

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

ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ

ВЕСТНИК

СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ

RECENT CONTRIBUTIONS
TO PHYSICS

2(93)2025

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

ХАБАРШЫ

Физика сериясы

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЪ-ФАРАБИ

ВЕСТНИК

Серия физическая

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

№2 (93)

Алматы
«Қазақ университеті»
2025



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №2(93) маусым

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 РЕДАКТОР

Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: physicskaz@gmail.com

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

Бейсен Н.Ә., ф.-м.ғ.к., профессор – ғылыми редактор (Қазақстан)

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

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

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

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

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

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

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

Буфенди Лайфа, профессор (Франция)

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

Ишицука Эцуо, доктор (Жапония)

Лунарска Элина, профессор (Польша)

Сафарик П., доктор (Чехия)

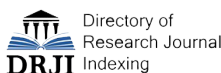
Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

Кеведо Эрнандо, профессор (Мексика)

ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

Дьячков В.В., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

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



Жоба менеджері

Гүлмира Шаккозова

Телефон: +7 701 724 2911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

ИБ №15883

Пішімі 60x84/8. Көлемі 8,16 б.т. Тапсырыс №1046.

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

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

**Теориялық физика.
Ядро және элементар бөлшектер физикасы.
Астрофизика**

**Theoretical Physics.
Nuclear and Elementary Particle Physics.
Astrophysics**

**Теоретическая физика.
Физика ядра и элементарных частиц.
Астрофизика**

С.У. Шарипов*  , И.Ф. Спивак-Лавров 

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

*e-mail: sharipov_samat@mail.ru

МАГНИТТІК ЭКРАНДАРЫ БАР ЕКІ ӨЛШЕМДІ МАГНИТТІК ПРИЗМАДАҒЫ ЗАРЯДТАЛҒАН БӨЛШЕКТЕР ШОҒЫНЫҢ ДИНАМИКАСЫН ЗЕРТТЕУ

Бұл шолу мақаласында магниттік экрандары бар екі өлшемді магниттік призманың скалярлық магниттік потенциалының аналитикалық өрнектері жан-жақта сипатталған. Екі өлшемді магниттік призмалардың физикалық және аспаптық сипаттамалары өлшемсіз Ньютон теңдеулерін, сондай-ақ призманың магнит өрісін сипаттайтын нақты аналитикалық өрнектерді қолдану арқылы сандық түрде есептелді. Бұл тәсілмен магнит өрісінің индукциясы скалярлық потенциалдың градиенті арқылы есептеледі, бұл оның кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде таралуын дәл және айқын анықтауға мүмкіндік береді. Электрмагниттік өрістердегі зарядталған бөлшектердің қозғалысын сипаттау үшін өлшемсіз дифференциалдық теңдеулерді қолдану сандық есептеулер процесін едәуір жеңілдетеді және модельдеу тиімділігін арттырады, өйткені мұндай теңдеулер қажетсіз параметрлерден арылуға және нәтижелерді әмбебап етуге мүмкіндік береді. Бұл, өз кезегінде, есептеулердің жалпы тиімділігін арттырады, оларды нақты өлшем бірліктеріне және эксперименттік жағдайларға аз тәуелді етеді. Жүргізілген есептеулер нәтижесінде телескопиялық фокустау режимінде жұмыс істейтін магниттік экрандары бар екі өлшемді магниттік призмалардың корпускулалы-оптикалық қасиеттері туралы сапалаы әрі сандық мәліметтер алынды, бұл нәтижелер осы саладағы ғылыми зерттеулер мен қолдаңбалы технологияларды одан әрі дамыту үшін маңызды.

Түйін сөздер: екі өлшемді магниттік призма, шеттік өріс, магнит өрісі, шоқтарды фокустау, зарядталған бөлшектер динамикасы, магниттік экрандар.

S.U. Sharipov*, I.F. Spivak-Lavrov

K.Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

*e-mail: sharipov_samat@mail.ru

Investigation of the dynamics of charged particle beams in two-dimensional magnetic prisms with magnetic screens

This review article describes analytical expressions for the scalar magnetic potential of a two-dimensional magnetic prism with magnetic screens. The physical and instrumental characteristics of two-dimensional magnetic prisms are calculated using dimensionless Newton's equations, as well as analytical expressions describing the magnetic field of the prism itself. With this approach, the magnetic field induction is calculated through the gradient of the scalar potential, which makes it possible to accurately determine its distribution at different points in space. The use of dimensionless differential equations to describe the motion of charged particles in electromagnetic fields greatly simplifies the process of numerical calculations, since such equations allow you to get rid of unnecessary parameters and make the results more universal. This, in turn, increases the efficiency of calculations, making them less dependent on specific units of measurement and experimental conditions. As a result of the calculations, data were obtained on the corpuscular-optical properties of two-dimensional magnetic prisms with magnetic screens operating in the telescopic focusing mode, which is important for further research and technology development in this field.

Keywords: two-dimensional magnetic prism, edge field, magnetic field, beam focusing, dynamics of charged particles, magnetic screens.

С.У. Шарипов*, И.Ф. Спивак-Лавров

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

*e-mail: sharipov_samat@mail.ru

Исследование динамики пучков заряженных частиц в двумерных магнитных призмах с магнитными экранами

В данной обзорной статье описываются аналитические выражения для скалярного магнитного потенциала двумерной магнитной призмы с магнитными экранами. Физические и инструментальные характеристики двумерных магнитных призм рассчитываются с использованием безразмерных уравнений Ньютона, а также аналитических выражений, описывающих магнитное поле самой призмы. При таком подходе индукция магнитного поля вычисляется через градиент скалярного потенциала, что позволяет точно определить его распределение в разных точках пространства. Использование безразмерных дифференциальных уравнений для описания движения заряженных частиц в электромагнитных полях значительно упрощает процесс численных расчетов, поскольку такие уравнения позволяют избавиться от ненужных параметров и сделать результаты более универсальными. Это, в свою очередь, повышает эффективность расчетов, делая их менее зависимыми от конкретных единиц измерения и условий эксперимента. В результате проведенных расчетов были получены данные о корпускулярно-оптических свойствах двумерных магнитных призм с магнитными экранами, работающих в режиме телескопической фокусировки, что важно для дальнейших исследований и развития технологий в этой области.

Ключевые слова: двумерная магнитная призма, краевое поле, магнитное поле, фокусировка пучков, динамика заряженных частиц, магнитные экраны.

Кіріспе

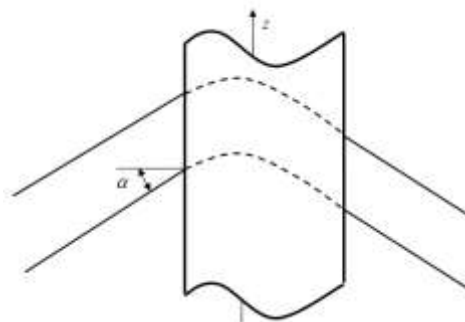
Екі өлшемді магниттік призмалар призмалық магниттік масса және бета-спектрометрлерде ауытқушы призмалар жүйесі ретінде қолданылады. Мұндай спектрометрлер схемасы бойынша призмалық жарық-оптикалық спектрометрлерге ұқсас. Олар коллиматорлық және фокустық линзалармен [1-5] жабдықталған. Магниттік призманың масса мен энергия бойынша бұрыштық дисперсиялары бірдей және D' тең, призмалық анализатордың сызықтық дисперсиясы келесі формуламен анықталады:

$$D = D'f_2, \quad (1)$$

мұндағы f_2 - фокустаушы линзаның фокустық қашықтығы. Сондықтан призмалық құрылғының сызықтық дисперсиясын линзаның f_2 фокустық қашықтығын ұлғайту арқылы призманың сызықтық өлшемдерін үлкейтпей-ақ арттыруға болады.

Екі өлшемді магниттік призмалар магнит өрісінің антисимметриялық жазықтығы болып табылатын ортаңғы жазықтыққа ие. Бұл жағдайда екі өлшемді магниттік призманың магниттік полюстері декарттық осьтердің бірінің бағыты бойынша едәуір созылған, айталық z осы болсын (1-сурет).

Сондықтан зарядталған бөлшектер шоғының қозғалыс аймағында призманың магнит өрісі тек басқа екі декарттық координатқа байланысты болады. Призманың ортаңғы жазықтығында қозғалатын зарядталған бөлшектердің параллель жазық біртекті шоғы призмадан ауытқиды және бөлшектер траекториясының сәйкестігіне байланысты одан параллель шығады. Осылайша, екі өлшемді магниттік призмаларда масса немесе энергия бойынша бөлінгеннен кейін ортаңғы жазықтықта қозғалатын зарядталған бөлшектердің жазық параллель біртекті шоғының параллельдігі сақталады. Көлемдік шоқтардың параллельділігін сақтау телескопиялық шартты орындау арқылы қамтамасыз етіледі.



1-сурет – Екі өлшемді магниттік призма

Екі өлшемді магниттік призмалар көптеген жұмыстарда [6-10] қарастырылады. Алайда, осы жұмыстардың барлығында екі өлшемді магниттік призманың магнит өрісі векторлық потенциалды қолдана отырып сипатталады, ал магниттің шеттік өрістерінің әсері ескерілмейді.

Екі өлшемді магниттік призманың шеттік өрістері ISIOS стандартты бағдарламасының көмегімен [11] жұмыста орындалды. Дегенмен,

Зерттеу әдісі

[12-16] жұмыстарда жерге тұйықталған екі экраны бар дефлекторлық пластиналардың скалярлық потенциалы үшін аналитикалық өрнектер алынды. Ұқсас өрнектерді магниттік

магниттік призманың шеттік өрісінің бұл сипаттамасы толық емес. $\vec{B}$ магнит индукция векторының роторы нөлге тең аймақта призманың $\vec{B}$ магнит өрісінің индукциясын ω скаляр магниттік потенциалдың градиенті ретінде анықтауға болады:

$$\vec{B} = -\text{grad } \omega \equiv -\vec{\nabla} \omega. \quad (2)$$

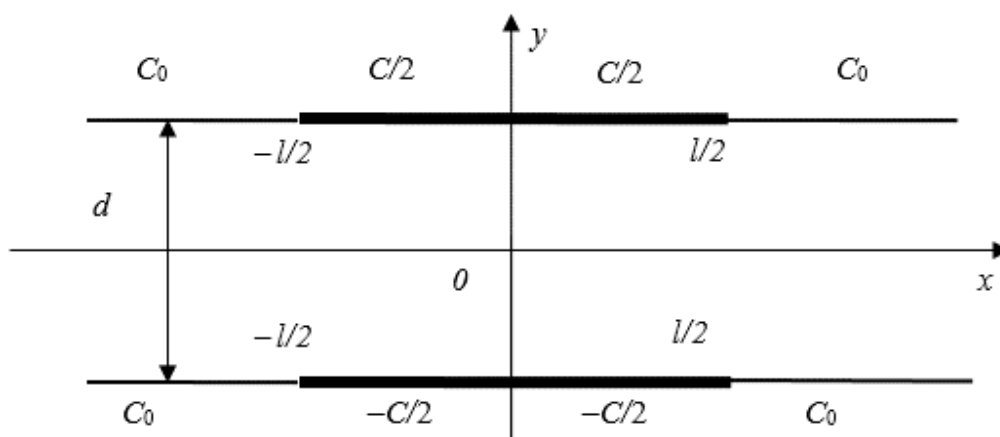
экрандары бар екі өлшемді магниттік призманың скалярлық магниттік потенциалы $\omega(x, y)$ үшін де қолдануға болады:

$$\omega(x, y) = \frac{C}{2\pi} \left(\arctg \frac{(a^2 - 1) \cos \frac{\pi y}{d}}{2a \cosh \frac{\pi x}{d} - (a^2 + 1) \sin \frac{\pi y}{d}} - \arctg \frac{(a^2 - 1) \cos \frac{\pi y}{d}}{2a \cosh \frac{\pi x}{d} + (a^2 + 1) \sin \frac{\pi y}{d}} \right) \quad (3)$$

мұндағы $\pm \frac{C}{2}$ – магниттік полюстердің потенциалы, d – магниттік полюстердің арақашықтығы және a параметрі мынаған тең:

$$a = \exp \left(\frac{\pi l}{2d} \right) \quad (4)$$

мұндағы l – x осы бағытындағы магниттік полюстердің ені, z осы бағытында полюстер жеткілікті созылған деп есептеледі, бұл зарядталған бөлшектердің қозғалыс аймағындағы өрістің екі өлшемділігін қамтамасыз етеді. Экрандары бар екі өлшемді магниттік призма және сәйкесінше декарттық координаттар жүйесі 2-суретте схемалық түрде көрсетілген.



2-сурет – Магниттік экрандары бар D2 магниттік призманың схемалық суреті

2-суретте $C_0 = 0$ потенциалы бар магниттік экрандар жіңішке сызықтармен, ал магниттік полюстер қалың сызықтармен бейнеленген.

(3) дифференциалдау арқылы $\vec{B}(x, y)$ магнит индукция векторының құраушыларын [17, 18] табамыз:

$$B_x = -\frac{\partial \omega}{\partial x} = -\frac{C}{2d} \left[\frac{2a(a^2-1)\cos\left(\frac{\pi y}{d}\right)\sinh\left(\frac{\pi x}{d}\right)}{4a^2 \cosh^2 \frac{\pi}{d}x - 4a(a^2+1)\cosh\left(\frac{\pi}{d}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{d}y\right) - 2a^2 \cos \frac{2\pi}{d}y + a^4 + 1} - \frac{2a(a^2-1)\cos\left(\frac{\pi y}{d}\right)\sinh\left(\frac{\pi x}{d}\right)}{4a^2 \cosh^2 \frac{\pi}{d}x + 4a(a^2+1)\cosh\left(\frac{\pi}{d}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{d}y\right) - 2a^2 \cos \frac{2\pi}{d}y + a^4 + 1} \right] \quad (5)$$

$$B_y = -\frac{\partial \omega}{\partial y} = \frac{C}{2d} \left[\frac{2a(a^2-1)\operatorname{ch}\left(\frac{\pi x}{d}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{d}\right) - (a^4-1)}{4a^2 \operatorname{ch}^2 \frac{\pi}{d}x - 4a(a^2+1)\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{d}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{d}y\right) - 2a^2 \cos \frac{2\pi}{d}y + a^4 + 1} - \frac{2a(a^2-1)\operatorname{ch}\left(\frac{\pi x}{d}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{d}\right) + a^4 - 1}{4a^2 \operatorname{ch}^2 \frac{\pi}{d}x + 4a(a^2+1)\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{d}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{d}y\right) - 2a^2 \cos \frac{2\pi}{d}y + a^4 + 1} \right]. \quad (6)$$

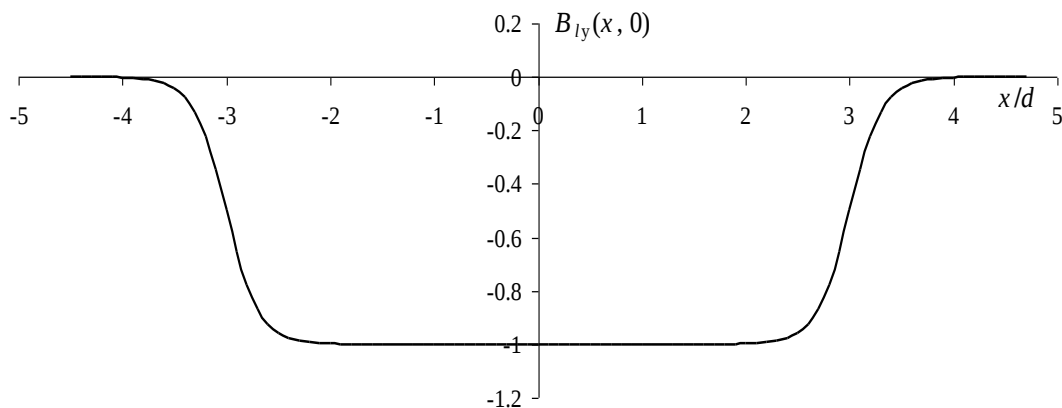
Призманың ортаңғы жазықтығындағы магниттік индукцияның таралуы мына өрнекпен анықталады:

$$B_y(x,0) = B_y(-x,0) = -\frac{C}{d} \frac{(a^4-1)}{4a^2 \cosh^2 \frac{\pi}{d}x + (a^2-1)^2} \quad (7)$$

Айталық, B_0 – магниттің центрінде $x = y = 0$ кездегі магнит өрісі индукциясы шамасының сипаттамалық мәні болсын, оны, мысалы, Холл есептегішімен өлшеуге болады. (7) сәйкес алсақ:

$$|B_y(0,0)| = B_0 = \frac{C}{d} \frac{a^2-1}{a^2+1}. \quad (8)$$

Онда $\vec{\nabla}\omega/B_0 = \vec{B}_l$ өрнегі $\vec{B}_l$ өлшемсіз магнит өрісінің индукциясын анықтайды. 3-суретте (7) формула бойынша есептелген $l/d = 6$ болатын призма үшін екі өлшемді магниттік призманың ортаңғы жазықтығындағы өлшемсіз магнит өрісі индукциясының таралуы көрсетілген. Бұл суретте екі өлшемді магниттік призманың ортаңғы жазықтығындағы шеттік өрістердің таралуы көрсетілген, ордината осі бойынша $B_{ly}(x,0)$ шамасы салынған.



3-сурет – $l/d = 6$ болатын екі өлшемді магниттік призманың ортаңғы жазықтығында өлшемсіз магнит өрісі индукциясының таралуы

Зерттеу нәтижелері мен талқылау

Екі өлшемді магниттік призмалардағы зарядталған бөлшектердің траекториясын есептеу үшін электр өрісі болмаған кездегі келесі Ньютонның өлшемсіз теңдеулерін қолданамыз:

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -\frac{K \dot{z} B_{ly}}{\sqrt{(1+\varepsilon)(1+\gamma)}}, \\ \ddot{y} &= \frac{K \dot{z} B_{lx}}{\sqrt{(1+\varepsilon)(1+\gamma)}}, \\ \ddot{z} &= \frac{K (\dot{x} B_{ly} - \dot{y} B_{lx})}{\sqrt{(1+\varepsilon)(1+\gamma)}}.\end{aligned}\quad (9)$$

мұндағы нүктелер τ өлшемсіз уақыт бойынша алынған өлшемсіз координаттардың туындыларын білдіреді, K – сандық мәні есептеу процесі кезінде таңдалатын өлшемсіз тұрақты. Симметриялы осьтік траекториясы бар призмаларды қарастырумен шектеліміз. Ол үшін магниттің ортасында $y = 0$ және $x = 0$ болғанда $\dot{y} = \dot{z} = 0$ мәні болсын, ал $\dot{x} = \sqrt{2}$. Онда (8) сәйкес K тұрақтысының мәні келесі өрнекпен анықталады:

$$K = \frac{\sqrt{2} d}{R_0}. \quad (10)$$

Шынында да, $\gamma = \varepsilon = 0$ болатын шоқтың осьтік траекториясы xz призма жазықтығында жатқан жазық қисық болады, оның қисықтық радиусы үшін келесі белгілі формуланы жазуға болады:

$$R = \frac{(\dot{x}^2 + \dot{z}^2)^{\frac{3}{2}}}{|\dot{x}\ddot{z} - \ddot{x}\dot{z}|}. \quad (11)$$

Осы формулаға $\dot{y} = \dot{z} = 0$ және $\dot{x} = \sqrt{2}$ қоя отырып, келесі формуланы аламыз:

$$R_0 = \frac{\dot{x}^2}{\ddot{z}}. \quad (12)$$

(9)-теңдеудегі үшінші теңдеуді пайдаланып және магниттің центрінде $B_{ly}(0,0)=1$ екенін ескере отырып, келесі теңдеуді жазамыз:

$$\ddot{z} = \dot{x} K, \quad (13)$$

(13) мәнін (12) орнына қойып, өлшемсіз бірліктерді аламыз:

$$\frac{R_0}{d} = \frac{\dot{x}}{K} = \frac{\sqrt{2}}{K}. \quad (14)$$

Тұрақты магнит өрісінде зарядталған бөлшектің қозғалысы кезінде жылдамдық модулі өзгермейтінін ескеру қажет, сондықтан келесі қатынас орындалады:

$$\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} = \sqrt{2}. \quad (15)$$

Бұл жағдайда магниттің ортасындағы "орталық" бөлшектің жылдамдығы энергияның сақталу заңына сәйкес келетін формуламен анықталады:

$$v_0 = \sqrt{2} \frac{d}{\tau_0} = \sqrt{\frac{2eV_0}{m_c}}. \quad (16)$$

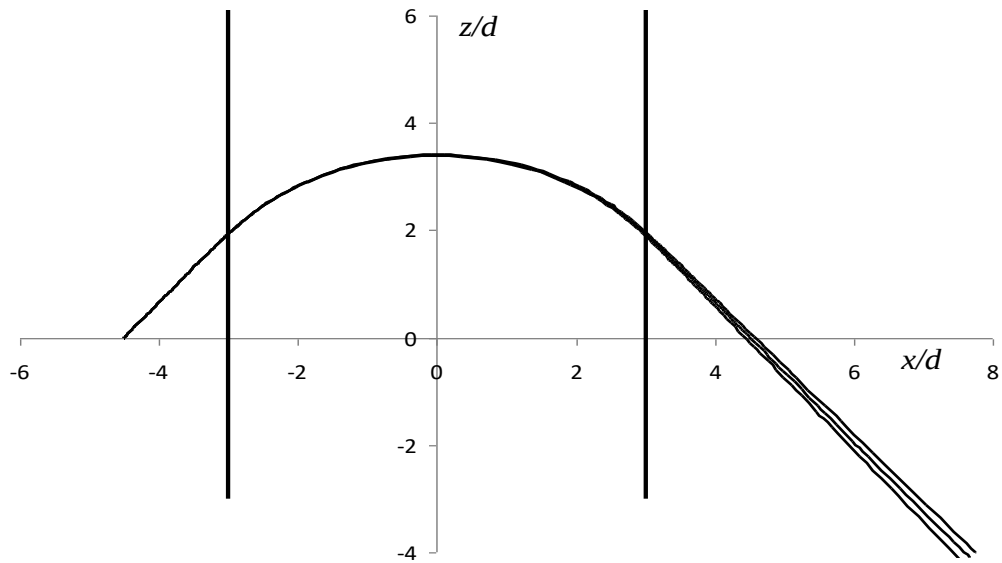
$l/d = 6$ болатын призма үшін бөлшектердің траекторияларын сандық есептеу нәтижелері 4 және 5-суреттерде көрсетілген. 4-суретте магниттік полюстердің шекаралары, сондай-ақ $\gamma = 0$ және $\gamma = \pm 0,01$ болатын үш масса үшін призманың ортаңғы жазықтығындағы бөлшектердің траекториясының проекциялары көрсетілген. Бөлшектердің магниттік полюстердің шекарасына түсу бұрышы $\alpha = 52,502^\circ$.

