dQ, \quad (6)$$

мұнда $G = A_{ee} a_z = \sqrt{\frac{1 - C_{ee}}{4x^2}}$,

$H = B_{ee} a_z = \sqrt{\frac{1 + C_{ee}}{4x^2}}$, $x = \frac{\lambda_{ei}}{a_z}$.

(3) потенциал негізінде алынған 1s → 2s ауысуының қималары 2-3 суреттерде көрсетілген. 2-суреттегі қималар де Бройль толқын ұзындығының $\lambda_{ei} = 0.1a_z$ мәніндегі әр түрлі экрандалу радиустары үшін алынған. 3-суреттегі қималар экрандалу радиусының $r_D = 20a_z$ тұрақты мәніндегі әр түрлі де Бройль толқын ұзындықтары үшін алынған. Осы суреттер бойынша де Бройль толқын ұзындығы көбейген сайын, яғни плазма температурасы кеміген сайын қима графиктерінің аз ғана төмендейтінін көруге болады. 1s күйінен 2p күйіне ауысуының матрицалық элементі келесідей:

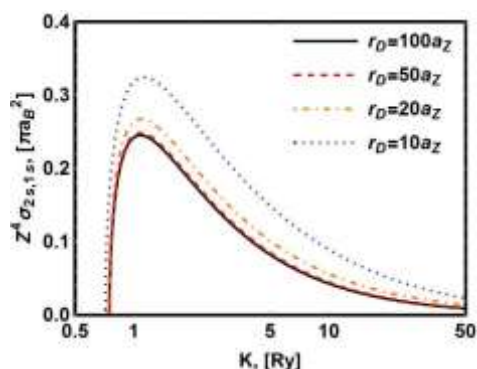
$$W_{2p,1s}(q) = - \frac{16i\pi\sqrt{2}e^2 q \gamma (A_{ee}^2 - B_{ee}^2) \eta_{1s}^{3/2} \eta_{2p}^{5/2}}{a_z^4 C_{ee} (A_{ee}^2 + q^2) (B_{ee}^2 + q^2) (q^2 + \gamma^2)^3}, \quad (7)$$

мұнда $\eta_{2p} = \frac{(1+y)^5}{1+5y}$, $\gamma = \left(\eta_{1s} + \frac{\eta_{2p}}{2} \right) a_z^{-1}$.

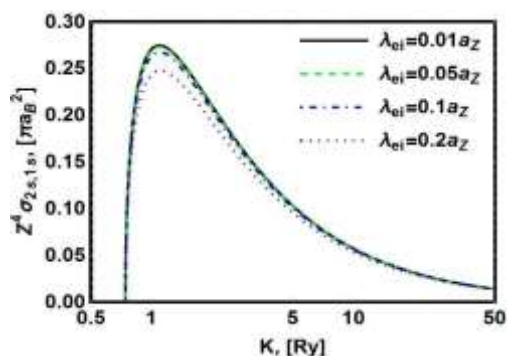
Қима формуласы:

$$Z^4 \sigma_{2p,1s} = \frac{256\pi a_B^2 \eta_{1s}^3 \eta_{2p}^5}{C_{ee}^2 K} * \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{(\gamma a_z)^2 (G^2 - H^2)^2 Q^3}{(G^2 + Q^2)^2 (H^2 + Q^2)^2 (Q^2 + (\gamma a_z)^2)^6} dQ. \quad (8)$$

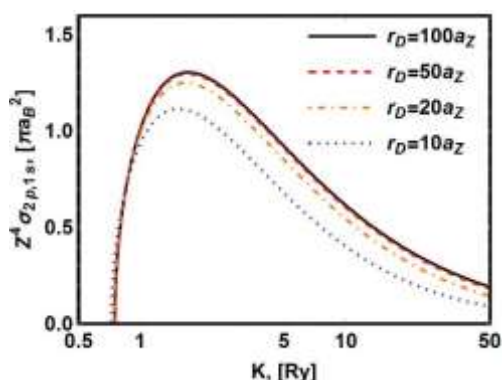
(4)-(8) формулалардағы η_{1s} , η_{2s} , η_{2p} , β , γ шамалары мен 1s, 2s, 2p күйлерінің радиал функциялары. (3) потенциал негізінде алынған 1s → 2p ауысуының қималары 4-5 суреттерде көрсетілген. 4-суреттегі қималар де Бройль толқын ұзындығының $\lambda_{ei} = 0.1a_z$ тұрақты мәніндегі әр түрлі экрандалу радиустары үшін алынған. 5-суреттегі қималар экрандалу радиусының $r_D = 20a_z$ мәніндегі әр түрлі де Бройль толқын ұзындықтары үшін алынған. Осы сурет бойынша 1s → 2s қозу процесімен қатар 1s → 2p қозу процесі үшін де Бройль толқын ұзындығы өскен сайын, яғни плазма температурасы кеміген сайын қима графиктерінің аз ғана төмендейтінін байқауға болады.



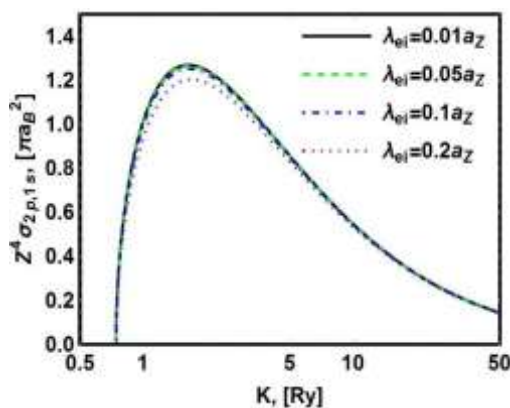
2-сурет. $1s \rightarrow 2s$ қозу процесі үшін (3) потенциалы негізінде алынған қима, $\lambda_{ei} = 0.1a_Z$



3-сурет. $1s \rightarrow 2s$ қозу процесі үшін (3) потенциалы негізінде алынған қима, $r_D = 20a_Z$



4-сурет. $1s \rightarrow 2p$ қозу процесі үшін (3) потенциал негізінде алынған қима, $\lambda_{ei} = 0.1a_Z$



5-сурет. $1s \rightarrow 2p$ қозу процесі үшін (3) потенциал негізінде алынған қима, $r_D = 20a_Z$

Қорытынды

Бұл жұмыста плазмадағы сутегі атомы және сутегі тәрізді иондардың күйлеріне, энергияларына, сондай-ақ қозу процестеріне плазмадағы ұжымдық эффектілердің әсері бойынша зерттеулер жүргізілді. Жұмыс барысында кванттық механиканың меншікті мәндерді жуықтап есептеу әдістері – вариациялық әдіс пен ұйытқу теориясы, нақтырақ айтқанда, серпімсіз шашырау процесі үшін Борн жуықтауы пайдаланылды. Осы жұмыста электрондық соққымен сутегі атомын қоздыру процесі үшін Борн жуықтауының теориясы мен Борн жуықтауы негізінде алынған нәтижелер келтірілді. Борн жуықтауы соққылаушы бөлшектердің энергиясы үлкен болған кездерде жақсы нәтиже береді. Дебай-Хюккель потенциалы негізінде алынған және (3) потенциал негізінде, де Бройль толқын ұзындығының тұрақты мәнінде, алынған қима графиктері экрандалу радиусы кеміген сайын ауысуы үшін жоғарылайды, ал ауысуы үшін төмендейді және солға жылжиды. Экрандалу радиусының тұрақты мәнінде (3) потенциал негізінде алынған қима графиктері де Бройль толқын ұзындығы өскен сайын төмен жылжиды. Алынған қима графиктері Кулон потенциалы негізінде алынған қималармен және Дебай-Хюккель потенциалы негізінде басқа жұмыстарда алынған қима графиктерімен салыстырылды. Жұмыс барысында алынған нәтижелер ғылыми және тәжірибелік мәнге ие, себебі шашырау қималарын анықтау арқылы жылдамдық коэффициенттерін анықтауға болады. Өз кезегінде жылдамдық коэффициенттері плазма бөлшектерінің қоныстануын (концентрациясын) білуге қолданылатын кинетикалық теңдеуді шешу үшін қажет.

АЛҒЫС

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және Жоғары Білім Министрлігінің Ғылым Комитеті қаржыландырды (Грант нөмері AP19679049)

Әдебиеттер

- 1 Basu M., Mazumdar P.S., Ghosh A.S. The sensitivity of the final-state wavefunction in positron impact ionisation // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1985. – Vol.18. – P.369-377.
- 2 Seisembayeva M.M., Shalenov E.O., Kossymkyzy Zh., Turekhanova K.M., Jumagulov M.N., Ramazanov T.S., and Dzhumagulova K.N. Effective Interaction Potentials and the Scattering Cross Sections of the Lorentzian Dense Semiclassical Plasma Particles // *Physics Letters A.* – 2022– Vol.447. – Art.No 128313.
- 3 Dzhumagulova K.N., Seisembayeva M., Shalenov E.O., Kossymkyzy Zh., and Ramazanov T.S. Study of the phenomenon of runaway electron based on the effective interaction potentials // *In Proc. Int. Conf. "47th EPS Conference on Plasma Physics" (Sitges).* – 2021. – Vol.45A. – P.349.
- 4 McEachran R. P., Morgan D.L., Ryman A.G., and Stauffer A.D. Positron scattering from noble gases. // *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* – 1977. – Vol.10 no.4. – P.663–677.
- 5 Parcell L., McEachran R., and Stauffer A. Positron excitation of the 21S state of helium // *Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* – 1983. – Vol.16. – P.4249–4258.
- 6 Parcell L., McEachran R., and Stauffer A. Positron excitation of the 21S state of helium // *Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* – 1987. – Vol.20. – P.2307–2315.
- 7 Madison D.H., and Winters K.H. A second-order distorted-wave model for the excitation of the 21P state of helium by electron and positron impact // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* – 1983. – Vol.16. – P.4437–4450.
- 8 Srivastava R., Kumar, M. and Tripathi A.N. Excitation of helium by positron: A distorted wave polarized orbital approach // *J. Chem. Phys.* – 1986. – Vo.84, no.8. – P.4715–4717.
- 9 Campeanu R.I., Fromme D., Kruse G., McEachran R., Parcell L., Raith W., Sinapius G., and Stauffer A. Partitioning of the positron-helium total scattering cross section // *J.Phys.B: At.Mol.Phys.* –1987. –Vol.20. –P.3557–3570.
- 10 Campeanu R., McEachran R., and Stauffer A. Positron Impact Ionization of He, Ne, and Ar. // *Can. J. Phys.* – 1996. – Vol.74. – P.544–547.
- 11 Knudsen H., Brun-Nielsen L., Charlton M., and Poulsen M. Single ionization of H₂, He, Ne and Ar by positron impact.// *Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* – 1990. – Vol.23. – P.3955–3976.
- 12 Ashley P., Moxom J., and Laricchia G. Near-Threshold Ionization of He and H₂ by Positron Impact // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol.77, no.7. – P.1250–1253.
- 13 Moxom J., Ashley P., and Laricchia G. Single ionization by positron impact // *Can. J. Phys.* – 1996. – Vol.74. – P.367–372.
- 14 Shalenov E.O., Seisembayeva M.M., Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., and Jumagulov M.N. Electron capture by the excited hydrogen atom in the dense semiclassical partially ionized plasma // *In Proc. Int. Conf. "46th EPS Conference on Plasma Physics" (Milan).* – 2019. – Vol.43C. –P.477.
- 15 Dzhumagulova K.N., Shalenov E.O., Ramazanov T.S., and Gabdullina G.L. Phase shifts and scattering cross sections of the particles of non-ideal semiclassical plasmas based on the dynamic interaction potential // *Contributions to Plasma Physics.* – 2015. – Vol.55, no.2–3. –P.230–35.
- 16 Jumagulov M.N., Seisembayeva M.M., Shalenov E.O., Kossymkyzy Zh., Ramazanov T.S., and Dzhumagulova K.N. Electron Runaway in a Dense Semiclassical Plasma // *High Energy Density Physics.* – 2020. – Vol.36. – Art.No 100832.
- 17 Seisembayeva M.M., Reinholz H., Shalenov E.O., Jumagulov M.N., and Dzhumagulova K.N. Coulomb Logarithm and the Dreicer Field in a Dense Semiclassical Plasma // *Contributions to Plasma Physics.* – 2022. – Vol.62, no.10. – Art.No e202200014.
- 18 Shalenov E.O., Nuraly A.T., and Dzhumagulova K.N. Bound States of the Hydrogen Atom in High-Density Plasmas // *Contributions to Plasma Physics.* – 2022. – Vol.62, no.10. – Art.No e202200017.

References

- 1 M. Basu, P.S. Mazumdar, A.S. Ghosh, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 18, 369-377 (1985).
- 2 M.M. Seisembayeva, E.O. Shalenov, et al., *Physics Letters A* 447, 128313 (2022).
- 3 K.N. Dzhumagulova, M.M. Seisembayeva, et al., Study of the phenomenon of runaway electron based on the effective interaction potentials, *In Proc. Int. Conf. "47th EPS Conference on Plasma Physics" (Sitges)* 45A, 349 (2021).
- 4 R.P. McEachran, D.L. Morgan, A.G. Ryman, and A.D. Stauffer, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* 10(4) 663–677 (1977).
- 5 L. Parcell, R. McEachran, and A. Stauffer, *Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 16, 4249–4258 (1983).
- 6 L. Parcell, R. McEachran, and A. Stauffer, *Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys.* 20, 2307–2315 (1987).
- 7 D.H. Madison, and K.H. Winters, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 16, 4437–4450 (1983).
- 8 R. Srivastava, M. Kumar, and A.N. Tripathi, *J. Chem. Phys.* 84 (8) 4715–4717 (1986).
- 9 R.I. Campeanu, D. Fromme, et al., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 20, 3557–3570 (1987).
- 10 R. Campeanu, R. McEachran, and A. Stauffer, *Can. J. Phys.* 74, 544–547 (1996).
- 11 H. Knudsen, L. Brun-Nielsen, M. Charlton, and M. Poulsen, *Phys.B.: At.Mol. Opt. Phys.* 23, 3955–3976 (1990).
- 12 P. Ashley, J. Moxom, and G. Laricchia, *Phys. Rev. Lett.* 77 (7), 1250–1253 (1996).

13 J. Moxom, P. Ashley, and G. Laricchia, Can. J. Phys. 74, 367–372 (1996).

14 E.O. Shalenov, M.M. Seisembayeva, K.N. Dzhumagulova, T.S. Ramazanov, and M.N. Jumagulov, Electron capture by the excited hydrogen atom in the dense semiclassical partially ionized plasma, In Proc. Int. Conf. "46th EPS Conference on Plasma Physics" (Milan), 43C, 477 (2019).

15 K.N. Dzhumagulova, E.O. Shalenov, T.S. Ramazanov, and G.L. Gabdullina, Contributions to Plasma Physics 55 (2–3), 230–35 (2015).

16 M.N. Jumagulov, M.M. Seisembayeva, et al., High Energy Density Physics 36, 100832 (2020).

17 M.M. Seisembayeva, H. Reinholz, et.al., Contributions to Plasma Physics 62 (10), e202200014 (2022).

18 E.O.Shalenov, A.T. Nuraly, and K.N. Dzhumagulova, Contributions to Plasma Physics 62 (10), e202200017 (2022).

Мақала тарихы:

Түсті – 26.04.2024

Қабылданды – 15.06.2024

Article history:

Received 26 April 2024

Accepted 15 June 2024

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Асхат Нұралы** – ғылыми қызметкер, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: askhat.nuraly.98@gmail.com).

2. **Мадина Сейсембаева** – аға ғылыми қызметкер, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, PhD студент, Өл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ЭТФҒЗИ (Алматы қ., Қазақстан, email: seisembayevamm@gmail.com).

Information about authors:

1. **Askhat Nuraly** – researcher, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, email: askhat.nuraly.98@gmail.com).

2. **Madina Seisembayeva** – senior researcher, Satbayev University, PhD student, Al-Farabi Kazakh National University, IETP (Almaty, Kazakhstan, email: seisembayevamm@gmail.com).

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**

Ж.К. Калкозова¹ , А.А. Мигунова¹ , А.С. Серикканов^{2,3} , Х.А. Абдуллин^{1,2*} 

¹Қазақский национальный университет имени аль-Фараби,

Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа, г.Алматы, Казахстан

²Satbayev University, ТОО «Физико-Технический Институт», г.Алматы, Казахстан

³Национальная академия наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан, г.Алматы, Казахстан

*e-mail: kh.abdullin@physics.kz

Простой метод синтеза наночастиц оксида кобальта для формирования электродов суперконденсатора с высокой удельной емкостью

Электрохимические системы хранения энергии имеют широкий спектр применений, включая крупномасштабное хранение энергии, выработанной альтернативной зеленой энергетикой, а также в электромобилях и портативной электронике. Для эксплуатации электрохимических систем хранения энергии важную роль играют суперконденсаторы, предохраняющие такие системы от поломок при скачках мощности. Гибридные суперконденсаторы из оксидов металлов, в частности, на основе оксида кобальта, являются перспективными приборами и интенсивно исследуются. Для преодоления высокого электрического сопротивления, а также для увеличения отношения поверхности к объему при изготовлении электродов необходимо использовать оксиды в виде наночастиц, иммобилизованных в проводящую матрицу, состоящую из углеродных материалов либо материалов с более высокой проводимостью, чем Co_3O_4 . В настоящей работе разработан простой метод синтеза наночастиц оксида кобальта для формирования электродов суперконденсатора с высокой удельной емкостью. Предложенный метод включает синтез получения метастабильного твердого раствора Zn-Co-O как промежуточный материал. Удельная емкость полученных электродов площадью 1 см^2 составила 467.8 Ф г^{-1} при измерении CV характеристик и скорости сканирования 3 мВ с^{-1} , 379 Ф г^{-1} в методе GCD при токе разряда 1 А г^{-1} и 415 Ф г^{-1} при измерении EIS на частоте 0.01 Гц .

Ключевые слова: суперконденсаторы, электроды, оксид кобальта, синтез.

Ж.К. Калкозова¹, А.А. Мигунова¹, А.С. Серикканов^{2,3}, Х.А. Абдуллин^{1,2*}

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,

Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана, Алматы қ., Қазақстан

²Satbayev University, «Физика-техникалық институты» ЖШС, Алматы қ., Қазақстан

³Қазақстан Республикасының жанындағы Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: kh.abdullin@physics.kz

Меншікті сыйымдылығы жоғары суперконденсатор электродтарын қалыптастыру үшін кобальт оксиді нанобөлшектерін синтездеудің қарапайым әдісі

Электрохимиялық энергияны сақтау жүйелері жасыл баламалы энергия көздерімен, сондай-ақ электромобильдер мен портативті электроникада өндірілетін энергияны ауқымды сақтауды қоса алғанда, кең ауқымды қолданысқа ие. Энергияны сақтаудың электрохимиялық жүйелерін пайдалану үшін суперконденсаторлар маңызды рөл атқарады, олар мұндай жүйелерді электр қуатының секірулері кезінде істен шығудан қорғайды. Металл оксидтерінің гибриді суперконденсаторлары, атап айтқанда кобальт оксиді негізіндегі суперконденсаторлар перспективті құрылғы болып табылады және қарқынды зерттелуде. Жоғары электр кедергісін жеңу үшін, сондай-ақ электродтарды өндіруде бет-көлем арақатынасын арттыру үшін көміртекті материалдардан немесе Co_3O_4 -тен электр өткізгіштігі жоғары материалдардан тұратын өткізгіш матрицада иммобилизацияланған нанобөлшектер түріндегі оксидтерді пайдалану қажет. Бұл жұмыста меншікті сыйымдылығы жоғары суперконденсатор электродтарын қалыптастыру үшін кобальт оксидінің нанобөлшектерін синтездеудің қарапайым әдісі жасалды. Бұл әдіс аралық материал ретінде метастабилді Zn-Co-O қатты ерітіндісін алудың синтезін қамтиды. CV сипаттамасын өлшеу барысында ауданы 1 см^2 электродтардың меншікті сыйымдылығы

467.8 Ф г⁻¹ және 0,01 Гц жиілікте EIS өлшеу кезінде 1 А г⁻¹ и 415 Ф г⁻¹ разряд тогында GCD әдісінде 3 мВ с⁻¹ сканерлеу жылдамдығында меншікті сыйымдылығы 379 Ф г⁻¹ құрады.

Түйін сөздер: суперконденсаторлар, электродтар, кобальт оксиді, синтез.

Zh.K. Kalkozova¹, A.A. Migunova¹, A.S. Serikkanov^{2,3}, K.A. Abdullin^{1,2*}

¹Al-Farabi Kazakh National University, National Nanotechnology Laboratory of Open Type, Almaty, Kazakhstan

²Satbayev University, Physico-Technical Institute, Almaty, Kazakhstan

³National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan under the President of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: kh.abdullin@physics.kz

Facile method of synthesis of cobalt oxide nanoparticles for formation of supercapacitor electrodes with high specific capacitance

Electrochemical energy storage systems have a wide range of applications, including large-scale storage of energy generated by alternative green energy, as well as in electric vehicles and portable electronics. For the operation of electrochemical energy storage systems, supercapacitors play an important role in protecting such systems from failure during power surges. Hybrid metal oxide supercapacitors, particularly those based on cobalt oxide, are promising devices and are intensively investigated. To overcome high electrical resistance, as well as to increase the surface-to-volume ratio in the manufacture of electrodes, it is necessary to use oxides in the form of nanoparticles immobilized in a conductive matrix consisting of carbon materials or materials with higher conductivity than Co₃O₄. In the present work, a simple method for synthesizing cobalt oxide nanoparticles to form supercapacitor electrodes with high specific capacitance is developed. The method includes synthesis of metastable Zn-Co-O solid solution as an intermediate material. The specific capacitance of the obtained 1 cm² electrodes was 467.8 F g⁻¹ in CV characteristic measurement and scan rate of 3 mV s⁻¹, 379 F g⁻¹ in GCD method at discharge current of 1 A g⁻¹ and 415 F g⁻¹ in EIS measurement at 0.01 Hz.

Key words: supercapacitors, electrodes, cobalt oxide, synthesis.

Введение

Развитие возобновляемой энергетики стимулирует разработку систем хранения электроэнергии. Суперконденсаторы как важный элемент таких систем имеют высокую удельную мощность и циклическую стабильность. Гибридные суперконденсаторы, которые сочетают преимущества электрохимических аккумуляторов и конденсаторов с двойным слоем, в настоящее время рассматриваются как весьма перспективное решение для увеличения плотности энергии суперконденсаторов. Электроды для гибридных суперконденсаторов на основе оксидов металлов разрабатываются в последнее время весьма интенсивно [1-3] благодаря высокой удельной емкости и обратимости окислительно-восстановительных реакций оксидов металлов.

Среди оксидов переходных металлов, таких как RuO₂, MnO₂, MoO₃ и NiO, оксид кобальта Co₃O₄ весьма интенсивно исследуется в качестве электрода гибридных суперконденсаторов благодаря своей высокой теоретической удельной емкости [4-8]. Применение Co₃O₄ качестве электродного материала для суперконденсаторов ограничивается невысокой электропроводностью

объемного оксида. Для преодоления высокого электрического сопротивления, а также для увеличения отношения поверхности к объему при изготовлении электродов необходимо использовать оксиды в виде наночастиц, иммобилизованных в проводящую матрицу, состоящую из углеродных материалов либо материалов с более высокой проводимостью, чем Co₃O₄. Такой подход используют все успешные стратегии. Имеется ряд работ, в которых для получения композитов на основе Co₃O₄ используется оксид цинка. В [4] применен метод синтеза одномерных (1D) пористых гетеропереходных композитов ZnO/Co₃O₄, такие композиты ZnO/Co₃O₄ продемонстрировали высокую емкость и хорошую стабильность при циклировании.

В [9] иерархические цветкообразные массивы нанопучков ZnO/Co₃O₄, выращенные на пеноникеле, были синтезированы с помощью гидротермального метода. Электроды из нанопучков ZnO/Co₃O₄ демонстрируют отличные электрохимические характеристики, что делает их перспективными электродными материалами для практического применения в суперконденсаторах. Симметричный суперконденсатор из композитов активированного угля и наночастиц

Co₃O₄ имел удельную емкость (C_{sp}) 125 Ф г⁻¹ и плотность энергии 55 Вт ч кг⁻¹ при плотности мощности 650 Вт кг⁻¹ с высокой циклической стабильностью после 8000 циклов с сохранением емкости на уровне 93.75% [10].

Карбонизация, термическая обработка в водной системе и сублимационная сушка гидрогелей крахмала применялась для создания композита Co₃O₄@C, состоящего из трехмерной сетки пористого угля с закрепленными нанокристаллами оксида кобальта [11]. Благодаря структурным особенностям 3D-сетки и высоким отношением поверхности к объему углеродного каркаса оптимизированный электрод имел емкость 1314 Ф г⁻¹ при токе 1 А г⁻¹) и высокую стабильность емкости при циклировании (93.5% в течение 10 000 циклов). В [12] микроволновым гидротермальным методом синтезирована 3D-структура CoWO₄/Co₃O₄, обладающая большой удельной поверхностью и быстрой передачей электронов и ионов. Гибридный электрод демонстрировал удельную емкость 1728 Ф г⁻¹ при плотности тока 2.7 мА см⁻², соответствующей 1 А г⁻¹, с удовлетворительной стабильностью циклирования (85.9% емкости сохранялось после 5000 циклов).

В исследовании [13] синтез наноструктур Co₃O₄ осуществлен с использованием природных восстановителей методом низкотемпературного водно-химического роста. Полученные наноструктуры Co₃O₄ демонстрируют удельную емкость 700 Ф г⁻¹ при плотности тока 0.8 А г⁻¹ и плотности мощности 30 Вт ч кг⁻¹, а также избыточный потенциал 250 мВ при 10 мА см⁻² для реакции эволюции кислорода при высокой стабильности работы электрода в течение 45 часов. Оксид Co₃O₄, синтезированный гидротермальным методом в виде перфорированных нанолистов [14], продемонстрировал удельную емкость 1456 Ф г⁻¹ при 1 А г⁻¹ и хорошую циклическую стабильность – 82.5% после 2000 циклов при плотности тока 5 А г⁻¹.