Магниттің центріндегі траекторияның қисықтық радиусы d бірлігінде $R_0/d = 3,7813$ -ке тең, бұл призманың телескопиялық сипатын қамтамасыз етеді. Бөлшектердің траекториясының ху жазықтығындағы проекциясы 4-суретте көрсетілген. Мұнда бөлшектер призмаға көлбеу кірген кезде бөлшектер магниттің ортасында сызықтық фокус түзіп, ортаңғы жазықтыққа қарай фокусталады [19]. Бұл жағдайда призманың телескопиялық сипаты қамтамасыз етіледі, ал призмаға кіретін параллель көлемді шоқтар одан шыққан кезде де параллель болып қалады.

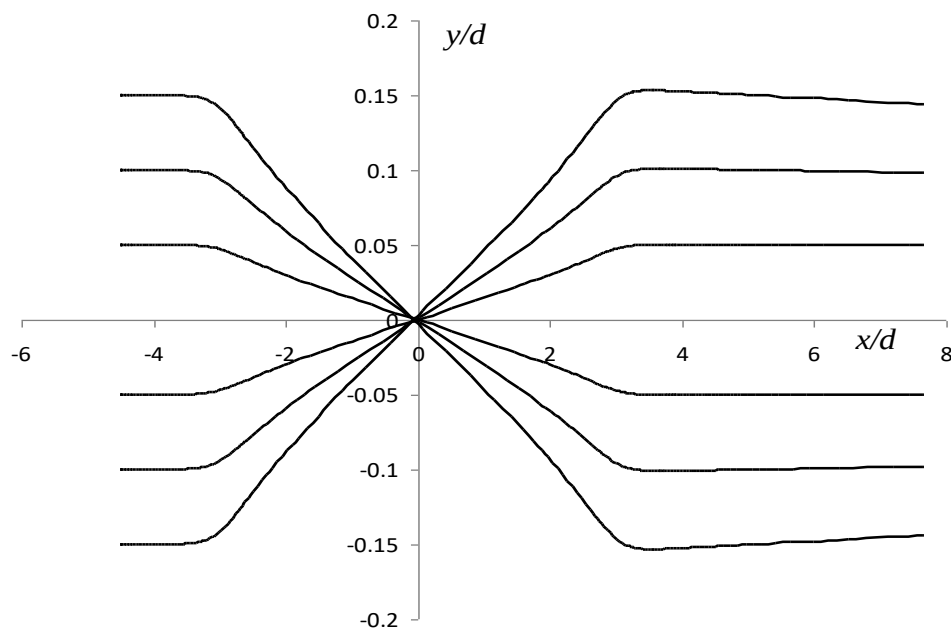
Суреттен телескопиялық шарты ортаңғы жазықтықтан $\pm 0,15d$ ауытқу кезінде де жақсы орындалатынын көруге болады. Масса бойынша призманың бұрыштық дисперсиясы $D'_m \cong \operatorname{tg} \alpha = 1,3$, ол есептеу нәтижелерімен және [20, 21] деректерімен жақсы сәйкес келеді. $\gamma = \pm 0,01$ массаның салыстыр-малы айырмашылығында бөлшектердің бұрыш-тық алшақтығы

$$\Delta \alpha = D'_m \gamma = \pm 0,013 \text{ рад} \quad (17)$$

яғни, 4-суретте байқауға болатын бір градустан сәл аз.



4-сурет – $l/d = 6$ болатын призманың ортаңғы жазықтығындағы бөлшектер траекториясының проекциялары



5-сурет – $l/d = 6$ болатын призма үшін xy жазықтығындағы бөлшектер траекториясының проекциясы

Әр түрлі l/d қатынастары бар екі өлшемді магниттік призмаларды есептеу нәтижелері төмендегі 1-кестеде көрсетілген. Жоғарыда көрсетілген мәліметтерден барлық призмалардың масса мен энергиясы бойынша екі өлшемді магниттік призмалардың бұрыштық дисперсиясы шамамен бірдей және l/d қатынасына тәуелді емес екенін көруге болады [22-25].

Енді алынған нәтижелердің әмбебаптығын көрсетейік. Негізгі нәтиже магниттің центріндегі осьтік траекторияның қисықтық радиусы болып

табылады. $l/d = 6$ кездегі призма үшін қатынас: $R_0/d \approx 3,7813$.

$$R_0 = \frac{\sqrt{2m_c |e V_0|}}{|e| B_0} \quad (18)$$

(18) формуласынан талданатын массаның шамасы келесі өрнек арқылы анықталатыны шығады:

$$m_c = \frac{(eB_0)^2 \left(\frac{R_0}{d}\right)^2 d^2}{2eV_0}. \quad (19)$$

(19)-формуласын қолдана отырып, талданатын массаны есептейміз. Мысалы, $B_0 = 1$ Тл, $eV_0 = 4$ кэВ, полюсаралық саңылаудың шамасын $d = 0,01$ м, массаның атомдық бірлігін $m_0 = 1,6605 \cdot 10^{-27}$ кг қолдана отырып, келесі теңдікті аламыз:

$$\frac{m_c}{m_0} = \frac{(1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 1)^2 \cdot (3,7813)^2 \cdot 0,01^2}{2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \cdot 10^3 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27}} = 68,97. \quad (20)$$

1-кесте – Екі өлшемді магниттік призмаларды есептеу нәтижелері

l/d	K	R_0/d	α , рад	α , градус	D'
4	0,5700	2,4811	0,9375	53,717	1,362
6	0,3738	3,7833	0,9163	52,502	1,303
8	0,2780	5,0871	0,9048	51,841	1,273
10	0,2214	6,3876	0,8991	51,515	1,268
12	0,1830	7,7279	0,8889	50,932	1,232
16	0,1364	10,3681	0,8813	50,497	1,213
20	0,1088	12,9983	0,8778	50,294	1,204
30	0,0722	19,5875	0,8723	49,978	1,191

Қорытынды

Екі өлшемді магниттік призмалардың физикалық және аспаптық сипаттамалары Ньютонның өлшемсіз теңдеулерін және призманың магнит өрісін сипаттайтын аналитикалық өрнектерді қолдану арқылы есептеледі. Бұл жағдайда призманың магнит өрісінің индукциясы скалярлық потенциалдың градиенті ретінде есептеледі. Электромагниттік өрістердегі зарядталған бөлшектердің қозғалысын сипаттау үшін өлшемсіз дифференциалдық теңдеулерді қолдану сандық есептеулерді жүргізуді жеңілдетеді және алынған есептеу нәтижелерін әмбебап етеді, яғни маңызды емес параметрлерді алып тастауға мүмкіндік береді. Телескопиялық фокустау режимінде магниттік экрандары бар екі өлшемді магниттік призмалардың корпускулары-оптикалық қасиеттері есептелді.

Алғыс

Жұмыс ҚР ҒЖБМ ҒК ЖТН АР23486969 «Өткізгіш дөңгелек цилиндр негізінде антирезонанстық мультипольдік жүйелерді әзірлеу және модельдеу» ғылыми жобасының гранттық қаржыландыруымен орындалды.

References

1. J. Chen, J. Yang, J. Liu, J. Liu, C. Sun, X. Li, J. Cui, *Appl. Opt.* **57**, 34, F (2018). <https://doi.org/10.1364/AO.57.0000F8>
2. A. Davila, B. Saucedo-Orozco, M. A. Meneses, C. Frausto-Reyes, *Opt. Eng.* **72**, 7, 1080–1087 (2018). <https://doi.org/10.1177/0003702818763820>
3. V.M. Kelman, E.M. Yakushev, *Zh. Tekh. Fiz.* **37**, 12, 2121–2136 (1967). (In Russ.)
4. J. Ximen, *Adv. Imaging Electron Phys.* **226**, 189–273 (2023). <https://doi.org/10.1016/bs.aiep.2023.03.001>
5. V.M. Kelman, L.M. Nazarenko, E. M. Yakushev, *Zh. Tekh. Fiz.* **42**, 5, 963–968 (1972). (In Russ.)
6. E.M. Yakushev, *Zh. Tekh. Fiz.* **46**, 8, 1700–1706 (1976). (In Russ.)
7. V.M. Kelman, S.P. Karetskaia, L.V. Fedulina, E.M. Yakushev, *Elektronno-opticheskie elementy prizmennyykh spektrometrov zariazhennykh chastits*, Nauka KazSSR, Alma-Ata, 232 p. (1979). (In Russ.)
8. V.M. Kelman, I.R. Rodnikova, L.S. Sekunova, *Staticheskie mass-spektrometry*, Nauka KazSSR, Alma-Ata, 264 p. (1983). (In Russ.)
9. L.N. Gall, A.S. Antonov, N.R. Gall, E.M. Yakushev, L.M. Nazarenko, A.A. Semenov, *Tech. Phys. Lett.* **44**, 7, 646–649 (2018). <https://doi.org/10.1134/S1063785018070209>
10. M.I. Yavor, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., A* **337**, 16–28, (1993). [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(93\)91133-8](https://doi.org/10.1016/0168-9002(93)91133-8)
11. M.I. Yavor, A. S. Berdnikov, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., A* **363**, 1–2, 416–422 (1995).
12. I.F. Spivak-Lavrov, S.U. Sharipov, B. O. Sarsenbaev, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., A* **1051**, 168161 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2023.168161>
13. I.F. Spivak-Lavrov, S. U. Sharipov, *AIP Conf. Proc.* **2467**, 060039 (2022). <https://doi.org/10.1063/12.0010068>
14. I.F. Spivak-Lavrov, A. A. Nurmukhanova, T. Zh. Shugaeva, *Bull. Karaganda Univ., Phys. Ser.* **29**, 1(113), 99–105 (2024). <https://doi.org/10.31489/2024ph1/99-105>
15. I.F. Spivak-Lavrov, D. B. Dzhetkergenov, S. U. Sharipov, *Vestn. Aktobe Reg. Univ. K. Zhubanova* **4**(58) (2019). (In Russ.)
16. E.M. Metodiev, K. L. Huang, Y. K. Semertzidis, W. M. Morse, *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **17**, 074002 (2014). <https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.17.074002>

17. I.F. Spivak-Lavrov, T. Zh. Shugaeva, T. S. Kalimatov, *Int. J. Mass Spectrom.* **444**, 116180 (2019).
<https://doi.org/10.1016/j.ijms.2019.116180>
18. R.J. Moerland, I. G. C. Weppelman, M. W. H. Garming, P. Kruit, J. P. Hoogenboom, *Opt. Express* **24**, 24760 (2016).
19. S.P. Karetskaia, V. M. Kelman, A. G. Mit', E. M. Yakushev, *Pis'ma Zh. Tekh. Fiz.* **16**, 8, 69–73 (1990). (In Russ.)
20. M. Ishihara, Y. Kammei, H. Matsuda, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., A* **363**, 1–2, 440–444 (1995).
21. E.I. Konovalova, L. V. Yablokova, *Chislennye metody matematicheskogo analiza: uchebnoe posobie*, Samara Univ. Publ., 149 p. (2022). (In Russ.)
22. B.P. Demidovich, I. A. Maron, E. Z. Shuvalova, *Chislennye metody analiza*, 5th ed., Lan', 400 p. (2022). (In Russ.)
23. L.G. Glikman, I.F. Spivak-Lavrov, *Pis'ma Zh. Tekh. Fiz.* **16**, 13, 26–29 (1990). (In Russ.)
24. I.F. Spivak-Lavrov, T.Zh. Shugaeva, *Pribory i tekhnika ehksperimenta* **1**, 132–135 (2021). (In Russ.)
25. V.M. Kelman, L.M. Nazarenko, E.M. Yakushev, *Pribory i tekhnika ehksperimenta* **5**, 118–121 (1971). (In Russ.)

Мақала тарихы:

Түсті – 10.12.2024

Қабылданды – 20.05.2025

Article history:

Received 12 December 2024

Accepted 20 May 2025

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Самат Уримбасарович Шарипов** (автор корреспондент) – аға оқытушы, Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. e-mail: sharipov_samat@mail.ru

2. **Игорь Феликсович Спивак-Лавров** – физ.мат.ғыл.докт., проф. Қ.Жұбанов ат. Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе қ., Қазақстан. e-mail: spivakif@rambler.ru

Information about authors:

1. **Samat Sharipov** (corresponding author) – senior lecturer, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan. e-mail: sharipov_samat@mail.ru

2. **Igor Spivak-Lavrov** – Dr. Phys. Math. Sci., Prof., K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan. e-mail: spivakif@rambler.ru

FTAMP 29.05.23

<https://doi.org/10.26577/RCPH20259322>С.А. Жауғашева , Г.Г. Сайдуллаева* , Е.С. Бақтыгереева 

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

*e-mail: saydullaeva.goziyal@kaznu.kz

ТЕТРАКВАРК МЕЗОННЫҢ БАЙЛАНЫСҚАН КҮЙДІҢ ҚАСИЕТТЕРІН СИПАТТАЙТЫН РЕЛЯТИВИСТІК КВАРКТЫҚ МОДЕЛІ

Қазіргі заманғы ядролық және жоғары энергия физикасында адрондардың ішкі құрылымын түсіндіру маңызды мәселелердің бірі болып табылады. Соңғы жылдары зерттеліп келе жатқан экзотикалық адрондардың бірі — $X(3872)$ мезоны. Бұл бөлшек алғаш рет 2003 жылы Belle тәжірибесінде табылған және қазіргі күнге дейін оның табиғаты туралы нақты тұжырым қалыптаспаған. Қазіргі таңда ең қызықты сұрақтардың бірі — $X(3872)$ -мезонды түсіндіру мәселесі. Ол $D^0\bar{D}^{0*}$ байланысқан молекула ретінде, не болмаса дикварктардың байланысқан күйі болып табылатын тетракварк ретінде қарастырылады. $X(3872)$ мезонының қасиеттеріне қатысты Belle, BaBar, CDF және $D\bar{D}$ коллаборациялары арқылы алынған эксперименттік және теориялық зерттеу нәтижелері қысқаша көрсетілді. Біздің жұмыста $X(3872)$ -мезонды тетракварк ретінде қарастырып оның ыдырау ендері есептелді. Адрондардың оларды құрайтын кварктармен тиімді әрекеттесуін сипаттайтын релятивистік лагранжиандар қарастырылды. Кванттық өріс теориясы аясында байланысқан күйлерді сипаттауда тиімді құрал болып табылатын байланыстылық шартының анықтамасы берілді. Физикалық үдерістер амплитудаларында кварктардың пайда болуына сәйкес келетін кез келген табалдырықтық ерекшеліктердің болмауын қамтамасыз ететін инфракызыл конфайнмент ұғымы енгізілді. $\rho(\omega)$ және D аралық күйлер арқылы жүретін $X \rightarrow J/\psi + 2\pi(3\pi)$ және $X \rightarrow D^0 + \bar{D}^{0*} + \pi^0$ ыдыраулардың ені есептелді. $X(3872)$ мезонының өлшемін сипаттайтын параметрдің ақылға қонымды мәндерінде теориялық есептеулер эксперименттік деректермен сәйкес келетіні анықталды. Бұл анализ кварктардың конфайнментін ескеретін релятивистік конституенттік кварктік модель шеңберінде жүргізілді. Зерттеу нәтижелері $X(3872)$ мезонының ішкі құрылымын тереңірек түсінуге және көпкварктік жүйелерді сипаттауға арналған болашақ зерттеулерге негіз бола алады.

Түйін сөздер: тетракварк, мезон, кварк, релятивистік үлгі, матрицалық элемент.

S.A. Zhaugasheva, G.G. Saidullaeva*, E.S. Baktygereeva

Al-Farabi University of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: saydullaeva.goziyal@kaznu.kz

Relativistic quark model for describing the bound state properties of a tetraquark meson

In modern nuclear and high-energy physics, the explanation of the internal structure of hadrons is one of the most important problems. One of the exotic hadrons studied in recent years is the $X(3872)$ meson. This particle was first discovered in the Belle experiment in 2003 and still has no clear idea of its nature. One of the most interesting issues for today's day- $X(3872)$ - this is the problem of interpreting the Meson. It is considered as a molecule associated with unsaturated energy, as a tetraquark, which is associated with the existence of dikvarkov. The experimental and theoretical studies of the $X(3872)$ meson property, which were obtained in the collaborations of Belle, BaBar, CDF and $D\bar{D}$, are briefly described. In our work, we considered the $X(3872)$ meson as a tetraquark and calculated the decay width It has been established that the $X(3872)$ meson is not a diquark molecule, but is precisely a tetraquark structure. Covariant Lagrangians describing the effective interaction of hadrons with their constituent quarks are discussed. A definition of

the connectivity condition is given, which is an effective tool for describing bound states in the framework of quantum field theory. The concept of infrared confinement is introduced, which ensures the absence of any threshold singularities corresponding to the birth of quarks in the amplitudes of physical processes. The widths of the decays are calculated: $X \rightarrow J/\psi + 2\pi(3\pi)$ going through the intermediate states $\rho(\omega)$. For reasonable values of the parameter that characterizes the size of the $X(3872)$ meson, agreement with experimental data was found. This analysis was carried out within the framework of the relativistic model of constituent quarks, taking into account their confinement. The results of the study can become the basis for a deeper understanding of the internal structure of meson $X(3872)$ and future research on the description of multi-quark systems.

Keywords: tetraquark, meson, quark, relativistic model, matrix element.

С.А. Жаугашева, Г.Г. Сайдуллаева*, Е.С. Бактыгереева

Казахский национальный университет, Алматы, Казахстан

*e-mail: saydullaeva.goziyal@kaznu.kz

Релятивистская кварковая модель для описания свойств связанного состояния тетракваркового мезона

В современной ядерной физике и физике высоких энергий объяснение внутренней структуры адронов является одной из самых важных проблем. Одним из экзотических адронов, изучаемых в последние годы, является $X(3872)$ -мезон. Эта частица была впервые обнаружена в эксперименте Belle в 2003 году и до настоящего времени не имеет четкого представления о ее природе. Один из самых интересных вопросов на сегодняшний день – $X(3872)$ это проблема интерпретации мезона. Он рассматривается либо как сильно связанная молекула с несколькими энергиями связи, либо как тетракварк, который является связанным состоянием дикварков. Коротко изложены экспериментальные и теоретические исследования свойства $X(3872)$ мезона, которые получены в коллаборациях Belle, BaBar, CDF и $D\Phi$. В нашей работе мы рассматривали $X(3872)$ мезон как тетракварк и вычислили ширину распада. Обсуждены ковариантные лагранжианы, описывающие эффективное взаимодействие адронов с их составляющими кварками. Дано определение условия связности, являющегося эффективным инструментом для описания связанных состояний в рамках квантовой теории поля. Введено понятие инфракрасного конфайнмента, обеспечивающего отсутствие любых пороговых сингулярностей, соответствующих рождению кварков, в амплитудах физических процессов. Вычислены ширины распадов: $X \rightarrow J/\psi + 2\pi(3\pi)$, идущие через промежуточные состояния $\rho(\omega)$. Для разумных значений параметра Λ_X , который характеризует размер $X(3872)$ -мезона, было найдено согласие с экспериментальными данными. Данный анализ был проведен в рамках релятивистской модели конституэнтных кварков с учётом их конфайнмента. Результаты исследования могут стать основой для более глубокого понимания внутренней структуры мезона $X(3872)$ и будущих исследований по описанию многокварковых систем.

Ключевые слова: тетракварк, мезон, кварк, релятивистская модель, матричный элемент.

Кіріспе

Қазіргі уақытта Әлемнің халықаралық ірі ғылыми орталықтарында адрондардың құрылымы, қалыптасуы және өзара әрекеттесуі қарқынды зерттелуде. Қарапайым кварк-антикварк және үш кварктық сызбасына сәйкес келмейтін экзотикалық адрондар ерекше қызығушылық тудырады.

Соңғы онжылдықтарда жоғары энергиялар физикасында бірқатар таңғаларлық жаңалықтар орын алды. Соның бірі – 2003 жылы Жапониядағы КЕКВ үдеткіші негізіндегі Belle тәжірибесінде анықталған жаңа бөлшек – $X(3872)$. Бұл бөлшектер XYZ деген атауға ие болды. Алғашқыда ол кәдімгі мезон тәрізді көрінгенімен,

тереңірек зерттеулер бұл бөлшектің қарапайым кварк-антикварк жұбынан тұрмайтынын көрсетті. Бұл - экзотикалық күй.

$X(3872)$ – бұл өте тар резонанс, $B^+ \rightarrow K^+ \pi^+ \pi^- J/\psi$ реакциясы кезінде 2003 жылы Belle бірлескен жұмысымен [1] ашылды. Бұл резонанс $\pi^+ \pi^- J/\psi$ түріне ыдырайды және $m_X = 3872.0 \pm 0.6(\text{stat}) \pm 0.5(\text{syst})$ МэВ массасына ие болады, ол D және D^* мезондар шегіне жақын: $M_{D^0} + M_{D^{*0}} = 3871.81 \pm 0.25 \text{ МэВ} / \text{МэВ}$ [2]. Оның ені 90% сенімділікпен 2.3 МэВ-тен аспайды – бұл өте аз, яғни бөлшек салыстырмалы түрде ұзақ өмір сүреді. Бұл күйді көп ұзамай BaBar [3] пен $p\bar{p}$ -соқтығысу коллобарациясы арқылы CDF [4] және $D\bar{D}$ [5] тәжірибелеріндегі театрондағы Ферми зертханасында расталды.

Қазіргі кезге дейін жасалған ең нақты масса өлшеу болып $M_X = 3871.61 \pm 0.16 \pm 0.19$ МэВ табылады [6,7]. [4]-жұмысында келтірілген орташа масса мәні

$$M_X = 3871.61 \pm 0.22 \text{ МэВ} \quad (1)$$

Belle [8] және BaBar [9] коллобарациялары жүргізген бақылаулар нәтижесінде $X(3872)$ бөлшегінің $X(3872) \rightarrow J/\psi \gamma$ күйіне ыдырауы расталды. Сонымен қатар, CDF [10] эксперименті аясында жүргізілген бұрыштық талдаулар бұл бөлшектің кванттық сандары $J^{PC}=1^{++}$ немесе 2^{++} болуы мүмкін екенін көрсетті.