Таким образом, оксид кобальта Co₃O₄ и его композиты являются весьма перспективными электродными материалами для суперконденсаторов ввиду их относительно низкой стоимости, высокой теоретической удельной емкости, нетоксичности и превосходной электрохимической активности [15], и разработка электродных материалов из Co₃O₄ интенсивно продолжают для определения условий синтеза наночастиц и формирования электродов. При этом создание оптимизированного электродного материала важно добиться при минимальных технологических затратах.

Высокая удельная емкость материала обеспечивается при большом отношении площади частиц к их объему, однако процессы коагуляции наночастиц на различных технологических этапах могут значительно увеличить размеры частиц от стадии синтеза до стадии формирования электродов. В настоящей работе предложен простой метод создания электродов на основе Co₃O₄ для гибридных суперконденсаторов, позволяющий сохранять малые размеры частиц и достигать высокой удельной емкости.

Эксперимент

Порошки Zn-Co-O синтезированы простым методом химического осаждения из водного раствора. Для этого использованы реактивы нитрата цинка Zn(NO₃)₂*6H₂O, нитрата кобальта Co(NO₃)₂*6H₂O, карбамида CH₄N₂O и уротропина C₆H₁₂N₄ (Sigma Aldrich). Для приготовления растворов использована деионизированная вода (18.2 МОм×см), полученная с помощью системы очистки воды AQUAMAX-Ultra 370 Series (YL Instrument Co.). Рабочий раствор с концентрацией 0.1 М по цинку и кобальту и 0.2 М по карбамиду и уротропину помещался в водяную баню, синтез проводился при постоянном перемешивании при температуре 90 °С в течение 6 часов. Полученный после синтеза порошок промывался в воде, сушился и отжигался в азоте при 300 °С в течении 30 минут.

В качестве подложек для электродов использована никелевая пена толщиной 2 мм, площадью 1×1 см². Подложки обезжиривали в ацетоне и несколько секунд травили в 10 % азотной кислоте, после чего промывали в воде и сушили. Синтезированный и предварительно отожженный порошок смешивали с ацетиленовой сажой в агатовой ступке, добавляли некоторое количество этанола с водной дисперсией политетрафторэтилена PTFE (Sigma-Aldrich). Массовое соотношение образца, сажи и PTFE составляло 8:1:1. Смесь перемешивали, подсушивали и раскатывали в пленку до толщины около 50 мкм, разрезали на квадраты 1×1 см², впредссывывали в никелевую пену и сушили. Массу активного материала определяли по разнице между массами изготовленного электрода и исходной подложки.

Типичная массовая загрузка электрода составляла ~5 мг см⁻².

Для определения морфологии использовался сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) Quanta 200i 3D (FEI). Кристаллическая структура образцов исследована на рентгеновском

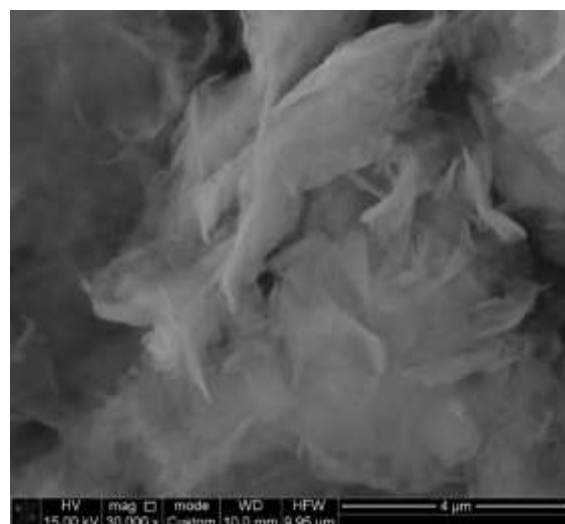
дифрактометре MiniFlex (Rigaku). Электрохимические емкостные характеристики образцов исследованы с помощью потенциостата Р-40Х-FRA-24М (Elins) путем измерения кривых циклической вольтамперометрии (CV), гальваностатического заряда/разряда (GCD), а также электрохимической импедансной спектроскопии (EIS) в трехэлектродной системе с использованием платинового противоиэлектрода и электрода сравнения Ag/AgCl в электрохимической ячейке с электролитом 3.5 М КОН.

Результаты и обсуждение

Синтез методом химического осаждения с использованием прекурсоров нитрата цинка и уротропина приводит к получению оксида цинка, а при использовании в качестве прекурсоров нитрата кобальта и карбамида синтезируется виде наностержней гидроксид-карбонат кобальта [16] с химической формулой $\text{Co}(\text{CO}_3)_{0.5}(\text{OH}) \cdot 0.11\text{H}_2\text{O}$ либо $\text{Co}_6(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_8\text{H}_2\text{O}$ [17]. В отличие от этих двух случаев синтеза, при совместном использовании прекурсоров нитратов цинка и кобальта, а также уротропина и карбамида, в результате синтеза были получены образцы в виде тонких пластин толщиной ~ 5 нм, соответствующие снимки электронной сканирующей и просвечивающей микроскопии приведены на рисунке 1 (а и b). Формирование как оксида цинка, так и гидроксид-карбоната кобальта подавлялось, соответствующей рентгеноструктурной картины исходные образцы не демонстрировали. После отжига при 300 °С в окислительной атмосфере формировались наночастицы ~ 5 -10 нм округлой формы (рис. 2).

На рисунке 3 приведены рентгеновские дифрактограммы образца после кальцинации при 300 °С в течение 30 минут (кривая 1). Наблюдаемые пики, отмеченные зелеными треугольниками, соответствуют рефлексам гексагонального оксида цинка (карта JCPDS No. 00-036-1451). Можно заметить, что каждый рефлекс состоит из наложения двух пиков – узкого и широкого. Узкий пик соответствует частицам ZnO, широкий пик можно отнести к твердому раствору Zn-Co-O с гексагональной решеткой [18].

Кривые 2 и 3 на рисунке 3 соответствуют рентгеновским дифрактограммам образца после выдержки в электролите 3.5 М КОН в течение 30 минут (кривая 2) и 24 часов (кривая 3) и демонстрируют изменения, которые должны иметь место при эксплуатации электрода, изготовленного из такого материала.



a)



b)

Рисунок 1 – SEM снимок (а) и ТЕМ снимок (b) образца сразу после синтеза

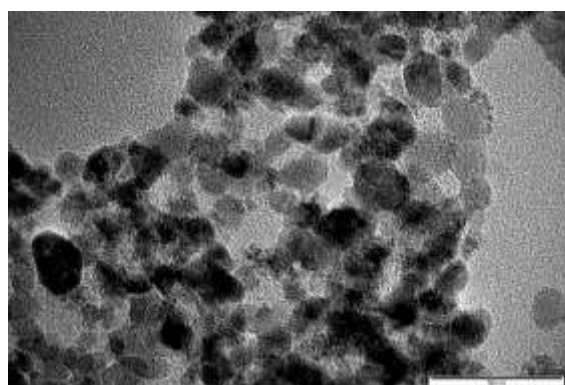


Рисунок 2 – ТЕМ снимок образца после отжига при 300 °С в течение 30 мин

Как видно, после 30-минутной щелочной обработки интенсивность рефлексов ZnO и твердого раствора Zn-Co-O уменьшается, и появляются новые рефлексы (отмеченные синими квадратами), их положение совпадает с эталоном гидроксида кобальта $\text{Co}(\text{OH})_2$ (карта JCPDS No.

01–089–8616). Можно сделать вывод, что фазы ZnO и твердого раствора Zn-Co-O подвержены деградации в щелочной среде. В результате более длительной щелочной обработки в течение 24 часов основной фазой становится оксид кобальта Co₃O₄, как показано на рисунке 3, кривая 3. Размер нанокристаллов оксида кобальта, оцененный по формуле Шеррера, составил 4.6±0.5 нм, что значительно меньше размеров частиц до щелочной обработки (рис. 2).

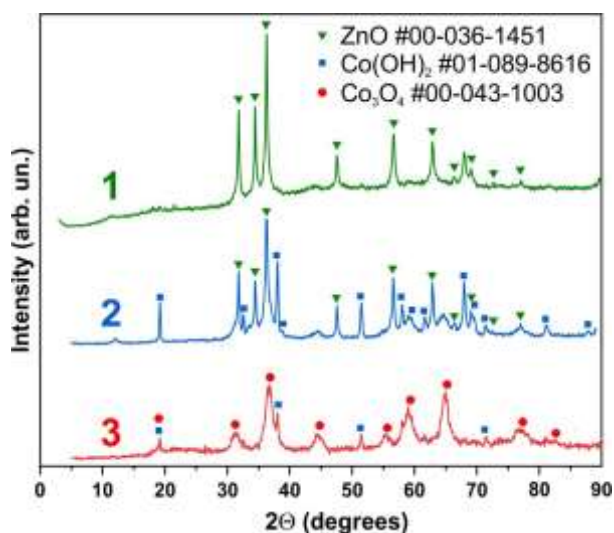


Рисунок 3 – Рентгеновские дифрактограммы образца после отжига при 300 °С в течение 30 минут (кривая 1), после обработки в электролите 3.5 М КОН в течение 30 минут (кривая 2) и 24 часов (кривая 3)

Были изготовлены электроды из синтезированных образцов Zn-Co-O после отжига при 300 °С в течение 30 минут. Типичная массовая загрузка составляла от 5 до 10 мг на 1 см². Электрохимические характеристики образцов были исследованы методом циклической вольтамперометрии (CV), гальваностатического заряда/разряда (GCD), а также электрохимической импедансной спектроскопии (EIS) в трехэлектродной системе. На рисунке 4а приведены кривые циклической вольтамперометрии, снятые при скоростях развертки потенциала от 3 мВ с⁻¹ до 10 мВ с⁻¹. Удельная емкость определялась из CV кривых по формуле

$$C_s = \int I(V) dV / (2 m v \Delta V),$$

где $I(V)$ – ток при измерении CV кривых от V , $m(z)$ – масса активного материала электрода, v (В с⁻¹) – скорость развертки при измерении CV кривых, ΔV – диапазон потенциала при CV измерениях.

Зависимость удельной емкости от скорости развертки приведена на рисунке 4б. Максимального значения емкость достигает 2.81 Ф при скорости 3 мВ с⁻¹ и массе электрода 6 мг, то есть удельная емкость равна 467.8 Ф г⁻¹.

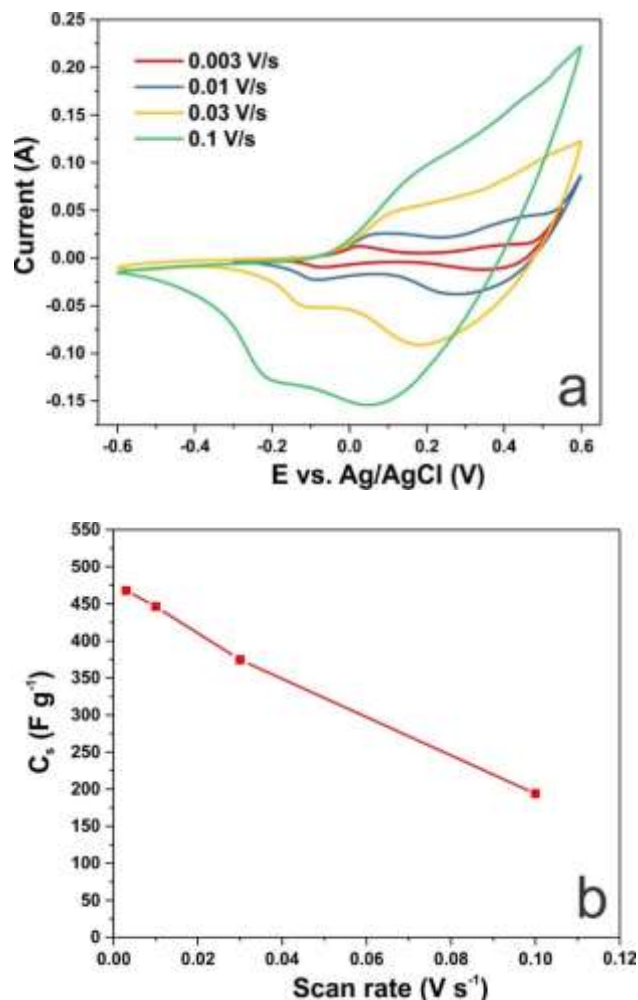


Рисунок 4 – Кривые циклической вольтамперометрии при разных скоростях развертки потенциала (а); Зависимость удельной емкости от скорости развертки (б)

На рисунке 5а приведены зависимости потенциала электрода от времени заряда-разряда при трех значениях тока (кривые GCD), а на рисунке 5б – зависимость от удельного тока разряда удельной емкости, определенной по формуле

$$C_s = I \Delta t / (m \Delta V),$$

где $I(A)$ – ток разряда, $\Delta t(c)$ – время разряда, $m(z)$ – масса электрода, ΔV – рабочее окно потенциала. При токе разряда 1 А г⁻¹ удельная емкость составила 379 Ф г⁻¹.

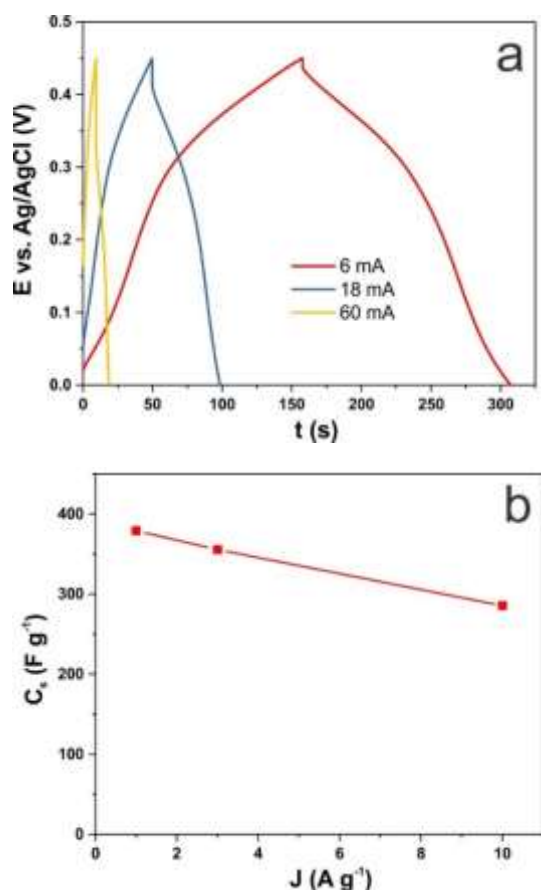


Рисунок 5 – GCD зависимости потенциала электрода от времени заряда-разряда при разных значениях тока (а); Зависимость удельной емкости от удельного тока разряда (б)

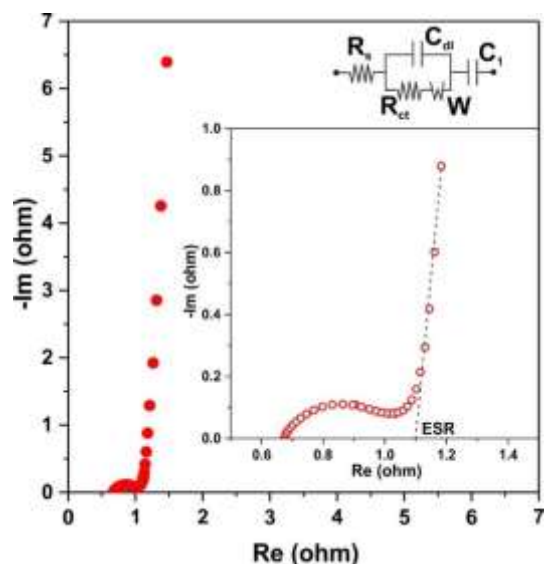


Рисунок 6 – График Найквиста для электрода Zn-Co-O, измеренные при смещении 300 мВ в диапазоне от 10 кГц до 0.01 Гц и соответствующая эквивалентная схема, на вставке приведена высокочастотная часть графика

Резкий рост мнимой части $Im Z$ по отношению к действительной части $Re Z$ импеданса при уменьшении частоты отражает емкостное поведение электрода. Для значения эквивалентного последовательного сопротивления электрода ESR, которое получается на пересечении экстраполированной линии низкочастотной емкости с осью $Re Z$, получено значение 1.1 Ом. Это сопротивление ограничивает максимальный ток, и следовательно, мощность электрода. Низкочастотная емкость электрода была оценена помощью соотношения: $C = -1/(2\pi f_0 Im Z)$ на частоте 0.01 Гц, которой соответствует $Im Z = 6.39$ Ом (рисунок 6), получено значение 2.49 Ф. Разделив это значение на массу электрода 6 мг, было получено значение удельной емкости $C_s = 415$ Ф г⁻¹. Это значение находится в хорошем согласии с удельной емкостью 468 Ф г⁻¹, полученной из CV характеристик при скорости развертки 3 мВ с⁻¹, и из GCD измерений 379 Ф г⁻¹ при токе 1 А г⁻¹.

Заключение

Таким образом, разработан простой способ, который позволяет получать оксид кобальта в виде наночастиц. На первом этапе синтеза одновременное применение прекурсоров кобальта и цинка подавляет синтез фазы, содержащей только кобальт, в результате синтеза формируются пластинчатые метастабильные частицы. Термический отжиг формирует наночастицы твердого раствора Zn-Co-O с гексагональной решеткой типа вюрцита. Изготовление электродов с применением биндера приводит к иммобилизации частиц. Последующие электрохимические измерения в электролите 3.5М КОН приводят к быстрой деградации твердого раствора с формированием наночастиц оксида кобальта. Удельная емкость полученных электродов площадью 1 см² составила 467.8 Ф г⁻¹ при измерении CV характеристик и скорости сканирования 3 мВ с⁻¹, 379 Ф г⁻¹ в методе GCD при токе разряда 1 А г⁻¹ и 415 Ф г⁻¹ при измерении EIS на частоте 0.01 Гц.

Финансирование

Данное исследование было профинансировано Министерством науки и высшего образования Республики Казахстан, гранты № BR18574141 и № AP19676535.

Литература

- 1 Suresh Jayakumar, Chinnappan Santhosh P., Mohamedazeem M. Mohideen, Radhamani A.V. A comprehensive review of metal oxides (RuO₂, Co₃O₄, MnO₂ and NiO) for supercapacitor applications and global market trends // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2024. – Vol.976. – P.173170.
- 2 Poonam, Kriti Sharma, Anmol Arora, Tripathi S.K. Review of supercapacitors: Materials and devices // *Journal of Energy Storage*. – 2019. – Vol.21. – P.801-825.
- 3 Sujata Mandal, Jiyao Hu, Sheldon Q. Shi. A comprehensive review of hybrid supercapacitor from transition metal and industrial crop based activated carbon for energy storage applications // *Materials Today Communications*. –2023. – Vol.34. –P.105207.
- 4 Miao Gao, Wei-Kang Wang, Qing Rong, Jun Jiang, Ying-Jie Zhang, and Han-Qing Yu. Porous ZnO-Coated Co₃O₄ Nanorod as a High-Energy-Density Supercapacitor Material // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. –2018. –Vol.10, 27. – P.23163–23173.
- 5 Xuelei Wang, Anyu Hu, Chao Meng, Chun Wu, Shaobin Yang, Xiaodong Hong. Recent Advance in Co₃O₄ and Co₃O₄-Containing Electrode Materials for High-Performance Supercapacitors // *Molecules*. –2020. –Vol.25(2). –P.269
- 6 Xinran Hu, Lishuang Wei, Rui Chen, Prof. Qingsheng Wu, Dr. Jiangfeng Li. Reviews and Prospectives of Co₃O₄-Based Nanomaterials for Supercapacitor Application // *ChemistrySelect*. –2020. –Vol. 5, Issue 17. – P.5013-5365.
- 7 Lin Yang, Qinghan Zhu, Ke Yang, Xinkai Xu, Jingchun Huang, Hongfend Chen, Haiwang Wang. A Review on the Application of Cobalt-Based Nanomaterials in Supercapacitors // *Nanomaterials*. –2022. –Vol.12(22). – P.4065
- 8 Samatha Kelathaya, Raghavendra Sagar. A review on Co₃O₄ nanostructures as the electrodes of supercapacitors // *Mechanical Engineering Advances*. –2024. –Vol.2(1). –P.111.
- 9 Hu N., Gong W.H., Huang L., Shen P.K. Ultrahigh energy density asymmetric electrochemical capacitors based on flower-like ZnO/Co₃O₄ nanobundle arrays and stereotaxically constricted graphene // *J. Mater. Chem. A*. –2019. – Vol.7. –P.1273–1280.
- 10 Badreah Ali Al Jahdaly, Ahmed Abu-Rayyan, Mohamed M. Taher and Kamel Shoueir Phytosynthesis of Co₃O₄ Nanoparticles as the High Energy Storage Material of an Activated Carbon/Co₃O₄ Symmetric Supercapacitor Device with Excellent Cyclic Stability Based on a Na₂SO₄ Aqueous Electrolyte // *ACS Omega*. –2022. –Vol. 7, 27. – P.23673–23684.
- 11 Liwen He, Chen Lin, Yican Zhao, Wenhai Gao, Hailian Zhang, Bizhou Lin, Dongya Sun. A new strategy for porous carbon synthesis: Starch hydrogel as a carbon source for Co₃O₄@C supercapacitor electrodes // *Ceramics International*. –2022. –Vol.48, Issue 6. –P.8104-8111.
- 12 Zhang M., Fan H., Zhao N., Peng H., Ren X., Wang W., Li H., Chen G., Zhu Y., Jiang X., Wu P. 3D hierarchical CoWO₄/Co₃O₄ nanowire arrays for asymmetric supercapacitors with high energy density // *Chemical Engineering Journal*. –2018. –Vol.347. –P.291–300.
- 13 Adeel Liaquat Bhatti, Aneela Tahira, Shusheel Kumar, Zaheer Ahmed Ujjan, Muhammad Ali Bhatti, Sooraj Kumar, Umair Aftab, Amal Karsy, Ayman Nafady, Antonia Infantes-Molina, Zafar Hussain Ibupoto. Facile synthesis of efficient Co₃O₄ nanostructures using the milky sap of *Calotropis procera* for oxygen evolution reactions and supercapacitor applications // *RSC Adv*. –2023. –Vol.13. –P.17710.
- 14 Umar A., Raut S.D., Ibrahim A.A., Algadi H., Albargi H., Alsaiari M. A., Baskoutas S. Perforated Co₃O₄ nanosheets as high-performing supercapacitor material // *Electrochimica Acta*. –2021. –Vol.389. –P.38661.
- 15 Congcong Lu, Lingran Liu, Yu Yang, Yunping Ma, Qiao Luo, Maiyong Zhu. Recent Progress in Co₃O₄-Based Nanomaterials for Supercapacitors // *Chemnanomat*. –2023. –Vol.9, Issue 5. –P.e202200537.
- 16 Abdullin, K.A., Zhumagulov, S.K., Ismailova, G.A. Kalkozova Zh. K., Kudryashov V. V. & Serikkanov A. S. Synthesis of Heterogeneous ZnO/Co₃O₄ Nanostructures by Chemical Deposition from Solutions // *Tech. Phys*. –2020. – Vol.65. –P.1139–1143.
- 17 Prateek Bhojane, Armel Le Bail, Parasharam M Shirage, A quarter of a century after its synthesis and with >200 papers based on its use, 'Co(CO₃)_{0.5}(OH)·0.11H₂O' proves to be Co₆(CO₃)₂(OH)₈·H₂O from synchrotron powder diffraction data // *Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry*. –2019. –Vol.C75. –P.61-64.
- 18 Wang X., Xu J., Yu X., Xue K., Yu J., Zhao X. Structural evidence of secondary phase segregation from the Raman vibrational modes in Zn_{1-x}Co_xO (0<x<0.6) // *Applied Physics Letters*. –2007. –Vol.91. –P.031908.

References

- 1 Suresh Jayakumar, Chinnappan Santhosh P., et al., *J of Alloys and Compounds* 976, 173170 (2024).
- 2 Poonam, Kriti Sharma, Anmol Arora, S.K. Tripathi, *Journal of Energy Storage* 21, 801-825 (2019).
- 3 Sujata Mandal, Jiyao Hu, Sheldon Q. Shi, *Materials Today Communications* 34, 105207 (2023).
- 4 Miao Gao, Wei-Kang Wang, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 10, 27, 23163–23173 (2018).
- 5 Xuelei Wang, Anyu Hu, et al., *Molecules* 25(2), 269 (2020).
- 6 Xinran Hu, Lishuang Wei, et al., *Chemistry Select* 5(17), 5013-5365 (2020).
- 7 Lin Yang, Qinghan Zhu, et al., *Nanomaterials* 12(22), 4065 (2022).
- 8 Samatha Kelathaya, Raghavendra Sagar, *Mechanical Engineering Advances* 2(1), 111 (2024).

- 9 N. Hu, W.H. Gong, L. Huang, P.K. Shen, J. Mater. Chem. A 7, 1273–1280 (2019).
10 Badreah Ali Al Jahdaly, et al., ACS Omega 7, 27, 23673–23684 (2022).
11 Liwen He, Chen Lin, et al., Ceramics International 48 (6), 8104–8111 (2022).
12 M. Zhang, H. Fan, et al., Chemical Engineering Journal 347, 291–300 (2018).
13 Adeel Liaquat Bhatti, Aneela Tahira, et al., RSC Adv. 13, 17710 (2023).
14 A. Umar, S.D. Raut, et al., Electrochimica Acta 389, 38661 (2021).
15 Congcong Lu, Lingran Liu, et al., Chemnanomat, 9(5), e202200537 (2023).
16 K.A. Abdullin, S.K. Zhumagulov, et al., Tech. Phys. 65, 1139–1143 (2020).
17 Prateek Bhojane, Armel Le Bail, Parasharam M Shirage, Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry C75, 61–64 (2019).
18 X. Wang, J. Xu, et al., Applied Physics Letters 91, 031908 (2007).

История статьи:

Поступила – 15.04.2024

Принята – 15.06.2024

Article history:

Received 15 April 2024

Accepted 15 June 2024

Сведения об авторах:

1. **Жанар Калкозова** – канд.физ.-мат.наук., асс.проф., ННЛОТ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (г.Алматы, Казахстан, email: zhanar.kalkozova@kaznu.edu.kz).

2. **Анастасия Мигунова** – ННЛОТ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (г.Алматы, Казахстан, email: anastassiya migunova@gmail.com).

3. **Абай Серикканов** – канд.физ.-мат.наук., Satbayev University, ТОО «Физико-Технический Институт», Национальная академия наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан (г.Алматы, Казахстан, email: a.serikkanov@satbayev.university).