Кейінірек, Belle және BaBar [11, 12] коллобарациялармен бірге оның ыдырау арна-лары мен бұрыштық корреляцияларын зерттеп, $X(3872)$ -нің

Зерттеу әдісі

Релятивистік байланысқан күйдің қасиеттерін сипаттайтын модель

Экзотикалық мезондардың негізгі қасиеттерін сипаттау үшін көптеген теориялық еңбектер берілген. Осы зерттеулердің нәтижесінде $X(3872)$ мезонның $J^{PC}=1^{++}$ кванттық сандары және $[cq]_{S=0}[\bar{c}\bar{q}]_{S=1} + [cq]_{S=1}[\bar{c}\bar{q}]_{S=0}$, $q=u,d$ симметриялы спиннің таралуы бар төрт кваркты күй екендігі көрсетілді.

Қазіргі таңда көпкварктік жүйелерді, соның ішінде экзотикалық мезондарды сипаттайтын бірыңғай теориялық түсінік қалыптаспаған. Бұл бағыттағы басты мәселелердің бірі – адрон мен оның құрамдас кварктары арасындағы өзара әрекеттесу тұрақтысын анықтау. Мұндай жүйелерді зерттеуде бастапқы теориялық негіз ретінде релятивистік-инвариантты Лагранжиан қолданы-

құрылымының тағы да экзотикалық екендігін растады. Монте-Карло модельдеуі эксперименттік деректерді салыстыру үшін кеңінен қолданылды. Бұл әдіс $X(3872)$ -нің тиімді массасын және оның ыдырау арналарының таралуын талдау үшін маңызды болды. Монте-Карло модельдеуі нәтижелері көрсеткендей [13], орбитальды моменттің бір бірлігін қосу арқылы деректерді нақтырақ түсіндіруге болады. Бұл бөлшектің теріс P паритетке ие екенін [14] дәлелдейтін маңызды фактор болды.

Қазіргі таңда ең қызықты сұрақтардың бірі – $X(3872)$ -мезонды түсіндіру мәселесі. Ол не байланыс энергиясы бірнеше

$$M_X - (M_{D^{*0}} - M_{D^0}) = -0.30 \pm 0.40 \text{ МэВ}$$

болатын күшті байланысқан молекула ретінде, не болмаса дикварктардың байланысқан күйі болып табылатын тетракварк ретінде қарастырылады. Біздің жұмыста $X(3872)$ -мезонды тетракварк ретінде қарастырып оның ыдырау ендері есептелді.

ЛНСб ынтымақтастығы экзотикалық мезондарды зерттеуде маңызды нәтижелерді жариялауды жалғастыруда. Бұл зерттеулерде ерекше орын алатын бөлшек — $X(3872)$ мезоны. 2003 жылы Belle экспериментінде ашылғаннан бері, $X(3872)$ мезоны ғалымдар арасында үлкен қызығушылық тудырды және оның табиғатын түсіну бойынша пікірталастар әлі де жалғасуда. Осы уақытқа дейін бұл бөлшек көптеген экзотикалық бөлшектермен салыстырғанда ерекше және күрделі табиғатқа ие екендігі анықталды.

лады, ол адрон мен кварк арасындағы байланыс механизмін сипаттайды.

Бұл сипаттаманы Саламның [15] жұмысындағы дейтрон қасиеттерінің сипаттамасымен тұжырымдаймыз. Кварктық модельде адрондардың қасиеттерін сипаттау үшін бұл әдіс сәтті [16] қолданылады. Локалды емес кварктық модельде қарапайым физикалық бөлшектер – адрондар $SU(3)$ топтық жүйеге бағынады, экспоненциалды бақыланатын массалары бар және кәдімгі Дирак, Клейн-Гардон және басқа теңдеулерге сәйкес келетін стандартты кванттық өрістермен сипатталады деп саналады.

Адрондар (бариондар мен мезондар) байланысқан кварк күйлері деп қабылдануы мүмкін. Байланыстылық шарты бұл – адрон өрісінің ренормализация тұрақтысы, оның құрам-

дас бөліктерімен өзара әрекеттесу нәтижесінде пайда болған, нөлге тең болуы керек дегенді білдіреді [15], яғни

$$Z_H = 0, \quad (2)$$

мұнда Z_H – адронның толқындық функциясының ренормализация тұрақтысы көрсетілген.

Ең қарапайым скалярлық (псевдоскалярлық) спинсіз өріс жағдайында бұл шарт келесі түрде жазылады:

$$Z_H = 1 - \Pi(m^2) = 0, \quad (3)$$

мұндағы $\Pi(m^2)$ – адрондың массалық операторының туындысы. Төрт кваркты адрондық ток келесідей жазылады [17-19]

$$J_{X_q}^\mu(x) = \int dx_1 \dots \int dx_4 \delta\left(x - \sum_{i=1}^4 w_i x_i\right) \Phi_X\left(\sum_{i<j} (x_i - x_j)^2\right) \times \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \varepsilon_{abc} \varepsilon_{dec} \{ [q_a(x_4) C \gamma^5 c_b(x_1)] [\bar{q}_d(x_3) \gamma^\mu C \bar{c}_e(x_2)] \\ + [q_a(x_4) C \gamma^\mu c_b(x_1)] [\bar{q}_d(x_3) \gamma^5 C \bar{c}_e(x_2)] \}, \quad (4)$$

$$\text{мұнда } w_1 = w_2 = w_c = \frac{m_c}{2(m_q + m_c)},$$

$$w_3 = w_4 = w_q = \frac{m_q}{2(m_q + m_c)}.$$

Мұнда зарядты біріктіретін матрицалар $C = \gamma^0 \gamma^2$: $C = C^+ = C^{-1} = -C^T$, $C \Gamma^T C^{-1} = \pm \Gamma$, (“+” $\Gamma = S, P, A$ үшін және “-” $\Gamma = V, T$ үшін). Мезонның құрамды кварктармен әрекет-тесуін сипаттайтын тиімді Лагранжиан келесідей жазылады [20-22]:

$$L_{\text{вз}} = g_X X_{q\mu}(x) J_{X_q}^\mu(x), \quad q = u, d \quad (5)$$

(3)-тендеу g -адрон-кварк әрекеттесуінің байланысқан тұрақтыларын анықтауға мүмкіндік береді.

Векторлық мезондар үшін сәйкес массалық операторлардың туындылары келесі түрде өрнектеледі:

$$\Pi'_V(p^2) = \frac{1}{3} \left(g_{\mu\nu} - \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \right) \frac{1}{2p^2} p^\alpha \frac{d}{dp^\alpha} N_c \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4 i} \tilde{\Phi}_V^2(-k^2) \times \\ \times \text{tr} \left[\gamma^\mu S_1(k + \omega_1 p) \gamma^\nu S_2(k - \omega_2 p) \right] = \frac{1}{3} \left(g_{\mu\nu} - \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \right) \frac{1}{2p^2} N_c \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4 i} \tilde{\Phi}_V^2(-k^2) \times \quad (6) \\ \times \left\{ \omega_1 \times \text{tr} \left[\gamma^\mu S_1(k + \omega_1 p) p S_1(k + \omega_1 p) \gamma^\nu S_2(k - \omega_2 p) \right] - \right. \\ \left. - \omega_2 \times \text{tr} \left[\gamma^\mu S_1(k + \omega_1 p) \gamma^\nu S_2(k - \omega_2 p) p S_2(k - \omega_2 p) \right] \right\}.$$

Мұндағы $\Phi_X\left(\sum_{i<j} (x_i - x_j)^2\right)$ шың функциясы тиісті Якоби координаттарының көмегімен есептеледі:

$$x_1 = x + \frac{2w_2 + w_3 + w_4}{2\sqrt{2}} \rho_1 - \frac{w_3 - w_4}{2\sqrt{2}} \rho_2 + \frac{w_3 + w_4}{2} \rho_3, \\ x_2 = x - \frac{2w_1 + w_3 + w_4}{2\sqrt{2}} \rho_1 - \frac{w_3 - w_4}{2\sqrt{2}} \rho_2 + \frac{w_3 + w_4}{2} \rho_3, \\ x_3 = x - \frac{w_1 - w_2}{2\sqrt{2}} \rho_1 + \frac{w_1 + w_2 + 2w_4}{2\sqrt{2}} \rho_2 - \frac{w_1 + w_2}{2} \rho_3, \quad (7) \\ x_4 = x - \frac{w_1 - w_2}{2\sqrt{2}} \rho_1 - \frac{w_1 + w_2 + 2w_3}{2\sqrt{2}} \rho_2 - \frac{w_1 + w_2}{2} \rho_3,$$

$$\text{мұнда } x = \sum_{i=1}^4 x_i w_i, \quad \sum_{1 \leq i < j \leq 4} (x_i - x_j)^2 = \sum_{i=1}^3 \rho_i^2.$$

Сәйкесінше

$$\Phi_X\left(\sum_{i<j} (x_i - x_j)^2\right) = \prod_{i=1}^4 \int \frac{dp_i}{(2\pi)^4} e^{-i \sum_{i=1}^4 p_i x_i} \times \tilde{\Phi}_X(p_1, \dots, p_4), \\ \tilde{\Phi}_X(p_1, \dots, p_4) = (2\pi)^4 \delta\left(\sum_{i=1}^4 p_i\right) \bar{\Phi}_X(-\Omega^2), \quad (8) \\ \bar{\Phi}_X(-\Omega^2) = \frac{1}{4} \prod_{i=1}^3 \int d\rho_i e^{i \sum_{i=1}^3 \omega_i \rho_i} \Phi_X(R^2),$$

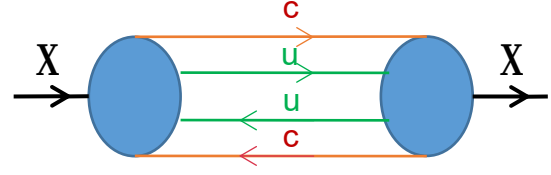
мұндағы, $\Omega^2 = \sum_{i=1}^3 \omega_i^2$, $R^2 = \sum_{i=1}^3 \rho_i^2$. Импульстік кеңістіктегі Якоби координаттары келесі қасиеттерге ие:

$$\omega_1 = \frac{p_1 - p_2}{2\sqrt{2}}, \quad \omega_2 = \frac{p_1 + p_2 + 2p_3}{2\sqrt{2}}. \quad (9)$$

Есептеудің ыңғайлылығы үшін біз Гаусс формасындағы шыңдар функциясын таңдаймыз

$$\overline{\Phi}_X(-\Omega^2) = \exp\left(\frac{\Omega^2}{\Lambda_X^2}\right), \quad (10)$$

мұндағы Λ_X параметрі X мезонының өлшемдерін сипаттайды. Массалық оператордың диаграммасы 1-суретте көрсетілген



1-сурет – X_u мезонының масса операторын сипаттайтын диаграмма.

X -мезонның $J^{PC}=1^{++}$ кванттық сандары ескерілген жағдайда, массалық оператордың скалярлы туынды бөлігі келесі түрде жазылады:

$$\begin{aligned} \Pi'_X(p^2) &= \frac{1}{2p^2} p^\alpha \frac{\partial}{\partial p^\alpha} \Pi_X(p^2) = \\ &= \frac{2}{3p^2} (g_{\mu\nu} - \frac{p_\mu p_\nu}{p^2}) \prod_{i=1}^3 \int \frac{d^4 k_i}{(2\pi)^4 i} \overline{\Phi}_X(-K^2) \times \\ &\times \{ -\omega_c \text{tr} \times [S_c^{[12]} p S_c^{[12]} \gamma^5 S_q^{[2]} \gamma^5] \text{tr} \times [S_c^{[3]} \gamma^\mu S_q^{[13]} \gamma^\nu] + \\ &+ \omega_q \text{tr} \times [S_c^{[12]} \gamma^5 S_q^{[2]} p S_c^{[2]} \gamma^5] \text{tr} \times [S_c^{[3]} \gamma^\nu S_q^{[13]} \gamma^\nu] - \\ &- \omega_c \text{tr} \times [S_c^{[12]} \gamma^5 S_q^{[2]} \gamma^5] \text{tr} \times [S_c^{[3]} p S_c^{[3]} \gamma^\mu S_q^{[13]} \gamma^\nu] + \\ &+ \omega_q \text{tr} \times [S_c^{[12]} \gamma^5 S_q^{[2]} \gamma^5] \text{tr} \times [S_c^{[3]} \gamma^\nu S_q^{[13]} p S_q^{[13]} \gamma^\nu] \}, \end{aligned} \quad (11)$$

Келесідей қысқартуларды қолдандық:

$$\begin{aligned} S_c^{[12]} &= S_c(k_1 + k_2 - w_c p), \\ S_c^{[3]} &= S_c(k_3 - w_c p), \\ S_q^{[2]} &= S_q(k_2 + w_q p), \\ S_q^{[13]} &= S_q(k_1 + k_3 + w_q p), \\ K^2 &= \frac{1}{8}(k_1 + 2k_2)^2 + \frac{1}{8}(k_1 + 2k_3)^2 + \frac{1}{4}k_1^2. \end{aligned}$$

Импульстік айнымалылар k бойынша интегралданатын l циклден, Гаусс типті шыңдық функциялары бар m шыңнан және n кварктік пропагатор S -тен тұратын еркін Фейнман диаграммасын қарастырайық.

Минковский кеңістігінде бұл диаграмма келесі түрде өрнектеледі:

$$\Pi(p_1, \dots, p_m) = \int [d^4 k]^l \prod_{i_1=1}^m \Phi_{i_1+n}(-K_{i_1+n}^2) \prod_{i_3=1}^n S_{i_3}(\tilde{k}_{i_3} + v_{i_3}), \quad (12)$$

$$\text{мұнда } K_{i_1+n}^2 = \sum_{i_2} (\tilde{k}_{i_2+n}^2 + v_{i_2+n}^2).$$

Әрі қарай бос кварк пропагаторы үшін Фок–Швингер өрнегін қолданамыз

$$S(k) = (m + k) \int_0^\infty d\beta e^{-\beta(m^2 - k^2)}. \quad (13)$$

Жалпылықты шектемей, шыңдық функцияларды Гаусс экспоненталары түрінде аламыз:

$$\Phi_{i+n}(-K^2) = \exp[\beta_{i+n} K^2], \quad i = 1, \dots, m, \quad (14)$$

мұндағы параметр $\beta_{i+n} = s_i = \frac{1}{\Lambda_i^2}$ – X -мезонның өлшемін сипаттайды.

Тұзақтық импульс айнымалылары бойынша интегралдауды және жоғарыда сипатталған дифференциация операциясын орындағаннан кейін, Фейнман диаграммасының өрнегі (12) теңдеуде келесі түрде жазылады:

$$\Pi = \int_0^\infty d^n \beta F(\beta_1, \dots, \beta_n). \quad (14)$$

Интегралды симплекстік айнымалылар бойынша интегралдау үшін ыңғайлы түрде "бірлікті енгізу" әдісін қолданып, ішкі интегралдық өрнекке ауысуға болады.

$$1 = \int_0^\infty dt \delta\left(t - \sum_{i=1}^n \beta_i\right) \quad (15)$$

және кейінгі $\beta_i = t\alpha_i$ айнымалыларды ауыстыру арқылы келесі түрге келеміз

$$\Pi = \int_0^\infty dt t^{n-1} \int_0^1 d^n \alpha \delta\left(1 - \sum_{i=1}^n \alpha_i\right) F(t\alpha_1, \dots, t\alpha_n). \quad (16)$$

Барлығы n сандық интегралдар бар: $(n-1)$ α параметрлері бойынша және t параметрі бойынша интегралды береді. Біз интегралдың жоғарғы шегін $1/\lambda_i$ нүктеде кесіп аламыз:

$$\Pi^c = \int_0^{1/\lambda_i} dt t^{n-1} \int_0^1 d^n \alpha \left(1 - \sum_{i=1}^n \alpha_i\right) F(t\alpha_1, \dots, t\alpha_n). \quad (17)$$

Кію параметрі λ инфрақызыл кію параметрі деп аталады.

Бұл жұмыста біз бір айналымнан тұратын екі нүктелі функцияны қарастырамыз. Сонда

$$\Pi_2(p^2) = \int \frac{d^4 k_E}{\pi^2} \frac{e^{-sk_E^2}}{[m^2 + (k_E + \frac{1}{2} p_E)^2][m^2 + (k_E - \frac{1}{2} p_E)^2]},$$

мұнда біз Гаусстық шыңдардың функцияларын $e^{-sk_E^2}$ факторына жинадық.

Көрнекілік ретінде бір тұзақтық өзіндік энергетикалық диаграмманы қарастырайық және қарапайымдылық үшін барлық спинорлық шамаларды елемейміз. Соңында пропагатор үшін келесідей өрнек алдық:

$$\Pi_2(p^2) = \int_0^\infty dt \frac{t}{(s+t)^2} \int_0^1 d\alpha \exp\left(-tz_{loc} + \frac{st}{s+t} z_1\right),$$

$$z_{loc} = m^2 - \alpha(1-\alpha)p^2, \quad z_1 = \left(\alpha - \frac{1}{2}\right)^2 p^2. \quad (18)$$

Нәтижелер мен талқылау

Ең алдымен $X \rightarrow J/\psi + \rho(\omega)$ ауысу матрицалық элементтерін есептейік. Себебі екі жағдайда да $X(3872)$ мезонының массасы тиісті кинематикалық шектерге өте жақын болғандықтан

$$m_X - (m_{J/\psi} + m_\rho) = -0.90 \pm 0.41 \text{ МэВ},$$

ρ , ω векторлық мезондар олардың массалық бетінен тыс қарастырылуы керек. Онда $X_u \rightarrow J/\psi + \rho(\omega)$ ауысу матрицалық элементтері келесі түрде жазылады:

$$\begin{aligned} M^{\mu\nu\rho}(X_u(p, \mu) \rightarrow J/\psi(q_1, \nu) + \nu^0(q_2, \rho)) = \\ = 6g_X g_{J/\psi} g_{\nu^0} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4 i} \int \frac{d^4 k_2}{(2\pi)^4 i} \overline{\Phi}_X(-K_1^2) \Phi_{J/\psi}\left(-\left(k_1 + \frac{1}{2} q_1\right)^2\right) \Phi_{\nu^0}\left(-\left(k_2 + \frac{1}{2} q_2\right)^2\right) \\ \times \text{tr}[i\gamma^5 S_c(k_1) \gamma^\nu S_c(k_1 + q_1) \gamma^\mu S_u(k_2) \gamma^\rho S_u(k_2 + q_2)] \\ = \varepsilon^{q_1 q_2 \mu \nu} q_1^\rho M_{X J \nu}^{(1)} + \varepsilon^{q_1 q_2 \mu \nu} q_2^\rho M_{X J \nu}^{(2)} + \varepsilon^{q_1 q_2 \mu \rho} q_2^\nu M_{X J \nu}^{(3)} + \varepsilon^{q_1 q_2 \nu \rho} q_1^\mu M_{X J \nu}^{(4)} \\ + \varepsilon^{q_1 \mu \nu \rho} M_{X J \nu}^{(5)} + \varepsilon^{q_2 \mu \nu \rho} M_{X J \nu}^{(6)} + \varepsilon^{q_1 q_2 \mu \rho} q_1^\nu M_{X J \nu}^{(7)} + \varepsilon^{q_1 q_2 \nu \rho} q_2^\mu M_{X J \nu}^{(8)}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$K_1^2 = \frac{1}{2} \left(k_1 + \frac{1}{2} q_1\right)^2 + \frac{1}{2} \left(k_2 + \frac{1}{2} q_2\right)^2 + \frac{1}{4} (\omega_u q_1 - \omega_c q_2)^2,$$

мұндағы $\nu^0 = \rho, \omega$. Айта кетейік, егер X және J/ψ бөлшектері массалық бетінде орналасқан жағдайда, яғни $\xi_\mu(q_1^\mu + q_2^\mu) = 0$ және $\xi_\nu q_1^\nu = 0$,

тәуелсіз лоренцтік құрылымдардың саны 6 дейін азаяды. Әрі қарай, келесі қатынастарды пайдалана отырып:

$$M(X_d \rightarrow J/\psi + \rho) = -M(X_u \rightarrow J/\psi + \rho),$$

$$M(X_d \rightarrow J/\psi + \omega) = -M(X_u \rightarrow J/\psi + \omega).$$

[23]-те анықталған физикалық күйлердің ыдырау амплитудаларын таза X_u – күйінің ыдырау амплитудалары арқылы өрнектеуге болады:

$$M(X_l \rightarrow J/\psi + \omega) = (\cos \theta + \sin \theta) M(X_u \rightarrow J/\psi + \omega),$$

$$M(X_h \rightarrow J/\psi + \omega) = (\cos \theta - \sin \theta) M(X_u \rightarrow J/\psi + \omega),$$

$$M(X_l \rightarrow J/\psi + \rho) = (\cos \theta - \sin \theta) M(X_u \rightarrow J/\psi + \rho),$$

$$M(X_h \rightarrow J/\psi + \rho) = -(\cos \theta + \sin \theta) M(X_u \rightarrow J/\psi + \rho).$$

(19) өрнектектегі $X \rightarrow J/\psi + \rho(\omega)$ матрицалық элементі қолдана отырып $X \rightarrow J/\psi + 2\pi(3\pi)$ ыдырау үшін яғни, олар аралық $\rho(\omega)$ резонанстық күйлер арқылы өтеді деген болжаммен ыдырау енін анықтау аламыз. Біз тар резонанстарды қолдану әдісін қолданамыз, бұл жағдайда ол жеткілікті негізделген, себебі $\rho(\omega)$ резонанстардың ендері олардың массаларынан айтарлықтай кіші.

Екі еркін параметрлер бар: θ араласу бұрышы және Λ_X параметрі, ол X -мезонды сипаттайтын параметрлер. Біз Λ_X параметрін $2.5 \leq \Lambda_X \leq 4$ ГэВ аралығында өзгерте отырып келесі қатынастарды анықтадық

$$\frac{\Gamma(X_u \rightarrow J/\psi + 3\pi)}{\Gamma(X_u \rightarrow J/\psi + 2\pi)} \approx 0.25. \quad (20)$$

Λ_X параметрі вариация кезінде өте орнықты. Онда [2]-де келтірілген эксперименттік деректерден алынған орташа мәнді және осы нәтижені пайдалана отырып, мынадай шаманы анықтауға болады.

$$\frac{\Gamma(X_{l,h} \rightarrow J/\psi + 3\pi)}{\Gamma(X_{l,h} \rightarrow J/\psi + 2\pi)} \approx 0.25 \cdot \left(\frac{1 \pm \tan \theta}{1 \mp \tan \theta} \right) \approx 1, \quad (21)$$

бұл, тиісінше $X_l \rightarrow "+"$ және $X_h \rightarrow "-"$ үшін $\theta \approx \pm 18.4^\circ$ мынадай нәтижелерді береді. Бұл нәтижелер [23] $\theta \approx \pm 20^\circ$ және [24] $\theta \approx \pm 23.5^\circ$ еңбектерінде алынған нәтижелермен сәйкес келеді. Ыдырау ені Λ_X параметрдің өзгеруіне едәуір сезімтал, бұл 2-суретте көрсетілген. Берілген аралықта $\Gamma(X \rightarrow J/\psi + n\pi)$ ыдырау енінің абсолюттік мәні 0.30 МэВ кіші, бұл эксперименттік $\Gamma(X(3872)) \leq 2.3 \text{ МэВ}$ шектеуге сәйкес келеді.

Біз D^{*+} және D^{*0} мезондардың массаларын және ыдырау ендерін [2] және [25], [23] (барлық өлшемдер МэВ бірлігімен берілген):

$$m_{D^{*+}} = 2010.27, \Gamma_{D^{*+}} = 2010.27,$$

$$m_{D^{*0}} = 2006.97, B(D^{*+} \rightarrow D^+ \pi^0) 0.307,$$

$$\Gamma_{D^{*0}} = 0.070, B(D^{*+} \rightarrow D^0 \pi^0) 0.619.$$

Бұл мәндерді біле отырып, ыдырау ені келесі формула бойынша есептеледі:

$$\Gamma(X_l \rightarrow \bar{D}^0 D^0 \pi^0) = \cos^2 \theta \Gamma(X_u \rightarrow \bar{D}^0 D^0 \pi^0)$$

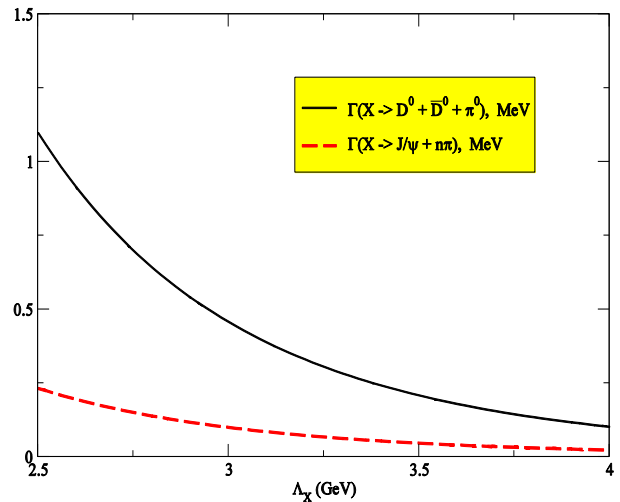
Ыдырау енінің Λ_X параметрге тәуелділігі 2-суретте көрсетілген. [2]-дегі нәтижелерді пайдалана отырып,

$$10^5 B(B^\pm \rightarrow K^\pm X) \cdot B(X \rightarrow J/\psi \pi^+ \pi^-) = 0.95 \pm 0.19,$$

$$10^5 B(B^\pm \rightarrow K^\pm X) \cdot B(X \rightarrow D^0 \bar{D}^0 \pi^0) = 10.0 \pm 4.0,$$

келесі қатынасты анықтауға болады

$$\frac{\Gamma(X \rightarrow D^0 \bar{D}^0 \pi^0)}{\Gamma(X \rightarrow J/\psi \pi^+ \pi^-)} = 10.5 \pm 4.7. \quad (22)$$



2-сурет – $\Gamma(X_l \rightarrow \bar{D}^0 D^0 \pi^0)$ және $\Gamma(X \rightarrow J/\psi + n\pi)$ ыдырау енінің Λ_X параметрге тәуелділігі

2-суретте көрсетілген ыдырау ені катынастарынан алынған теориялық мән

$$\frac{\Gamma(X \rightarrow D^0 \bar{D}^0 \pi^0)}{\Gamma(X \rightarrow J/\psi \pi^+ \pi^-)} \bigg|_{\text{теор}} = 4.5 \pm 0.2. \quad (23)$$

Қорытынды

X(3872) мезонының қасиеттеріне қатысты Belle [8], BaBar [9], CDF [4] және DØ [5] коллаборациялары арқылы алынған эксперименттік және теориялық зерттеу нәтижелері қысқаша көрсетілді. Зерттеулер нәтижесінде X(3872) мезоны дикуарктік молекула емес, нақты тетракуарктік құрылым екені анықталды.

Адрондардың оларды құрайтын кварктармен тиімді әрекеттесуін сипаттайтын релятивистік

лагранжиандар қарастырылды. Кванттық өріс теориясы аясында байланысқан күйлерді сипаттауда тиімді құрал болып табылатын байланыстылық шартының анықтамасы берілді. Физикалық үдерістер амплитудаларында кварктардың пайда болуына сәйкес келетін кез келген табалдырықтық ерекшеліктердің болмауын қамтамасыз ететін инфракызыл конфайнмент ұғымы енгізілді.

$\rho(\omega)$ және D аралық күйлер арқылы жүретін $X \rightarrow J/\psi + 2\pi(3\pi)$ және $X \rightarrow D^0 + \bar{D}^0 + \pi^0$ ыдыраулардың ені есептелді. X(3872) мезонының өлшемін сипаттайтын параметрдің ақылға қонымды мәндерінде теориялық есептеулер эксперименттік деректермен сәйкес келетіні анықталды. Бұл анализ кварктардың конфайнментін ескеретін релятивистік конституенттік кварктік модель шеңберінде жүргізілді.

Әдебиеттер References

1. S.K. Choi, S. L. Olsen, K. Abe, T. E. Browder, D. Dinh, I. Adachi, H. Aihara, H. Akimoto, Y. Asano, T. Aviles, ... K. Ziegler (Belle Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **91**, 262001 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.262001>
2. K. Nakamura, and (Particle Data Group), *J. Phys. G* **37**, 075021 (2010). DOI 10.1088/0954-3899/37/7/075021
3. B. Aubert, R. Barate, M. Battaglia, A. Bevan, ... H. Wang, Y. Zhang (BABAR Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **93**, 041801 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.041801>
4. D. E. Acosta, T. A. Aaltonen, N. B. Smith, R. C. Elfgren, F. Amendolia, ... J. H. Garcia (CDF II Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **93**, 072001 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.072001>
5. V. M. Abazov, B. Abbott, M. Abolins, B. S. Acharya, D. N. Adams, ... A. Zhou (DØ Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **93**, 162002 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.162002>
6. T. Aaltonen, A. Abulencia, J. Adelman, T. Akimoto, B. Álvarez González, ... A. Zhu (CDF Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **103**, 152001 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.152001>
7. K. Yi for the CDF Collaboration, *Heavy quark meson spectroscopy at CDF*, arXiv:0910.3163 [hep-ex] (2009).
8. K. Abe, P. Pakhlov, A. Gritsan, Y. Nagashima, E. Nakano, ... Y. Yamazaki (Belle Collaboration), *Evidence for $X(3872) \rightarrow \gamma J/\psi$ and sub-threshold decay $X(3872) \rightarrow \omega J/\psi$* , arXiv:hep-ex/0505037 (2005).
9. B. Aubert, R. Barate, D. Boutigny, F. Butler, T. Cowan, ... C. Zupanc (BABAR Collaboration), *Phys. Rev. D* **74**, 071101 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.071101>
10. A. Abulencia, J. Adelman, T. Affolder, T. Akimoto, M. G. Albrow, ... A. Zucchelli (CDF Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **98**, 132002 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.132002>
11. G. Gokhroo, P. Rubin, S.-K. Choi, D. Mohapatra, ... S. L. Olsen (Belle Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **97**, 162002 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.162002>
12. B. Aubert, B. Bosanac, J. P. Lees, V. Poireau, ... C. Xi (BABAR Collaboration), *Phys. Rev. D* **77**, 011102 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.77.011102>
13. P. del Amo Sanchez, B. Aubert, A. Bolko, M. Bračko, M. Calderón, ... B. Zhang (BABAR Collaboration), *Phys. Rev. D* **82**, 011101 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.82.011101>
14. S. K. Choi, Y. Mizuk, T. Uglov, K. Trabelsi, B. Pal, ... H. Nakano (Belle Collaboration), *Phys. Rev. D* **84**, 052004 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.84.052004>
15. K. Hayashi, H. Y. Cheng, K. Cross, N. Fujimura, ... and A. Salam, *Fortsch. Phys.* **15**, 625 (1967); *Nuovo Cimento* **25**, 224 (1962).
16. M. Dineykhon, G. V. Efimov, M. A. Ivanov, *Yad. Fiz.* **35**, 134 (1982). (in Russ).
17. G. Ganbold, M. A. Ivanov, *Phys. Rev. D* **111**, 014007 (2025). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.111.014007>
18. C. T. Tran, M. A. Ivanov, P. Santorelli, Q. C. Vo, *Chinese Phys. C* **48**, 023103 (2024). <https://doi.org/10.1088/1674-1137/ad102c>

19. G. Ganbold, T. Gutsche, M. A. Ivanov, V. E. Lyubovitskij, *Phys. Rev. D* **104**, 094048 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.104.094048>
20. M. Dineykhon, M. A. Ivanov, G. G. Saidullaeva, *Phys. Part. Nuclei* **43**, 749-782 (2012). <https://doi.org/10.1134/S1063779612060032>
21. S. Dubnicka, A. Z. Dubnickova, M. A. Ivanov, J. G. Jörner, P. Santorelli, G. G. Saidullaeva, *Phys. Rev. D* **84**, 014006 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.84.014006>
22. M.A.Ivanov, J.G. Körner, S. G.Kovalenko, P. Santorelli and G.G. Saidullaeva. *Phys. Rev. D* **85**, 034004 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.85.034004>
23. L. Maiani, F. Piccinini, A. D. Polosa, V. Riquer, *Phys. Rev. D* **71**, 014028 (2005). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.71.014028>
24. M. Nielsen, F. S. Navarra, S. H. Lee, *Phys. Rept.* **497**, 41-83 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2010.07.005>
25. M. B. Voloshin, *Phys. Lett. B* **579**, 316-320 (2004). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2003.11.014>

Мақала тарихы:

Түсті – 06.05.2025

Түзетілген түрде түсті – 22.05.2025

Қабылданды – 02.06.2025

Article history:

Received 06 May 2025

Received in revised form 22 May 2025

Accepted 02 June 2025

Авторлар туралы мәлімет:

Жаугашева Сауле Аманбаевна – физика-математика ғылымдарының кандидаты, теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы қ, Қазақстан, e-mail: zhaugashevas@gmail.com

2. Сайдұллаева Гозьял Гайнидиновна (корреспондент автор) – PhD, теориялық және ядролық физика кафедрасының аға оқытушысы, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы қ, Қазақстан, e-mail: saydullaeva.goziyal@kaznu.kz

3. Бактегереева Екатерина Серікқызы, теориялық және ядролық физика кафедрасының лаборанты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы қ, Қазақстан, e-mail: katywka_b@mail.ru

Information about authors:

1. **Saule Zhaugasheva** – candidate of physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of theoretical and nuclear physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, e-mail: zhaugashevas@gmail.com

2. **Gozyal Saidullaeva** (corresponding author), PhD, Senior Lecturer of the Department of theoretical and nuclear physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, e-mail: saydullaeva.goziyal@kaznu.kz

3. **Ekaterina Baktegeereva**, Laboratory assistant of the Department of theoretical and nuclear physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, e-mail: katywka_b@mail.ru

А.Ж. Акниязова^{1*}, А.С. Мирошниченко^{2,3}, З.Ж. Жанабаев¹

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

²Университет Северной Каролины в Гринсборо, Гринсборо, США

³Астрофизический институт им. В. Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

*e-mail: aigerimakniyazova@gmail.com

КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРАЛЬНЫХ И ФОТОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОБЪЕКТА С ФЕНОМЕНОМ В[E] MWC 342 ЗА 40-ЛЕТНИЙ ПЕРИОД НАБЛЮДЕНИЙ

MWC 342 (V1972 Cyg) представляет собой эмиссионную звезду раннего спектрального класса, открытая около 90 лет назад. Объект проявляет характерный феномен В[е], включающий разрешенные и запрещенные эмиссионные линии и инфракрасный избыток вследствие излучения околозвездной пыли, впервые обнаруженный в 1970-х годах. Однако его эволюционный статус до сих пор остаётся предметом дискуссий. В разные годы MWC 342 классифицировалась как звезда Ве Хербига, двойная система с холодным компаньоном или долгопериодическая переменная. В данной работе представлены результаты спектроскопического и фотометрического анализа объекта, выполненного на основе данных 1986 - 2024 годов. Спектры среднего и высокого разрешения были сопоставлены с переменностью оптического блеска. Мы выявили квазипериодические фотометрические вариации с характерным масштабом ~20 лет, а также установили корреляцию между оптической яркостью и эквивалентной шириной линии H α , что, вероятно, связано с изменениями плотности околозвездного вещества. Анализ распределения энергии в спектре (РЭС) в диапазоне длин волн до 160 μm показал резкое снижение потока на длинных волнах, исключающее наличие значительного количества холодной околозвездной пыли в системе. Это согласуется с предположением о наличии компактного пылевого диска. Теоретическое РЭС с эффективной температурой ~25,000 К хорошо описывает фотометрические данные в оптическом диапазоне спектра. Использование расстояния Gaia DR3 и новой карты межзвездного покраснения в направлении на объект позволило уточнить его светимость $\log\left(\frac{L}{L_{\odot}}\right) \approx 3.9$. Результаты подчёркивают важность продолжения спектрального и многоцветного фотометрического мониторинга MWC 342, необходимого для уточнения её природы и динамики околозвездной среды.

Ключевые слова: спектроскопия, фотометрия, звезды с эмиссионными линиями, околозвездное вещество.

Ә.Ж. Ақниязова^{1*}, А.С. Мирошниченко^{2,3}, З.Ж. Жаңабаев¹

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

²Гринсборо қаласындағы Северная Каролина Университеті, Гринсборо, АҚШ

³В.Г. Фесенков атындағы астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан

*e-mail: aigerimakniyazova@gmail.com

В[Е] құбылысы бар MWC 342 нысанының спектрлік және фотометриялық сипаттамаларын 40 жылдық бақылау негізінде кешенді талдау

MWC 342 (V1972 Cyg) — шамамен 90 жыл бұрын ашылған ерте спектрлік класстағы эмиссиялық жұлдыз. Нысанда В[е] құбылысы байқалады, сонымен қоса оның спектрінде рұқсат етілген және тыйым салынған эмиссиялық сызықтар мен 1970 жылдары алғаш рет табылған жұлдыз маңындағы шаңның сәулеленуіне байланысты инфрақызыл артықшылық байқалады. Алайда нысанның эволюциялық күйі әлі күнге дейін талқылану үстінде. MWC 342 Хербиг Ве жұлдызы, суық серігі бар қос жұлдызды жүйе немесе ұзақ мерзімді айнымалы

жұлдыз ретінде жіктелген. Бұл жұмыста 1986 - 2024 жылдардағы мәліметтер негізінде жасалған объектіні спектроскопиялық және фотометриялық талдау нәтижелері келтірілген. Орташа және жоғары ажыратымдылықтағы спектрлер оптикалық жарықтылықтың айнымалылығымен салыстырылды. Біз ~20 жыл шкаласы бар квази-периодты фотометриялық өзгерістерді анықтадық, сонымен қатар оптикалық жарықтылық пен H α сызығының эквивалентті ені арасындағы корреляцияны анықтадық. Бұл жұлдыз маңындағы заттың тығыздығының өзгеруіне байланысты болуы мүмкін. 160 μ m дейінгі толқын ұзындығы ауқымында спектрлік энергия таралуын (СЭТ) талдау ұзын толқындарда ағынның күрт төмендегенін көрсетті, бұл жүйеде салқын жұлдыз маңындағы шаңның айтарлықтай мөлшерінің жоқтығын білдіреді. Бұл қорытынды ықшам шаң дискісінің бар болуы мүмкін деген жорамалмен үйлеседі. Тиімді температурасы шамамен ~25,000 K болатын теориялық СЭТ спектрдің оптикалық диапазонындағы фотометриялық деректерді жақсы сипаттайды. Gaia DR3 қашықтығын және жұлдызаралық қызарудың жаңа картасын объектіге қарай пайдалану оның жарықтығын нақтылауға мүмкіндік берді $\log\left(\frac{L}{L_{\odot}}\right) \approx 3.9$. Нәтижелер MWC 342 спектрлік және көп түсті фотометриялық мониторингін жалғастырудың маңыздылығын көрсетеді, бұл оның табиғаты мен айналмалы ортаның динамикасын нақтылау үшін қажет.

Түйін сөздер: спектроскопия, фотометрия, эмиссиялық сызықтары бар жұлдыздар, жұлдызды зат.

A.Zh. Akniyazova^{1*}, A.S. Miroshnichenko^{2,3}, Z.Zh. Zhanabaev¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²University of North Carolina at Greensboro, Greensboro, USA

³Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: aigerimakniyazova@gmail.com

Comprehensive analysis of spectral and photometric characteristics of the B[E] PHENOMENON object MWC 342 over a 40-year observation period

MWC 342 (V1972 Cyg) is an early-type emission-line star discovered approximately 90 years ago. The object exhibits the characteristic B[e] phenomenon, including both permitted and forbidden emission lines, as well as an infrared excess caused by emission from circumstellar dust, first identified in the 1970s. However, its evolutionary status remains under debate. Over the years, MWC 342 has been classified as a Herbig Be star, a binary system with a cool companion, or a long-period variable star. This paper presents the results of spectroscopic and photometric analyses of the object based on data collected from 1986 to 2024. Medium- and high-resolution spectra were compared with optical brightness variations. We identified quasi-periodic photometric variability on a characteristic timescale of ~20 years and established a correlation between optical brightness and the equivalent width of the H α line, likely related to changes in the density of the circumstellar environment. An analysis of the spectral energy distribution (SED) up to 160 μ m revealed a sharp decline in flux at longer wavelengths, indicating the absence of a significant amount of cold circumstellar dust in the system. This supports the hypothesis of a compact dust disk. A theoretical SED with an effective temperature of ~25,000 K fits the photometric data well in the optical range. Using the Gaia DR3 distance and a new map of interstellar reddening in the direction of the object, we refined its luminosity to $\log\left(\frac{L}{L_{\odot}}\right) \approx 3.9$. These results highlight the importance of continued spectroscopic and multicolor photometric monitoring of MWC 342 to further clarify its nature and the dynamics of its circumstellar environment.

Key words: spectroscopy, photometry, emission-line stars, circumstellar matter.

Введение

MWC 342, звезда 10-й звездной величины в созвездии Лебедя, в спектре которой были обнаружены линии излучения водорода в ходе обзора звезд с эмиссионными линиями обсерваторией Маунт-Уилсон [1]. В ранних исследованиях спектра этой звезды были обнаружены разрешенные и запрещенные линии излучения FeII [2]. MWC 342 одна из первых горячих звезд, у которой был обнаружен избыток инфракрасного излучения [3]. Основываясь на наличии запрещенных эмиссионных линий в ее оптическом спектре, MWC 342 был включен в первоначальный список пекулярных звезд Be, которые в настоящее время известны как объекты с феноменом B[e] [4].

После первых оптических спектроскопических и многоволновых фотометрических наблюдений в 1970 - 1980-х годах, было выдвинуто несколько гипотез относительно природы объекта. [5]. На основе анализа фотографических спектров было обнаружено, что ее свойства соответствуют свойствам звезды спектрального типа B3 III, окруженной оптически тонкой оболочкой из газа и пыли [6]. В свою очередь, исходя из спектрального распределения энергии (РЭС) в оптической области было предложено наличие гиганта спектрального класса M [7]. А в 1990 году MWC 342 отнесли к классу звезд Ae/Be Хербига, находящихся на стадии до главной последовательности [5]. Однако при анализе наблюдаемых характеристик всего первоначального списка звезд с B[e]-феноменом, пришли к выводу, что MWC 342 не может быть отнесен ни к одному из известных эволюционных классов, и включили его в группу неклассифицированных объектов с B[e]-феноменом [8].

Анализ многоцветной фотометрии и оптических спектров высокого разрешения позволил отвергнуть гипотезу о молодом эволюционном статусе MWC 342 и выдвинуть предположение о ее принадлежности к числу эволюционировавших звезд, вероятно входящих в состав двойной системы [9]. Позднее объект был отнесен к группе звезд типа FS CMa с феноменом B[e], в которую вошло большинство ранее неклассифицированных B[e] звезд [10]. Основная гипотеза относительно природы таких объектов заключается в

том, что это двойные системы промежуточной массы ($2 - 10 M_{\odot}$), находящиеся на стадии активной или завершившейся переноса массы между компонентами. С момента выделения группы объектов FS CMa в ряде таких объектов действительно была подтверждена двойственность, однако наличие спутника у MWC 342 остается не выясненным [11].

Фотометрические и спектроскопические наблюдения переменности MWC 342, проводившиеся в течение десяти лет, выявили наличие различных циклов. Так, между 1986 и 1988 годами в переменности яркости в полосе U был зарегистрирован 132-дневный цикл [5]. В данных 1990 года в нескольких оптических фотометрических диапазонах также наблюдался цикл аналогичной продолжительности, который в последующем начал сокращаться [9]. Кроме того, в 1989 и 1993 годах с использованием фотометрии Стремгрена были зафиксированы 16-дневные циклические изменения яркости [12].

В спектроскопических данных была обнаружена волна длительностью около ~ 1500 дней в параметрах линии излучения H α [13]. Однако до настоящего времени отсутствуют убедительные доказательства существования устойчивого периодического процесса в поведении данного объекта.

Вопрос об эволюционном статусе MWC 342 по-прежнему остается предметом дискуссий. В ряде последних работ объект рассматривается либо как молодая звезда на стадии до выхода на главную последовательность [14], либо как проэволюционировавшая звезда, возможно входящая в состав двойной системы [11]. Ввиду отсутствия опубликованных результатов длительных серий наблюдений в оптической области спектров высокого разрешения нами были собраны соответствующие данные, полученные в ряде различных обсерваторий, а также фотометрические наблюдения, охватывающие несколько десятилетий.