4. **Хабибулла Абдуллин** – докт.физ.-мат.наук., проф., ННЛОТ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Satbayev University (г.Алматы, Казахстан, email: kh.abdullin@physics.kz).


Information about authors:

1. **Zhanar Kalkozova** – Cand. of Phys. and Math. Sc., Ass.Prof., National Nanotechnology Laboratory of Open Type, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: zhanar.kalkozova@kaznu.edu.kz).

2. **Anastassiya Migunova** – National Nanotechnology Laboratory of Open Type, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: anastassiya migunova@gmail.com).

3. **Abay Serikkanov** – Cand. of Phys. and Math. Sc., Satbayev University, Physico-Technical Institute, National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan under the President of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan, email: a.serikkanov@satbayev.university).

4. **Khabibulla Abdullin** (corresponding author) – Doc. of Phys. and Math. Sc., Prof., National Nanotechnology Laboratory of Open Type, Al-Farabi Kazakh National University, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan, email: kh.abdullin@physics.kz).

К. Турлыбекулы , М.Т. Айткулов* , Ж.Т. Бугыбай ,
С.К. Аскербеков , А.А. Шаймерденов 
Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан
*e-mail: maitkulov@inp.kz

ЭКСПЕРИМЕНТ ПО НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ОБЛУЧЕНИЮ ПОРОШКА ФТОРИРОВАННЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ В РЕАКТОРЕ ВВР-К: УСЛОВИЯ И ПЕРВИЧНАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОБРАЗЦОВ

Легированные фтором порошки детонационных наноалмазов (ДНА) рассматриваются в качестве нового класса отражателей нейтронов и могут существенно улучшить характеристики источников очень холодных и ультрахолодных нейтронов, что в свою очередь приведет к проведению новых видов экспериментов на качественном уровне. Эти улучшения достигаются за счет таких свойств ДНА как высокое диффузионное и квазизеркальное отражение. Благодаря высокой отражающей способности улучшается эффективность доставки нейтронов и, следовательно, потоки нейтронов на нейтронных установках. Исходя из этого, фторированные ДНА рассматриваются как потенциальный материал отражателя нейтронов для проектируемого источника очень холодных и ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-К. Однако, на сегодняшний день экспериментальных данных о поведении, фторированных ДНА в нейтронном поле недостаточно и поэтому с целью изучения радиационной стойкости ДНА на реакторе ВВР-К начаты работы по их облучению и дальнейшему исследованию. Для этого была разработана оптимальная конструкция облучательной капсулы и проведены комплексные расчеты по обоснованию условий и пределов реакторного облучения. В настоящей работе приводятся описание облученных образцов и реакторного эксперимента, методология и условия облучения образцов, и результаты их первичной характеристики после облучения.

Ключевые слова: детонационный наноалмаз, фтор, ВВР-К, очень холодные нейтроны, ультрахолодные нейтроны.

K. Turlybekuly, M.T. Aitkulov*, Zh.T. Buggybay, S.K. Askerbekov, A.A. Shaimerdenov
Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan
*e-mail: maitkulov@inp.kz

Experiment on low-temperature irradiation of fluorinated detonation nanodiamond powder in the WWR-K reactor: conditions and initial characterisation of samples

Fluorine-doped detonation nanodiamond (DND) powders are considered as a new class of neutron reflectors and can significantly improve the performance of very cold and ultracold neutron sources, which in turn will lead to new types of experiments at a qualitative level. These improvements are achieved due to such properties of DND as high diffusion and quasi-mirror reflection. The high reflectivity improves the neutron delivery efficiency and, consequently, the neutron fluxes at neutron facilities. On this basis, fluorinated DNDs are considered as a potential neutron reflector material for the designed very cold and ultracold neutron source at the WWR-K reactor. However, to date, experimental data on the behaviour of fluorinated DND in the neutron field are insufficient, and therefore, in order to study the radiation resistance of DND at the WWR-K reactor, work has been started on their irradiation and further study. For this purpose, an optimal irradiation capsule design was developed and comprehensive calculations were performed to justify the conditions and limits of reactor irradiation. This paper describes the irradiated samples and reactor experiment, the methodology and conditions for irradiating the samples, and the results of their initial characterisation after irradiation.

Keywords: detonation nanodiamond, fluorine, WWR-K, very cold neutrons, ultracold neutrons.

Қ. Тұрлыбекулы, М.Т. Айтқулов*, Ж.Т. Буғыбай, С.Қ. Әскербеков, А.А. Шаймерденов

Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: maitkulov@inp.kz

ССР-Қ реакторында фторланған детонациялық наноалмаздардың ұнтағын төмен температуралық сәулелендіру эксперименті: шарттары және үлгілерді бастапқы сипаттау

Фтормен легирленген детонациялық наноалмаздардың (ДНА) ұнтақтары нейтрондарды шағылыстыратын жаңа материалдар ретінде қарастырылып отыр. Олар суық және ультрасуық нейтрон көздерінің сипаттамаларын едәуір жақсартуының арқасында жаңа эксперимент түрлерінің сапалы деңгейде өтуіне септігін тигізеді. Ондай нәтижеге ДНА-ның жоғары диффузиялық және квазиайналы шағылыстыру сияқты қасиеттері есебінен қол жеткізіледі. Шағылыстыру қабілетінің жоғары болу есебінен нейтрондарды жеткізу және сәйкесінше нейтрон қондырғыларындағы нейтрондар ағыны жақсара түседі. ССР-Қ реакторында салынуға жоспарланған өте суық және ультрасуық нейтрондар көзінің шағылыстырғыш материалы ретінде фторланған ДНА қарастырылуда. Дегенмен, қазіргі таңда нейтрон өрісіндегі фторланған ДНА-ның қалай өзгертіндігі туралы эксперименттік деректер тым аз, сондықтан ДНА-ның радиациялық төзімділігін зерттеу үшін ССР-Қ реакторында оларды сәулелендіру және одан кейінгі зерттеулер бойынша жұмыстар басталды. Ол үшін сәулелендіру капсуласының оңтайлы конструкциясы әзірленді және реакторлық сәулелендірудің шарттары мен шектерін негіздеу үшін оған кешенді есептер жүргізілді. Осы жұмыста сәулеленген үлгілердің және реакторлық эксперименттің сипаттамасы, үлгілерді сәулелендіру әдісі мен шарттары және сәулелендіруден кейінгі бастапқы сипаттау нәтижелері келтірілген.

Түйін сөздер: детонациялық наноалмаз, фтор, ССР-Қ, өте суық нейтрондар, ультрасуық нейтрондар.

Введение

Наноалмазы (NDs) [1-4] считаются перспективным материалом для ряда приложений в трибологии, модификации свойств материалов, доставке лекарств, косметологии, биоимиджинге, хранении энергии, катализе, квантовой инженерии и т.д. (см., например, обзоры [5,6] и ссылки в них).

Одним из направления применения наноалмазов является нейтронная наука и технология. Наноалмаз считается перспективным материалом для создания отражателей очень холодных нейтронов (ОХН) и ультрахолодных нейтронов (УХН). Нейтронные отражатели [6-8] имеют огромное значение. Их основное назначение - перенаправлять потоки нейтронов в нужное место и тем самым снижать потери нейтронов. Они повышают производительность источников нейтронов и транспортных систем экономичным и эффективным образом.

В настоящее время доступно множество различных методов получения наноалмазов для различных направлений исследования. Их можно получить путем детонационного синтеза, лазерного синтеза, химического осаждения из паровой фазы и т.д. Синтез путем детонационного взрыва является одним из первых и эффективных методов получения наноалмазов. Наноалмазы полученные таким

методом называются детонационными (ДНА). Синтез наноалмазов путем детонационного взрыва происходит при высоких давлениях (20 ± 30 ГПа), и температурах (3000 ± 4300 К) в области существования стабильной алмазной фазы [1,2]. Считается, что каждая частица детонационного наноалмаза ДНА представляет собой частицу, состоящую из алмазного ядра в форме многогранника, окруженного некристаллической С-оболочкой, содержащей функциональные группы [3-5]. Отражение нейтронов от порошка ДНА возникает в результате многократного когерентного упругого рассеяния. Следовательно, рассеяние и перенос нейтронов в порошках детонационного наноалмаза определяется свойствами, характеристиками, химическим составом, геометрическим размером и формой детонационных наноалмазов.

Модифицирование и легирование ДНА приводит к существенному изменению свойств ДНА. Так, например, в целях обеспечения увеличения эффективности отражательной способности нейтронов с высоким альбедо была применена к ДНА технология фторирования, тем самым получая фторированного ДНА – F-DND. Также такие свойства ДНА как высокое диффузионное и квазизеркальное отражение позволит кардинально улучшить характеристики источников нейтронов, эффективность доставки

нейтронов и, следовательно, потоки медленных нейтронов на нейтронных установках. Это также может позволить разработать новое поколение нейтронных источников и проведение новых видов экспериментов.

Исходя из этого, ДНА рассматриваются как потенциальный материал отражателя нейтронов для проектируемого источника очень холодных и ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-К [9-11]. С целью изучения радиационной стойкости ДНА и влияния нейтронного облучения на отражающие свойства ДНА на реакторе ВВР-К начаты работы по данному направлению. В настоящей статье приводятся описание реакторного эксперимента, условия облучения образцов и результаты их первичной характеристики.

Материалы и методы

Объектами исследования являются образцы детонационных наноалмазов, приготовленных стандартным взрывным методом (Таблица 1).

Условия эксплуатации ДНА в качестве отражателя нейтронов в источниках холодных нейтронов (ХН) и очень холодных нейтронов (ОХН) характеризуются низкой температурой (не более 100°C) и сравнительно не большим

флюенсом быстрых нейтронов (10^{19} - 10^{20} см⁻²). Учитывая эти факторы, была разработана конструкция облучательной капсулы, формирующая заданные условия облучения ДНА в нейтронном поле реактора ВВР-К (Рисунок 1).

Таблица 1 – Описание исследуемых образцов

№	Образец	Масса, г	Насыпная плотность, г/см ³	Примечание
1	F-DND	0,35	0,381	фторированный порошок
2	FDNDII	0,23	0,371	дважды фторированный порошок

Основой облучательной капсулы является стандартная ампула реактора ВВР-К, в которую устанавливаются три под-капсулы из алюминиевого сплава. Во внутрь каждой под-капсулы устанавливается ампула из кварца, которая заполнена ДНА. Капсула и под-капсулы снаружи охлаждаются водой первого контура реактора ВВР-К. При этом, под-капсулы и кварцевые ампулы заполнены инертным газом.

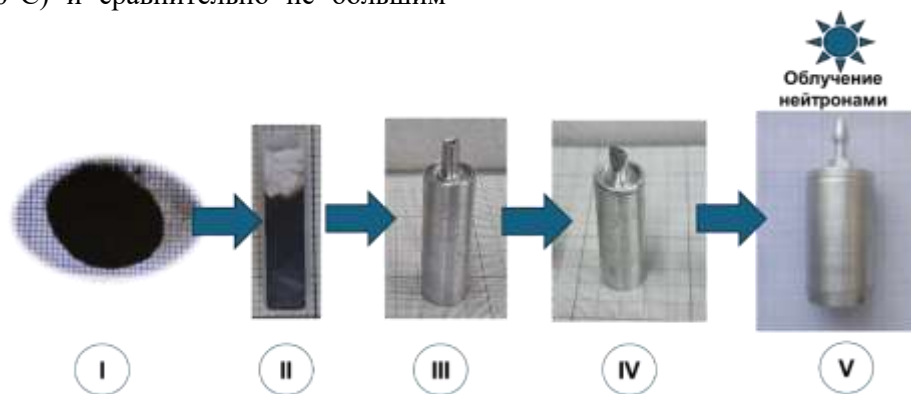


Рисунок 1 – Схематический вид облучательного эксперимента: I – исходный образец; II – образец в кварцевой ампуле; III – ампула в алюминиевой капсуле; IV – капсула заполняется аргоном и герметизируется; V – капсула в алюминиевой ампуле

Расчетное исследование нейтронно-физических характеристик разработанной конструкции облучательной капсулы проводилось методом Монте-Карло с помощью транспортного кода MCNP6 [12]. Транспортный код MCNP6 предназначен для решения задач в области физики ядерных реакторов, радиационной защиты, дозиметрии, радиографии, радиационной медицины и ядерной безопасности. Пользователь имеет возможность моделировать геометрические

трехмерные конфигурации, задавая математические уравнения ограничивающих их поверхностей первой, второй и четвертой степени, и их заполнение произвольным материалом, задавая концентрации ядер элементов, входящих в состав вещества. При моделировании в транспортном коде MCNP6 использовалась библиотека сечений взаимодействия нейтронов с веществом ENDF/B-VII.1 [13]. В MCNP6 была смоделирована текущая конфигурация активной зоны реактора

ВВР-К с реальным материальным составом. Статистическая погрешность расчетов не превышала 5%. В качестве облучательной позиции в активной зоне реактора ВВР-К был выбран периферийный вертикальный канал в ячейке 10-2.

Теплофизические расчеты проведены комплексом COMSOL Multiphysics [14], предназначенным для моделирования комплексных физических задач. Для расчета применялась трехмерная геометрия, физически реально, отображающая строение и размеры капсулы с порошком ДНА, а также окружающую её часть облучательного канала (области воды сверху и снизу капсулы, стенку облучательного канала из алюминиевого сплава). Для описания теплофизических свойств материалов использовалась стандартная библиотека материалов COMSOL. Это означает, что все необходимые для теплового расчета параметры (теплопроводность k , теплоемкость при постоянном давлении C_p и плотность ρ) и их температурные зависимости взяты из апробированного источника.

Исходными условиями для задачи считалось температура всех материалов модели равная 40°C. Давление воды равно атмосферному с учетом гидростатической добавки на высоту водяного столба, абсолютное давление аргона в капсулах считается равным 100 кПа. Тепловые контакты идеальны и не нарушаются в ходе нагрева. Фазовые изменения свойств воды других материалов в ходе нагрева не учитываются.

Поскольку нецелесообразно включать в модель весь объем воды в канале (примерно 2 метра водяного столба над капсулой и 1 метр - под ним), то на верхней и нижней границах водяного домена указаны граничные условия конвекционного теплообмена с основной массой воды канала по закону

$$Q_0 = h \cdot (T_{ext} - T), \quad (1)$$

где Q_0 – удельный поток конвективного тепла на единицу площади; T – температура воды в окрестности пены (расчетное значение), T_{ext} – внешняя температура воды в системе охлаждения реактора; $h = 0.3$ Вт/(см²*К) – коэффициент конвекции для нагретой воды.

В настройках модели было присвоено тепловыделение конструкционным материалам и порошку ДНА, выделяющим тепло под воздействием нейтронного и фотонного излучений. В модели учитывается

излучательный теплообмен между капсулой и стенкой канала (через воду) по закону Стефана Больцмана. Эмиссионные свойства поверхностей равны $\varepsilon = 0.3$.

Для описания ламинарных потоков воды и аргона при их свободной конвекции вода задается в модели как слабосжимаемая жидкость, а аргон как несжимаемый газ. Все поверхности, омываемые водой и аргоном, указаны как поверхности трения при всех скоростях течения. На воду действует направленная вниз сила тяжести, обеспечивающая, при наличии перепада температур, условие возникновения тепловой конвекции воды.

Рентгенофазовый анализ образцов выполнялся на универсальном комплексе D8 ADVANCE (Bruker, Германия), схема съемки « θ - θ » по Брэггу-Брентано, трубка с медным анодом (длина волны 1,5406 Å), рабочие параметры на трубке 40 кВ, 40 мА, NaI сцинтилляционный детектор, диапазон углов по 2θ 20-120°, шаг 0,02 градуса, скорость сканирования 0,5 сек/шаг. Съемка производилась с вращением держателя с образцом на угловой скорости 60 об/мин с помощью управляющей программы Adjust. Качественный фазовый анализ выполнен в программе EVA. Для идентификации фаз использована база данных ICDD: International Centre of Diffraction Data (порошковая база данных PDF2).

Взвешивание образцов проводилось на аттестованных аналитических весах марки «Vibra HT 224RCE» с погрешностью $\pm 0,0002$ г.

Измерение мощности дозы фотонного излучения проводилось с помощью дозиметра FH 40G-L10 с диапазоном измерения от 10 нЗв/час до 100 мЗв/час. Предел основной относительной погрешности измерения мощности амбиентного эквивалента дозы $\dot{H}^*(10)$ составляет – 20%.

Наведенная активность гамма-излучения от облученных образцов измерялась с помощью широкодиапазонного (от 3 кэВ до 3 МэВ) германиевого гамма-спектрометра Canberra GX 2518, с относительной эффективностью 25%. Перед началом работ гамма-спектрометр был откалиброван набором образцовых источников ОСГИ.

Результаты и обсуждения

Расчетным путем определен энергетический спектр нейтронов в зоне облучения ДНА (Рисунок 2).

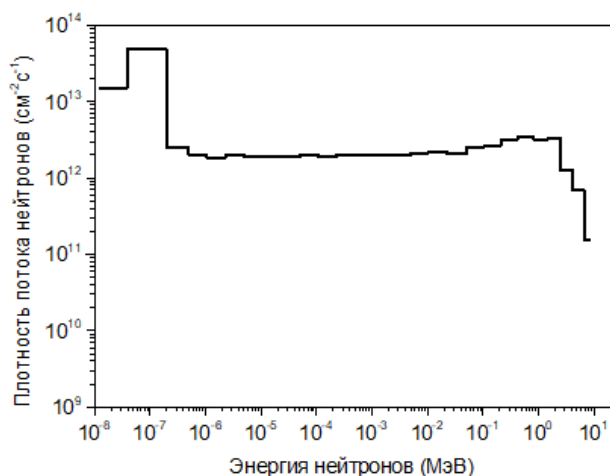


Рисунок 2 – Энергетический спектр нейтронов в облучательной позиции

По результатам нейтронно-физических расчетов энерговыделение в ДНА составило 2.4 Вт/г (таблица 2). Энергетическое распределение нейтронов в объеме образцов приведено в таблице 3. Рассмотрены три энергетические группы нейтронов. Доля тепловых нейтронов (<0.683 эВ) составила 56%, а доля быстрых нейтронов (>1 МэВ) – 6%. Интегральная плотность потока нейтронов – $1.1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$. Эффект реактивности от загрузки капсулы с образцами в активную зону реактора ВВР-К составил минус 0.1 % $\Delta k/k$.

Распределение температуры по объему облучательной капсулы показано на рисунке 3. Из рисунка 3 видно, что в местах протока теплоносителя в капсуле создается турбулентное

движение жидкости, что приводит к повышению температуры до 70°C. Температура образцов (порошка ДНА) не повысится выше 81°C, что является приемлемым и соответствует задаче эксперимента. Стационарное распределение температуры по объему капсулы установится через 12 минут после начала облучения в нейтронном поле реактора ВВР-К. Максимальная скорость движения воды не превысит 1 см/сек, средняя скорость воды в зазоре канал-капсула составит 3 мм/сек.

Таблица 2 – Энерговыделение в образцах и конструкционных материалах облучательной капсулы

Материал	Удельное энерговыделение, Вт/г
Алюминиевый сплав (обл. капсула)	0.68
Алюминиевый сплав (под-капсула)	0.69
Порошок ДНА	2.43

Таблица 3 – Энергетическое распределение нейтронов

Энергия нейтронов	Плотность потока нейтронов, $\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$
0 – 0.683 эВ	6.07E+13
0.683 эВ - 1 МэВ	4.17E+13
> 1 МэВ	6.33E+12

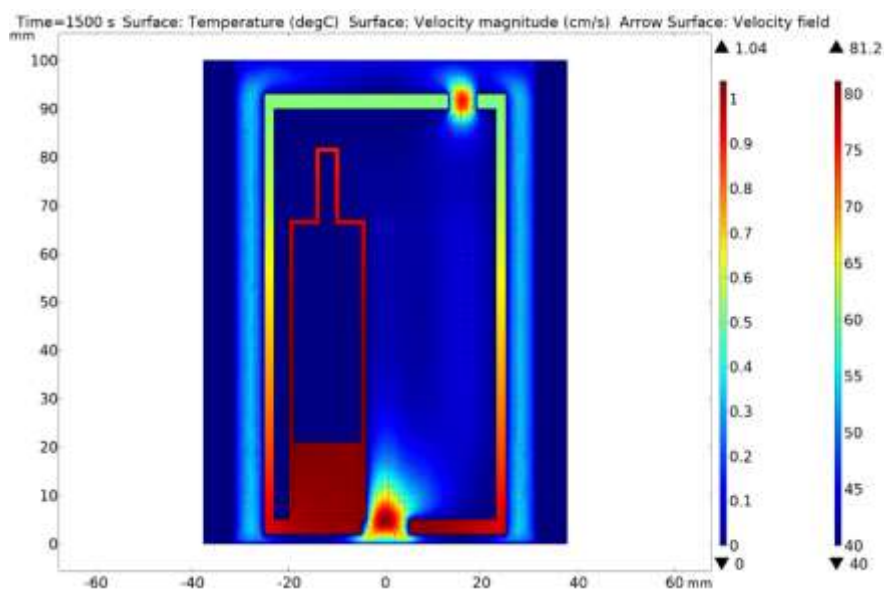


Рисунок 3 – Распределение температуры по вертикальной плоскости облучательной капсулы

Проведен рентгенофазовый анализ двух необлученных образцов наноалмазов F-DND и FDNDII. На рисунке 4 представлены дифрактограммы порошка наноалмаза F-DND и FDNDII. Три рефлекса на дифрактограмме образца F-DND соответствуют положению линий штрих-диаграммы карточки алмаза (№ 06-0675), имеющего ГЦК-решетку. В программе EVA для автоматического установления положения пиков применена функция

PeakSearch. Параметр кристаллической решетки рассчитан в программе RTP: $a = (3,5834 \pm 0,0017) \text{ \AA}$. Согласно карточке № 06-0675 параметр решетки алмаза составляет $a = 3,566 \text{ \AA}$. Расхождение рассчитанного и карточного значений $0,017 \text{ \AA}$. Параметр кристаллической решетки для образца FDNDII составил $a = (3,5729 \pm 0,0040) \text{ \AA}$. Расхождение рассчитанного и карточного значений $0,007 \text{ \AA}$.

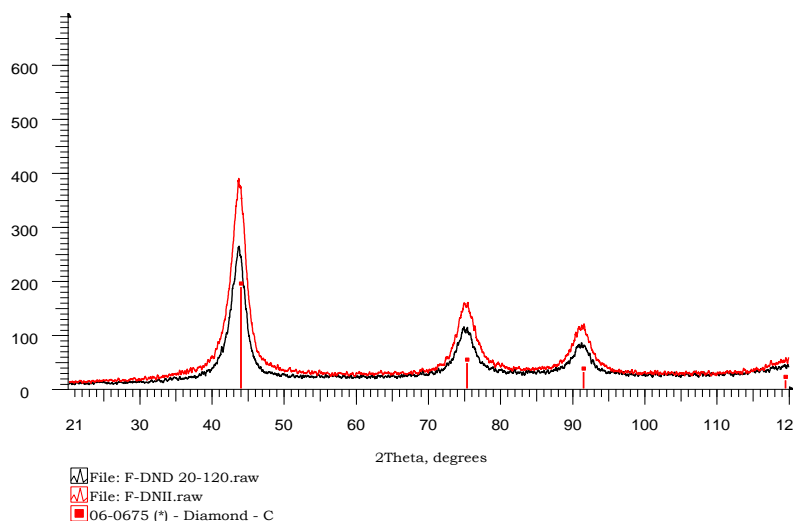


Рисунок 4 – Дифрактограммы образцов F-DND и FDNDII

В «горячей» камере образцы были извлечены из капсул после облучения и проведена первичная характеристика образцов (внешний вид, масса, радионуклидный состав и мощность эквивалентной дозы гамма-излучения). Внешний вид облученных образцов приведены на рисунке 5. Радионуклидный состав образцов приведен в таблице 4. Мощность дозы гамма-излучения от образца F-DND составило 1.65 мкЗв/ч , от FDNDII – 0.87 мкЗв/ч . Масса образца F-DND составила 0.35 г , FDNDII – 0.23 г .

Таблица 4 – Радионуклидный состав образцов

№	Нуклид	T _{1/2} , сут	Активность, Бк/образец	
			F-DND	FDNDII
1	Sc-46	1925	1601±119	149±26
2	Cr-51	84	470444±36690	6778±683
3	Mn-54	312	1135±90	-
4	Fe-59	28	2543±169	-
5	Co-58	44	2227±145	946±74
6	Co-60	244	8438±380	2512±250
7	Zn-65	60	29939±1244	7456±344
9	Sb-124	71	14691±323	18850±787
11	Eu-152	250	-	869±125



а)



б)

Рисунок 5 – Внешний вид ДНА после облучения: (а) F-DND, (б) FDNDII

Из таблицы 4 видно, что основной вклад в радиоактивность ДНА вносят изотопы сурьмы, цинка и хрома. При этом следует отметить, что радиоактивность образцов по каждому из радионуклидов меньше минимальной значимой активности [15] поэтому образцы не подлежат учету и контролю.

Выводы

Разработана методология эксперимента порошков ДНА в активной зоне реактора ВВР-К. Выбрана оптимальная конструкция облучательной капсулы и проведены комплексные расчеты по обоснованию условий и пределов реакторного облучения. Установлено, что в зоне облучения преимущественно тепловой спектр нейтронов с интегральной плотностью потока нейтронов $1.1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$. Температура облучения образцов не превысило 80 °С. Среда облучения – инертный газ, т.е. было исключено

взаимодействие образцов с водой первого контура реактора. Рентгенофазовый анализ показал, что образцы монофазны и имеют ГЦК решетку. Мощность дозы гамма-излучения от образцов не превышает 1.65 мкЗв/ч. Основной вклад в радиоактивность образцов вносят изотопы сурьмы, цинка и хрома. При этом радиоактивность образцов по каждому из радионуклидов меньше минимальной значимой активности, что не требует их учета и контроля с точки зрения радиационной безопасности.

Финансирование

Настоящая работа была выполнена при финансовой поддержке МНВО РК в рамках НТП «Комплексные фундаментальные исследования по ядерной и радиационной физике, физике высоких энергий и космических лучей для атомной энергии» (ИРН №BR20280986).