Целью данного исследования является поиск регулярной спектральной и фотометрической переменности с целью проверки о двойственности системы.

Наблюдения

В этой статье мы анализируем спектры, которые были получены в следующих обсерваториях: 14 спектров на 2.1-метровом телескопе Национальной астрономической обсерватории San

Pedro Martir (OAN SPM, Нижняя Калифорния, Мексика) со спектрографом REOSC (со спектральной разрешающей способностью $R = 18,000$) [15]; 2 спектра на 2.7-метровом телескопе имени

Harlan J. Smith обсерватории McDonald (Техас, США) со спектрографом Tull coude TS2 ($R = 60,000$) [16]; 10 спектров на 3.6-метровом телескопе Canada–France–Hawaii в обсерватории Mauna Kea (CFHT; Мауна-Кеа, Гавайи, США) со спектрополя-риметром ESPaDOnS ($R = 65,000$) [17]; 2 спектра на 0.8-метровом телескопе обсерватории TCO (Three College Observatory, Северная Каролина, США) [18]; 2 спектра на 3.5-метровом телескопе Astrophysical Research Consortium в обсерватории Apache Point (Санспот, Нью-Мексико, США) со спектрографом ARCES ($R = 31,500$) [19]; 4 спектра на 2-метровом Гималайском телескопе Chandra (HCT) в Индийской астрономической обсерватории (IAO, Ханле, Индия) с инструментом HESP ($R = 30,000$) [20]; 30 спектра были получены с помощью 1.2- метровом телескопе Mercator в обсерватории del Roque de Los Muchachos (о. Ла-Пальма, Канарские острова, Испания) со спектрографом HERMES ($R = 85,000$) [21]; 1 спектр, полученный с помощью эшелле-спектрополяриметра NARVAL ($R = 60,000$) на 2-метровом телескопе Bernard Lyot в обсерватории Pic du Midi (TBL, Пик-дю-Миди, Французские Пиренеи) [22]. В рамках настоящего исследова-

ния удалось собрать 65 оптических спектров высокого разрешения, полученных в период с 2004 по 2023 год.

Фотометрические данные были получены из обзора ASAS-SN в фильтрах g и V [23, 24], в системе Johnson-Cousins (BVR), с использованием 1-метрового телескопа Астрофизической обсерватории Ассы-Тургень и Тянь-Шанской астрономической обсерватории (ТШАО) в период с 2002 по 2024 годы [5, 9], с 60-см телескопа обсерватории Majdanak (Узбекистан) – в период с 1999 по 2008 годы [25] и на 1.25-метровом телескопе Крымской астрофизической обсерватории в 2008 году, а также из обсерватории Abastumani на 1.25-метровом телескопе в период с 1989 по 1993 годы [12], из обсерватории APAS DR10 в 2011 году [26], из системы оптического мониторинга на борту космического корабля INTEGRAL в период с 2002 по 2008 годы [27].

Дополнительно использовались данные в инфракрасном диапазоне, полученные с космических телескопов WISE ($22.1\ \mu\text{m}$ [28], AKARI (9 и $18\ \mu\text{m}$) [29], MSX (8.28 ; 12.13 ; 14.65 и $21.34\ \mu\text{m}$) [30], IRAS (12 и $25\ \mu\text{m}$) [31], а также Herschel (70 и $160\ \mu\text{m}$) [32].

Результаты и обсуждения

Оптический спектр MWC 342 характеризуется множеством эмиссионных линий, среди которых особенно выделяются линии серии Бальмера с раздвоенными пиками, при этом красносмещенный пик заметно сильнее синесмещенного. Эти спектральные особенности были первоначально зафиксированы в ранних работах [2] и позднее подтверждены в [9]. Анализ серии из 102 спектров, собранных в обсерватории Ондрейова (Чехия) в период 2004 - 2010 годов, показал переменность формы пиков, интенсивности линий и эквивалентной ширины (EW), особенно выраженную в синесмещенном пике линии $\text{H}\alpha$ [13]. Полученные результаты указывают на наличие возможного цикла вариаций отношения интенсивностей пиков V/R в линии $\text{H}\alpha$ с периодом около ≈ 1500 дней. Однако, из-за ограниченности временного интервала наблюдений были зафиксированы лишь два максимума этого цикла.

Линии He I и O I демонстрируют сложные профильные изменения, включая асимметричные эмиссионные крылья. Подобные спектральные особенности характерны для объектов с феноменом B[e] , где взаимодействие между звездным ветром и дисковой структурой играет важную роль. В спектре также выявлены несколько линий поглощения, преимущественно межзвездного происхождения, что указывает на значительное

ослабление излучения звезды в межзвездной среде. Данная особенность согласуется с наблюдаемым расхождением между межзвездным и полным поглощением, ранее зафиксированным в работе [9].

Благодаря более высокому спектральному разрешению и лучшему соотношению сигнал/шум по сравнению с ранее опубликованными данными, нам удалось уточнить описание ряда спектральных особенностей, что способствует более глубокому пониманию природы основного источника энергии в системе. Так, при анализе спектра низкого разрешения ($R \approx 5000$), полученном в 1997 году, было высказано предположение о наличии линий поглощения O II на длинах волн 4649 и $5208\ \text{\AA}$, а также C II на $5242\ \text{\AA}$ [33].

Слабый намёк на присутствие линии поглощения вблизи $4649\ \text{\AA}$ виден в наших спектрах с соотношением сигнал/шум не ниже 100. Однако, его происхождение остается неизвестным, поскольку это может быть связано со сложностями проведения континуума между линиями излучения Fe II в этой области. Мультиплет $8\ \text{O II}$ не содержит дополнительных линий. Кроме того, достоверных признаков поглощения не обнаружено вблизи 5208 и $5242\ \text{\AA}$.

В исследовании [9] рассматривалась вероятность наличия эмиссионных линий He II на длинах волн 4541, 4686 и 5411 Å. Однако, в наших спектрах с высоким соотношением сигнал/шум не обнаружено признаков ни излучения, ни поглощения на длине волны 4686 Å. Эмиссионные особенности, наблюдаемые вблизи 4541 и 5412 Å, могут быть с высокой степенью уверенности интерпретированы как линии Fe II (мультиплет 38) при 4541.52 Å и [Fe II] (мультиплет 17) при 5412.64 Å соответственно.

Спектральная особенность в области 4541 Å может быть интерпретирована как линия He II 4541.59 Å, однако её близкое расположение к линии Fe II (мультиплет 38) 4541.52 Å, а также наличие других компонентов того же мультиплета с аналогичными профилями, указывает на более вероятную идентификацию в пользу Fe II. Аналогично, линия в области 5412 Å совпадает по положению и форме с [Fe II] (мультиплет 17F) 5412.64 Å и демонстрирует радиальные скорости, сопоставимые с другими идентифицированными [Fe II] линиями. При этом линия He II 5411.52 Å, являющаяся компонентом того же мультиплета 2, что и 4541.59 Å, должна обладать сходными характеристиками, чего не наблюдается. Таким образом, учитывая отсутствие достоверных признаков линий He II в спектре, можно заключить, что эффективная температура ионизирующего источника, не превышает $\approx 28\,000$ K [34].

Спектроскопические оценки спектрального типа центрального источника варьируются от V3 III [6] до V0/V1 [9, 33], тогда как по результатам спектрофотометрии он был классифицирован как B8 [7]. Постоянное присутствие выраженного эмиссионного спектра свидетельствует о наличии горячего возбуждающего компонента. В полученных спектрах линии He I при 4471 и 4713 Å преимущественно проявляются в виде чистого поглощения, тогда как компоненты при 5876, 6678 и 7065 Å демонстрируют переменные профили, включая тип P Cyg и чистую эмиссию. Кроме того, наблюдаются выраженные эмиссионные линии кислорода (триплет 7772 - 7775 Å), Si II (5979, 6347 и 6371 Å), а также водородные линии серии Пашена [см. рис. 1 в 33], что в совокупности подтверждает принадлежность объекта к ранним спектральным типам В-звезд. Эмиссионные линии демонстрируют значительные вариации как по форме профиля, так и по радиальной скорости. Особенно выраженные изменения наблюдаются в линии He I 5875 Å (рис. 1) и в ближнем инфракрасном триплете O I. Хотя наличие периодичности в этих колебаниях не установлено, их характер, по-видимому, отражает динамичные процессы в околозвездной среде, обусловленные неустойчивым распределением газа вблизи центрального источника.

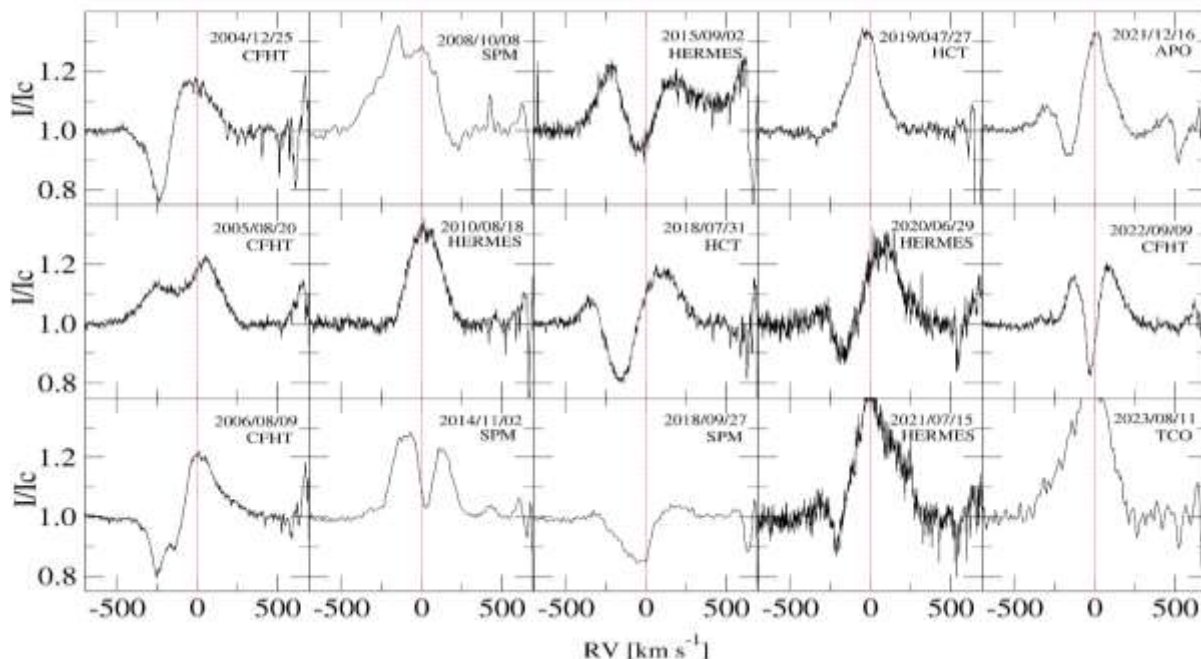


Рисунок 1 – Примеры изменения профилей линий He I (5875 Å) за период с 2004 по 2023 гг. Вертикальные красные пунктирные линии обозначают стационарные положения спектральной линии. По оси абсцисс отложены гелиоцентрические радиальные скорости (в км с⁻¹), по оси ординат — интенсивность линий, нормированная на локальный континуум.

Переменность оптической яркости MWC 342 неоднократно изучалась на основании наблюдений, проведённых в 1980 - 1990-х годах [5, 9, 12, 13]. Объект демонстрировал квазипериодические колебания с характерными временными масштабами от нескольких недель до нескольких месяцев. Однако, ни один из выявленных циклов не показал устойчивой долговременной стабильности. Более поздний анализ данных ASAS-SN выявил возможный длительный цикл с периодом около 632.75 дней на основе наблюдений в фотометрической полосе V за интервал порядка 1400 дней с амплитудой изменения яркости около 0.37 mag. Тем не менее, совокупность всех доступных на сегодняшний день данных ASAS-SN не обеспечивает однозначного подтверждения данного периода.

В результате анализа собранных фотометрических данных было обнаружено, что существует более длительный цикл изменения яркости объекта, продолжительностью примерно ≈ 20 лет (см. верхнюю панель на рис. 2). За период с 1987 по 2025 год, были замечены два локальных максимума яркости, примерно 1995 и 2017 годы, а также три минимума яркости, примерно 1987, 2007 и 2024 годы. Кроме того, наблюдается тенденция к постепенному снижению яркости: в минимуме 1987 года она составляла ≈ 11 mag, а в минимуме 2024 года составляет ≈ 11.2 mag. В максимуме 1999 года яркость была ≈ 10.2 mag, а в максимуме 2017 года ≈ 10.4 mag. В то же время показатель цвета (B-V) демонстрировал лишь незначительные изменения; он показал тенденцию к небольшому увеличению с 1986 по 2015 год и меньшую амплитуду изменений по сравнению с изменениями в полосе V.

Из-за небольшого количества наблюдений до 2005 года описание изменений интенсивности эмиссионной линии H α затруднено. Данная линия не демонстрировала значительного ослабления в течение последних двадцати лет. В частности, учитывая более высокий уровень шума в наборе данных, различия в процедуре нормализации спектров могут быть связаны с различиями в измерении эквивалентных ширин [13] (отмечены зелеными точками в нижней панели на рис. 2). Сопоставление измеренных нами эквивалентных ширин (EW) линии H α с фотометрическими наблюдениями из обзора ASAS-SN позволяет предположить, что снижение яркости, зафиксированное в период 2017 - 2024 годов, связано со снижением интенсивности линии H α , которое частично связано с уменьшением уровня континуума. В противном случае, это может быть результатом усиления процесса потери или переноса массы, которые могут привести к увеличению

эмиссии. Значения отношения V/R в линии H α , показывают различия, сходные с теми, что были отмечены в исследовании [13]. Однако эти значения не подтверждают предполагаемый этими авторами цикл 1560 дней.

В нашей выборке были зафиксированы два эпизода увеличения V/R, которые произошли около дат JD 2,457,200 и JD 2,459,500, примерно через 2300 дней. По сравнению с кривой блеска в полосе V видно, что эти увеличения V/R происходят в моменты, когда объект кажется менее ярким, чем обычно. Если эта взаимосвязь верна, это может означать, что скорость потери массы центральной звездой уменьшается. Это связано с тем, что в звездных ветрах синесмещенная абсорбционная компонента профиля типа P Cyg уменьшается, что приводит к увеличению отношения V/R.

Изменения показателя цвета B - V, представленные на средней панели рис. 2, демонстрируют относительно слабые вариации в пределах от 1.1 до 1.3 mag. В ходе активного фотометрического мониторинга в период 2010 - 2015 гг. наблюдалась тенденция к незначительному увеличению значения индекса. На основании синхронных измерений в фильтрах V и g, выполненных до перехода проекта ASAS-SN на исключительно g-диапазоне, было определено среднее значение показателя цвета $g - I$, равное 0.48 ± 0.04 mag. Преобразование этого значения в B - V по эмпирическому соотношению, приведённому в [36], даёт $B - V = 1.07 \pm 0.04$ mag. Тем не менее, с учётом значительного вклада эмиссионной линии H α в поток в полосе V, можно заключить, что показатель цвета B - V остаётся в целом стабильным и не демонстрирует существенных отклонений от значений, полученных ранее в фотометрической системе Джонсона.

Анализ кривой блеска звезды MWC 342 с использованием статистических методов Random Forest и скользящего среднего (Moving Average) позволил выявить устойчивые признаки квазипериодичности с близкими значениями периода: $P = 7186$ и $P = 7156$ суток, соответственно. Оба метода обеспечили получение фазовых кривых, демонстрирующих сходный характер переменности яркости. Применение алгоритма Random Forest, основанного на ансамбле решающих деревьев, дало возможность учесть сложные нелинейные взаимосвязи между наблюдаемыми величинами, а также повысить чувствительность к мелкомасштабным особенностям кривой блеска [37]. В то же время метод скользящего среднего, базирующийся на сглаживании временного ряда, позволил эффективно выделить основные тренды и длительные циклические компоненты в изменчивости объекта [38].

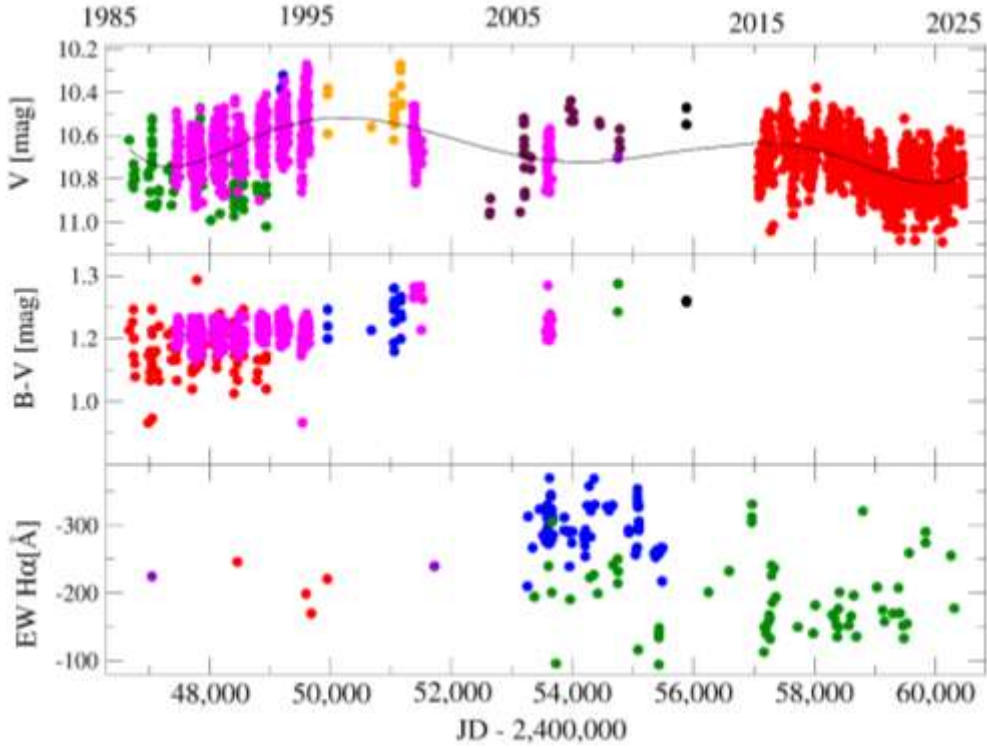


Рисунок 2 – Кривая блеска звезды MWC 342 в полосе V (верхняя панель), показатель цвета B – V (средняя панель) и эквивалентная ширина линии H α (нижняя панель). Различные символы соответствуют данным, полученным на следующих обсерваториях: Majdanak (пурпурный цвет), ТШАО (оранжевый), Ассы-Тургень (зелёный), Abastumani (синий), а также из каталогов CraO (фиолетовый), INTEGRAL (бордовый), APASS DR10 (чёрный) и ASAS-SN (красный). Данные ASAS-SN в полосе g приведены к полосе V путём смещения на 0.48 mag. Чёрная сплошная линия на верхней панели соответствует средней яркости в полосе V. Символы, представляющие значения эквивалентной ширины линии H α , получены из следующих источников: красный — [9], синий — [13], фиолетовый — [18], зелёный — настоящая работа.

Несмотря на качественное согласие результатов, полученных двумя различными подходами, последующий спектральный анализ не выявил достоверной связи обнаруженных периодов с физическими механизмами, такими как вращение звезды или орбитальное движение в рамках возможной двойной системы (рис. 3). Отсутствие корреляции с характеристиками звёздной динамики указывает на то, что обнаруженная периодичность, вероятно, связана с изменениями в структуре или плотности околозвёздной оболочки. Такие вариации могут быть обусловлены нерегулярными выбросами вещества, перераспределением материи в диске или другими процессами, характерными для эволюционирующих объектов с феноменом B[e].

Из-за значительных неопределённостей, связанных как с величиной межзвёздного и околозвёздного поглощения, так и с расстоянием до MWC 342, её светимость долгое время оставалась определённой с невысокой точностью.

В одной из ранних работ расстояние до объекта было оценено примерно в 1 kpc на основе анализа закона межзвёздного поглощения, полученного из данных UBВ фотометрии для звёзд, проекционно расположенных вблизи направления на MWC 342 [7]. Позднее уточнение межзвёздной компоненты покраснения было выполнено на основе эквивалентных ширин (EW) наиболее выраженных диффузных межзвёздных полос (DIB), которые дали значение $E_{IS}(B - V) = 0.7 \pm 0.2 \text{ mag}$ [9].

Дополнительно был учтён вклад околозвёздного вещества в общее покраснение: вклад газовой компоненты оценен как $E_{ff}(B - V) \approx 0.3 \text{ mag}$, а пылевой — как $E_{dust}(B - V) \approx 0.5 \text{ mag}$ [9]. Приняв стандартное отношение полного визуального поглощения к селективному $\frac{A_V}{E(B-V)} = 3.1$, характерное для межзвёздной среды, была получена общая величина визуального поглощения $A_V = 3.7 \pm 0.6 \text{ mag}$. На

основании средней визуальной звёздной величины $V = 10.5 \text{ mag}$ и оцененного поглощения светимость объекта была определена как $\log\left(\frac{L}{L_{\odot}}\right) = 4.2 \pm 0.4$.

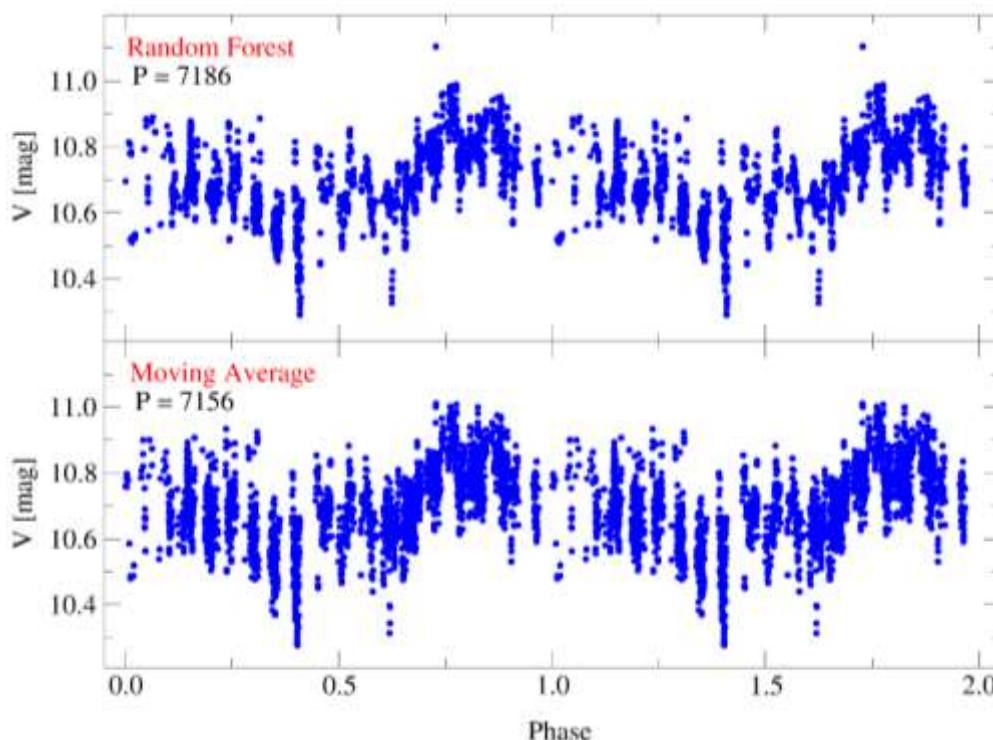


Рисунок 3 – Фазовые кривые яркости MWC 342, основанные на моделировании с использованием двух различных методов: случайного леса (верхний график) и скользящего среднего (нижний график).