Литература

- 1 Plotnikov V.A., Makarov S.V., Bogdanov D.G., Bogdanov A.S. The structure of detonation nanodiamond particles//AIP Conference Proceedings.–2016. –Vol.1785. – Art.No 040045.
- 2 Mochalin V.N., Shenderova O., Dean Ho, Gogotsi Yu. The properties and applications of nanodiamonds // Nature nanotechnology.–2012.–Vol.7. – P.11-23.
- 3 Amita Bedar, Nitesh Goswami, Amit K. Singha, Virendra Kumar, Anil K. Debnath, Debasis Sen, Vinod K. Aswal, Sanjay Kumar, Dhanadeep Dutta, Biju Keshavkumar, Sharwari Ghodke, Ratnesh Jain, Beena G. Singh, Pradeep K. Tewari, Ramesh C. Bindal, Soumitra Kar Nanodiamonds as a state-of-the-art material for enhancing the gamma radiation resistance properties of polymeric membranes//Nanoscale Adv.–2020.–Vol.2.–P.1214-1227
- 4 Dolmatov V.Yu., Ozerin A.N., Kulakova I.I., Bochechka O.O., Lapchuk N.M., Myllymaeki V., Vehanen A. Detonation nanodiamonds: new aspects in the theory and practice of synthesis, properties and applications // Russ. Chem. Rev.–2020.–Vol.–89(12).–P.1428-1462
- 5 Efremov V.P., Zakatilova E.I. Nanodiamond graphitization at heating and irradiation // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. –Vol.1385. –Art.No 012035
- 6 Nesvizhevsky V.V., Köster U., Dubois M., Batische N., Frezet L., Bosak A.B., Gines L. and O. Williams Fluorinated nanodiamonds as unique neutron reflector//Carbon.–2018. –Vol.130.–P. 799-805
- 7 Nesvizhevsky V., Koester U., Dubois M., Batische N., Frezet L., Bosak A., Gines L., Williams O. Fluorinated nanodiamonds as unique neutron reflector// Journal of Neutron Research.–2018. –Vol. 20. – P. 81–82
- 8 Aleksenskii A., Bleuel M., Bosak A., Chumakova A., Dideikin A., Dubois M., Korobkina E., Lychagin E., Muzychka A., Nekhaev G. and et al. Clustering of Diamond Nanoparticles, Fluorination and Efficiency of Slow Neutron Reflectors // Nanomaterials.–2021.–Vol.11. – Art.No 1945.
- 9 Shaimerdenov A.A., Nakipov D.A., Arinkin F.M., Gizatulin Sh.Kh., Chakrov P.V., Kenzhin Ye.A. The 50th Anniversary of the WWR-K Research Reactor // Physics of Atomic Nuclei.–2018. –Vol. 81 (10). – P. 1408–1411.
- 10 Shaimerdenov A., Gizatulin S., Dyussambayev D., Askerbekov S., Kenzhina I. The WWR-K reactor experimental base for studies of the tritium release from materials under irradiation // Fusion Science and Technology.– 2020. – Vol.76(3). – P. 304-313
- 11 Sairanbaev D., Koltchnik S., Shaimerdenov A., Tulegenov M., Kenzhin Y., Tsuchiya K. Time History of Performance Parameters of WWR-K Reactor during Gradual Replacement of the Water Reflector by a Beryllium One // Russian Physics Journal. –2021. – Vol. 63. – P. 2165-2177.
- 12 Goorley J.T., et al., 2013. Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 version 1.0, LA-UR-13-22934.
- 13 Brown D.A., Chadwick M.B., Capote R., Kahler A.C., Trkov A., Herman M.W. end et. al., ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data // Nuclear Data Sheets. – 2011. – Vol.112. – P.2887-2996.
- 14 COMSOL Multiphysics, 2022. <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics> (accessed 12 May 2023).
- 15 Гигиенические нормативы к обеспечению радиационной безопасности. Приказ Министерства здравоохранения Республики Казахстан от 2 августа 2022 года № ҚР ДСМ-71.

References

- 1 V.A. Plotnikov, S.V. Makarov, D.G. Bogdanov and A.S. Bogdanov, AIP Conference Proceedings 1785, 040045 (2016).
- 2 V.N. Mochalin, O. Shenderova, Dean Ho and Yu. Gogotsi, Nature nanotechnology, 7, 11-23 (2012).
- 3 A. Bedar, N. Goswami, A.K. Singha, V.Kumar, A.K. Debnath, D.Sen, V.K. Aswal, Sanjay Kumar, D. Dutta, B. Keshavkumar, Sh. Ghodke, R. Jain, B.G. Singh, P.K. Tewari, R.C. Bindal and S.Kar, Nanoscale Adv., 2, 1214-1227 (2020).
- 4 V.Yu.Dolmatov, A.N.Ozerin, I.I.Kulakova, O.O.Bochechka, N.M.Lapchuk, V.Myllymaeki and A.Vehanen, Russ. Chem. Rev., 89 (12) 1428-1462 (2020).
- 5 V.P. Efremov and E.I. Zakatilova, J. Phys.: Conf. Ser. 1385, 012035 (2019).
- 6 V.V. Nesvizhevsky, U. Köster, M. Dubois, N. Batische, L. Frezet, A.B. Bosak, L. Gines and O. Williams, Carbon 130, 799 (2018).
- 7 V. Nesvizhevsky, U. Koester, M. Dubois, N. Batische, L. Frezet, A. Bosak, L. Gines and O. Williams, Journal of Neutron Research 20, 81–82 (2018).
- 8 A. Aleksenskii, M. Bleuel, A. Bosak, A. Chumakova, A. Dideikin, M. Dubois, E. Korobkina, E. Lychagin, A. Muzychka, G. Nekhaev and et al., Nanomaterials 11, 1945 (2021).
- 9 A.A. Shaimerdenov, D.A. Nakipov, F.M. Arinkin, Sh.Kh. Gizatuln, P.V. Chakrov, and Ye. A. Kenzhin, Physics of Atomic Nuclei, 81 (10), 1408–1411 (2018).
- 10 A. Shaimerdenov, S. Gizatuln, D. Dyussambayev, S. Askerbekov and I. Kenzhina, Fusion Science and Technology, 76(3), 304-313 (2020).
- 11 D. Sairanbaev, S. Koltochnik, A. Shaimerdenov, M. Tulegenov, Y. Kenzhin and K. Tsuchiya, Russian Physics Journal, 63(12), 2165-2177 (2021).
- 12 J.T. Goorley and et al., Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 version 1.0, LA-UR-13-22934 (2013).
- 13 D.A. Brown, M.B. Chadwick, R. Capote, A.C. Kahler, A. Trkov, M.W. Herman and et. al., Nuclear Data Sheets, 112, 2887-2996 (2011).
- 14 COMSOL Multiphysics, 2022. <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics> (accessed 12 May 2023).
- 15 Gigienicheskie normativi k obespecheniyu radiacionnoi bezopasnosti. Prikaz Ministra zdravoohraneniya Respubliki Kazahstan ot 2 avgusta 2022 goda № KR DSM_71.

История статьи:

Поступила 24 мая 2024 г.
Принята 12 июня 2024 г.

Article history:

Received 24 May 2024
Accepted 12 June 2024

Информация об авторах:

1. **Кылышбек Турлыбекулы** – PhD, Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: k.turlybekuly@inp.kz)
2. **Магжан Айткулов** (автор корреспондент) – Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: maitkulov@inp.kz)
3. **Жанар Бугыбай** – Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: zh.bugybay@inp.kz)
4. **Саулет Аскербеков** – PhD, Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: askerbekov@mail.ru)
5. **Асет Шаймерденов** – PhD, Институт ядерной физики (Казахстан, г.Алматы, email: ashaimerdenov@mail.ru)

Information about authors:

1. **Kylyshbek Turlybekuly** – PhD, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: k.turlybekuly@inp.kz).
2. **Magzhan Aitkulov** (corresponding author) – Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: maitkulov@inp.kz).
3. **Zhanar Bugybay** – PhD, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: zh.bugybay@inp.kz).
4. **Saulet Askerbekov** – PhD, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: askerbekov@inp.kz).
5. **Asset Shaimerdenov** – PhD, Institute of Nuclear Physics (Almaty, Kazakhstan, email: ashaimerdenov@inp.kz).

G.S. Amirbekova¹ , Zh.K. Tolepov^{1*} , N. Guseinov² , T. Kuanyshbekov³ 

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh National University, Laboratory of Engineering profile, Almaty, Kazakhstan

³National Scientific Laboratory of Collective Use S. Amanzholov East Kazakhstan University,

Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

*e-mail: mr.tolepov@mail.ru

THE INFLUENCE OF THE TEMPERATURE OF A MIXTURE OF LEAD NITRATE AND SODIUM HYDROXIDE SOLUTIONS ON THE GROWTH PECULIARITIES OF LEAD SULFIDE FILMS

The present work is devoted to studying the effect of temperature on the formation of a submicron-sized particles of lead sulfide (PbS). Lead sulfide samples were obtained by chemical bath deposition method. 25 ml of an aqueous solution of lead nitrate $Pb(NO_3)_2$, 75 ml of sodium hydroxide NaOH and 50 ml of thiourea CH_4N_2S with molar concentrations of 0.18 M (1.52 g), 0.38 M (1.151 g) and 0.11 M (0.397 g), respectively, were used as reagents. In the process of obtaining samples, solutions of lead nitrate and sodium hydroxide were initially mixed at temperatures of 70°C and 100°C, then a thiourea solution was added to this mixture. It was found that temperature has an effect on the formation of PbS structures. It is shown that at a temperature of 100°C isolated particles are formed, whereas at a temperature of 70°C a film is formed.

The morphology and elemental composition of the obtained lead sulfide (PbS) samples were studied by scanning electron microscopy (SEM) and the surface structure was studied using an atomic force microscope (AFM). As a result of the study of the morphology and texture of the surface of lead sulfide samples, the average size of isolated particles was determined, which is ~144 nm, and these particles also had a cubic shape with a smooth surface.

Keywords: lead sulfide, film, isolated particles, temperature, optimal parameters.

Г.С. Әмірбекова¹, Ж.Қ. Төлепов^{1*}, Н. Гусейнов², Т. Қуанышбеков³

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

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

³С. Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университетінің ұжымдық пайдалану ұлттық ғылыми зертханасы,

Өскемен қ., Қазақстан

*e-mail: mr.tolepov@mail.ru

Қорғасын сульфиді пленкаларының өсу ерекшеліктеріне қорғасын нитраты мен натрий гидроксиді ерітінділер қоспасы температурасының әсері

Бұл зерттеу жұмысы температураның қорғасын сульфиді (PbS) субмикрондық өлшемді бөлшектерінің түзілуіне әсерін зерттеуге арналған. Қорғасын сульфидінің үлгілері сулы ерітіндіден химиялық тұндыру әдісімен алынды. Реагенттер ретінде 25 мл қорғасын нитраты $Pb(NO_3)_2$, 75 мл натрий гидроксиді NaOH және 50 мл тиомочевина CH_4N_2S тиісінше молярлық концентрациялары бойынша 0,11 М (0,397 г), 0,18 М (1,52 г), 0,38 М (1.151 г) сулы ерітінділері пайдаланылды. Үлгілерді алу процесінде бастапқы кезеңде қорғасын нитраты мен натрий гидроксиді ерітінділері 70°C және 100°C температурада араластырылды, содан кейін бұл қоспаға тиомочевина ерітіндісі қосылды. Температура PbS құрылымдарының қалыптасуына әсер ететіні анықталды. 100°C температурада оқшауланған бөлшектер пайда болды, ал 70°C температурада пленка пайда болды.

Алынған қорғасын сульфидінің (PbS) үлгілерінің морфологиясы мен элементтік құрамы сканерлеуші электронды микроскопия (СЭМ) әдісімен зерттелді және беттік құрылымы атомдық күштік микроскопы (АСМ) арқылы зерттелді. Қорғасын сульфидінің үлгілерінің морфологиясы мен беткі қабатын зерттеу нәтижесінде оқшауланған бөлшектердің орташа мөлшері анықталды, ол ~144 нм құрайды, сонымен қатар бұл бөлшектер беті тегіс текше түрінде болды.

Түйін сөздер: қорғасын сульфиді, пленка, оқшауланған бөлшектер, температура, оңтайлы параметрлер.

Г.С. Амирбекова¹, Ж.К. Толепов¹, Н. Гусейнов², Т. Куанышбеков³

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

²Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Лаборатория инженерного профиля г.Алматы, Казахстан

³Национальная научная лаборатория коллективного пользования

Восточно-Казахстанского университета им. С. Аманжолова, г.Усть-Каменогорск, Казахстан

*e-mail: mr.tolepov@mail.ru

Влияние температуры смеси растворов нитрата свинца и гидроксида натрия на особенности роста пленок сульфида свинца

Настоящее исследование посвящено изучению влияния температуры на образование частиц сульфида свинца (PbS) субмикронного размера. Образцы сульфида свинца были получены методом химического осаждения из водного раствора. В качестве реагентов использовались 25 мл водного раствора нитрата свинца $Pb(NO_3)_2$, 75 мл гидроксида натрия NaOH и 50 мл тиомочевины CH_4N_2S с молярными концентрациями 0,18 М (1,52 г), 0,38 М (1.151 г) и 0,11 М (0,397 г), соответственно. В процессе получения образцов на начальном этапе производилось перемешивание растворов нитрата свинца и гидроксида натрия при температурах 70°C и 100°C, затем в данную смесь добавлялся раствор тиомочевин. Было установлено, что температура оказывает влияние на формирование структур PbS. Показано, что при температуре 100°C образуются изолированные частицы, тогда как при температуре 70°C формируется пленка.

Морфология и элементный состав полученных образцов сульфида свинца (PbS) изучались методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и поверхностная структура была изучена с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ). В результате исследования морфологии и структуры поверхности образцов сульфида свинца был определен средний размер изолированных частиц, который составляет ~144 нм, кроме того данные частицы имеют кубическую форму с гладкой поверхностью.

Ключевые слова: сульфид свинца, пленка, изолированные частицы, температура, оптимальные параметры.

Introduction

Lead sulfide (PbS) is an inorganic chemical compound of lead and sulfur. The appearance of crystalline substance ranges from blue-gray to silver-gray color. In nature it is found in the form of the mineral galena [1-3]. In the laboratory it can be obtained by reaction between solutions of lead salt and sodium sulfide. Lead sulfide (PbS) is recognized as an excellent material for infrared luminescence with several advantages including a direct narrow band gap of 0.41 eV, broad spectral absorption in the visible to near infrared region, and remarkable quantum confinement effects of charge carriers [4]. Lead sulfide is a semiconductor material. The lattice parameter is 0.593 nm. There are different methods of lead sulfide production. One method is chemical vapor deposition (CVD), where lead sulfidization occurs. This process uses lead (Pb) vapor, hydrogen sulfide (H_2S). This process uses atmospheric pressure, inert gas (Ar, N_2), reaction temperature is from 400-800°C. This process has disadvantages such as limited particle shape and size and the need to control temperature and pressure [5-9]. There is also pyrolysis of aerosol, in this method lead salt solution ($Pb(NO_3)_2$) and thiourea ($CS(NH_2)_2$) are used as starting substances. To make the process run well, the

reaction temperature should be 400-600°C and the pressure should be atmospheric, inert gases such as (Ar, N_2) are used as an admixture. The advantages of this method are that the shape and size of the particles can be controlled, but the disadvantage is that the sedimentation rate is very low and the process is very complicated [10-14]. The third method is physical vapor deposition (PVD), which is a vacuum deposition method, in this method a target of lead (Pb) and sulfur (S) is used as a starting material. In this process the lead is evaporated in vacuum, the reaction takes place with sulfur vapor and sedimentation on the substrate. The advantages of this reaction are that the product has high purity, the film thickness can be controlled, but also this process has its disadvantages such as the cost of this process is very high and has its own difficulties in the reaction [15]. The fourth method is ion beam deposition. In ion beam deposition, lead ions (Pb^+) and hydrogen sulfide (H_2S) are used as precursors. This method is carried out through bombarding the substrate with lead ions and reacting with hydrogen sulfide. As a result lead sulfide is formed. The advantage of this process is that the process is carried out at low temperature and the shape and size of the particles can be controlled, besides it has the disadvantage that the deposition takes place at a low rate [16]. The fifth

method is molecular beam epitaxy. In molecular beam epitaxy, molecular beams of lead (Pb) and sulfur (S) are used as a starting material and lead and sulfur molecules are deposited on a substrate. In this process, high quality crystals grow and the doping process can be controlled. The disadvantage of this process is that it is very expensive and has its own difficulties [17-20]. The sixth method is laser deposition. This process requires laser light and lead sulfide (PbS) target as the starting material. The process takes place by laser vaporization of the target and deposition on the substrate. The advantages of this method are that the process is very fast and the shape and size of the particle can be controlled. The disadvantage of this method is that the purity of the product is very low and the process has its own difficulties [21-23]. Seven is the most commonly used method of chemical bath deposition (CBD) because it is a very simple, cost-effective and economically reproducible method that can be used for large area deposition at low temperature. Chemical bath deposition is used to deposit thin films from a wide range of materials. The deposition mechanism is essentially the same for all such materials. A soluble salt of the desired metal is dissolved in an aqueous solution to release the cations. A non-metallic element is provided by a

suitable starting compound, which is decomposed in the presence of hydroxide ions to release anions. The anions and cations then react to form a compound [24].

In this work, we report the effect of reaction temperature on the structure of lead sulfide obtained by chemical method from aqueous solution.

Experiment

Lead sulfide samples were obtained by chemical precipitation on silicon substrate from aqueous solution. A mixture of aqueous solutions of 25 mL of lead nitrate $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ 0.18 M (1.52 g) and 75 mL of sodium hydroxide NaOH 0.38 M (1.151 g) were mixed using a magnetic stirrer for 60 minutes at temperatures of 70°C and 100°C. At the initial moment of the process, the mixture of the mixed solutions was transparent, further during the mixing process it started to change color from transparent to yellow and small golden particles were formed in the mixture (Figure 1a). 50 mL aqueous thiourea $\text{CH}_4\text{N}_2\text{S}$ solution with a molar concentration of 0.11 M (0.397 g) was prepared for 30 minutes at room temperature (Figure 1b). Aqueous thiourea solution was added to the mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions (Figure 1c).

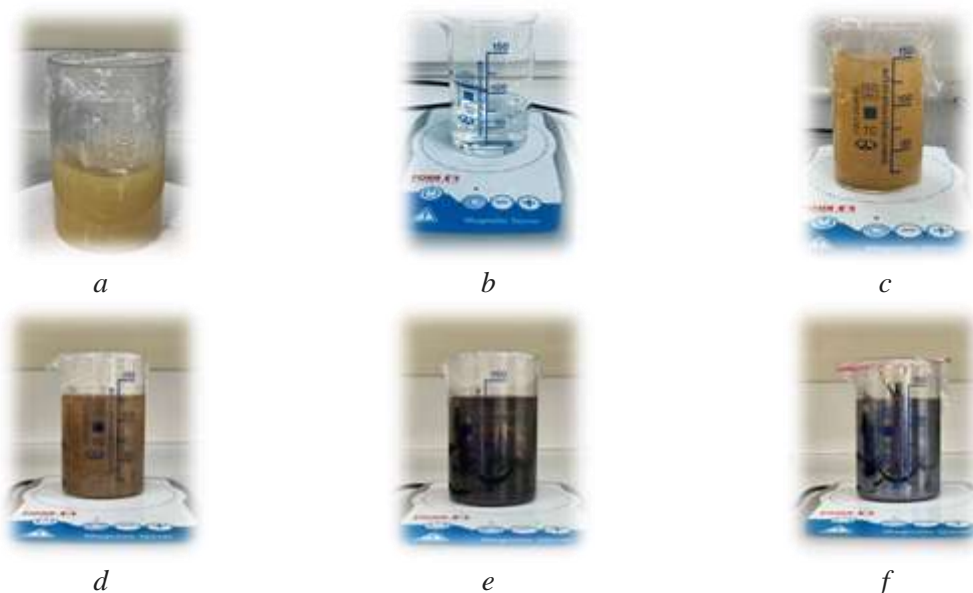


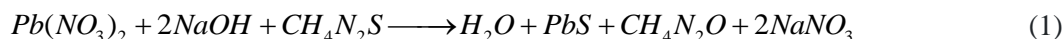
Figure 1-Solutions of lead nitrate, sodium hydroxide, and thiourea to produce isolated particles and films of lead sulfide (PbS) as a function of temperature

After adding a thiourea solution to a mixture of lead nitrate and sodium hydroxide, the process of lead sulfide synthesis began. During the process, during the first four minutes of the reaction, the resulting solution changed its color from brown to dark gray. At the first minute the color of the solution was light

brown, and in the second minute it changed to a more brown color (Figure 1d), and in the third minute the solution had a darker shade (Figure 1e), and in the fourth minute a thin film of lead sulfide was formed on the surface of the beaker (Figure 1f). And after that, the silicon substrate was immersed in the

solution. The synthesis was carried out for 35 minutes and the obtained samples were cleaned in an ultrasonic bath for 15 minutes at room temperature.

The chemical reaction of the formation of inorganic lead sulfide compound took place according to the following formula:



The obtained samples were examined by scanning electron microscope (SEM), and the elemental composition was also determined by energy dispersive analysis on Quanta3D 200i. The surface structure of the obtained lead sulfide samples was investigated by atomic force microscopy (AFM), which allowed to study their morphological characteristics.

Results and discussion

Figure 2 shows the surface morphology of the samples obtained by scanning electron microscope.

Figure 2a shows the morphology of lead sulfide sample obtained at a temperature of 70°C mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions and its elemental composition is shown in Figure 2b. This figure shows that at this temperature, a continuous film with a rough surface formed from cubic shaped crystallites is formed. From the elemental analysis, the atomic of lead was determined to be 49.76% and sulfur 50.24%, which shows that the elemental composition corresponds to the stoichiometric percentage ratio of lead sulfide (PbS).

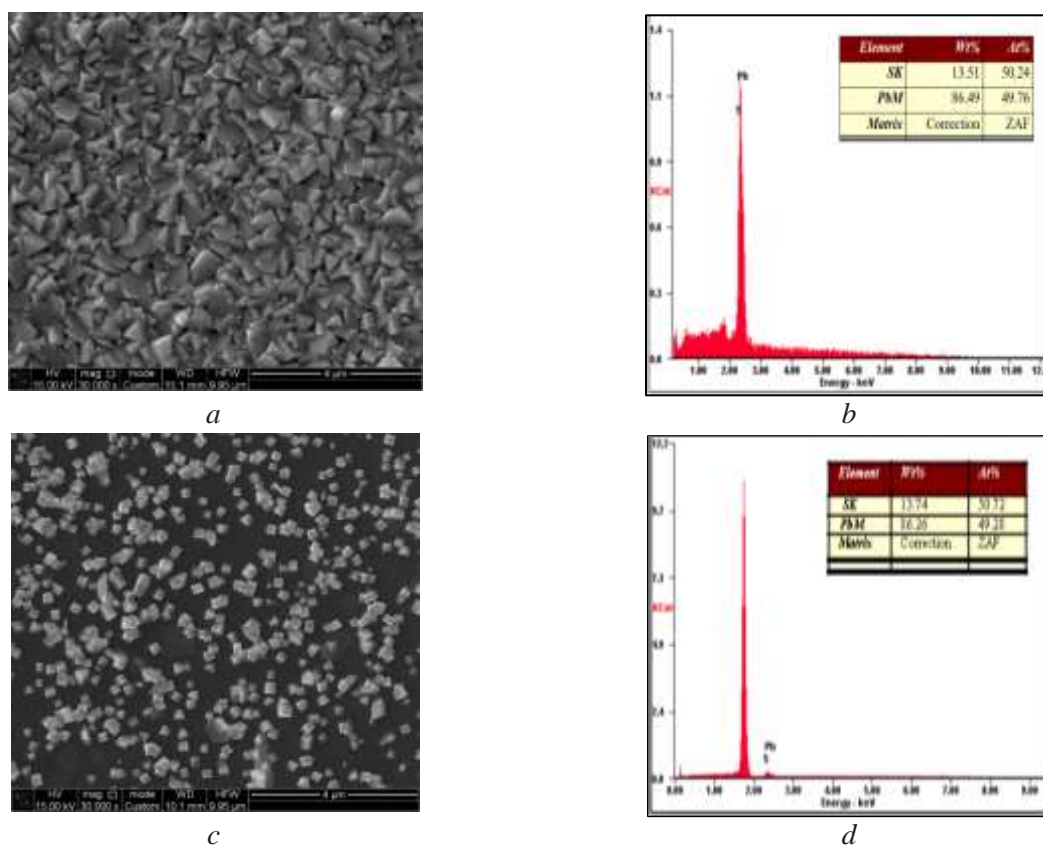


Figure 2-(a), (b), SEM image and energy dispersive analysis of PbS lead sulfide film and (c), (d) SEM image and energy dispersive analysis of isolated PbS lead sulfide particles

Figure 2 (c, d) shows the SEM image and elemental composition of lead sulfide obtained at the temperature of 100°C mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions. As can be seen from the figure, the obtained sample of lead sulfide has separate isolated particles of cubic shape with an average size of ~144 nm, which repeats the crystal

structure of lead sulfide itself. From the data of EDS analysis it follows that the particles have 49.28 at.% and sulfur 50.72 at.%, in which as well as in lead sulfide films the stoichiometric ratio is observed. The insignificant deviation of atomic percentages does not exceed 1%, which can be related to the accuracy of measurement.

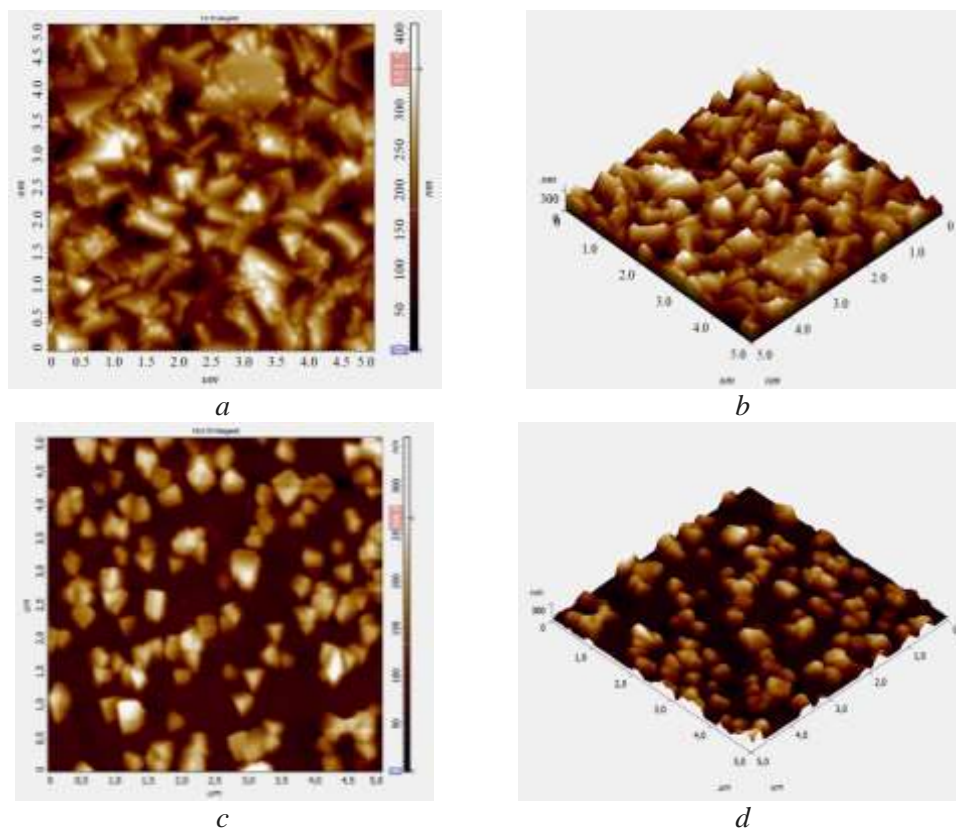


Figure 3 - AFM image of the surface of the film (*a, b*) and isolated particles (*c, d*) of lead sulfide (PbS)

Figure-3 shows the AFM images of PbS samples of $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ scanning area. It can be seen from the figure that the results of the study are in good agreement with the results obtained by scanning electron microscope (SEM). Figure 3 (*a, b*) shows 2D and 3D images of the surface of lead sulfide film obtained at a temperature of 70°C mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions. From the figure it can be seen that the film was formed and it has a rough surface of cubic crystallite shape with peak-to-peak value of $\sim 300 \text{ nm}$.

AFM images of lead sulfide samples obtained at the temperature of the mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions 100°C are presented in Figure 3 (*c, d*). The figure shows that lead sulfide is formed into separate isolated particles homogeneous in size and with a height similar to the thickness of the films, i.e. $\sim 300 \text{ nm}$.

Conclusion

In this work, isolated submicron lead sulfide (PbS) particles were prepared using the chemical bath deposition method and it was determined that at a lower temperature (70°C) the growth of PbS film occurs and at a higher temperature (100°C) the formation of individual submicron particles.

Scanning electron microscopy (SEM) was used to study the morphology and elemental composition of lead sulfide samples. Atomic force microscope (AFM) allowed a detailed study of the surface structure of these samples. The analysis showed that the average size of isolated lead sulfide particles is about 144 nm . At the same time, all the particles have cubic shape and smooth surface.

Thus, isolated particles of PbS were obtained using temperature effects. On the next stage of the research it is planned to reduce the size of these particles, our research work will be devoted to the study of the influence of time on the synthesis of lead sulfide structures.

References

- 1 Mamiyev Z., and Balayeva N.O. PbS nanostructures: A review of recent advances // Materials Today Sustainability. – 2023. – Vol.21. – Art.No 100305.
- 2 Mohammed M.K.A. Studying the Structural, Morphological, Optical, and Electrical Properties of CdS/PbS Thin Films for Photovoltaic Applications // Plasmonics. – 2020. – Vol.15, no. 6. – P.1989–1996.

- 3 Tang H. et al. Lead Sulfide Quantum Dot Photodetector with Enhanced Responsivity through a Two-Step Ligand-Exchange Method // *ACS Appl Nano Mater.* – 2019. – Vol.2, no.10. – P.6135–6143.
- 4 Rodríguez C.A., Mera A.C., Pizarro-Castillo L., Ashfaq M., Sandoval-Paz M.G., Burgos M.J.C., Suárez S. Fabrication of CdS/PbS and CdS:Al/PbS solar cells: Optimization of the Al content in CdS and the solution pH during PbS deposition // *Materials Science in Semiconductor Processing.* – 2021. – Vol.131. – Art.No.105839.
- 5 Yesica B. Castillo-Sánchez, A. and Luis González. Chemically deposited PbS thin films by reaction media with glycine for use in photovoltaics. Chemically deposited PbS thin films by reaction media with glycine for use in photovoltaics // *Materials Science in Semiconductor Processing.* – 2021. – Vol.121. – Art.No.105405.
- 6 Chalapathi U., Park S.H., Choi W.J. // *Materials Science in Semiconductor Processing.* – 2021. – Vol.134. – Art.No.106022.
- 7 Jyothilakshmi V.P., Bhabhina N.M., Dharsana M.V. and Swaminathan S., Wet chemical synthesis of lead sulfide nanoparticles and its application as light harvester in photovoltaic cell // *Materials Today: Proceedings.* – 2020. – Vol.33, part 5. – P.2125-2129.
- 8 Huo, N., Gupta S. and Konstantatos, G. MoS₂-HgTe Quantum Dot Hybrid Photodetectors beyond 2 μm. // *Adv. Mater.* – 2017. – Vol.29. – P.1606576.
- 9 Moughli H., Azeddine B., Tiouti Z., and Rajczyk M. Study and modeling of a CdS /PbS betavoltaic cell by Monte Carlo simulation // *Chalcogenide Letters.* – 2023. – Vol.20, no.3. – P.227–233.
- 10 El Madani A., Daoudi O., Benyoussef S., Qachaou A., Fahoume M. and Lharch M., Experimental and Ab Initio Investigation of the Physical Properties of PbS Thin Films Prepared by Chemical Bath Deposition (CBD) // *Brazilian Journal of Physics.* – 2021. – Vol.51. – P.1166–1174.
- 11 Abdallah B., Hussein R., Al-Kafri N., Zetoun W. PbS Thin Films Prepared by Chemical Bath Deposition: Effects of Concentration on the Morphology, Structure and Optical Properties // *Iranian Journal of Science and Technology.* – 2019. – Vol.43. – P.1371-1380.
- 12 Weyde M.M., Yarema M., Liu M., Sargent E. and Wood V., Nanocrystal Quantum Dot Devices: How the Lead Sulfide (PbS) System Teaches Us the Importance of Surfaces // *Chimia.* – 2021. – Vol.75. – P.398-413.
- 13 Liu Y. and Peard N. Electronic, Optical and Transport Properties of PbS Nanocrystal Superlattices // *Bulletin of the American Physical Society.* – 2019. – Vol.64, iss. 2.
- 14 Ahmed A. M., Rabia M. and Shaban M. The structure and photoelectrochemical activity of Cr-doped PbS thin films grown by chemical bath deposition // *RSC Advances.* – 2020. – Vol.10(24). – P.14458-14470.
- 15 John S., Francis M., Reena Mary A. P., and Geetha V. Influence of annealing on the properties of chemically prepared SnS thin films // *Chalcogenide Letters.* – 2023. – Vol.20, no.5. – P.315–323.
- 16 Barrios-Salgado E., Rodríguez-Lazcano Y., Pérez-Orozco J.P., Colin J., Altuzar P., Campos J., Quesada D. Effect of Deposition Time on the Optoelectronics Properties of PbS Thin Films Obtained by Microwave-Assisted Chemical Bath Deposition // *Advances in Condensed Matter Physics.* – 31 Mar. 2019. – Vol. 2019, 8 p.
- 17 Yellapragada N.V.S.R., Cherukuri T.S., Jayaraman P., and. Devarakonda S.K. Estimation of Lattice Strain in Lanthanum Hexa Aluminate Nanoparticles Using X-Ray Peak Profile Analysis // *Revue des composites et des matériaux avancés.* – 2021. – Vol.31, no. 1. – P.13–19.
- 18 Castillo-Sánchez Y. B. and González L. A. Chemically deposited PbS thin films by reaction media with glycine for use in photovoltaics // *Mater Sci Semicond Process.* – 2021. – Vol.121. – P.105405.
- 19 Sanchez-Martinez A., Ceballos-Sanchez O., Guzman-Caballero D. E., Avila-Avendano J. A., Perez-Garcia, Quevedo-Lopez M.A. and Bon R. R. // *Ceramics International.* – 2021. – Vol.47(13). – P.18898-18904.
- 20 Yepseu A.P., Girardet T., Nyamen L.D., Fleutot S., Ketchemen K.I.Y, Kun W.N., Cleymand F. and Ndifon P.T. Synthesis and Photocatalytic Activity of High-Quality Lead(II) Sulfide Nanoparticles from Lead(II) Thiosemicarbazone Complexes as Single Source Precursors // *Nanomaterials.* – 2024. – Art. ID 9932000.
- 21 Iram S., Mahmood A., Sitara E., Bukhari S.A.B., Fatima S.A., Shaheen R. and Malik M. A. Nanostructured Lead Sulphide Depositions by AACVD Technique Using Bis(Isobutyldithiophosphinato) Lead(II) Complex as Single Source Precursor and Its Impedance Study // *Nanomaterials (Basel).* – 2020 Aug. – Vol.10(8). – P.1438.
- 22 Saka A., Gudata L., Jule L.T., Seeivasan V., Nagaprasad N, and Ramaswamy K. Synthesis of nano-sized lead sulfide thin films from Avocado (*Glycosmis cochinchinensis*) Leaf extracts to empower pollution remediation // *Sci Rep.* – 2022. – Vol.12. – P.11710.
- 23 Faremi A.A., Adekoya M.A., Oluyamo S.S., Adeyemo P.A., Akindadelo A.T., Ajayeoba Y.A. and Ogundare R.T. Influence of substrate temperature and deposition time in energy band gap characteristic of lead sulfide thin film // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2021. – Vol.2034. – Art.No.012026.
- 24 Amirbekova G. Tolepov Zh. Guseinov N. Nemkaeva R. Kuanyshbekov T. Ramazanova A. Tlaubergenova D., Formation of PbS microstructured films by CBD method and study of structural properties // *Chalcogenide Letters.* – 2023. – Vol. 20, No. 12. – P.857–861.

References

- 1 Z. Mamiyev, N.O. Balayeva, *Materials Today Sustainability* 21, 100305 (2023).
 2 M.K.A Mohammed., *Plasmonics* 15(6), 1989–1996 (2020).
 3 H. Tang et al., *ACS Appl Nano Mater.* 2(10), 6135–6143 (2019).

- 4 C.A Rodríguez., A.C Mera., et al., *Materials Science in Semiconductor Processing* 131, 105839 (2021).
- 5 B. Yesica Castillo-S´anchez, A. and Gonz´alez L, *Materials Science in Semiconductor Processing* 121, 105405 (2021).
- 6 Chalapathi U., Park S. H. et al., *Materials Science in Semiconductor Processing* 134, 106022 (2021).
- 7 V.P. Jyothilakshmi , N.M. Bhabhina, et al., *Materials Today: Proceedings* 33 (5), 2125-2129 (2020).
- 8 N. Huo, S. Gupta, et al., *Adv. Mater.* 29, 1606576 (2017).
- 9 H. Moughli, B. Azeddine, et al., *Chalcogenide Letters* 20(3), 227–233 (2023).
- 10 El Madani A., Daoudi1 O., et al., *Brazilian Journal of Physics* 51, 1166–1174 (2021).
- 11 B. Abdallah, R. Hussein, et al., *Iranian Journal of Science and Technology* 43, 1371-1380 (2020).
- 12 M.M. Weyde, M. Yarema, *Chimia* 75, P.398-413 (2021).
- 13 Y.Liu and N. Peard, *Bulletin of the American Physical Society* 64 (2) (2019).
- 14 A. M. Ahmed, M. Rabia et al., *RSC Advances* 10(24), 14458-14470 (2020).
- 15 S. John. M. Francis, et al., *Chalcogenide Letters* 20 (5), 315–323 (2023).
- 16 E. Barrios-Salgado, Y. Rodríguez-Lazcano, et al., *Advances in Condensed Matter Physics*, 31 Mar. 2019, 8 (2019).
- 17 P. Jayaraman, and S.K. Devarakonda, et al., *Revue des composites et des matériaux avancés* 31 (1), 13–19 (2021).
- 18 Y.B. Castillo-Sánchez and L.A. González, *Mater Sci Semicond Process* 121, 105405 (2021).
- 19 A. Sanchez-Martinez, O. Ceballos-Sanchez, et al., *Ceramics International* 47(13), 18898-18904 (2021).
- 20 A.P. Yepsu, T.Girardet, et al., *Nanomaterials* 2024, ID 9932000 (2024).
- 21 S. Iram, A. Mahmood, et al., // *Nanomaterials* 10(8), 1438 (2020).
- 22 A. Saka, L. Gudata, *Sci Rep.* 12, 11710 (2022).
- 23 A.A. Faremi, M.A. Adekoya., et al., *Journal of Physics: Conference Series* 2034, 012026 (2021).
- 24 G. Amirbekova, Zh.Tolepov, et al., *Chalcogenide Letters* 20 (12), 857–861 (2023).

Article history:

Received 15 April 2024

Accepted 06 May 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 15.04.2024

Қабылданды – 06.05.2024

Information about authors:

1. **Gulzhanat Amirbekova** – PhD student, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: gulzhanatt95@gmail.com).

2. **Zhandos Tolepov** (corresponding author) – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, (Almaty, Kazakhstan, email: mr.tolepov@mail.ru).

3. **Nazim Guseinov** – Al-Farabi Kazakh National University, Laboratory of Engineering profile (Almaty, Kazakhstan, email: solar_neo@mail.ru).

4. **Tlek Kuanyshbekov** – PhD, National Scientific Laboratory of Collective Use S. Amanzholov East Kazakhstan University (Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan, email: kuanyshbekov_17@mail.ru).

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Гүлжанат Әмірбекова** – PhD студент, әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: gulzhanatt95@gmail.com).

2. **Жандос Төлепов** (автор корреспондент) – PhD, әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: mr.tolepov@mail.ru).

3. **Назим Гусейнов** – Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Инженерлік лаборатория (Алматы қ., Қазақстан, email: solar_neo@mail.ru).

4. **Тілек Қуанышбеков** – PhD, С. Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университетінің ұжымдық пайдалану ұлттық ғылыми зертханасы (Өскемен қ., Қазақстан, email: kuanyshbekov_17@mail.ru).

4-бөлім





**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ
ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

Section 4

**THERMOPHYSICS
AND THEORETICAL HEAT ENGINEERING**

Раздел 4

**ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
ТЕПЛОТЕХНИКА**

M.S. Moldabekova , V. Mukamedenkyzy* , M.K. Asembayeva , A.G. Tolepbergen 
Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan
*e-mail: mukameden@inbox.ru

INVESTIGATION OF THE DIFFUSION OF TWO GASES EQUALLY DILUTED WITH DIFFERENT BALLAST GASES

Both liquid and gaseous mixes have significant significance in numerous natural and artificial processes. This elucidates the comprehensive examination of such systems in a diverse array of various applications. The presence of several processes of heat and mass transfer in gas mixtures without an interfacial boundary in the system causes the emergence of thermoconcentration gravitational fluxes, resulting in density inhomogeneity of the medium. Isothermal diffusion in helium and methane gas mixtures in a stationary medium of propane and nitrous oxide ballast gases at various pressures has been experimentally studied. It is shown that in systems where the two main gases helium and methane were diluted with propane, and then helium with propane, and methane with nitrous oxide, a repetitive unstable diffusion state of varying intensity occurs with increasing pressure. The effect of the diluent gas on the transfer of two main gases in three-component and four-component systems is significant, since the ballast gas can either accelerate, slow down, or leave the diffusion mixing process unchanged. The comparison between experimental and calculated data on the Stefan-Maxwell theory shows a noticeable difference between them.

Key words: convection, diffusion, ballast gas, multicomponent gas mixtures.

М.С. Молдабекова, В. Мукамеденқызы*, М.К. Асембаева, А.Г. Төлепберген
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан
*e-mail: mukameden@inbox.ru

Түрлі балласты газдармен тең сұйылтылған екі газдың диффузиясын зерттеу

Сұйық және газ тәрізді қоспалар көптеген табиғи және жасанды процестерде маңызды рөл атқаратыны белгілі. Бұл мұндай жүйелерді қолданудың кең ауқымында жан - жақты зерттеуге мүмкіндік береді. Жүйеде фазааралық шекарасы жоқ газ қоспаларында бірнеше жылу және масса алмасу процестерінің болуы жылу концентрациясының гравитациялық ағындарының пайда болуына әкеледі, және де бұл ортаның тығыздығының біртексіздігіне әкеледі. Гелий мен метанның газ қоспаларындағы изотермиялық диффузия пропан мен азот оксидінің балласт газдарының әр түрлі қысымдағы қозғалмайтын ортасында эксперименталды түрде зерттелді. Бұл жұмыста екі негізгі газ гелий мен метанды пропанмен, содан кейін гелий пропанмен және метанды азот оксидімен сұйылтқан жүйелерде қысымның жоғарылауымен әртүрлі қарқындылықтағы қайталанатын тұрақсыз диффузиялық күй пайда болатыны көрсетілген. Балласт газдың үш компонентті және төрт компонентті жүйелердегі екі негізгі газдың тасымалдануына әсері айтарлықтай, өйткені балласт газы диффузиялық араластыру процесін жылдамдатуы немесе баяулатуы немесе өзгеріссіз қалдыруы мүмкіндігі туралы айтылған. Сондай-ақ, Стефан-Максвелл теориясы бойынша тәжірибелі және есептелген деректерді салыстыру олардың арасындағы айтарлықтай айырмашылықты көрсетеді.

Түйін сөздер: конвекция, диффузия, балласт газы, көпкомпонентті газдар қоспасы.

М.С. Молдабекова, В. Мукамеденқызы*, М.К. Асембаева, А.Г. Төлепберген
Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан
*e-mail: mukameden@inbox.ru

Исследование диффузии двух газов, в равной степени разбавленных различными балластными газами

Как жидкие, так и газообразные смеси играют важную роль во многих естественных и искусственных процессах. Это дает возможность всесторонне изучить такие системы в широком спектре применений. Наличие нескольких процессов тепло- и массообмена в газовых смесях без межфазной границы в системе приводит к возникновению термоконцентрационных гравитационных потоков, приводящих к неоднородности плотности среды. В данной работе экспериментально изучена изотермическая диффузия в газовых смесях гелий и метан в неподвижной среде балластных газов пропана и закиси азота при различных давлениях. Показано, что в системах, где два основных газа гелий и метан разбавлялись пропаном, а затем гелий - пропаном, а метан - закисью азота, с повышением давления возникает повторяющееся неустойчивое диффузионное состояние различной интенсивности. Влияние газа-разбавителя на перенос двух основных газов в трехкомпонентной и четырехкомпонентной системах существенно, так как балластный газ может или ускорить, или замедлить, или оставить без изменения диффузионный процесс смешения. Проведенное сравнение между опытными и расчетными данными по теории Стефана-Максвелла показывает заметное отличие между ними.

Ключевые слова: конвекция, диффузия, балластный газ, многокомпонентная газовая смесь.

Introduction

In the study of multi-component diffusion in gases, the occurrence of structured convective flows in certain conditions was discovered, the imposition of which on the proper molecular transfer leads to diffusion instability, i.e. mechanical imbalance of the mixture. The manifestation of this instability in the diffusion process was first observed in the study of the thermal effect in three-component gas mixtures in the Loshmidt diffusion apparatus [1]. Further studies of the diffusion process in isothermal multi-component gas mixtures at elevated pressures in a double-collar apparatus also showed a molecular transfer disorder and the appearance of powerful convective flows significantly exceeding diffusion [2, 3]. The appearance of convective flows in a closed device, such as a two-collar apparatus, could be explained by the manifestation of "Tour effects" or the influence of hydrodynamic flow, due to the diffusion bar effect, was not productive [4]. The causes of convection, or more precisely of free gravitational concentration convexity, could be explained within the framework of the linear theory of stability, allowing to identify types of mixing of gases [5, 6].

In solving practical problems in multi-component mass transport, the so-called ballast gas method is often used to diffuse several gases through a diluent gas layer. This method is preferable because the diffusion instruments and the procedure of experimentation remain the same as in the measurement of conventional diffusion coefficients [7]. If by its diffusion properties the ballast gas is close to one of the main ones, then in mutual diffusion the dilution gas plays the role of the movement indicator of the entire mixture, which allows to measure the resulting hydrodynamic flow. In the ballast gas method, the two main diffusing gases are diluted by the third, through which the mass transfer

is carried. And ballast gas as an indicator allows to describe the features of the diffusion process. An experimental study of gas mixtures with ballast gas showed that, by choosing the diluent gas appropriately, the diffusion mass transfer of the main components could be accelerated, slowed down, or kept unchanged [9-11]. Thus, the results of the experimental study of diffusion in ballast gas systems suggest that the effect of the diluent gas on the transfer of the two main ones is significant.

Further study of the concentration convection caused by mechanical imbalance with ballast gas showed that increased pressure affects the occurrence of the area of stable diffusion and unstable convective mixing. Moreover, the direction of the ballast gas flow depended on the pressure [12-13].

In connection with the above, the focus of this paper is on the experimental study of the diffusion of two gases equally diluted by different ballast gases at different pressures. Diffusion in a mixture of helium-propane gases in a fixed medium of ballast gas (dilution gas) was studied. Initially, both the main diffusing gases of helium (top cylinder) and methane (bottom cylinder) were diluted with propane, and then with propane and nitrogen oxide, i.e. two systems were studied:

- 1) $0.570He + 0.430C_3H_8 - 0.580CH_4 + 0.420C_3H_8$
and
- 2) $0.575He + 0.426N_2O - 0.425C_3H_8 + 0.574CH_4$.

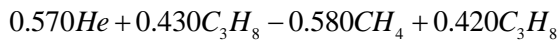
Method

This article presents the results of the study of the dependency of the concentration of diffused propane on the pressure. The experiments were conducted using the two-collar method [6-8]. The volume of the appliance was the same and amounted to 62.0 cm³. The length and diameter of the diffusion channel were 63.1 mm and 4.0 mm, respectively. The duration of all experiments at 298.0 K was 1 hour.

The experiments were carried out in the range of pressures from $p = 0.4$ MPa up to $p = 1.2$ MPa.

Results and Discussion

Figure 1 shows the change in the concentration of the ballast gas - propane in the upper cylinder of the diffusion apparatus depending on the test pressure for the system



(system 1). Here are the results of the calculations of the concentration of propane from pressure according to the Stefan-Maxwell equations (point line). The calculations were made with a pressure range of 0.2 MPa.

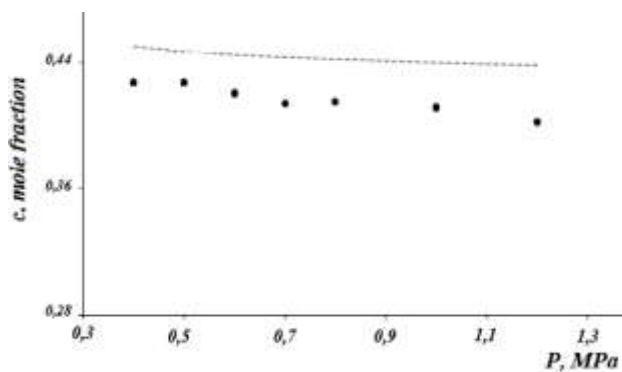


Figure 1 – Change of the concentration C_3H_8 in the $0.570He + 0.430C_3H_8 - 0.580CH_4 + 0.420C_3H_8$ system's upper cylinder depending on the pressure (points are the results of the experiment, a pointed line is the theoretical calculation)

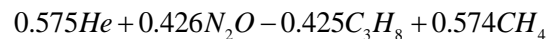
As you can see from this figure, in system 1, during the diffusion mixing process, the concentration of propane in the lower cylinder increased by 0.054 moles (the initial concentrations of propane in the bottom and upper cylinders were equal) when the pressure increased to $p = 0.5$ MPa. Further pressure increases leads to a decrease in the concentration of propane in the lower cylinder and at pressure $p = 0.7$ MPa reaches a minimum. To 0.8 MPa there is again a slight but noticeable increase in the ballast gas concentration, which then decreases to $p = 1.2$ MPa. Thus, in the pressure range of 0.4 to 1.2 MPa, there is a recurring unstable diffusion state of varying intensities, i.e. the transfer of the diluent gas from one bubble to another with subsequent return to the first. This feature found in ballast gas systems indicates that the diluent gas is circulating through the diffusion channel.

For the quantitative study of the circulation of the diluent gas discovered in the experiment, we

modified the method of ballast gas, which usually consisted of two main components and diluted with a single ballast gas. In our experience, the main diffusing gases were diluted not with one, but each with a separate gas. These gases differed little in their diffusion properties from the main diffusing gases. For this experiment, the propane in the upper cylinder was replaced with the nitric oxide that was closest to the required condition.

Figure 2 shows the concentration of nitrogen oxide in the second system depending on the pressure. The conditions for conducting the experiment are the same as for the previous system 1.

A study carried out for the system



showed that in the case of instability, the transfer of nitrogen oxide significantly exceeds the amount of propane in the diffusion of a mixture of helium and propane into a mix of methane and propane. If in the first system the concentration of propane in the lower cylinder increased by only 0.054 moles (Figure 1), then from Figure 2 it can be seen that the nitrogen oxide concentration in the second system changed by almost 0.24 moles. Thus, if you identify the propane in the upper cylinder of the first system with the nitrogen oxide in the same cylinder of the second system, the amount of propane is approximately 0.196 moles smaller than the nitric oxide, i.e. the difference is very significant.