При расчёте светимости не был учтён вклад околозвёздного континуума, обусловленного свободно-свободными и свободно-связанными переходами. Наличие такого континуума представляется очевидным, учитывая высокую интенсивность эмиссионного спектра и частичное заполнение излучением ряда линий поглощения, таких как H I, He I и Si II. Исключение вклада околозвёздного континуума из общего потока привело бы к снижению оценённой светимости самой звезды.

Ещё одна неопределённость в определении светимости связана с выбором значения визуальной яркости фотосферы звезды. В работе [9] в качестве усреднённой величины была использована яркость в полосе V, полученная на основе фотометрических наблюдений, доступных на конец XX века ($V = 10.5 \text{ mag}$). Наблюдения, проведённые в XXI веке, расширили диапазон яркости, однако среднее значение визуальной яркости существенно не изменилось. Тем не менее использование среднего значения может быть некорректным, поскольку эмиссионные линии и, соответственно, вклад околозвёздного

континуума сохраняются даже в периоды минимальной яркости.

В интерферометрических наблюдениях MWC 342 на длине волны $10.7 \text{ }\mu\text{m}$ с использованием 10-метрового телескопа Кека была обнаружена асимметричная структура — пылевой диск, который ограничено разрешен вдоль главной оси (полная ширина при полумаксимуме, FWHM, $39 \pm 11 \text{ mas}$) и неразрешён вдоль малой оси (FWHM $37 \pm 37 \text{ mas}$) [39]. Эти результаты согласуются с тем, что околозвёздный диск наблюдается почти с ребра, что может объяснять наличие профилей с двойным пиком и значительно более слабым синесмещенным пиком, а также глубокой центральной дисперсии в высоких членах серии Бальмера (см. рис. 3 в [9]).

Кроме того, в [39] была использована диаграмма зависимости размера молодых звезд от светимости в среднем ИК-диапазоне для оценки светимости объекта, которая оказалась около $10^4 L_{\odot}$ [39].

Согласно данным Gaia DR3 [40], расстояние до MWC 342 составляет $D = 1.68 \pm 0.33 \text{ kpc}$, что

примерно на 70% больше по сравнению с оценкой из [9]. Объединение наших спектров CFHT с высоким разрешением для увеличения отношения сигнал/шум в континууме до ≥ 250 позволило повысить точность оценки межзвездного поглощения, основанной на значениях DIB EW, по сравнению с результатами [9].

Используя диффузные межзвездные полосы на 5780, 5797 и 6614 Å с эквивалентными ширинами (EW) 0.35 Å, 0.14 Å и 0.17 Å соответственно, а также калибровки из [41, 42], мы определили межзвездное покраснение $E(B - V) = 0.8 \pm 0.1 \text{ mag}$. Эта оценка практически совпадает с данными карты межзвездного поглощения [43] для расстояния до объекта, опубликованного в Gaia DR3 в направлении MWC 342.

Для новой оценки светимости объекта необходимо учесть вклад околозвездного континуума, обусловленного процессами «свободно-свободного» и «связанно-свободного» излучений. При этом важно отметить, что даже при минимальной оптической яркости около $V \approx 11.2 \text{ mag}$ спектр эмиссионных линий остается достаточно интенсивным.

Это свидетельствует о существенном присутствии околозвездного континуума. Однако, его вклад в общее визуальное излучение не должен быть слишком большим, так как в спектре по-прежнему наблюдаются отдельные линии поглощения, которые, скорее всего, формируются в атмосфере самой звезды. Исходя из этих соображений, можно приблизительно оценить, что вклад околозвездного континуума в визуальную яркость составляет $\approx 0.5 \text{ mag}$.

Таким образом, учитывая обновленные согласованные данные о расстоянии до MWC 342 и межзвездном покраснении, а также предполагаемую яркость фотосферы в диапазоне $\approx 11.5 - 12 \text{ mag}$ и полное межзвездное поглощение $A_V \approx 3.7 \text{ mag}$, можно оценить абсолютную визуальную звездную величину как $M_V \approx -3.1 \text{ mag}$. С учетом болометрической поправки $BC_V \approx -1.9 \text{ mag}$, соответствующей эффективной температуре $T_{\text{eff}} = 20,000 \text{ K}$, получаем болометрическую светимость $\log\left(\frac{L}{L_\odot}\right) \sim 3.9$.

Следует отметить, что эта оценка подвержена значительной неопределенности, связанной с погрешностями в определении расстояния, вклада околозвездного континуума, значений T_{eff} и общего поглощения. Тем не менее, полученное значение находится в пределах ранее предложенных диапазонов и согласуется с ними с учетом допустимой погрешности.

Нижний предел светимости ($\log\left(\frac{L}{L_\odot}\right) \sim 3.5$) соответствует положению звезды раннего В-типа на линии начальной главной последовательности. Маловероятно, чтобы лежащая в основе система имела столь низкую светимость исключительно из-за особенностей температурного режима поверхности звезды.

Если объект является одиночной звездой, то ее предполагаемые фундаментальные параметры соответствуют начальному диапазону масс порядка $6 - 10 M_\odot$, при условии что вклад околозвездного вещества – как в виде дополнительного поглощения, так и в виде излучения – в наблюдаемую яркость не отличается существенно от принятых оценок.

Присутствие значительного количества околозвездного материала вокруг звезды средней массы является довольно необычным явлением, за исключением случая, если она находится в ранней стадии эволюции до достижения главной последовательности. Однако, вероятность такого сценария низка, поскольку вблизи объекта не обнаружено активной области звездообразования, а также наблюдается быстрое снижение инфракрасного потока при длинах волн около $\lambda \sim 10 \mu\text{m}$.

Последняя особенность типична для объектов, не относящихся к молодой популяции и указывает на более зрелый эволюционный статус звезды.

На основе новых данных, полученных с инфракрасных обзоров неба (*IRAS*, *Herschel*, *AKARI*, *MSX*, *WISE*), была выполнена более точная реконструкция РЭС MWC 342 в инфракрасном диапазоне, охватывающем длины волн от 0.3 до 160 μm . Эти данные позволили заменить устаревшие и менее надёжные значения потоков, представленных в начале 1990-х годов на основе измерений спутника *IRAS*, которые были ограничены по чувствительности.

Обновлённое распределение энергии (рис. 4) демонстрирует устойчивый спад потока в направлении длинноволновой части спектра, что свидетельствует об отсутствии значительного количества холодной пыли в околозвездной среде.

Отсутствие характерного "плато" или вторичного подъёма потока в области 0.3 - 160 μm указывает на то, что субмиллиметровая и дальнеинфракрасная компоненты РЭС представлены слабо, а значит, присутствие большого количества холодной околозвездной пыли в оболочке звезды маловероятно.

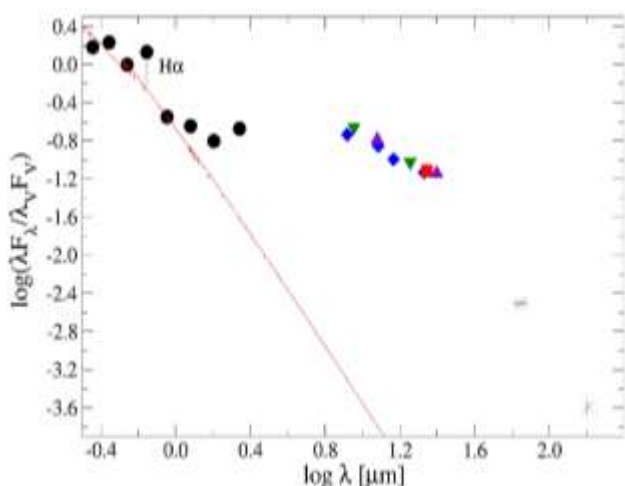


Рисунок 4 – Распределение энергии спектра MWC 342 в диапазоне 0.3–160 μm с наложением модели Kurucz для температуры 25 000 K [44].

В то же время, в спектре чётко прослеживается избыток инфракрасного излучения по сравнению с предсказаниями чисто фотосферной модели для горячей звезды. Это избыточное ИК-излучение, наблюдаемое начиная с ближнего инфракрасного диапазона, скорее всего, обусловлено переизлучением звёздного света горячей пылью, локализованной в диске или уплотнённой оболочке, что типично для объектов с феноменом V[e]. Данный факт поддерживает идею о наличии сложной, неоднородной околозвёздной среды, включающей в себя как газовую, так и пылевую компоненты.

Заключение

В настоящей работе представлены результаты спектроскопического и фотометрического анализа звезды с эмиссионными линиями MWC 342, природа и эволюционный статус которой до настоящего времени остаются не до конца определёнными. Проведённый анализ показал, что профили и положения спектральных линий, а также оптическая яркость объекта демонстрируют сильную переменность, не обладающую строгой периодичностью. Вместо этого наблюдаются квазипериодические изменения, которые, по-видимому, обусловлены вариациями оптической глубины в околозвёздной среде. В частности, обнаружены признаки длительного, порядка двух десятилетий, квазипериода, проявляющегося в изменении фотометрических характеристик.

Кроме того, выявлена антикорреляция между эквивалентной шириной линии H α и оптической яркостью, что может свидетельствовать о

Особое внимание заслуживает заметное отклонение фотометрической точки в полосе R (примерно при $\log \lambda \approx -0.05$), проявляющееся в виде превышения наблюдаемого потока над предсказанным моделью. Это отклонение связано с сильной эмиссионной линией H α , расположенной в центральной части полосы пропускания R-фильтра ($\lambda = 6563 \text{ \AA}$). Известно, что у звёзд типа V[e], включая MWC 342, линия H α может демонстрировать значительные изменения интенсивности и эквивалентной ширины (EW), обусловленные изменениями в структуре и плотности околозвёздной оболочки или диска. Это согласуется с результатами спектроскопических наблюдений, показывающих корреляцию между изменениями EW линии H α и оптической яркостью объекта.

Сравнение наблюдаемого РЭС с теоретическими фотосферными моделями атмосфер горячих звёзд, в частности моделью Kurucz, подтверждает высокую эффективную температуру центрального источника — порядка $\sim 25\,000 \text{ K}$. Это значение соответствует спектральному классу B1 и согласуется с результатами спектрального анализа и классификацией объекта как звезды V[e]-типа.

Таким образом, обновлённые данные в инфракрасном диапазоне позволили не только устранить ранее существовавшие неопределённости, связанные с характеристиками пылевой компоненты, но и предоставили важную информацию для более точного понимания физической природы околозвёздной среды звезды MWC 342.

изменениях основного континуума как одной из причин усиления эмиссионных признаков. Проведённый спектральный анализ с использованием данных более высокого спектрального разрешения и лучшего отношения сигнал/шум не подтвердил наличие ранее предполагаемых эмиссионных линий He II.

Определение межзвёздного покраснения, основанное на современных фотометрических картах и усовершенствованных оценках вклада околозвёздного континуума, позволило уточнить светимость объекта, которая оказалась равной $\log \left(\frac{L}{L_{\odot}} \right) \sim 3.9$. Эта величина находится в согласии с ранее опубликованными оценками, хотя остаётся значительная неопределённость (до 0.4 dex), обусловленная совокупным влиянием факторов, включая точность определения расстояния, температурные параметры и особенности распределения излучения в околозвёздной среде.

Полученные результаты подчёркивают необходимость проведения дальнейших, систематических и многоволновых наблюдений за MWC 342. Особое значение имеют инфракрасные исследования, позволяющие глубже понять структуру и эволюцию пылевой и газовой оболочки. Организация длительного фотометрического и спектроскопического мониторинга с высоким временным разрешением представляется особенно актуальной для установления механизмов, лежащих в основе наблюдаемой переменности. Сочетание таких наблюдений с анализом данных спутниковых обзоров, таких как ASAS-SN, существенно расширит понимание физических процессов, происходящих в системе.

Таким образом, MWC 342 остаётся ярким представителем группы звёзд с феноменом B[e]

Благодарность

В этом исследовании использовалась база данных SIMBAD, работающая в CDS, Страсбург, Франция; информационные продукты SAO/NASA ADS, ASAS и Gaia. Эта статья частично основана на наблюдениях, полученных на 2.1-метровом телескопе Национальной астрономической обсерватории San Pedro Martir (Нижняя Калифорния, Мексика), 2.1-метровом телескопе Otto Struve и 2.7-метровом телескопе имени Harlan J. Smith в обсерватории McDonald (Техас, США), на телескопе Canada–France–Hawaii (CFHT), которым управляет Национальный исследовательский совет Канады, Национальный институт наук об университетах Национального центра научных исследований Франции и Гавай-

ского университета; на телескопе Mercator на острове Ла-Пальма фламандским сообществом, в испанской обсерватории del Roque de los Muchachos Института астрофизики Канарских островов, на 2-метровом Гималайском телескопе Chandra (Ханле, Индия) и на 0.81- метровом телескопе обсерватории Three College (Северная Каролина, США). Благодарим за техническую поддержку Dan Gray (Sidereal Technology company), Joshua Haislip (Университет Северной Каролины в Чапел-Хилле) и Mike Shelton (Университет Северной Каролины в Гринсборо), а также за финансирование со стороны Колледжа искусств и наук Университета Северной Каролины в Гринсборо и факультета физики и астрономии этого Университета.

В дальнейшем планируется провести аналогичный анализ других активных представителей группы FS CMa, таких как FS CMa (HD 45677) и HD 50138, с целью формирования более полного представления об эволюционном статусе объектов данной категории. Обзор последних результатов по объектам группы FS CMa можно найти в [11].

Литература

1. P. W. Merrill, C. G. Burwell, *Astrophys. J.* **78**, 87 (1933). <https://doi.org/10.1086/143490>
2. V. P. Swings, O. Struve, *Astrophys. J.* **97**, 194 (1943). <https://doi.org/10.1086/144513>
3. S. L. Geisel, *Astrophys. J.* **161**, L105 (1970). <https://doi.org/10.1086/180580>
4. D. A. Allen, J. P. Swings, *Astron. Astrophys.* **47**, 293-302 (1976).
5. Y.K. Bergner, A.S. Miroshnichenko, I.S. Sudnik, et al. *Astrophysics* **32**, 109-119 (1990). <https://doi.org/10.1007/BF01005474>
6. N. Brosch, E. M. Leibowitz, N. Spector, *Astron. Astrophys.* **65**, 259-263 (1978).
7. V. P. Arkhipova, A. P. Ipatov, *Sov. Astron. Lett.* **8**, 298–302 (1982).
8. H. J. G. L. M. Lamers, F.-J. Zickgraf, D. de Winter, L. Houziaux, & Zorec, J., *Astron. Astrophys.* **340**, 117-128 (1998).
9. A. S. Miroshnichenko, P. Corporon, *Astron. Astrophys.* **349**, 126-134 (1999).
10. A. S. Miroshnichenko, *Astrophys. J.* **667**, 497-504 (2007). <https://doi.org/10.1086/520798>
11. A. S. Miroshnichenko et al., *Galaxies* **11**, 36 (2023). <https://doi.org/10.3390/galaxies11010036>
12. J. N. Chkhikvadze, V. O. Kakhiani, E. B. Djaniashvili, *Astrophysics* **45**, 8-14 (2002). <https://doi.org/10.1023/A:1015386323943>
13. B. Kučerová, D. Korčáková, J. Polster, M. Wolf, V. Votruba, J. Kubát, P. Škoda, M. Šlechta and M. Křížek, *Astron. Astrophys.* **554**, A143 (2013). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201117437>
14. S. L. Grant et al., *Astrophys. J.* **926**, 229 (2022). <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ac450a>

15. G. Contarini, R. Gratton, in *Proceedings of the ESO Conference on Progress in Telescope and Instrumentation Technologies*, Garching 1992, p. 737.
16. R. G. Tull, Phillip J. MacQueen, Christopher Sneden, and David L. Lambert, *Publ. Astron. Soc. Pac.* **107**, 251-264 (1995). <https://doi.org/10.1086/133548>
17. N. Manset, J. F. Donati, in *Polarimetry in Astronomy*, SPIE **4843**, 425-436 (2003). <https://doi.org/10.1117/12.458230>
18. A. S. Miroshnichenko et al., *Galaxies* **11**, 8 (2023). <https://doi.org/10.3390/galaxies11010008>
19. S. Wang et al., in *SPIE Astronomical Telescopes and Instrumentation*, SPIE **4841**, 1145-1156 (2003). <https://doi.org/10.1117/12.461447>
20. S. Sriram et al., in *Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy VII*, SPIE **10702**, 2007-2021 (2018). <https://doi.org/10.1117/12.2313165>
21. G. Raskin et al., *Astron. Astrophys.* **526**, A69 (2011). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201015435>
22. J. Arnaud, N. Meunier, and M. Aurière, *European Astronomical Society Publications Series* **9**, 105 (2003). <https://doi.org/10.1051/eas:2003091>
23. C. S. Kochanek et al., *Publ. Astron. Soc. Pac.* **129**, 104502 (2017). <https://doi.org/10.1088/1538-3873/aa80d9>
24. K. Hart et al., [arXiv:2304.03791 \[astro-ph.IM\]](https://arxiv.org/abs/2304.03791) (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.03791>
25. W. Herbst, V. S. Shevchenko, *Astron. J.* **118**, 1043 (1999). <https://doi.org/10.1086/300966>
26. A. A. Henden, *J. Am. Assoc. Var. Star Obs.* **47**, 130 (2019).
27. J. Alfonso-Garzón et al., *Astron. Astrophys.* **548**, A79 (2012). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201220095>
28. R. M. Cutri et al., *VizieR Online Data Catalog* **2328**, II/328 (2021).
29. D. Ishihara et al., *Astron. Astrophys.* **514**, A1 (2010). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/200913811>
30. M. P. Egan, S. D. Price, K. E. Kraemer, *Astron. Soc. Pac. Meet. Abstr.* **203**, 57.08 (2003).
31. G. Neugebauer et al., *Astrophys. J.* **278**, L1-L6 (1984); *Research supported by the Science and Engineering Research Council and NASA* **278**, L1-L6 (1984) <https://doi.org/10.1086/184259>
32. G. Marton et al., *Astron. Astrophys.* **688**, A203 (2024). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202450032>
33. Y. Andrillat, C. Jaschek, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **136**, 59-63 (1999).
34. W. Schmutz et al., *Astrophys. J.* **372**, 664-682 (1991). <https://doi.org/10.1086/170009>
35. F. J. K. Zickgraf, *Astron. Astrophys.* **408**, 257-285 (2003). <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20030999>
36. M. Fukugita et al., *Astronomical Journal* **111**, 1748 (1996). <https://doi.org/10.1086/117915>
37. L. Breiman, *Machine Learning* **45**, 5-32 (2001). <https://doi.org/10.1023/A:1010933404324>
38. R. J. Hyndman, *Moving Averages In book: International Encyclopedia of Statistical Science Springer* (2011). https://doi.org/10.1007/978-3-642-04898-2_380
39. J. D. Monnier et al., *Astrophys. J.* **647**, 444 (2006). <https://doi.org/10.1086/505340>
40. C. A. L. Bailer-Jones et al., *Astron. J.* **161**, 147 (2021). <https://doi.org/10.3847/1538-3881/abd806>
41. G. H. Herbig, *Astrophys. J.* **407**, 142-156 (1993). <https://doi.org/10.1086/172481>
42. J. Kos and T. Zwitter, *Astrophys. J.* **774**, 72 (2013). <https://doi.org/10.1088/0004-637X/774/1/72>
43. G. M. Green et al., *Astrophys. J.* **887**, 93 (2019). <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab5962>
44. F. Castelli and R. L. Kurucz, *arXiv (astro-ph/0405087)* (2004). <https://doi.org/10.48550/arXiv.astro-ph/0405087>

История статьи:

Поступила – 20.05.2025

Принята – 10.06.2025

Article history:

Received 20 May 2025

Accepted 10 June 2025

Информация об авторах:

1. **Акниязова Айгерим Жанатовна** (автор корреспондент) – соискатель PhD, старший преподаватель кафедры электроники и астрофизики КазНУ им. аль-Фараби, г. Алматы Казахстан. e-mail: aigerimakniyazova@gmail.com

2. **Мирошниченко Анатолий Сергеевич** – директор обсерватории Three College и планетария UNCG, профессор факультет физики и астрономии Университета Северной Каролины в Гринсборо, г. Гринсборо США. e-mail: a_mirosh@uncg.edu

3. **Жанабаев Зейнулла Жанабаевич** – д.ф.-м.н., профессор кафедры электроники и астрофизики КазНУ им. аль-Фараби, г. Алматы Казахстан. e-mail: zhanabayev.zeynulla@gmail.com

Information about authors:

1. **Aigerim Akniyazova** (corresponding author) – PhD student, senior lecturer, ¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: aigerimakniyazova@gmail.com

2. **Anatoly Miroshnichenko** – Dr., Prof., Director of the Three College Observatory and UNCG Planetarium, Professor, Department of Physics and Astronomy, University of North Carolina at Greensboro, Greensboro, USA. e-mail: a_mirosh@uncg.edu

3. **Zeinulla Zhanabaev** – Dr., Prof. of the Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: zhanabayev.zeynulla@gmail.com

Плазма физикасы

Plasma Physics

Физика плазмы

B.K. Rakhadilov^{1,2} , N.M. Magazov¹ , G.K. Uazyrkhanova¹ ,

Z.E. Aringozhina¹ , Z.K. Uazyrkhanova¹ , A.N. Askhatov^{1*} 

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

²LLP "PlasmaScience", Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

*e-mail: ashatovarnur@gmail.com

ION-PLASMA NITRIDING OF TITANIUM ALLOYS: TECHNOLOGIES, ADVANTAGES, AND LIMITATIONS

To improve the surface properties of titanium and its alloys, numerous surface modification processes have been developed through the formation of coatings, films, or layers. One such treatment method is plasma nitriding, which is widely used to enhance the surface properties of titanium and its alloys. The diffusion of nitrogen into the bulk material creates a continuous hardness profile, thereby providing optimal support for the hard surface layer. This study examines the ion-plasma nitriding technology for the treatment of titanium alloys. The fundamental principles of ion-plasma nitriding, its advantages, and limitations are thoroughly analyzed, and the optimal process parameters that contribute to increasing the wear resistance and durability of titanium alloys are identified. The study includes an analysis of modern approaches and trends in the development of this technology, allowing for the identification of the most efficient processing modes and improvements in the characteristics of the resulting layers. Special attention is given to the influence of processing parameters such as temperature, pressure, gas mixture composition, and exposure time on the formation of the structure and properties of the nitrided layers. Research has shown that properly selected processing modes not only increase the microhardness and wear resistance of the surface but also reduce the coefficient of friction, which is particularly important for components operating under high mechanical loads. In addition, ion-plasma nitriding is compared with other surface modification methods for titanium, such as gas nitriding, laser hardening, and the application of hard coatings. The key advantages of this method have been identified, including the high uniformity of the nitrided layer, minimal dimensional changes in the components, and the environmental safety of the process. The obtained results can be used to optimize industrial processing technologies for titanium alloys, enabling their expanded application in the aerospace, medical, and mechanical engineering industries, where high reliability and durability of materials are required.