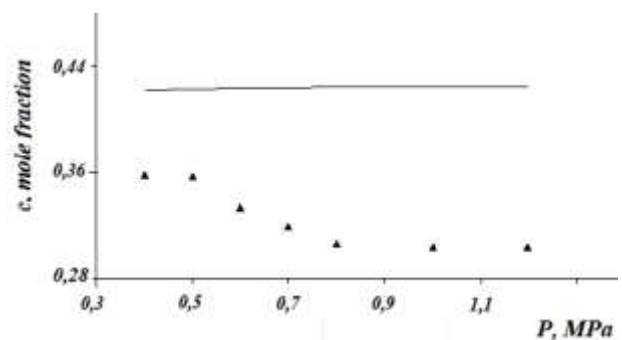
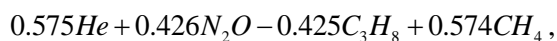


Figure 2 – Change of the concentration N_2O in the $0.575He + 0.426N_2O - 0.425C_3H_8 + 0.574CH_4$ system's upper cylinder depending on the pressure (points are the results of the experiment, a straight line is the theoretical calculation)

As shown in Figure 1 and 2, the change in the concentration of diffused propane and nitrogen oxide from the pressure is similar, starting from 0.5 MPa the propane concentration decreases, then from 0.7 MPa there is a slight, but a noticeable increase in the propane concentration and further increase in

pressure leads to a decrease in the amount of diluent gas passed by $p = 1.0$ MPa. A similar change in nitrogen oxide concentration is observed in the four-component system



for which the observed feature is more noticeably expressed. The results of the diffusion study in the ballast gas systems under investigation indicate that the effect of the diluent gas on the transfer of the two main gases is significant. By choosing the appropriate ballast gas, you can either speed up, slow down, or leave the diffusion mixing process unchanged.

The resulting experimental data indicate that the circulation of ballast gas allows to maintain the unstable nature of multi-component diffusion for a long time, slowing the transition to stable mass transfer. At the initial stage, the role of convection is great, the transfer of components is significant and the experiment allows to quantify it. The replacement of propane with nitrogen oxide in the second system also indicates the occurrence of an unstable diffusion process. The transfer of nitrogen oxide at the expense of its own concentration gradient (molecular transfer) compared to the transfer by convection can be neglected. The influence of convective flows caused by unstable diffusion in both systems is significant. The "unrecognized" transfer of the diluent gas in the first system due to its circulation is significant. This can be traced in experiments in the second system.

The presence of its own gradients in the "heavy" components, as evidenced by the study, is minor and the main redistribution of concentrations at the initial stage of diffusion appears to have been mainly due to the resulting convection.

Conclusion

Thus, the study of the system $He + N_2O - C_3H_8 + CH_4$ showed that in an unsustainable diffusion process, the transfer of nitrogen oxide is significantly greater than the propane transfer in the diffusion of a mixture of helium and propane into a mix of methane and propane, since in this system it is impossible to divide the propane flows in opposite directions. This suggests that in a system $He + C_3H_8 - CH_4 + C_3H_8$ during an unstable process, the diluent gas (propane) circulates through the diffusion channel from one column to another, continuously participating in the process. In the lower cylinder, propane is transported by a convex flow, the density of which is greater than the average density in the mixture, and in the upper, by a flow of density less than the mean density. The data indicate that the circulation of ballast gas enables the unstable nature of diffusion for long periods of time. The process in this case is self-organized (self-reproduced). Such self-sustainment continues as long as the main diffusing gases (helium and methane) at a sufficient concentration of propane contribute to the formation of structures leading to unstable diffusion

References

- 1 Hu Z.C. and Zhang X.R. A new oscillatory instability in Rayleigh–Bénard convection of a binary mixture with positive separation ratio // *Phys. Fluids*. – 2021. – Vol.33. – Art.No.054113.
- 2 Kosov V. and Altenbach H. Diffusion mechanisms of convective instability in liquid and gas mixtures // *Journal of Applied Math. Mech.* – 2023. – Vol.103. – e202300801.
- 3 Sihi D., Davidson E.A., Savage K.E. and Liang D. Simultaneous numerical representation of soil microsite production and consumption of carbon dioxide, methane, and nitrous oxide using probability distribution functions // *Global Change Biology*. – 2019. – Vol.26 (1). – P.200-218.
- 4 Pavlov A.V. Diffusion and Thermodiffusion of Atmospheric Neutral Gases: A Review // *Surv. Geophys.* – 2019. – Vol.40 (2). – P.247–276
- 5 Kosov V., Fedorenko O., Zhakebayev D., Mukamedenkyzy V. and Kulzhanov D. Convective mass transfer of a binary gas mixture in an inclined channel // *ZAMM - J. Appl. Math. Mech.* – 2022. – Vol.102 (1). – e201900197.
- 6 Hu H., Du L., Xing Y., and Li X. Detailed study on self- and multicomponent diffusion of CO₂-CH₄ gas mixture in coal by molecular simulation // *Fuel*. – 2017. – Vol.187. – P.220-228.
- 7 Zhakebayev D.B., Fedorenko O.V., Kosov V., Zhumali A., Mukamedenkyzy V. and Karuna O. Simulation of concentration convention in an inclined channel // *Heat Transfer Research* – 2022. – Vol.53 (15). –P.39–52.
- 8 Kosov V., Fedorenko O. and Zhakebayev D. Features of Multicomponent Mass Transfer in Gas Mixtures Containing Hydrocarbon Components // *Chem. Eng. Technol.* – 2019. – Vol.42 (4). – P.896–902.
- 9 Wang R., Song Y., Ma Z., Ma D., Wang L. and Wang P. The transition to turbulence in rarefaction-driven Rayleigh–Taylor mixing: Effects of diffuse interface // *Phys. Fluids*. – 2022. – Vol.34 (1). – 015125.
- 10 Kosov V., Zhakebayev D.B. and Fedorenko O.V. Numerical mass transfer studies in case of convective flows occurrence in isothermal ternary gas mixtures // *Computational Thermal Sciences: An International Journal*. – 2019. – Vol.11 (1-2). – P.29-39.
- 11 Kallepalli S., Johnson L. and Mattson B. Diffusion of Gases into Air: A Simple Small-Scale Laboratory Activity // *Journal of Chemical Education*. – 2021. – Vol. 98. – Vol.10. – P.3258-3262.

12 Kosov V., Fedorenko O., Asembaeva M., Mukamedenkyzy V. and Moldabekova M. Intensification of the Separation of Isothermal Ternary Gas Mixtures Containing Carbon Dioxide // Chem. Eng. Technol. – 2021. – Vol.44 (11). – P.2034-2040.

13 Kosov V., Fedorenko O.V., Asembaeva M.K. and Mukamedenkyzy V., Changing diffusion-convection modes in ternary mixtures with a diluent gas // Theor. Found. Chem. Eng. – 2020. – Vol.54 (2). – P.289-296.

References

- 1 Z.C. Hu and X.R. Zhang, Phys. Fluids 33, 5 (2021).
- 2 V. Kosov and H. Altenbach, Journal of Applied Math. Mech. 103, e202300801 (2023).
- 3 D. Sihi, E.A. Davidson, K.E. Savage and D. Liang, Global Change Biology 26, 1, 200-218 (2019).
- 4 A.V. Pavlov, Surv. Geophys. 40, 2, 247-276 (2019).
- 5 V. Kosov, O. Fedorenko, D. Zhakebayev, V. Mukamedenkyzy and D. Kulzhanov, ZAMM - J. Appl. Math. Mech. 102, 1, e201900197 (2022).
- 6 H. Hu, L. Du, Y. Xing and X. Li, Fuel 187, 220-228 (2017).
- 7 D.B. Zhakebayev, O.V. Fedorenko, V. Kosssov, A. Zhumali, V. Mukamedenkyzy and O. Karuna, Heat Transf. Res. 53, 15, 39-52 (2022).
- 8 V. Kosov, O. Fedorenko and D. Zhakebayev, Chem. Eng. Technol. 42, 4, 896-902 (2019).
- 9 R. Wang, Y. Song, Z. Ma, D. Ma, L. Wang and P. Wang, Physics of Fluids 34, 1, 015125 (2022).
- 10 V. Kosov, D.B. Zhakebayev and O.V. Fedorenko, Computational Thermal Sciences: An International Journal 11, 1-2, 29-39 (2019).
- 11 S. Kallepalli, L. Johnson and B. Mattson, Journal of Chemical Education 98, 10, 3258-3262 (2021).
- 12 V. Kosov, O. Fedorenko, M. Asembaeva, V. Mukamedenkyzy and M. Moldabekova, Chem. Eng. Technol. 44, 11, 2034-2040 (2021).
- 13 V. Kosov, O.V. Fedorenko, M.K. Asembaeva and V. Mukamedenkyzy, Theor. Found. Chem. Eng. 54, 2, 289-296 (2020).

Article history:

Received 04 April 2024

Received in revised form 17 April 2024

Accepted 15 June 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 04.04.2024

Түзетілген түрде түсті – 17.04.2024

Қабылданды – 15.06.2024

Information about authors:

1. **Mayra Moldabekova** – Doctor of Pedagogical Sciences, Prof., Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: mairamold@mail.ru).

2. **Venera Mukamedenkyzy** (corresponding author) – Cand. of Phys. and Math. Sc., Ass.Prof., Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: mukameden@inbox.ru).

3. **Mansiya Asembaeva** – Cand. of Phys. and Math. Sc., Ass.Prof. Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: masembaeva@kaznu.kz).

4. **Arsen Tolepbergen** – Master of Engineering and Technology, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan, email: arsen4236@gmail.com).

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Майра Молдабекова** – педагогика ғыл.докт., проф., әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: mairamold@mail.ru).

2. **Венера Мукамеденқызы** (автор корреспондент) – физ.-мат.ғыл. канд, қауымд.проф., әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: mukameden@inbox.ru).

3. **Мансия Асембаева** – физ.-мат.ғыл. канд, қауымд.проф., әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: masembaeva@kaznu.kz).

4. **Арсен Төлепберген** – техника және технология магистрі, әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті (Алматы қ., Қазақстан, email: arsen4236@gmail.com).

5-бөлім

**ЖОҒАРЫ МЕКТЕПТЕ
ФИЗИКА ПӘНІН ОҚЫТУ ӘДІСТЕМЕСІ**

Section 5

**METHODS OF TEACHING
HIGH SCHOOL PHYSICS**

Раздел 5

**МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ
ФИЗИКИ В ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ**

Б.А. Мукушев 

С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық университеті, Астана қ., Қазақстан
e-mail: mba-55@mail.ru

ЖЕРДІҢ ТҰРАҚТЫ ГРАВИТАЦИЯЛЫҚ ӨРІСІНДЕГІ ДЕНЕНІҢ ҚОЗҒАЛЫСЫН КОМПЬЮТЕРЛІК БЕЙНЕЛЕУ

Бұл мақалада Жерге жақын гравитациялық өрістегі материалдық нүкте немесе дене қозғалысын компьютерлік бейнелеу процедурасы толықталды. Mathcad математикалық ортасында құрастырылған компьютерлік бағдарламалар негізінде дене қозғалысының траекториялары құрылды. Сондай-ақ, Mathcad пакетінің компьютерлік құралдары арқылы алынған траекториялардың кинематикалық параметрлері зерттелді. Сапалық және компьютерлік әдіспен алынған траекториялардың сипаттайтын физикалық параметрлерін салыстыру жасалды. Mathcad ортасында құрастырылған компьютерлік бағдарламалардың көмегімен мынандай нәтижелерге қол жетті: көкжиекке әр түрлі бұрышта лақтырылған дененің оның жылдамдығы тұрақты болған кездегі траекториялары алынды; көкжиекке белгілі бір бұрышпен лақтырылған дененің ауаның кедергісін ескермеген және осы кедергіні есептеген жағдайдағы қозғалу траекториясы құрылды; екі өлшемді кеңістіктегі дене қозғалысының анимациясы жасалды.

Компьютерлік бейнелеу кезінде компьютер экранында дененің Жерге жақын аймақтағы қозғалысының элементтері мен құрамдас бөліктерінің ішкі байланыстары көрнекі түрде көрсетіледі. Компьютерлік бейнелеу арқылы алынған дене қозғалысының траекториялары аналитикалық жолмен алынған есептің шешімі мен жауабын тексеру әдісінің рөлін атқара алатындығы дәлелденді. Mathcad пакеті көмегімен жасалған имитациялық модельдеу нәтижелері кеңістіктегі дене қозғалысының динамикалық заңдылықтарын көрнекі түрде бере алды.

Түйін сөздер: компьютерлік бейнелеу, дененің қозғалыс траекториясының кинематикалық параметрлері, имитациялық модель, MathCAD қолданбалы бағдарламалар пакеті.

Б.А. Мукушев

Казахский агротехнический университет им. С.Сейфуллина, г. Астана, Казахстан
e-mail: mba-55@mail.ru

Компьютерная визуализация движения тела в постоянном гравитационном поле Земли

В данной статье проанализирована компьютерная визуализация движения материальной точки или тела в постоянном гравитационном поле. С помощью пакета прикладных программ MathCAD, построены траектории движения тела. Проанализированы механические параметры полученных траекторий посредством пакета MathCAD. А также проведен сравнительный анализ физических параметров траекторий, полученных на основе качественного анализа и посредством компьютерной визуализации. Компьютерные программы, составленные с помощью MathCAD, позволили получить следующие результаты: получены траектории брошенных тел под различными углами к горизонту, когда их скорости были одинаковыми; далее найдены траектории движения брошенного тела под углом к горизонту без учета сопротивления воздуха и с учетом вязкости среды; и наконец, создана анимация движения материальной точки в двухмерном пространстве.

При компьютерной визуализации была достигнута наглядная демонстрация внутренних взаимосвязей кинематических параметров движения материальной точки вблизи Земли. Доказано, что траектории движения тела, построенные с помощью компьютерной визуализации, могут быть методом перепроверки решения и ответа задачи на кинематику. Представлены результаты имитационного моделирования и закономерности движения тела в двухмерном пространстве.

Ключевые слова: компьютерная визуализация, кинематические параметры траектории движения тела, имитационная модель, пакет прикладных программ MathCAD.

B.A. Mukushev

S. Seifullin Kazakh AgroTechnical University, Astana, Kazakhstan

e-mail: mba-55@mail.ru

Computer visualization of body motion in the constant gravitational field of the Earth

The paper analyzes computer visualization of the motion of a material point or body in a constant gravitational field. Using the MathCAD application program package, the trajectories of the body motion are constructed. Mechanical parameters of the obtained trajectories are analyzed by means of MathCAD package. A comparative analysis of physical parameters of trajectories obtained on the basis of qualitative analysis and by means of computer visualization has been carried out. Computer programs made with the help of MathCAD allowed to obtain the following results: the trajectories of thrown bodies at different angles to the horizon were drawn when their velocities were the same; the trajectories of motion of a thrown body at an angle to the horizon were found without taking into account air resistance and with taking into account viscosity of the medium; an animation of motion of a material point in two-dimensional space was created.

At computer visualization a visual demonstration of internal interrelations of kinematic parameters of motion of a material point near the Earth was achieved. It is proved that the trajectories of body motion constructed with the help of computer visualization can be a method of rechecking the solution and answer of the problem on kinematics. Results of simulation modeling and regularities of body motion in two-dimensional space are presented.

Key words: computer visualization, kinematic parameters of the body motion trajectory, simulation model, MathCAD application program package.

Кіріспе

Соңғы 50 жылда компьютерлік ғылымдардың қарқынды дамуы жаратылыстану ғылымдарының әдіснамасын жаңа зерттеу әдістері мен құралдарымен байытуға мүмкіндік жасады. Компьютерлік құралдар физика ғылымын зерттеуде де кеңінен қолданыс табуда [1-5].

Физикалық құбылыстарды компьютерлік техника көмегімен зерттеудің артықшылығы мынады: құбылыстың немесе нысанның өзі емес, оның компьютерлік модельдері қарастырылады. Нәтижесінде физикалық құбылыстар мен нысандардың көпшілігі үлкен шығындарсыз зерттеледі. Қазіргі уақытта физика ғылымында жаңа ғылыми сала – есептеу (компьютерлік) физикасы пайда болды. Физиканың бұл ғылыми саласы математикадан сандық талдауды, теориялық физикадан заңдар мен заңдылықтарды және информатикадан бағдарламалау әдістерін біріктіреді [6-8].

Есептеу физикасынан ғылымның әртүрлі салаларын интеграциялау негізінде физикалық құбылыстардың заңдылықтарын жоғары көрнекілікпен көрсетуге бағытталған компьютерлік бейнелеу бөлініп шықты.

Зерттеу әдістемесі

Физиканы зерттеу кезінде компьютерлік техниканың мүмкіндіктерін пайдалану бейнелеу

режимінде әр түрлі физикалық құбылыстар мен процестерді жүзеге асыруға жағдай жасайды. Компьютерлік бейнелеу кезінде екі өлшемді және үш өлшемді кеңістіктегі денелердің қозғалысы, газдардағы, сұйықтардағы және қатты денелердегі молекулалар мен атомдардың хаосты қозғалысы, өткізгіштердегі электрондар мен иондардың жағдайы, радиоактивті заттардағы ядролық реакциялар және тағы басқа құбылыстар көрнекі болады.

«Зерттелетін нысанды компьютерлік бейнелеу - бұл компьютер экранында нысанның құрамдас бөліктерінің немесе олардың модельдерінің және компоненттердің ішкі қатыстарын көрсету мүмкіндігі. Зерттелетін құбылыстың компьютерлік бейнеленуі – бұл компьютер экранындағы көрнекілік, сонымен қатар нақты әлемдегі көзге байқалмайтын құбылыстардың бейнеленуі» [9].

Студенттердің оқу-зерттеу жұмысын компьютерлік бейнелеу мазмұнды және көрнекі етеді. Компьютерлік құралдар ретінде MathCAD, MatLab, ABCPascal, C, Python және т. б. бағдарламаларды пайдалануға болады.

Нәтижелер және талдау

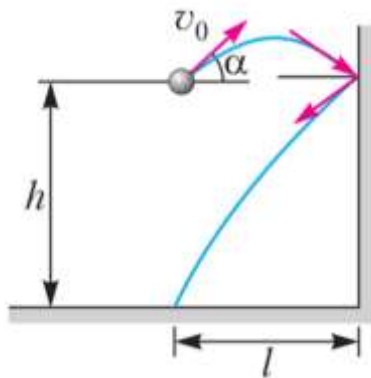
Компьютерлік технологияны қолдана отырып, дененің механикалық қозғалысын бейнелеудің кейбір мәселелерін қарастырамыз. Mathcad қолданбалы бағдарламалар пакетінің көмегімен студенттер тұрақты гравитациялық

өрістегі материалдық нүктелердің қозғалыс траекторияларын зерттеп, компьютерлік бейнелеу арқылы олардың кинематикалық параметрлерін таба алады.

Жерге жақын денелердің қозғалысын компьютерлік бейнелеу.

Доптың қозғалысы бейнелеуге арналған келесі мысалды қарастырамыз. Допты спортшы $h = 1,5$ м биіктіктен және спортзалдың тік қабырғасына бағыттай көкжиекпен 45° бұрыш жасай лақтырады. Спортшы қабырғадан $l = 6$ м қашықтықта орналасқан. Доп қабырғамен серпімді әсерлескеннен кейін оның аяғына дәл түседі. Ауа кедергісін елемейміз. Доп қандай жылдамдықпен лақтырылды?

Қарастырылған механикалық құбылысты талдау үшін лақтырылған доптың сапалық (жуық) траекториясын салу керек. Ауырлық күшінің өрісінде доп қозғалысының траекториясын құрайық (1-сурет).



1-сурет. Қабырғаға лақтырылған доптың қозғалысының сапалық (жуық) траекториясы

Қабырғаға түсірілген нормаль және соққы алдындағы доптың жылдамдық векторы арасындағы бұрыш нормаль мен серпімді соққыдан кейінгі доп жылдамдығы арасындағы бұрышқа тең. t_0 арқылы біз доптың ұшу уақытын белгілейміз. t_0 кезінде доп горизонталь бойымен $2l$ қашықтыққа орын ауыстырады. $v_0 \cos \alpha$ - доп жылдамдығының горизонталь құраушысы болып табылады. Ұшу кезінде бұл мән өзгермейді. Демек, $v_0 \cos \alpha t_0 = 2l$.

t_0 уақыт моментінде де доптың вертикаль координатысы нөлге тең болады.

$$h + v_0 \sin \alpha \cdot t_0 - \frac{gt_0^2}{2} = 0.$$

Бұл өрнеке t_0 –дің мәнін қойсақ:

$$v_0 = \frac{l}{\cos \alpha} \sqrt{\frac{2g}{h + 2l \tan \alpha}} \approx 10,23 \frac{\text{м}}{\text{с}}$$

Есеп дұрыс шешілгені анық. Алайда, доптың траекториясына қатысты мынандай сұрақтар туындайды:

1. Доптың траекториясы қаншалықты дәл сызылған?

2. Доптың дәл траекториясын құрудағы компьютерлік бейнелеудің рөлі қандай?

Компьютерлік бейнелеуді қолдану үшін біз доптың келесі кинематикалық параметрлерін аналитикалық түрде табамыз: доп спортшының аяғына $11,58$ м/с жылдамдықпен соғылады, бұл жылдамдық пен горизонталь азықтық арасындағы бұрыштың мәні $51,7$ градус.

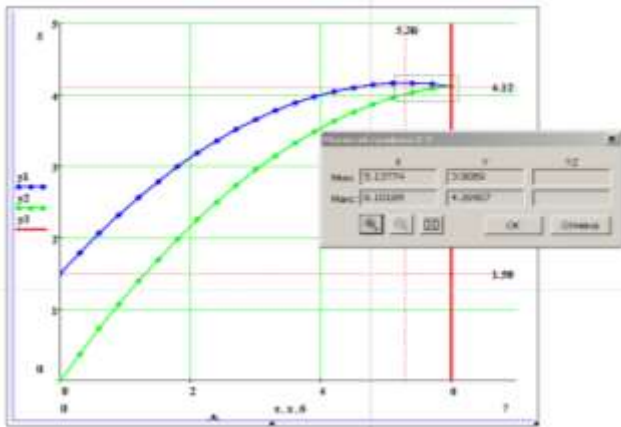
Mathcad ортасында шағын бағдарлама жасаймыз (2-сурет). Бағдарлама құруда есептеп шығарылған доптың қозғалыс параметрлерін қолданамыз.

$i := 0..12$	$x_i := i \cdot 0.5$	$g := 9.81$
$y1_i := 1.5 + \tan\left(45 \cdot \frac{\pi}{180}\right) \cdot x_i - \frac{g \cdot (x_i)^2}{2 \cdot \left(10.23 \cdot \cos\left(45 \cdot \frac{\pi}{180}\right)\right)^2}$		
$y2_i := \tan\left(51.7 \cdot \frac{\pi}{180}\right) \cdot x_i - \frac{g \cdot (x_i)^2}{2 \cdot \left(11.58 \cdot \cos\left(52 \cdot \frac{\pi}{180}\right)\right)^2}$		

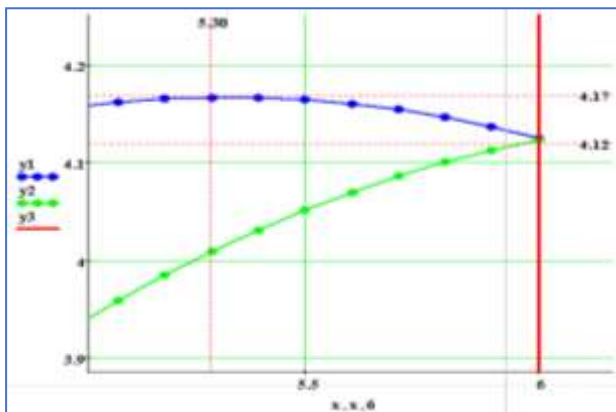
2-сурет. Қабырғаға соғылғанға дейін және одан кері қозғалған доптың траекториясын құруға арналған листинг

MathCAD пакетінің көмегімен біз 3-суретте көрсетілген доптың нақты траекторияларын аламыз. Доптың қабырғаға соғылғанға дейінгі траекториясы көк түспен, ал соқтығысқаннан кейінгісі жасыл түспен сызылған. Компьютерлік бейнелеу арқылы алынған доп траекториялары зерттелетін механикалық құбылысқа нақты және дәл талдау жасауға мүмкіндік береді.

MathCAD пакеті құрамындағы "Масштаб" компьютерлік құралының көмегімен біз доптың қабырғаға соқтығысу нүктесіне жақын шағын ауданшаны бөліп аламыз (3-сурет). Ауданшаның масштабын үлкейтеміз (4-сурет). Сонда доптың қабырғамен соқтығысу аймағының көрнекілігі артады.



3-сурет. Компьютерлік эксперимент арқылы алынған доптың траекториясы



4-сурет. Соқтығысу нүктесіне жақын аймақтағы доп траекторияларының үлкейтілген суреті

Компьютерлік бейнелеу арқылы алынған доптың нақты траекториялары мен жуық траекторияларын талдағаннан кейін біз келесі қорытындылар жасаймыз:

1. Доптың кеңістіктегі ұшу траекторияларының жуық суреті және компьютерлік бейнелеу арқылы алынған нақты (дәл) траекториялар арасындағы айырмашылықтар бірден байқалады. Компьютерлік бейнелеу арқылы алынған траекториялар дененің жерге жақын қозғалу заңдылықтарын дәл көрсетеді.

2. Компьютерлік бейнелеу арқылы алынған траекториялардың көмегімен доп қозғалысының келесі кинематикалық параметрлерін үлкен дәлдікпен анықтауға болады: доптың максималды көтерілу нүктесінің координаттары:

$$x_{max} \approx 5,30 \text{ м}; y_{max} \approx 4,17 \text{ м};$$

доптың қабырғаға соқтығысу нүктесінің координаттары:

$$x_{соқ} \approx 6,00 \text{ м}; y_{соқ} \approx 4,12 \text{ м}.$$

Ауырлық күшінің тұрақты өрісіндегі денелердің қозғалыс траекторияларын компьютерлік бейнелеуге мысалдар.

Мысал 1. Доп көкжиекке α бұрышпен лақтырылады. Доптың бастапқы жылдамдығы $v_0 = 20$ м/с. Ауаның кедергісін елемей, доптың қозғалыс траекториясын құру керек. Допты лақтыру бұрыштары: $\alpha = 30, 45, 60$ және 75 градус.