Keywords: plasma, glow discharge, nitride phase, nitrogen, temperature, vacuum.

Б.К. Рахадиллов^{1,2}, Н.М. Магазов¹, Г.К. Уазырханова¹, З.Е. Арингожина¹,

Ж.К. Уазырханова¹, А.Н. Асхатов^{1*}

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

²"PlasmaScience" ЖШС, Өскемен, Қазақстан

*e-mail: ashatovarnur@gmail.com

Титан қорытпаларын ион-плазмалық азоттау: технологиялар, артықшылықтар және шектеулер

Титан мен оның қорытпаларының беткі қасиеттерін жақсарту мақсатында жабындар, үлбірлер немесе қабаттар түзе отырып, беткі қабатты түрлендірудің әртүрлі әдістері әзірленді. Осындай өңдеу тәсілдерінің бірі – плазмалық азоттау, ол титан мен оның қорытпаларының беткі қасиеттерін жетілдіру үшін ең кеңінен қолданылатын әдістердің бірі болып табылады. Азоттың көлемдік материалға диффузиясы қатты беткі қабатқа оңтайлы тірек болатын үздіксіз қаттылық профилін қамтамасыз етеді. Бұл жұмыста титан қорытпаларын өңдеуге арналған ион-плазмалық азоттау технологиясы зерттеледі. Ион-

плазмалық азоттаудың негізгі принциптері, оның артықшылықтары мен шектеулері жан-жақты қарастырылып, титан қорытпаларының тозуға төзімділігі мен ұзақ қызмет ету мерзімін арттыратын оңтайлы өңдеу параметрлері анықталған. Жұмыста заманауи тәсілдер мен технологияны дамыту үрдістері талданған, бұл ең тиімді өңдеу режимдерін анықтауға және алынған қабаттардың сипаттамаларын жақсартуға мүмкіндік береді. Әсіресе өңдеу параметрлерінің – температура, қысым, газ қоспасының құрамы мен экспозиция уақыты – азотталған қабаттардың құрылымы мен қасиеттерінің қалыптасуына әсеріне ерекше назар аударылған. Зерттеулер көрсеткендей, дұрыс таңдалған өңдеу режимдері беткі қабаттың микрокаттылығын және тозуға төзімділігін арттырып қана қоймай, сонымен қатар үйкеліс коэффициентін төмендетуге мүмкіндік береді, бұл әсіресе жоғары механикалық жүктемелер жағдайында жұмыс істейтін бөлшектер үшін аса маңызды. Сондай-ақ ион-плазмалық азоттау титанды беткі қабаттық түрлендірудің басқа әдістерімен, мысалы, газдық азоттау, лазерлік беріктендіру және қатты жабындар жағу тәсілдерімен салыстырылды. Әдістің негізгі артықшылықтары ретінде азотталған қабаттың жоғары біртектілігі, бөлшектердің өлшемдерінің өзгерісінің минималды болуы және процестің экологиялық қауіпсіздігі анықталды. Алынған нәтижелер титан қорытпаларын өңдеудің өндірістік технологияларын оңтайландыру үшін қолданылуы мүмкін. Бұл олардың авиация-ғарыш, медицина және машина жасау салаларында сенімділік пен ұзақ қызмет ету мерзімі талап етілетін жағдайларда қолданылуын кеңейтуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: плазма, жарқырау разряды, нитридті фаза, азот, температура, вакуум.

Б.К. Рахадиллов^{1,2}, Н.М. Магазов¹, Г.К. Уазырханова¹, З.Е. Арингожина¹,
Ж.К. Уазырханова¹, А.Н. Асхатов^{1*}

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

²ТОО "PlasmaScience", Усть-Каменогорск, Казахстан

*e-mail: ashatovarnur@gmail.com

Ионно-плазменное азотирование титановых сплавов: технологии, преимущества и ограничения

Для улучшения поверхностных свойств титана и его сплавов было разработано множество процессов модификации поверхности путем формирования покрытий, пленок или слоев. Одним из таких методов обработки является плазменное азотирование, которое наиболее широко используется для совершенствования поверхностных свойств титана и его сплавов. Диффузия азота в объемный материал создает непрерывный профиль твердости и, следовательно, обеспечивает оптимальную поддержку твердого поверхностного слоя. В данной работе исследуется технология ионно-плазменного азотирования для обработки титановых сплавов. Подробно рассмотрены основные принципы ионно-плазменного азотирования, его преимущества, ограничения, а также определены оптимальные параметры процесса, способствующие повышению износостойкости и долговечности титановых сплавов. Работа включает анализ современных подходов и тенденций в развитии технологии, что позволяет выявить наиболее эффективные режимы обработки и улучшить характеристики полученных слоев. Особое внимание уделено влиянию параметров обработки, таких как температура, давление, состав газовой смеси и время экспозиции, на формирование структуры и свойств азотированных слоев. Исследования показывают, что правильно подобранные режимы обработки позволяют не только увеличить микротвердость и износостойкость поверхности, но и снизить коэффициент трения, что особенно важно для деталей, работающих в условиях высоких механических нагрузок. Также проведено сравнение ионно-плазменного азотирования с другими методами поверхностной модификации титана, такими как газовое азотирование, лазерное упрочнение и нанесение твердых покрытий. Определены ключевые преимущества метода, среди которых высокая однородность азотированного слоя, минимальное изменение размеров деталей и экологическая безопасность процесса. Полученные результаты могут

быть использованы для оптимизации промышленных технологий обработки титановых сплавов, что позволит расширить их применение в авиационно-космической, медицинской и машиностроительной отраслях, где требуется повышенная надежность и долговечность материалов.

Ключевые слова: плазма, тлеющий разряд, нитридная фаза, азот, температура, вакуум.

Introduction

Today, one of the key industrial challenges is to ensure the strength and wear resistance of various metals and alloys used in industries such as mechanical engineering, automotive and aerospace. This is especially true for titanium products that are subjected to significant mechanical stresses, such as in joint endoprostheses and dental structures. Constant friction, cyclic loads, and interaction with various materials, microcracks are formed as a result of fatigue failure of the material [1], which can lead to material failure. Despite titanium's high corrosion resistance and strength, its surface remains relatively soft, which increases the risk of wear, especially when in contact with metallic or ceramic elements. This shortens the service life of titanium products and reduces their reliability in long-term operation. To improve wear resistance and increase the service life of titanium alloy products, a promising solution is the use of chemical heat treatment (CHT) [2,3]. Among the most widespread methods of chemical heat treatment are cementation [4], nitrocementation [5], boriding [6] and nitriding. Each of these methods has its own features, advantages and limitations, which determines their field of application. Among the methods and technologies of CVD, ion-plasma nitriding stands out as the most promising technology due to a significant number of advantages. This process is based on saturation of the metal surface with nitrogen using a plasma discharge, which makes it possible to form high-quality nitride coatings with high hardness and wear resistance.

Ion-plasma nitriding (IPN) is one of the promising technologies of surface treatment of materials, widely used to improve their mechanical and operational characteristics [7]. This technology is used to harden surfaces, improve corrosion resistance and increase wear resistance of metal products. IPN is widely used in various industries including

mechanical engineering, metalworking, automotive and aerospace industries, energy and medicine. The technology is actively used to modify parts such as engine components, gears, shafts, cutting tools (drills, milling cutters, dies) and other products that require increased durability and efficiency under harsh operating conditions. Unlike traditional nitriding methods, such as gas or salt nitriding, IPN is carried out under low-pressure conditions in a vacuum chamber, where plasma activates nitrogen atoms and ensures their effective penetration into the surface layer of the material. This allows the creation of nitride layers of high density and homogeneity. In addition, IPN technology is characterized by environmental safety, as it does not require the use of toxic impurities and chemical reagents. Modern requirements to parts and tools include increased durability and stability under extreme conditions - high loads, aggressive media and significant temperature fluctuations. Ion-plasma nitriding not only meets these requirements, but also provides additional economic benefits by reducing wear and extending the service life of products.

Ion plasma nitriding (IPN) technology continues to evolve rapidly, including the introduction of multi-cathode systems, the use of pulsed voltages, and combinations with other surface treatment methods such as oxidizing and coating. These improvements allow the method's capabilities to be significantly expanded and adapted to specific production requirements.

This paper discusses the basic principles of IPN operation, its advantages over other methods, existing limitations and ways of their elimination. It also presents an overview of current trends in the development of the technology and its application to the machining of complex metal shapes.

Ion-plasma nitriding process

The principle of operation of ion-plasma nitriding (IPN) is the formation of a nitride layer on the surface of a metal (steel, titanium, etc.). When voltage is applied between the anode (vacuum chamber body) and the cathode (the sample to be

treated), a glow discharge is excited, which knocks electrons out of the atoms of the working gas, forming positively charged ions [8]. These ions bombard the metal surface, penetrating it and promoting the formation of nitride phase. As a result, the surface

layer is modified, which increases its hardness, wear resistance and corrosion resistance. A detailed breakdown of the entire nitriding process is discussed below.

Fig. 1 shows the basic setup for ion-plasma nitriding. The vacuum chamber is pre-pumped to a pressure of 10^{-3} torr [9], which depends on the objectives and the type of metal to be processed. The required pressure is achieved by removing air and gas impurities using a pumping unit (Fig. 1, item 5). After the formation of plasma on the entire surface of the stand (Fig. 1, item 3) and the metal, the process of nitrogen ionization is activated. This process can be observed through the vacuum viewing window (Fig. 1, item 7). The working gas is exposed to a high-voltage electric field, which leads to its ionization, resulting in the formation of nitrogen ions (N^+) and neutral nitrogen atoms (Fig. 2). The nitrogen ions are accelerated in the electric field and collide with the metal surface, transferring their energy to it. This initiates processes such as the diffusion of nitrogen into the material and the formation of a nitride phase, which contributes to the hardness and wear resistance of the machined surface.

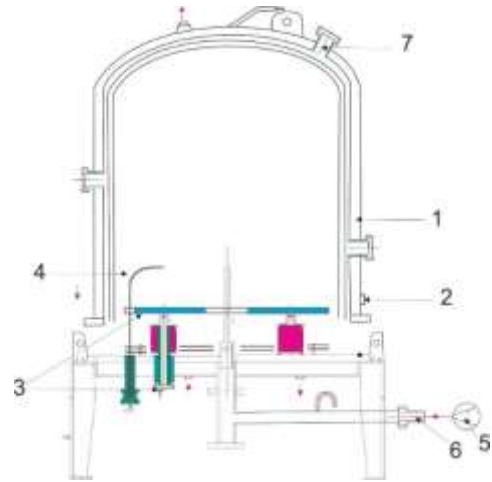


Figure 1 – Design of the IPN unit.
1-Vacuum chamber. 2-Anode. 3-Cathode (Support).
4-Temperature gauge of the vacuum chamber.
5-Pump unit. 6-Pressure relief plug. 7-Vacuum viewing window

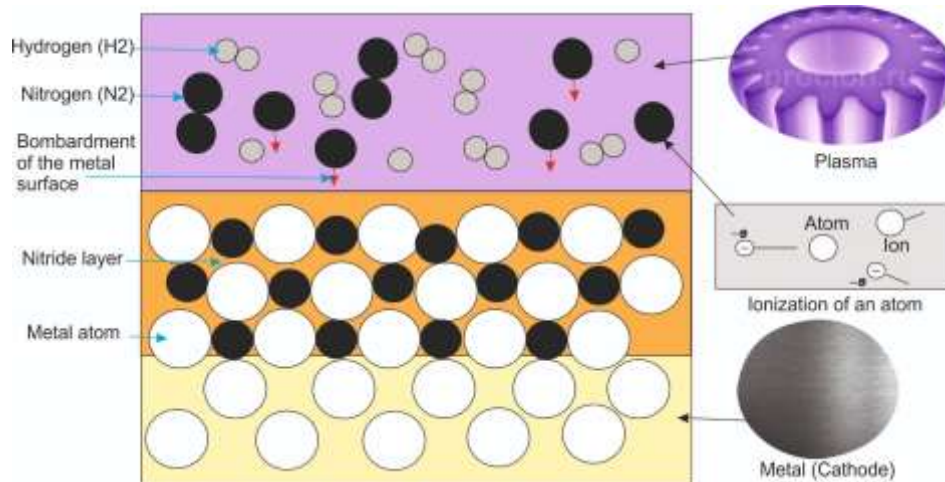


Figure 2 – The process of gas ion diffusion onto the metal surface.

When accelerated nitrogen ions and other plasma ions interact with the material surface, kinetic energy is transferred and converted into thermal energy. This process leads to heating of the treated sample. The temperature is controlled by a temperature sensor (Fig. 1, item 4) installed in the vacuum chamber. After reaching the set temperature, a timer is started, which fixes the duration of processing. At the end of the set time interval the temperature in the chamber is gradually reduced to room temperature. At the same time, a vacuum environment is maintained to prevent oxidation of the material surface. The voltage generator is only

switched off after the temperature has stabilized to avoid temperature fluctuations that could adversely affect the material properties. After the cooling process is completed, inert gas is fed into the working chamber to prevent the treated surfaces from coming into contact with oxygen. The pressure in the chamber is released by opening the plug (Fig. 1, pos. 6), which ensures safe completion of the treatment cycle. Nitriding of complex metal shapes is a technically challenging process because it depends on many factors, including plasma physics, part geometry, and gas distribution characteristics [10]. In a vacuum chamber, the plasma can be unevenly distributed,

especially in areas with recesses, threads, or complex topography. This leads to the fact that the internal surfaces of parts may not be saturated with nitrogen, which, in turn, contributes to the formation of "shadow zones" - areas with minimal ion density, where the nitriding process proceeds less efficiently [11].

Ion-plasma nitriding of complex metal shapes requires methods that ensure uniform treatment and efficient nitrogen saturation even in hard-to-reach places. To achieve this, various technological approaches and innovative solutions are used. The method of multi-cathode systems makes it possible to install several cathodes arranged around complex metal molds in a vacuum chamber. [12] The cathodes are placed in such a way as to minimize "shadow zones" and ensure uniform plasma exposure on all surfaces of the part. This ensures uniform plasma distribution and improves coatings in recesses, internal channels and complex topography. However, implementation of this technology requires additional cost and a skilled control approach. To provide better controllability of the plasma, pulse nitriding (pulse plasma) method is also used [13]. Which in turn applies voltages in the form of short pulses. This gives easy penetration of plasma into narrow channels and complex structures, minimizes overheating of parts with thin walls.

Favorable gas environments for diffusion to the surface of the metal product

Table 1 shows the different compositions of gas mixtures used in the ion-plasma nitriding process to achieve the specified properties of the treated material. The main active component in the mixtures is nitrogen (N_2), which provides saturation of the material surface with nitrogen atoms. Additionally, the gas mixtures may comprise hydrogen (H_2), argon (Ar), and hydrocarbons (e.g., methane - CH_4), which play an auxiliary role. Hydrogen (H_2) helps to remove oxides from the surface, improving the adhesion of the nitrided layers. Argon (Ar) stabilizes the plasma and regulates the ion energy, which affects the uniformity of the coating. Hydrocarbons (CH_4) are used to form combined coatings with increased wear resistance. The gas mixture is selected based on the requirements for thickness, hardness, corrosion resistance and other characteristics of the layer, as well as the properties of the treated material.

The role of each gas depends on the process objectives: nitrogen provides surface saturation, hydrogen cleans and stabilizes the process, inert gases improve surface activation, and hydrocarbons and oxygen complement the process, expanding the range of layer properties [14]. The optimum gas mixture is

selected taking into account the material to be processed and the coating requirements.

The process of ionic nitriding in hydrogen-containing media (ammonia, nitrogen-hydrogen mixture) is well enough studied in domestic and foreign literature [15]. Hydrogen plays an important role in the process of ion-plasma nitriding, acting as an active component of the gas mixture. Its presence affects the kinetics of ionic interaction, the formation of the surface layer structure and the quality of the resulting coating. However, the presence of a large amount of hydrogen in the saturating medium causes surface brittleness (especially sharp edges) and base hardening, which under certain conditions leads to a decrease in the strength and durability of structural elements [16].

Table 1 – Compositions of gas mixtures for ion-plasma nitriding [14]

Gas combination	Assignment
NH_3	Provides plasma discharge stability, improving nitriding uniformity.
$N_2 + H_2$	A standard blend that provides uniform nitrogen saturation of the surface and improved adhesion properties.
$N_2 + Ar$	Used to increase plasma stability and improve processing quality.
$N_2 + H_2 + CH_4$	To create carbonitride layers with high wear resistance.
$N_2 + Ar + H_2$	For complex processes requiring high layer homogeneity

Influence of ion-plasma nitriding process parameters

The temperature of the ion-plasma nitriding process is a critical parameter that determines the quality and characteristics of the formed nitrided layer. Properties such as penetration depth, phase composition, surface roughness and corrosion resistance depend on carefully selected temperature conditions [17]. After ion plasma treatment, a significant increase in the microhardness of the metal surface is observed. However, it should be taken into account that excessively high microhardness can lead to surface embrittlement, which negatively affects its adhesion properties [18,19]. In addition, it can be observed, methods with high temperatures have higher microhardness. Therefore, for different metals

and their alloys, an individual approach to the choice of temperature and processing conditions is required, which is due to the peculiarities of their structure and composition. The most widely used material for nitriding is steel, including its numerous grades. In the temperature range of 400-600 °C [17], which is typical for the processing of most types of steels, the diffusion rate of nitrogen atoms into the metal matrix increases significantly [17]. This leads to an increase in the thickness of the nitrided layer, which has a positive effect on its wear resistance. For titanium and its alloys, the process is usually carried out at higher temperatures - in the range of 700-900 °C, which is due to their specific physical and chemical properties [20]. With increasing temperature, the formation of ϵ -phase with increased corrosion resistance is possible. However, excessive heating can be accompanied by a decrease in the hardness of this phase, which in some cases limits its application. In addition, uncontrolled overheating can lead to deterioration of the properties of the base material, such as reduced ductility or internal stresses. Thus, temperature optimization is essential to balance layer thickness, hardness and corrosion resistance. A comprehensive approach, including temperature selection taking into account the properties of the treated material, makes it possible to achieve high efficiency of ion-plasma nitriding without compromising the mechanical characteristics of the base metal.

Vacuum also contributes to the stability and efficiency of the nitriding process [21]. Its application allows to remove impurities and oxide films from the surface of the material, contributing to a more uniform saturation of the metal with nitrogen. This is especially important in the processing of complex geometric shapes, where the uniformity of the coating significantly affects the mechanical properties of the product [22]. Maintaining a certain level of vacuum provides stability of the gas composition in the working chamber, which is important for the formation of a uniform and high-quality nitrided layer. According to [21], the use of vacuum allows to precisely regulate the parameters of the process of ion-plasma nitriding. The use of vacuum provides precise dosing of nitrogen and additional gas components such as hydrogen or argon, which has a positive effect on the intensity of diffusion processes and the thickness of the formed nitride layer. The vacuum environment reduces the probability of formation of pores, cracks, and undesirable inclusions in the surface layer, which contributes to its wear and corrosion resistance [21]. Despite the need for energy costs associated with vacuumization, the improvement in the quality of the formed layer and the increase in the service life of the machined parts compensate for these costs. Thus, vacuum is an

indispensable element for achieving high performance in nitriding processes.

The choice of vacuum level depends on the purpose of the process. Medium vacuum (10^{-2} - 10^{-3} Pa) is used to remove gaseous impurities such as oxygen and water vapor, which can negatively affect the process. It provides the necessary cleanliness of the working chamber before supplying the working gas (nitrogen or a mixture with other gases). The operating vacuum (50-500 Pa) is set after the supply of the operating gas and its value is determined by the process parameters, material type and product geometry. High vacuum (10^{-5} - 10^{-7} Pa) is used in specialized installations for maximum complete removal of contaminants, especially when working with high-alloy steels and titanium [8].

The next voltage parameter affects the formation of plasma and regulation of nitrogen ionization intensity. Under the action of high voltage between the anode and cathode, an electric field accelerating ions and electrons is generated, which contributes to the initiation and maintenance of the plasma state in the working chamber [18]. In addition, the voltage affects the energy distribution in the system, which directly affects the efficiency of the nitriding process. When the voltage is increased, an increase in the energy of nitrogen ions is observed, which promotes deeper penetration of nitrogen atoms into the metal and improves the properties of the nitrided layer, such as wear resistance and strength. However, excessive stress can lead to overheating of the material surface, which in turn can damage the material, especially with prolonged exposure, requiring precise control of the process parameters. In addition, stress affects the morphology and structure of the nitrided layer. At high stress, accelerated nitrogen ions activate the interaction processes with the material, leading to the formation of denser and more wear-resistant layers. However, excessive stress can promote the formation of unfavorable phases such as the ϵ -phase, which improves corrosion resistance but can reduce the hardness of the coating. Thus, the optimal choice of voltage for ion-plasma nitriding should take into account the specifics of the material, the type of product, the requirements for the properties of the nitrided layer, and other process parameters [8]. It is important to ensure the voltage balance in order to achieve the desired mechanical and physicochemical characteristics, minimizing the risk of material damage and the occurrence of undesirable phases.