Талдау. Біз компьютерлік бейнелеуді жүзеге асыру үшін MathCAD ортасында бағдарлама жасаймыз. Ол үшін белгілі кинематикалық теңдеулер мен параметрлерді қолданамыз (5-сурет).

$$v_0 := 20 \quad g := 9.81 \quad \alpha_0 := 15 \cdot \text{deg}$$

$$\Delta t := 0.1 \quad n := 3 \quad i := 0..50 \quad \varphi := 15 \cdot \text{deg}$$

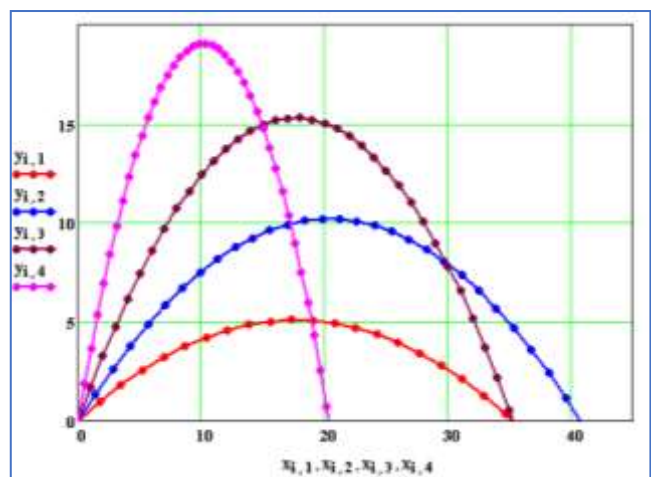
$$\begin{pmatrix} t_0 \\ x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad vx_0 := v_0 \cdot \cos(\alpha_0) \quad vy_0 := v_0 \cdot \sin(\alpha_0)$$

$$k := 0..n \quad \alpha_{k+1} := \alpha_k + \varphi \quad vx_k := vx_0 \quad vy_k := vy_0 + g \cdot t_k$$

$$\begin{pmatrix} t_{k+1} \\ x_{k+1, k+1} \\ y_{k+1, k+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} t_k + \Delta t \\ v_0 \cdot t_k \cdot \cos(\alpha_k + \varphi) \\ v_0 \cdot t_k \cdot \sin(\alpha_k + \varphi) - \frac{g \cdot (t_k)^2}{2} \end{pmatrix}$$

5-сурет. Көкжиекке әр түрлі бұрыштармен лақтырылған доптың траекториясын құруға арналған листинг

6-суретте көкжиекке әр түрлі бұрыштармен лақтырылған доптың траекторияларының компьютерлік бейнелеуі көрсетілген.



6-сурет. Көкжиекке әр түрлі бұрыштармен лақтырылған доптың траекторияларының компьютерлік бейнеленуі

Екі өлшемді кеңістікте доптың ұшуының осы траекторияларын зерттей отырып біз келесі қорытындыларды жасаймыз:

1. Допты көкжиекке 45° бұрышпен лақтырған кезде, доптың түсу қашықтығы максимал болады.

2. 30° және 60° бұрыштармен лақтырылған дененің түсу қашықтықтары бірдей болады.

3. Допты максималды биіктікке көтерілу құбылысы лақтыру бұрышының 0° ден 90° бұрышқа өсу кезінде болады.

Мысал 2. Дене көкжиекке α бұрышпен лақтырылады. Дененің бастапқы жылдамдығы $v_0 = 60$ м/с, ал массасы $m=10$ кг.

а) көкжиекке 45 градус бұрышпен лақтырылған дененің қозғалыс траекториясын салу керек. Ауа кедергісін елемейміз.

б) ауаның тұтқыр үйкелісін ескере отырып, көкжиекке 45 градус бұрышпен лақтырылған дененің қозғалыс траекториясын сызу керек. Аз жылдамдықтағы ауа кедергісінің теңдеуі: $F_{\text{Тр}} = -rv$. Ауаның кедергі коэффициенті $r = 1$ Н·с/м.

Талдау. а) Алдымен Mathcad ортасында бастапқы деректерді жазайық: **$m:=10$; $g:=9.81$; $V_0:=60$; $\alpha:=45 \cdot \frac{\pi}{180}$** . Содан кейін біз бағдарлама жасаймыз (7-сурет).

```

Given
m * (d^2 x1(t) / dt^2) = 0
x1'(0) = V0 cos(alpha)  x1(0) = 0
x1 := Odesolve(t,100,500)  t := 0,0.5..100

Given
m * (d^2 y1(t) / dt^2) + m * g = 0
y1'(0) = V0 sin(alpha)  y1(0) = 0
y1 := Odesolve(t,100,500)  t := 0,0.5..100
    
```

7-сурет. Ауаның кедергісін ескермеген жағдайдағы көкжиекке 45° бұрышпен лақтырылған дененің траекториясын құруға арналған листинг

б) MathCAD ортасында алғашқы берілген шамаларды жазамыз: **$m:=10$; $g:=9.81$; $V_0:=60$; $\alpha:=45 \cdot \frac{\pi}{180}$; $r:=1$** . Дененің траекториясын құру үшін ауаның кедергісін ескере отырып, біз келесі бағдарламаны қолданамыз (8-сурет).

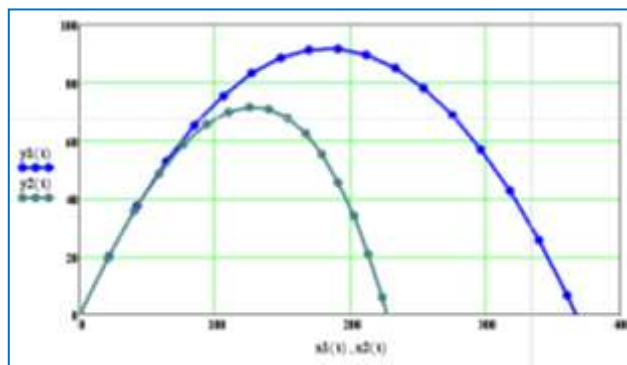
```

Given
m * (d^2 x2(t) / dt^2) + r * (d x2(t) / dt) = 0
x2'(0) = V0 cos(alpha)  x2(0) = 0
x2 := Odesolve(t,100,500)  t := 0,0.5..100

Given
m * (d^2 y2(t) / dt^2) + r * (d y2(t) / dt) + m * g = 0
y2'(0) = V0 sin(alpha)  y2(0) = 0
y2 := Odesolve(t,100,500)  t := 0,0.5..100
    
```

8-сурет. Ауаның кедергісін ескере отырып, дененің көкжиекке 45° бұрышпен лақтырылған жағдайдағы траекториясын құруға арналған листинг

9-суретте 7 және 8-суреттерде көрсетілген бағдарламалардың көмегімен жасалған компьютерлік бейнелеудің нәтижелері көрсетілген. Ауаның кедергісін есепке алмаған және ескерген жағдайларда алынған дененің траекториялары бір-бірінен айтарлықтай өзгеше болады. Бірінші жағдай дененің параболалық қозғалысы деп аталады, яғни доптың траекториясы параболаның графигіне сәйкес келеді. Екінші жағдайдағы қисық ешқандай математикалық функцияның графигі бола алмайды.



9-сурет. Ауаның кедергісін есепке алмаған және ескерген жағдайдағы дене траекториялары

Мысал 3. Баллистикалық пистолет шарикті $v_0=10$ м/с бастапқы жылдамдықпен көкжиекке 45° бұрышпен атады. Екі өлшемді кеңістікте доптың ұшуының имитациялық моделін (анимациясын) жасау керек.

Талдау. 9-суретте Mathcad ортасындағы шағын бағдарлама көрсетілген.

```


$$\alpha := \frac{\pi}{180} \cdot 45 \quad V0 := 10 \quad g := 9.8$$


$$x(t) := V0 \cdot \cos(\alpha) \cdot t \quad y(t) := V0 \cdot \sin(\alpha) \cdot t - \frac{g}{2} \cdot t^2$$


$$t1 := 0.01 \quad t1 := t1 + \text{FRAME} \cdot \frac{1}{50}$$

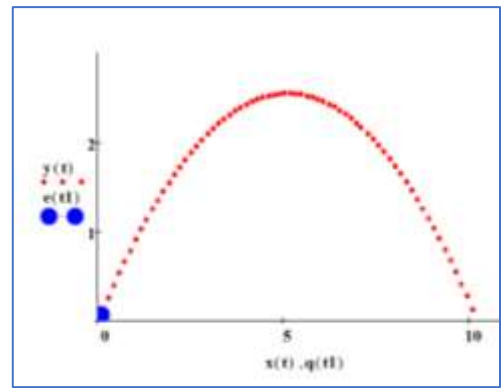

$$q(t1) := V0 \cdot \cos(\alpha) \cdot t1 \quad e(t1) := V0 \cdot \sin(\alpha) \cdot t1 - \frac{g}{2} \cdot t1^2$$


```

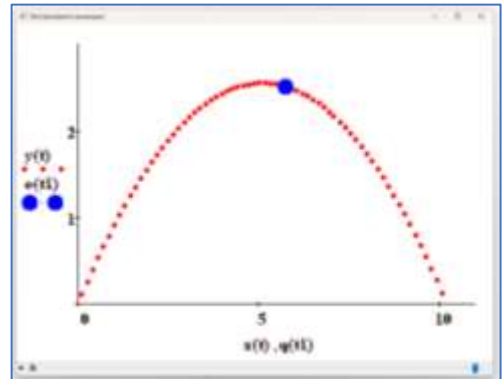
10-сурет. Екі өлшемді кеңістікте доптың ұшуының имитациялық моделін жасауға арналған листинг

Анимация процедурасын жүзеге асырған кезде келесі көздерде берілген нұсқауларды қолдану қажет [10-12]. 11а-суретте екі өлшемді кеңістік бейнеленген. 11ә-суретте доптың ұшу анимациясының «бейнелегіші» көрсетілген.

Осы анимацияны мына сілтеме арқылы көрсетуге болады
https://drive.google.com/file/d/13hoH9CPgBumLhq4vkDWP831xuN4oDzsp/view?usp=drive_link



а)



ә)

11-сурет. Екі өлшемді кеңістіктегі шариктің қозғалысының имитациялық моделі

Қорытынды

Жерге жақын ауырлық күшінің тұрақты өрісіндегі дене қозғалысын зерттеу процесінде компьютерлік бейнелеуді қолдану келесі ғылыми нәтижелерге қол жеткізуге ықпал етеді:

- интерактивті режимде компьютерлік бейнелеу кезінде екі өлшемді кеңістіктегі материалдық нүкте қозғалысының элементтері мен құрамдас бөліктерінің ішкі байланыстары айқын көрінеді;
- компьютерлік бейнелеу арқылы алынған дене қозғалысының траекториясын

аналитикалық әдіспен алынған кинематикаға арналған есептердің шешімі мен жауабын тексеру әдісі ретінде пайдалануға болады;

- анимация немесе имитациялық модельдеу дене қозғалысын бейнелеуді динамикалық режимде жүзеге асырады.

Қаржыландыру

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің ғылым комитеті қаржыландырды, грант № AP23487389.

Әдебиеттер

- 1 Martz C., Van Middelkoop S., Gkigkitzis I., Haranas I., Kotsireas I. Yukawa Potential Orbital Energy: Its Relation to Orbital Mean Motion as well to the Graviton Mediating the Interaction in Celestial Bodies // Hindawi Advances in Mathematical Physics. – 2019. – Vol.2019, Article ID 6765827, 10 p
- 2 McNutt R.L.Jr., Solar System Exploration: A Vision for the Next Hundred Years // IAC-04-IAA.3.8.1.02, 55th Intern. Astronautical Congress, Vancouver, Canada. – 2004.
- 3 Torres-Silva H. Electrodinámica Quiral: Eslabón para la Unificación del Electromagnetismo y la Gravitación //Ingeniare. Revista chilena de ingeniería. – 2008. – Vol. 16 nº especial. – P. 6-23.
- 4 Samokhin A.S. and Samokhina M.A. Optimization of the interplanetary flight to Mars with three-pulse approach to Phobos based on Lagrange principle // Journal of Physics Conference Series. – 2021. – Vol. 1864(1). – Art.No 012130.
- 5 Shane D. Ross. The Interplanetary Transport Network // American Scientist. – 2006. – Vol. 94(3). – P.230.

- 6 Мукушев Б.А. Энергетическая картина гравитационного поля Солнечной системы // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2022. – № 4. – С.59-66.
- 7 Мукушев Б.А. Вычислительные эксперименты по исследованию движения небесных тел // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2023. – № 2. – С.49-58.
- 8 Мукушев Б.А. Движение тел в гравитационном поле // Квант. – 2018. – №9. – С.29-33.
- 9 Роберт И. В. Информационные и коммуникационные технологии в образовании. - М.: Дрофа, 2008. – 312 с.
- 10 Мукушев Б.А. Изучение физических процессов посредством пакета MathCAD // Учебная физика – 2022. - №2. – С.45-50.
- 11 Мукушев Б.А. Пакет прикладных программ Mathcad // Вестник КазАТУ. – 2022. - №2 (113). Ч.2. – С. 197-202.
- 12 Nelson F. Using mathcad to simplify uncertainty computations in a laboratory course // Computer Applications in Engineering Education. – 2014.- Vol.23. - № 2. - P.250-257.

References

- 1 C. Martz, S. Van Middelkoop, I. Gkigkitzis, I. Haranas, I. Kotsireas Hindawi Advances in Mathematical Physics, 2019, 6765827 (2019).
- 2 R.L.Jr. McNutt, Solar System Exploration: A Vision for the Next Hundred Years, IAC-04-IAA.3.8.1.02, 55th Intern. Astronautical Congress, Vancouver, Canada, (2004).
- 3 H. Torres-Silva, Ingeniare. Revista chilena de ingeniería, 16 n° especial, 6-23 (2008).
- 4 A.S. Samokhin and M.A. Samokhina, Journal of Physics Conference Series, 1864(1), 012130 (2021).
- 5 Shane D. Ross, American Scientist, 94(3), 230 (2006).
- 6 B.A. Mukushev, Recent Contributions to Physics, 4, 59-66 (2022). (in Russ.)
- 7 B.A. Mukushev, Recent Contributions to Physics, 2, 49-58 (2023). (in Russ.)
- 8 B.A. Mukushev, Kvant, 9, 29-33 (2018). (in Russ.)
- 9 I.V. Robert. Informacionnye i kommunikacionnye tekhnologii v obrazovanii, (Moscow, Drofa, 2008), 312 p. (in Russ.)
- 10 B.A. Mukushev, Educational physics, 2, 45-50 (2022). (in Russ.)
- 11 B.A. Mukushev, et al, Vestnik ENU (Fizika), 3, 25-34 (2021). (in Russ.)
- 12 F. Nelson, Computer Applications in Engineering Education, 23 (2), 250-257 (2014).

Мақала тарихы:

Түсті – 29.12.2023

Түзетілген түрде түсті – 12.06.2024

Қабылданды – 13.06.2024

Article history:

Received 29 December 2023

Received in revised form 12 June 2024





Accepted 13 June 2024

Автор туралы мәлімет:

Базарбек Мукушев – педагогика ғыл.докт., проф., С. Сейфуллин ат. Қазақ агротехникалық университеті, (Астана қ., Қазақстан, email: mba-55@mail.ru).

Information about author:

Bazarbek Mukushev – Doctor of Pedagogical Sciences, Prof., S. Seifullin Kazakh AgroTechnical University (Astana, Kazakhstan, email: mba-55@mail.ru).

Б.М. Усеинов^{1*} , А.Г. Маркова¹ , А.В. Первиков² , С.А. Сартин¹ ,
М.Б. Шогжанова¹ , Г.У. Сейльбекова¹ 

¹Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева, г.Петропавловск, Казахстан

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г.Томск, Россия

*e-mail: buseinov@gmail.com

ОСОБЕННОСТИ ПРЕПОДАВАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ “НАНОТЕХНОЛОГИИ В ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ” В СЕВЕРО-КАЗАХСТАНСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ ИМЕНИ М.КОЗЫБАЕВА

Нанотехнологии впечатляющими масштабами захватили информационное поле, так или иначе связанное с научной тематикой. В современном мире термин “нанотехнологии” на слуху почти у каждого обывателя, в маркетинговых целях встречаются злоупотребления с отсылкой на эту область. Приведено определение, ограничивающее область применения данного термина. В то же время показаны прорывные возможности с использованием этой междисциплинарной сферы для науки, новейшие выдающиеся исследования как для продвижения цифровизации, так и для познания самого человека. В Северо-Казахстанском университете с 2022 года проводятся занятия по дисциплине “Нанотехнологии в естественно-научных исследованиях” с использованием высокоточного современного оборудования. Поставлена цель раскрыть особенности преподавания этой дисциплины на кафедре Физики. Рассмотрена важность обучения специалистов различных образовательных программ естественно-научного направления этой дисциплине, необходимость применения практических навыков исследования на передовом научном оборудовании: атомно-силовом микроскопе, сканирующем туннельном микроскопе. Приведены результаты сканирования студентами, полученные на лабораторных занятиях. Раскрыты аспекты преподавания этой дисциплины в Северо-Казахстанском университете на кафедре Физики, показана значимость полученных знаний и навыков в становлении будущего конкурентноспособного на рынке труда специалиста.

Ключевые слова: нанотехнологии, естественно-научные исследования, атомно-силовой микроскоп, сканирующий туннельный микроскоп, лабораторная работа, СЗМ-изображение.

Б.М. Усеинов^{1*}, А.Г. Маркова¹, А.В. Первиков², С.А. Сартин¹, М.Б. Шогжанова¹, Г.У. Сейльбекова¹

¹М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Петропавл қ., Қазақстан

²РФА СБ Күш физикасы және материалтану институты, Томск қ., Ресей

*e-mail: buseinov@gmail.com

М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университетінде «Жаратылыстану ғылымдарындағы нанотехнологиялар» пәнін оқыту ерекшеліктері

Нанотехнологиялар ақпараттық өрісті қандай да бір жолмен ғылыми тақырыптарға байланысты әсерлі ауқымда түсірді. Қазіргі заманда «нанотехнология» терминін іс жүзінде әрбір лайман тыңдайды, маркетинг мақсатында осы салаға сілтеме жасай отырып, теріс пайдаланулар орын алады. Бұл терминнің қолданылу аясын шектейтін анықтама келтіріледі. Сонымен қатар, осы пәнаралық саланы ғылым үшін пайдалана отырып, серпінді мүмкіндіктер, цифрландыруды ілгерілету үшін де, адамның өзін білуі үшін де ең соңғы көрнекті зерттеулер көрсетілген. 2022 жылдан бастап Солтүстік Қазақстан университетінде «Жаратылыстану ғылымын зерттеудегі нанотехнологиялар» пәні бойынша жоғары дәлдіктегі заманауи жабдықтарды пайдалана отырып сабақтар өткізілуде. Мақсаты – физика кафедрасында осы пәнді оқытудың ерекшеліктерін ашу. Бұл пән бойынша жаратылыстану ғылымдарының әр түрлі білім беру бағдарламаларының мамандарын даярлаудың маңыздылығы, алдыңғы қатарлы ғылыми жабдықтарға практикалық зерттеу дағдыларын қолдану қажеттілігі қарастырылады: атом күшінің микроскопы, туннельдік микроскопты сканерлеу. Зертханалық сабақтарда алынған оқушылардың сканерлеу нәтижелері келтіріледі. Физика кафедрасы жанындағы Солтүстік Қазақстан университетінде осы пәнді оқыту аспектілері ашылып, еңбек нарығында болашақ

бәсекеге қабілетті маманды қалыптастыруда алған білімдері мен дағдыларының маңыздылығы көрсетілген.

Түйін сөздер: нанотехнологиялар, жаратылыстану ғылымын зерттеу, атом күшінің микроскопы, туннельдік микроскопты сканерлеу, зертханалық жұмыстар, СПМ бейнесі.

B.M. Useinov^{1*}, A.G. Markova¹, A.V. Pervikov², S.A. Sartin¹, M.B. Shogzhanova¹, G.E. Seilbekova¹

¹M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

*e-mail: b.useinov@gmail.com

Features of teaching the discipline "Nanotechnologies in natural sciences" at the M. Kozybayev North Kazakhstan University

Nanotechnology has captured the information field on an impressive scale, which is in one way or another related to scientific topics. In the modern world, the term "nanotechnology" is heard by almost every layman, for marketing purposes there are abuses with reference to this area. A definition is given that restricts the scope of this term. At the same time, breakthrough opportunities with the use of this interdisciplinary field for science, the latest outstanding research both for the promotion of digitalization and for the knowledge of man himself are shown. Since 2022, North Kazakhstan University has been conducting classes in the discipline "Nanotechnology in Natural Science Research" using high-precision modern equipment. The goal is to reveal the features of teaching this discipline at the Department of Physics. The importance of training specialists of various educational programs of the natural sciences in this discipline, the need to apply practical research skills on advanced scientific equipment: atomic force microscope, scanning tunneling microscope are considered. The results of scanning by students obtained in laboratory classes are given. The aspects of teaching this discipline at the North Kazakhstan University at the Department of Physics are revealed, the importance of the knowledge and skills gained in the formation of a future competitive specialist in the labor market is shown.

Key words: nanotechnology, natural science research, atomic force microscope, scanning tunneling microscope, laboratory work, SPM image.

Введение

Нанотехнологии ворвались в жизнь человека, даже если он не подозревает об этом. Направление зреть в "микрокосмос" задал еще в 1959 году Ричард Фейман в своей статье "Plenty of Room at the Bottom" ("Внизу много места") [1]. Закон Мура (наблюдение) задает уменьшение интегральных микросхем, ограничение этим тенденциям создает лишь сама природа: строение вещества [2]. И тем не менее кремневые век сменяется веком "графитовым", уже созданы нанотранзисторы, прорывные вычислительные компьютерные мощности используются для реализации ChatGPT, создания нейросетей и уже с высоких трибун говорят о так называемом "искусственном интеллекте".

Глава "Нанотехнологии и наноматериалы" введена даже в школьный учебник физики 11 класса в Казахстане автором Закировой Н.А. [3]. Впечатляющие открытия в этой области не только делают возможным глобальную цифровизацию, создания "искусственного интеллекта", но и по-новому позволяют взглянуть на самого человека.

Исследования Максима Никитина, опубликованные в журнале Nature Chemistry, привели к изобретению ДНК-компьютера [4]. Автор открыл новый фундаментальный механизм хранения информации в ДНК. Это позволит изучить природу самых разнообразных процессов, начиная от сложных заболеваний, тайн генетики, мгновенной памяти и старения до вопросов возникновения жизни на Земле и ее эволюции, а также улучшить специфичность генной терапии и безопасность ДНК/РНК-вакцин за счет выявления и снижения побочных реакций на препараты во время лечения.

Особенного внимания заслуживает тот факт, что Максим Никитин вел разработки самостоятельно, у статьи только один автор. Будучи физиком по образованию, работа в междисциплинарных областях с применением нанотехнологий позволила совершить научный прорыв, который еще даст свои плоды для человечества. Тем более становится актуальным изучение соответствующей дисциплины студентами СКУ естественно-научного направления. Более того это возможность

приобрести еще одну специальность: оператор сканирующего зондового микроскопа.

Среди множества определений термина нанотехнология, можно выделить определение, приведенное в “Концепции развития в Российской Федерации работ в области нанотехнологий на период до 2010 года” [5]. Согласно этой концепции нанотехнология определяется как совокупность методов и приемов, обеспечивающих возможность контролируемым образом создавать и модифицировать объекты, включающие компоненты с размерами объектов менее 100 нм, хотя бы в одном измерении, и в результате этого получившие принципиально новые качества, позволяющие осуществлять их интеграцию в полноценно функционирующие системы большего масштаба.

Положительный момент этого определения заключается в том, что оно четко задает область ограничения до 100 нм, избегая спекуляций на модном термине.

При очевидной теоретической и практической значимости обозначенной темы в казахстанском информационном поле практически отсутствуют публикации об особенностях преподавания дисциплины “Нанотехнологии в естественнонаучных исследованиях”, особенно реализованный опыт проведения лабораторных занятий по этой дисциплине. Новизна заключается во введении в обучение исследовательского процесса.

Метод исследования

Дисциплина “Нанотехнологии в естественнонаучных исследованиях” состоит из проведения лекционных, лабораторных занятий, а также самостоятельной работы студента совместно с преподавателем.

На лекциях и срап используются инновационные методы обучения: дискуссия, дебаты, case-study- метод конкретных обучающих ситуаций, метод блиц-опроса, метод критического мышления, мини-исследование, метод проектов, метод мозгового штурма,

проблемное обучение, лекция-беседа, лекция-визуализация, лекция-диспут, метод «круглого стола», «студенческая трибуна» и другие.

Особого внимания заслуживают лабораторные работы студентов естественнонаучного направления на сканирующем зондовом микроскопе (далее СЗМ), не имеющего аналогов такого уровня в других университетах Казахстана.

На лабораторных занятиях используется сканирующий зондовый микроскоп Solver NANO (Солвер НАНО СЗМ НАНОЭДЮКАТОР 2) производства компании NT-MDT Spectrum Instruments.

Микроскоп сопровождается руководством по эксплуатации. Кафедра Физики оснащена лабораторными работами на основе этого руководства. Методические указания по типовым расчетам, выполнению расчетно-графических, лабораторных работ находятся непосредственно в лабораторной аудитории.

Обязательно выделяется время на лабораторных занятиях на знакомство с методическими указаниями, с правилами эксплуатации, с правилами безопасности, условиями эксплуатации, так как оборудование дорогое, но несмотря на это все студенты в рамках изучения дисциплины обучаются получать СЗМ изображения. Присутствует обязательное заполнение журнала по технике безопасности. Проводится опрос, срез знаний по правилам эксплуатации. Следует отметить, что особо важные моменты в инструкции сопровождаются знаком “Внимание” и текстом, например: Перед включением контроллера необходимо зафиксировать все разъёмы. Отсоединение разъёмов во время работы может привести к повреждению электронных элементов.

Работа на самом микроскопе осуществляется посредством программного обеспечения: Nova Pх. Программа может быть скопирована в любое удобное место компьютера, но защищена от копирования на внешние носители. Ниже на рисунке 1 представлена панель окон и инструментов программы Nova Pх.



Рисунок 1 – Интерфейс программы Nova Pх

Микроскоп снабжен двумя измерительными головками: АСМ – атомно-силовая микроскопия и СТМ – сканирующая туннельная микроскопия.

Атомно-силовая микроскопия – вид зондовой микроскопии, в основе которой лежит силовое взаимодействие атомов. На расстоянии около одного ангстрема между атомами образца и атомом зонда (кантилевера) возникают силы отталкивания, а на больших расстояниях – силы притяжения. Идея устройства очень проста – кантилевер, перемещаясь относительно поверхности и реагируя на силовое взаимодействие, регистрирует ее рельеф. В сканирующих зондовых микроскопах исследование микрорельефа поверхности и ее локальных свойств проводится с помощью специальным образом приготовленных зондов в виде игл. Рабочая часть таких зондов (острие) имеет размеры порядка десяти нанометров. Характерное расстояние между зондом и поверхностью образцов в зондовых микроскопах по порядку величин составляет 0,1 – 10 нм [6].

Работа туннельного микроскопа основана на явлении протекания туннельного тока между металлической иглой и проводящим образцом. Сканирующая туннельная микроскопия предназначена для исследования свойств поверхностей проводящих материалов с разрешением вплоть до атомарного уровня [7]. Туннельный ток, регистрируемый в процессе сканирования, как утверждает Панфилова Е.В., достаточно мал ($0,5 \text{ пА} \div 50 \text{ нА}$), что дает возможность исследовать образцы с низкой проводимостью, в частности, биологические объекты [8]. Одним из недостатков СТМ является сложность интерпретации полученных результатов, так как изображение поверхности, полученное с использованием СТМ, определяется не только рельефом поверхности, но и различными локальными электрическими характеристиками поверхности. Тем более возникает необходимость не только в обучении получения изображения, но и в обучении интерпретации изображения, получения навыков работы с фильтрами.

Перечень предусмотренных лабораторных работ:

1 Получение первого СЗМ изображения.

2 Обработка и количественный анализ СЗМ изображений.

3 Исследование поверхности твердых тел полуконтактным методом атомно-силовой микроскопии.

4 Артефакты в сканирующей зондовой микроскопии.

5 Изготовление зондов для СЗМ методом электрохимического травления.

6 Исследование поверхности твердых тел методами сканирующей туннельной микроскопии.

7 Зондовая литография.

8 Калибровка сканеров [9].

Лабораторная работа проводится в три этапа, каждый из которых оценивается.

1 Допуск. Подготовительный этап включает проверку теоретической подготовки студента к работе, знание этапов лабораторной работы, а также первичный отчет к лабораторной работе, содержащий основные требования к оформлению: номер, название лабораторной работы, цель, приборы и материалы, ход работы, содержащий ключевые этапы выполнения лабораторной работы.

2 Измерения и отчет. В ходе выполнения лабораторной работы студент в отчете фиксирует ключевые аспекты, цифровые данные, сопровождает необходимыми графиками. А также прилагает скриншоты программного окна, которые помогают в последующем этапе восстановить в памяти некоторые операции.

3 Защита лабораторной работы. Включает в себя опрос по контрольным вопросам, прилагаемым к лабораторной, а также в целом оценка результатов деятельности на лабораторном занятии, проверка достигнутых целей.

Результат исследования

К измерениям допускаются группы по 2-3 человека, для этого учебная группа разбивается на подгруппы. За один академический час в среднем такая подгруппа успевает сделать измерения. То есть на одну работу всей учебной группы уходит две недели. Вне работы за микроскопом, подгруппы изучают теоретический материал, получают допуски к лабораторным работам, защищают работы в устном опросе преподавателем, что требует достаточных временных затрат, поэтому уплотнение подгрупп не допустимо ни по санитарным требованиям к эксплуатации микроскопа, ни по эффективному обучению студентов, чтобы каждый студент успел несколько раз за семестр сделать измерения на таком высококлассном оборудовании. Это безусловно передовой опыт, позволяющий выпускнику стать конкурентноспособным специалистом в современном мире.

Представленные ниже изображения (рисунки 2 и 3) получены зондом, самостоятельно

изготовленным студентами на практических занятиях с помощью метода электрохимического травления. Зонд для СТМ головки

изготавливается из вольфрамовой проволоки, толщина на конце достигает одного атома.



Рисунок 2 – Изготовление зонда с помощью электрохимического травления

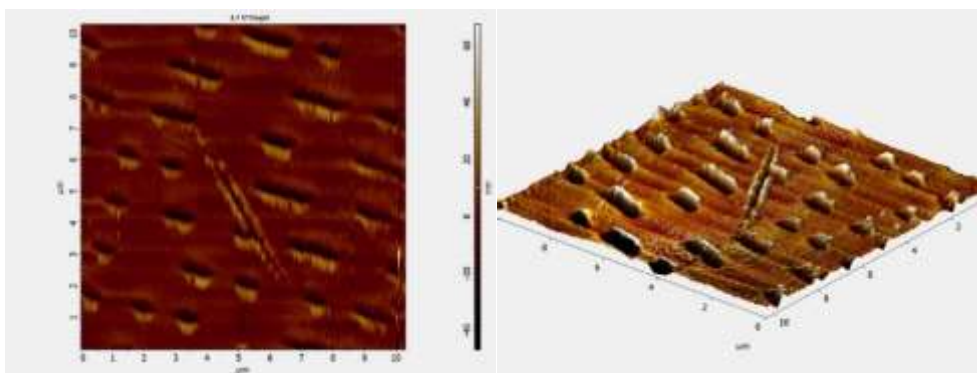


Рисунок 3– Изображение DVD-диска полученное с помощью СТМ измерительной головки в 2D и 3D представлении

После приобретения навыков работы с фильтрами в одной из лабораторных работ

представленная калибровочная решетка (рисунок 4) приобретает вид, представленный на рисунке 5.

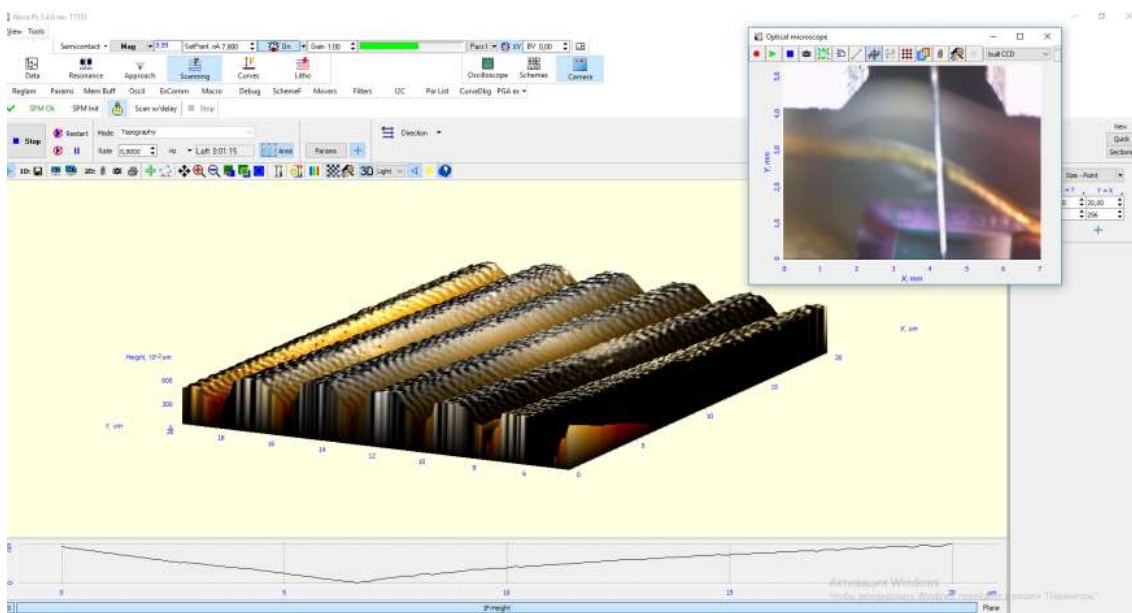


Рисунок 4 – Сканирование. 3D представление изображения калибровочной решетки

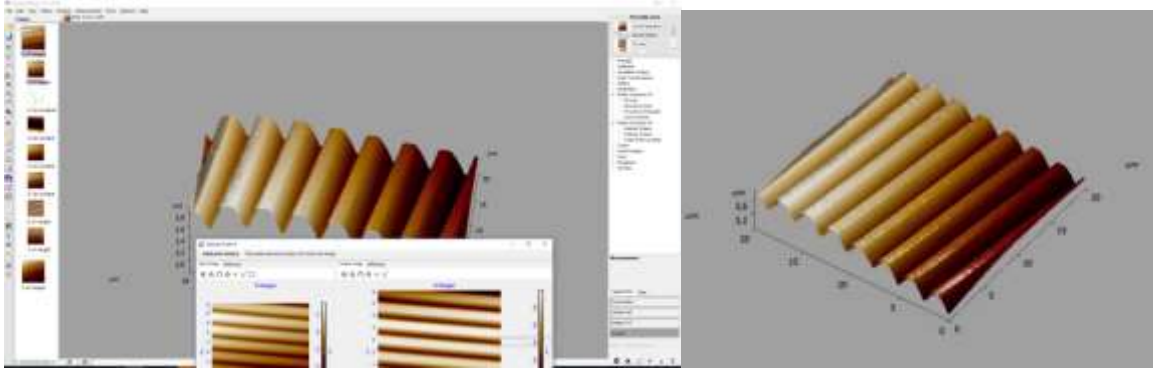


Рисунок 5 - Работа с фильтрами в программе Nova Pх

По сути, мы не видим микро и нано мир, но мы передаем его ощущение. И высотное представление передается цветом, который тоже можно менять (рисунок 6).

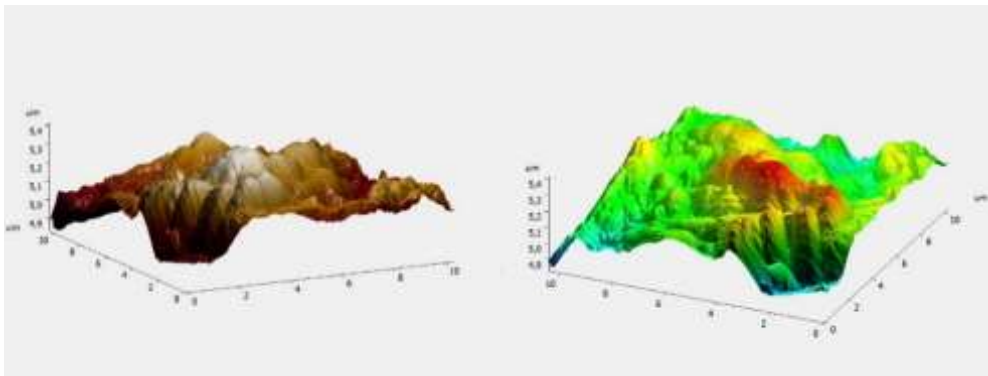


Рисунок 6 – Различное цветовое представление высоты в программе Nova Pх

На лабораторных занятиях проводится сканирование различных поверхностей: DVD-диск, камень, битум, бумага, пленка, кровь, различные металлические образцы после электролиза, стекло, сушеные листья (рисунок 7).

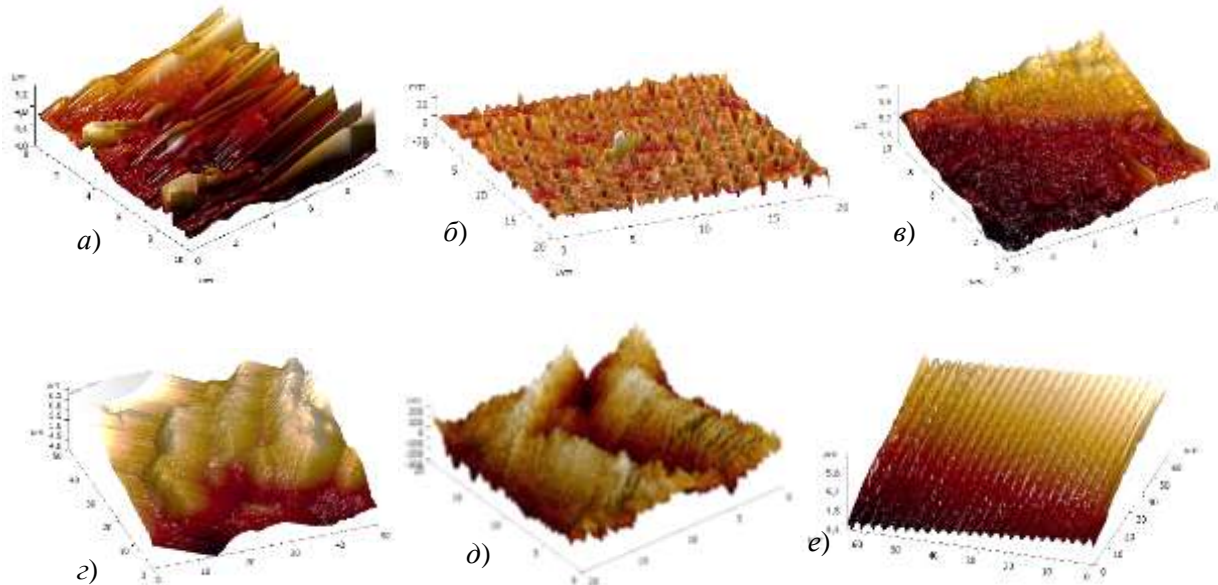


Рисунок 7 – Примеры сканированных поверхностей: а) камень, б) диск, в) поверхность после электролиза, г) бумага, д) кровь сухая, е) калибровочная решетка

Сканирующий зондовый микроскоп Solver NANO позволяет развивать научное взаимодействие с другими лабораториями. В рамках межкафедрального сотрудничества ведется активная работа, например, изображение на рисунке 8 получено в рамках исследования кафедрой "Химия и химические технологии" битумной поверхности при отрицательной температуре.

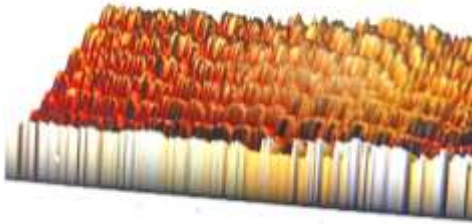


Рисунок 8 – Поверхность битума при отрицательной температуре в 3D представлении

Сотрудничество в области нанотехнологий продолжается и на республиканском уровне с Астанинским филиалом института ядерной физики министерства энергетики РК, а также выходит на международный уровень, позволяя развивать обмен знаниями и практическим опытом познания микромира.

Данные атомно-силовой микроскопии имеют важное значение при проведении научных исследований. Так, выпускник кафедры Физика СКУ имени М. Козыбаева Александр Первиков, научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН совместно с коллегами, используют данные атомно-силовой микроскопии для анализа поверхности металлических проволок, применяемых для получения наночастиц металлов и сплавов [10].

Использование современных технологических устройств в образовательном процессе повышает эффективности учебного процесса, который не стоит на месте, постоянно модифицируется. При высоком классе точности современных оптических микроскопов, есть непреодолимые ограничения, наложенные самой природой. В сканирующих зондовых микроскопах нет явления дифракции, которая наблюдается, когда размеры препятствия соизмеримы с длиной волны. Механизм получения информации о поверхности в корне иной, упомянутый выше. А значит мы можем "посмотреть" вирусы, молекулы днк, вещество на атомарном уровне. Зондовая микроскопия имеет следующие возможности: изучение электрохимического поведения твердых или

жидких образцов, исследование диэлектрических свойств, оценка распределения поверхностного потенциала, изучение локальных магнитных свойств, получение информации о распределении заряда в молекуле, получение трехмерных изображений, литография, измерение электрической проводимости одной клетки, также введение лекарства в одну клетку, позволяет оценивать латеральные силы, отображение сопротивления растекания, имеет возможность оценивать пьезоотклик доменов под действием электрического поля, детектирование крупных частиц в различных сплавах и многие другие возможности (рисунки 9-10).

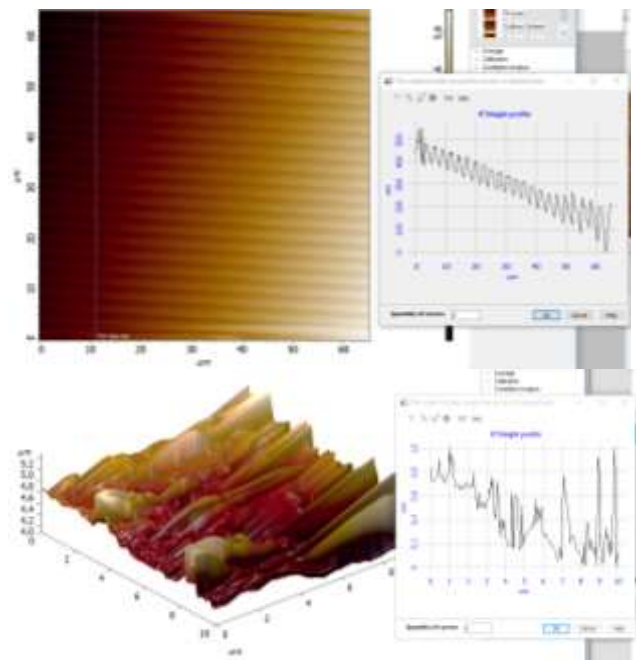


Рисунок 9 – Изучение сечения поверхности

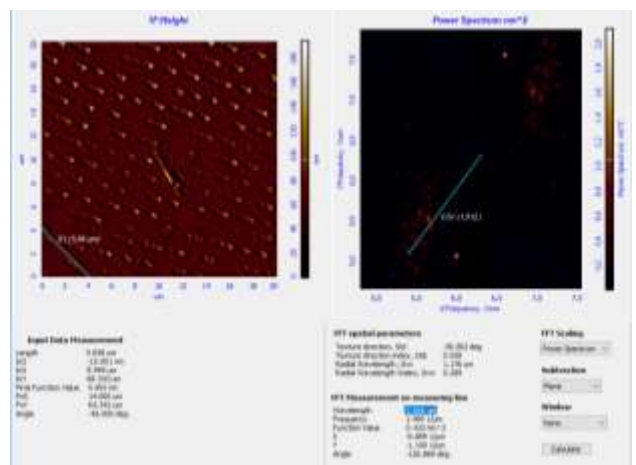


Рисунок 10 – Определение периодичности методом преобразования Фурье

Выводы

Приобретение опыта работы с таким передовым оборудованием можно рекомендовать для технических, технологических, даже медицинских специальностей.

Будущему специалисту естественнонаучного направления владение даже теоретическими знаниями в области нанотехнологий и

сканирующей зондовой микроскопии дает конкурентное преимущество на рынке труда, полученные же практические навыки лабораторных исследований могут стать серьезным фундаментом для становления казахстанского ученого, владеющего передовым инструментом познания мира.

Литература

- 1 Feynman R.P. The Wonders That Await a Micro-Microscope //The Saturday Review. –1960. – Vol.2. -P.45-47.
- 2 By Peter J. Denning, Ted G. Lewis Exponential Laws of Computing Growth // Communications of the ACM - January 2017 - Vol. 60 №. 1 - P.54-65
- 3 Закирова Н.А. Аширов Р.Р. Физика. Учебник для 11 класса. – Нур-Султан: Арман-ПВ, 2020. – 336 с.
- 4 Nikitin M.P. Non-complementary strand commutation as a fundamental alternative for information processing by DNA and gene regulation // Nature Chemistry. – 2023. – Vol.15. – P.70-82.
- 5 Концепция развития в РФ работ в области нанотехнологии на период до 2010 г. — М., 2004.
- 6 Нагорнов Ю.С. Изучение биологических объектов методами атомно-силовой микроскопии - Тольятти: ТГУ, 2012. - 67 с.
- 7 Миронов В. Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Учебное пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. РАН. Институт физики микроструктур. Нижний Новгород, 2004. – 114 с.
- 8 Панфилова Е.В., Сырицкий А.Б., Доброносова А.А. Применение методов сканирующей зондовой микроскопии в исследовании опаловых наноструктур // Инженерный журнал: наука и инновации. – 2018. – №1. – С.1-11.
- 9 Круглов А.В., Филатов Д.О., Гущина Ю.Ю., Звонкова М.Б., Голубок А.О., Фельштын М.Л., Горбенко О.М., Сапожников И.Д. Сканирующая зондовая микроскопия. – 2018.
- 10 Pervikov A., Lerner M., Krukovskii K. Structural characteristics of copper nanoparticles produced by the electric explosion of wires with different structures of metal grains // Current Applied Physics. – 2017. – Vol.17, Issue 2. – P.201-206.

References

- 1 R.P. Feynman, The Saturday Review, April 2, 45-47 (1960).
- 2 By Peter J. Denning and Ted G. Lewis, Communications of the ACM, №. 1, 54-65 (2017).
- 3 N.A. Zakirova, R.R. Ashirov, Fizika. Uchebnik dlya 11 klassa. (Nur-Sultan: Arman-PV, 2020), 336 p. (in Russ.)
- 4 P.M. Nikitin, Nature Chemistry 15, 70-82 (2023).
- 5 Kontseptsiya razvitiya v RF rabot v oblasti nanotekhnologii na period do 2010 g. M. (2004) (in Russ.)
- 6 Yu.S. Nagornov, Izucheniye biologicheskikh ob"yektov metodami atomno-silovoy mikroskopii (Tol'yatti: TGU, 2012), 67 p. (in Russ.)
- 7 V.L. Mironov, Osnovy skaniruyushchey zondovoy mikroskopii. Uchebnoye posobiye dlya studentov starshikh kursov vysshikh uchebnykh zavedeni. (RAN. Institut fiziki mikrostruktur. Nizhniy Novgorod, 2004) 114 p. (in Russ.)
- 8 Ye.V. Panfilova, A.B. Syritskiy and A.A. Dobronosova, Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii 1, 1-11 (2018) (in Russ.)
- 9 A.V. Kruglov, D.O. Filatov, Yu.Yu. Gushchina, M.B. Zvonkova, A.O. Golubok, M.L. Fel'shtyn, O.M. Gorbenko and I.D. Sapozhnikov, Skaniruyushchaya zondovaya mikroskopiya, (2018) (in Russ.)
- 10 A. Pervikov, M. Lerner and K. Krukovskii, Current Applied Physics 17 (2), 201-206 (2017).

История статьи:

Поступила 01 марта 2024 г.
Принята 12 июня 2024 г.

Article history:

Received 01 March 2024
Accepted 12 June 2024

Информация об авторах:

1. **Бейбут Усеинов** (автор корреспондент) – канд.физ.-мат.наук, проф., Северо-Казахстанский

Information about authors:

1. **Beybut Useinov** (corresponding author) – Cand. of Phys. and Math. Sc., Prof., M. Kozybayev North

университет им. М. Козыбаева (Казахстан, г. Петропавловск, email: buseinov@gmail.com)

2. **Агния Маркова** – Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева (Казахстан, г. Петропавловск, email: agni.m@bk.ru)

3. **Александр Первиков** – канд.тех.наук, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (Россия, г.Томск, email: Pervikov@list.ru)

4. **Сергей Сартин** – канд.физ.-мат.наук, доцент, Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева (Казахстан, г. Петропавловск, email: Sartin78@mail.ru)

5. **Меруерт Шогжанова** – Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева (Казахстан, г. Петропавловск, email: bulakmik@mail.ru)

6. **Гульмира Сейльбекова** – Северо-Казахстанский университет им. М. Козыбаева (Казахстан, г. Петропавловск, email: tanina.g@bk.ru)

Kazakhstan University (Petropavlovsk, Kazakhstan, email: buseinov@gmail.com).

2. **Agniya Markova** – M. Kozybayev North Kazakhstan University (Petropavlovsk, Kazakhstan, email: agni.m@bk.ru).

3. **Alexander Pervikov** – Cand. of Tech. Sc., Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS (Tomsk, Russia, email: Pervikov@list.ru).

4. **Sergey Sartin** – Cand. of Phys. and Math. Sc., M. Kozybayev North Kazakhstan University (Petropavlovsk, Kazakhstan, email: Sartin78@mail.ru).

5. **Meruert Shogzhanova** – M. Kozybayev North Kazakhstan University (Petropavlovsk, Kazakhstan, email: bulakmik@mail.ru).

6. **Gulmira Seilbekova** – M. Kozybayev North Kazakhstan University (Petropavlovsk, Kazakhstan, email: tanina.g@bk.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>Bayakhmetov O.S., Sakhiyev S.K.</i>		
R-matrix calculations of the deuterium-tritium fusion cross section based on precise coulomb functions 4		
<i>Азнабаев Д.Т., Бекбаев А.К., Коробов В.И.</i>		
Молекулярный ион водорода H_2^+ . Магнитные M1 переходы 13		
<i>Alimgazinova N.Sh., Sharipbay N.A., Kyzgarina M.T., Manapbayeva A.B., Turekhanova K.M., Omar A.Zh., Demessinova A.M., Alibek A.A.</i>		
Study of the N126 dust bubble in the infrared wavelength range 19		
2-Бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Нұралы А.Т., Сейсембаева М.М.</i>		
Сутегі атомының байланысқан күйлерінің козу процесін зерттеу 27		
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
<i>Калкозова Ж.К., Мигунова А.А., Серикканов А.С., Абдуллин Х.А.</i>		
Простой метод синтеза наночастиц оксида кобальта для формирования электродов суперконденсатора с высокой удельной емкостью 34		
<i>Турлыбекулы К., Айткулов М.Т., Бугыбай Ж.Т., Аскербеков С.К., Шаймерденов А.А.</i>		
Эксперимент по низкотемпературному облучению порошка фторированных детонационных наноалмазов в реакторе ВВР-К: условия и первичная характеристика образцов 42		
<i>Amirbekova G.S., Tolepov Zh.K., Guseinov N., Kuanyshbekov T.</i>		
The influence of the temperature of a mixture of lead nitrate and sodium hydroxide solutions on the growth peculiarities of lead sulfide films 50		
4 Бөлім Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы	Section 4 Thermophysics and Theoretical Heat Engineering	Раздел 4 Теплофизика и теоретическая теплотехника
<i>Moldabekova M.S., Mukamedenkyz V., Asembayeva M.K., Tolepbergen A.G.</i>		
Investigation of the diffusion of two gases equally diluted with different ballast gases 57		
5-Бөлім Жоғары мектепте физика пәнін оқыту әдістемесі	Section 5 Methods of teaching high school physics	Раздел 5 Методика преподавания физики в высшей школе
<i>Мукушев Б.А.</i>		
Жердің тұрақты гравитациялық өрісіндегі дененің қозғалысын компьютерлік бейнелеу 62		
<i>Усеинов Б.М., Маркова А.Г., Первигов А.В., Сартин С.А., Шогжанова М.Б., Сейльбекова Г.У.</i>		
Особенности преподавания дисциплины “Нанотехнологии в естественнонаучных исследованиях” в Северо-Казахстанском университете имени М.Козыбаева 69		