The time of ion-plasma nitriding is an important parameter determining the thickness, phase composition, and mechanical characteristics of the formed nitrided layer [23]. Increasing the treatment time promotes the growth of the diffusion layer thickness due to the intensification of the diffusion of

nitrogen atoms into the metal matrix, although over time the process slows down due to the decrease in the concentration gradient. The duration of exposure affects the phase composition of the layer: at early stages, the γ' -nitride phase predominates, while longer nitriding promotes the formation of ε -phase with increased corrosion resistance [24]. However, excessive processing time can lead to the formation of saturated nitrides (e.g., TiN, CrN), increased surface roughness and reduced ductility of the base material due to internal stresses and microcracks. In addition, excessive processing time increases energy consumption, reducing cost effectiveness. Thus, to ensure a uniform nitrided layer with optimum mechanical properties such as hardness, wear resistance and corrosion resistance, the process time must be carefully optimized depending on the

material, product geometry and operational requirements. Table 2 presents a comparative analysis of key parameters of the ion-plasma nitriding process and their influence on the characteristics of the coatings. The parameters included - temperature, pressure, voltage, gas mixture composition and treatment duration - are critical for the formation of nitride layers with optimum mechanical properties. Analysis of experimental data shows that for each of these parameters, there is an optimal range of values that provides a balance between hardness, wear resistance, corrosion resistance, and minimization of undesirable effects [25] such as overheating or non-uniformity of the coating. This information will be useful for further research in the field of surface treatment of titanium and its alloys.

Table 2 – Influence of ion-plasma nitriding parameters on coating characteristics

Process parameter	Effect on coverage	Mechanism of influence	Analysis of experimental data	Conclusions
Temperature	Increasing hardness and wear resistance, formation of nitride phases	Diffusion of nitrogen atoms into the matrix, formation of ε - and γ' -phases	Optimum temperature for titanium: 700-900 °C, for steels: 400-600 °C. Excessive temperature can lead to a decrease in ductility	Temperature conditions should be selected individually for each material
Chamber pressure	Influence on the uniformity of nitrogen saturation	Removing impurities, improving plasma stability	Medium vacuum (10^{-2} - 10^{-3} Pa) is required for removing impurities, working vacuum (50-500 Pa) is required for processing	Vacuum optimization reduces the probability of defect formation
Voltage	Determines ion energy, depth of diffusion	Acceleration of ions in the electric field	Higher stress increases the hardness of the coating, but excessive stress can cause overheating	Balance between energy and the possibility of surface overheating
Gas mixture composition	Effect on structure and adhesion of coatings	Regulation of interaction and ionization kinetics	Mixtures of $N_2 + H_2$, $N_2 + Ar$, $N_2 + CH_4$ allow to obtain coatings with different properties	Selection of the mix depends on the requirements of the coating
Treatment duration	Increase in the thickness of the nitride layer	Continuous diffusion of nitrogen,	The coating thickness increases with increasing time, but overheating and roughness may occur	Optimized processing time reduces energy costs and improves coating properties

Conclusion

Ion-plasma nitriding is a highly efficient method of chemical and thermal treatment of metal surfaces, which allows to significantly improve the performance characteristics of products. By using

plasma in a vacuum chamber, a deep and uniform saturation of the surface with nitrogen is achieved, resulting in the formation of a strong nitride layer. This layer provides a significant increase in hardness,

wear resistance, fatigue strength and corrosion resistance of materials without changing their dimensions and structure. The main advantage of the method is its ability to provide precise control of process parameters such as temperature, pressure, gas composition and ion current density. This allows the process to be customized to meet the specific machining requirements of different alloys and steels. In addition, ion-plasma nitriding is environmentally friendly and cost-effective compared to traditional nitriding methods such as gas or liquid nitriding. The technology is widely used in mechanical engineering, aerospace, automotive and power generation. It is used to treat parts subject to high mechanical stress and friction, such as gears, shafts, dies and cutting tools. Due to the possibility of localized machining, this method is also used to modify surfaces of

complex geometric shapes. The development of ion-plasma nitriding is aimed at improving plasma sources, reducing energy consumption and expanding the range of processed materials. Studies on combining ion-plasma nitriding with other methods of surface hardening, such as nitro cementation and ion alloying, are underway, which opens new horizons in the creation of high-performance coatings with specified properties. Thus, ion-plasma nitriding is the most important technology of modern materials science, providing reliability, durability and high performance of products in a wide range of industries. Its further development and integration with innovative technologies will contribute to the creation of new materials and structures that meet the growing requirements for strength and durability under conditions of intensive operation.

References

- 1 A. A. Shanyavskiy, *Civil Aviation High Technologies (Nauchnyi Vestnik MGTU GA)* 179, 33-44 (2012). (In Russ.)
- 2 C. Zhao, et al., *J. Biomed. Mater. Res. Part B: Appl. Biomater* 95B(2), 387-396 (2010).
<https://doi.org/10.1002/jbm.b.31728>
- 3 B. Rakhadilov, Z. Satbayeva, et al, *Materials* 14(8), 1928 (2021). <https://doi.org/10.3390/ma14081928>
- 4 P. Kula, R. Pietrasik, and K. Dybowski, *J. Mater. Process. Technol.* 164, 876-881 (2005).
<https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2005.02.145>
- 5 D.J. Shen et al., *Mater. Sci. Eng. A* 458 (1-2), 240-243 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.12.067>
- 6 S.C. Singhal, *Thin Solid Films* 45 (2), 321-329 (1977). [https://doi.org/10.1016/0040-6090\(77\)90265-6](https://doi.org/10.1016/0040-6090(77)90265-6)
- 7 V.A. Belous, G. I. Nosov, I. O. Klimenko, *Probl. Atomic Sci. Technol.* 111, 73-82 (2017).
- 8 Yu.V. Zaitsev, A.V. Solovyov, K.V. Nosachev, *Electronic journal "Researched in Russia"*, 1666-1672 (2004). (In Russ.)
- 9 <https://ionmet.ru/> Ion-plasma nitriding (IPN). (In Russ.)
- 10 K.H. Kim, J.S. Oh, *Advanced Techniques for Surface Engineering*, (Elsevier, Amsterdam, 1992).
- 11 K-T. Rie, E. Menthe, A. Matthews, K. Legg, J. Chin, *MRS Bull.*, 21(8), 46-51 (1996).
<https://doi.org/10.1557/S0883769400035715>
- 12 H. Dou, C. Zhou, et al, *Materials* 16(24), 7616 (2023) <https://doi.org/10.3390/ma16247616>
- 13 A. Dasgupta, K. Parasuraman, M. Vijayalakshmi, V. Raghunathan, *J. Mater. Sci.* 42 (20), 8447-8453 (2007).
<https://doi.org/10.1007/s10853-007-1783-7>
- 14 M. Karakan, A. Alsaran, A. Çelik, *Materials Characterization* 49 (3), 241-246 (2002).
[https://doi.org/10.1016/S1044-5803\(03\)00010-X](https://doi.org/10.1016/S1044-5803(03)00010-X)
- 15 E.V. Berlin, N.N. Koval, L.A. Seidman, *Plazmennaya khimiko-termicheskaya obrabotka stal'nykh poverkhnostnykh detaley [Plasma Chemical-Thermal Treatment of Steel Surface Parts]*, (Technosphere, Moscow, 2012) 46 p. (In Russ.)
- 16 X. Bingzhong, Z. Yingzhi, *Surf. Eng.* 3(3), 226-232 (1987). <https://doi.org/10.1179/sur.1987.3.3.226>
- 17 M. Yakupova, N. Vasiliev, [Steel nitriding - principle of operation, advantages and types], available at: <https://stankoff.ru/> (In Russ.)
- 18 R.Sh. Nagimov, R.K. Vafin, *Bull. Nosov Magnitogorsk State Technical University*, 22(4), 111-119 (2024). (In Russ.)
- 19 Yu.G. Khusainov, D.R. Lapitsky, R.S. Yesipov, *Bull. Ufa State Aviation Technical University* 22(1), 29-35 (2018). (In Russ.)
- 20 V.A. Burdovitsin, et al., *Surf. Coat. Technol.* 358, 726-731 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.11.081>
- 21 D.P. Borisov, V.M. Kuznetsov, V.A. Slabodchikov, [Method of Vacuum-Plasma Nitriding of Stainless Steel Products in a Low-Pressure Arc Glow Discharge], Patent RU2596554 C1 10 Sept. 2016. (In Russ.)
- 22 S.A. Gerasimov, L.I. Kuksenova, et al, *Nauka i obrazovanie: nauchnoye izdaniye MGTU im. N.E. Baumana* 06 (2013). (In Russ.)
- 23 E.V. Astrashab, A.N. Grigorichik, et al, *Vestnik of Polotsk State University. Part B. Industry. Applied Sciences* 3, 49-54 (2019) (In Russ.)
- 24 Ion-plasma nitriding: current state and prospects, *Collection of scientific papers "Materials and Technologies"*, 210-215 (2023). <https://journals.psu.by/industry/article/view/515>
- 25 A.A. Shanyavskiy, *Sci. Bull. MSTU GA* 179, 32-44 (2012). (In Russ.)

Article history:

Received 6 March 2025

Received in revised form 21 May 2025

Accepted 02 June 2025

Information about authors:

1. **Bauyrzhan Rakhadilov** – PhD, Leading Researcher of "PlasmaScience" LLP Associate Professor of D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: rakhadilovb@gmail.com

2. **Nurtoleu Magazov** – researcher of the scientific center "Protective and functional coatings" D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: magazovn@gmail.com

3. **Gulzhaz Uazyrkhanova** – Associate Professor of the Center of Physics at D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: guazyrhanova@edu.ektu.kz

4. **Zarina Aringozhina** – researcher of the scientific center "Protective and functional coatings" D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: zaringozhina@edu.ektu.kz

5. **Zhuldyz Uazyrkhanova** – researcher of D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: ZhUazirhanova@edu.ektu.kz

6. **Arnur Askhatov** (corresponding author) – Student of D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenagorsk, Kazakhstan, e-mail: ashatovarnur@gmail.com

Мақала тарихы:

Түсті – 06.03.2025

Түзетілген түрде түсті – 21.05.2025

Қабылданды – 02.06.2025

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Рахадиллов Бауыржан Қорабаевич** – PhD, «PlasmaScience» ЖШС жетекші ғылыми қызметкері, Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университетінің доценті, Өскемен, Қазақстан, e-mail: rakhadilovb@gmail.com

2. **Мағазов Нұртөлеу Мағзұмбекович** – Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті «Қорғаныс және функционалдық жабындар» ғылыми орталығының ғылыми қызметкері, Өскемен, Қазақстан, e-mail: magazovn@gmail.com

3. **Уазырханова Гүлжаз Кеңесханқызы** – Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университетінің физика орталығының доценті, Өскемен қ., Қазақстан, e-mail: guazyrhanova@edu.ektu.kz

4. **Арингожина Зарина Ержановна** – Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университетінің «Қорғау және функционалдық жабындар» ғылыми орталығының ғылыми қызметкері, Өскемен, Қазақстан, e-mail: zaringozhina@edu.ektu.kz

5. **Уазырханова Жұлдыз Кеңесханқызы** – Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университетінің ғылыми қызметкері, Өскемен, Қазақстан, e-mail: ZhUazirhanova@edu.ektu.kz

6. **Асхатов Арнұр Нұржанович** (автор-корреспондент) – Д.Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университетінің студенті, Өскемен, Қазақстан, e-mail: ashatovarnur@gmail.com

**Конденсирленген күй физикасы және материалтану
проблемалары. Наноғылым**

**Condensed Matter Physics and Materials Science Problems.
Nanoscience**

**Физика конденсированного состояния и проблемы
материаловедения. Нанонаука**

МРНТИ 29.19.25

<https://doi.org/10.26577/RCPH20259325>А. Танирберген^{1*}, Н. Амангелди¹, Ш. Реванкар², Г. Ергалиулы¹.¹Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан²Университет Пурдью, Индиана, США

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

РОЛЬ СПЛАВОВ FeCrAl В ОБЕСПЕЧЕНИИ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ И БЕЗОПАСНОСТИ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

С целью разработки оболочек ядерного топлива, обладающих стойкостью в аварийных условиях, сплавы FeCrAl рассматриваются как важный материал в области ядерной энергетики. Эти сплавы демонстрируют отличную устойчивость к коррозии и окислению при высоких температурах и в агрессивной среде. Кроме того, они обладают теплопроводностью, не уступающей современным циркониевым сплавам, используемым в настоящее время. Однако в процессе эксплуатации ядерного реактора под воздействием ионизирующего излучения механические свойства материала могут изменяться, приводя к радиационному упрочнению. В данной статье рассматриваются основные экспериментальные методы – наноиндентация и испытания на микротвёрдость – и теоретические подходы, такие как модель Никса-Гао, теория дисперсионного барьерного упрочнения (DBH), теория функционала плотности (DFT), молекулярная динамика (MD) и дискретная дислокационная динамика (DDD), применяемые для изучения процесса упрочнения в сплавах FeCrAl после облучения. Также рассматривается влияние микроструктурных изменений, таких как образование дислокационных петель и α' -выделений. Представлены методы повышения радиационной стойкости с использованием оксидных дисперсных частиц (ODS). Теоретические модели позволяют установить взаимосвязь между атомными дефектами и макромеханическими свойствами. В качестве перспективных направлений будущих исследований выделены оптимизация состава сплавов, оценка их долгосрочной стабильности и внедрение технологий аддитивного производства.

Ключевые слова: оболочка топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF), сплав FeCrAl, упрочнение при облучении, упрочнение оксидными дисперсными частицами (ODS), наноиндентация, DFT

A. Tangirbergen^{1*}, N. Amangeldi¹, S. Revankar², G. Yergaliuly¹.¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan²Purdue University, Indiana, USA

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

The role of FeCrAl alloys in ensuring radiation resistance and safety of nuclear reactors

In order to develop accident-tolerant fuel (ATF) cladding for nuclear reactors, FeCrAl alloys are considered a key material in the nuclear energy sector. These alloys demonstrate excellent resistance to corrosion and oxidation under high temperatures and aggressive environments. Moreover, they exhibit thermal conductivity comparable to the zirconium-based alloys currently in use. However, during nuclear reactor operation, exposure to ionizing radiation can alter the mechanical properties of these materials, leading to irradiation-induced hardening. This article provides an overview of the primary experimental techniques—such as nanoindentation and microhardness testing - and theoretical approaches including the Nix-Gao model, dispersion barrier hardening (DBH) theory, density functional theory (DFT), molecular dynamics (MD), and discrete dislocation dynamics (DDD), used to study the hardening process in FeCrAl alloys after irradiation. It also discusses the effects of microstructural changes, such as the formation of

dislocation loops and α' -precipitates. Strategies to enhance radiation resistance through the incorporation of oxide dispersion-strengthened (ODS) particles are also described. Theoretical models help bridge atomic-scale defects with macroscopic mechanical behavior. Future research directions include alloy composition optimization, long-term performance assessment, and the application of additive manufacturing technologies.

Keywords: accident-tolerant fuel (ATF), FeCrAl alloy, irradiation hardening, oxide dispersion strengthening (ODS), nanoindentation, DFT.

А. Тәңірберген^{1*}, Н. Амангелді¹, Ш. Реванкар², Ғ. Ерғалиұлы¹.

¹Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Пурдью университеті, Индиана, США

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

FeCrAl қорытпаларының ядролық реакторлардың радиациялық төзімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз етудегі рөлі

Апат жағдайында төзімділік танытатын отын қабықшаларын әзірлеу мақсатында FeCrAl қорытпалары ядролық реакторлар саласында маңызды материал ретінде қарастырылып отыр. Бұл қорытпалар жоғары температура мен агрессивті орта жағдайында коррозия мен тотығуға тамаша төзімділік көрсетеді. Сонымен қатар, қазірге таңда қолданылатын цирконийға негізделген қоспалардан кем емес жылу алмасу көрсеткіші бар. Алайда, ядролық реактор жұмыс барысында иондаушы сәулеленуге ұшыраған кезде, материалдардың механикалық қасиеттері өзгеріп, сәулелену арқылы қатайтылуы мүмкін. Бұл мақалада FeCrAl қорытпаларының сәулеленуден кейінгі қатайуы үдерісін зерттеуде қолданылатын негізгі эксперименттік әдістерге – наноиндентация және микро қатайу сынақтары – және теориялық тәсілдерге – Nix-Gao моделі, дисперсиялық кедергі теориясы (DBH), тығыздық функционалы теориясы (DFT), молекулалық динамика (MD), және дислокацияның дискреттік динамикасы (DDD) – шолу беріледі. Сонымен қатар, дислокациялық ілмектер мен α' -тұнбалар сияқты сәулеленуден туындайтын микроқұрылымдық өзгерістердің әсері қарастырылады. Радиациялық тұрақтылықты арттыру үшін оксидті дисперсті бөлшектерді (ODS) енгізу тәсілдері сипатталады. Теориялық модельдер атомдық деңгейдегі ақаулар мен макромеханикалық қасиеттер арасындағы байланысты түсінуге мүмкіндік береді. Болашақ зерттеулердің маңызды бағыттары ретінде қорытпа құрамын оңтайландыру, ұзақ мерзімді сенімділікті бағалау және аддитивті өндіріс технологияларын енгізу ұсынылады.

Түйін сөздер: апатқа төзімді отын (ATF), FeCrAl қорытпасы, сәулелену арқылы қатайтылу, оксидті дисперсті қатайтылу (ODS), наноиндентация, DFT.

Введение

В стремлении к устойчивой энергетике ядерная энергия выделяется как надёжный источник с низким уровнем выбросов парниковых газов [1–3]. Несмотря на её преимущества перед ископаемыми и возобновляемыми источниками энергии, вопросы безопасности остаются актуальными, особенно после крупных инцидентов, таких как авария на Фукусиме-Даичи [4–6]. Эти события подчеркнули необходимость повышения уровня безопасности ядерных реакторов, что стимулировало разработку материалов оболочек для топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF). В числе предложенных решений – использование новых

материалов оболочек, таких как SiC, FeCrAl, высокоэнтропийные сплавы (HEA), нержавеющая сталь (SS), а также нанесение тонких покрытий из диоксида циркония на материал, способный противостоять коррозии и химическому разложению со временем [7–10]. Однако каждый из этих материалов имеет свои преимущества и ограничения для применения в ATF, связанные с их физическими и химическими характеристиками.

В таблице 1 приведены усреднённые значения ключевых параметров для ряда основных материалов, рассматриваемых для использования в качестве оболочек топлива.

Таблица 1 – Свойства оболочечных материалов для ядерного топлива

Название материала	Температура плавления °C	Предел текучести /прочность на растяжение при низкой температуре (МПа)	Теплопроводность W/m*°K	Среднее сечение поглощения нейтронов (барн)
SiC/SiC	~2900 [11]	~250 [12,13]	~138 [14]	~ 0.086 [15]
SS-316	~1450 [16]	~300- 1110 [17,18]	~14 [19]	~3.1 [20]
Zircaloy-4	~1760 [21]	~386 [22]	~ 13-21.5 [23][24]	~ 0.20 [15]
Ti-6Al-4V	~1660 [25]	~980 [22,26]	~6.6 [27]	~7.3 [28]
FeCrAl-(APMT)	~1530 [29]	~500 [12]	~12 [30]	~1.95-2.43 [15,20]

В условиях стремления к устойчивому развитию энергетики ядерная энергия выделяется как надёжный и низкоуглеродный источник [1–3]. Однако безопасность этого источника продолжает оставаться в центре внимания, особенно после крупных инцидентов, таких как авария на Фукусиме-Даичи [4–6]. Эти события подчеркнули необходимость повышения безопасности ядерных реакторов, что привело к разработке оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF). В этом контексте разрабатываются альтернативные материалы для оболочек топлива, такие как SiC, FeCrAl, высокоэнтропийные сплавы (HEA), нержавеющая сталь (SS) и покрытия на основе диоксида циркония с добавками, устойчивыми к коррозии [7–10]. Эти материалы обладают как преимуществами, так и ограничениями, которые определяются их физическими и химическими свойствами. В таблице 1 представлены основные параметры различных материалов, потенциально подходящих для оболочек топлива.

SiC, например, отличается высокой температурой плавления (~2900°C), отличной теплопроводностью (~138 Вт/м·К) и низким поглощением нейтронов (~0,086 барн), что делает его идеальным для высокотемпературных и нейтронно-чувствительных приложений, хотя его хрупкость и умеренная прочность (~250 МПа) являются недостатками. Нержавеющая сталь SS-316 обладает высокой прочностью (300–1110 МПа) и стойкостью к коррозии, но её ограничивают высокое поглощение нейтронов (~3,1 барн) и умеренная теплопроводность (~14 Вт/м·К). Zircaloy-4 имеет низкое поглощение нейтронов (~0,20 барн) и умеренную теплопроводность (13–21,5 Вт/м·К), что делает его подходящим для ядерных применений, хотя его коррозионная стойкость и прочность на растяжение (~386 МПа) остаются вопросом.

FeCrAl-(APMT) сочетает хорошие свойства для окисления и теплопроводности (~12 Вт/м·К), но его поглощение нейтронов (~1,95–2,43 барн) и прочность (~500 МПа) могут быть недостаточными.

HEA, представляющие собой сплавы нескольких элементов в эквимоларных пропорциях, демонстрируют высокую стойкость к износу и коррозии при высоких температурах, делая их перспективными для ATF. Например, сплав AlCrCuFeMo обладает хорошей коррозионной стойкостью, но его низкая пластичность усложняет производство тонкостенных оболочек для ядерного топлива.

FeCrAl, один из первых материалов, предложенных для оболочек топлива, демонстрирует отличную коррозионную стойкость в водных и жидкометаллических средах, что делает его подходящим для реакторов IV поколения. В сплавах с содержанием 10–15% Cr и 3-5% Al образуется оксидный слой с кристаллами, богатыми железом. При добавлении небольших количеств Si улучшается коррозионная стойкость, а оптимальное содержание Al и Cr способствует образованию защитного оксидного слоя. Однако FeCrAl требует более обогащённого топлива из-за его нейтронного поглощения, что увеличивает стоимость топливного цикла.

Настоящая статья восполняет пробел в обобщении экспериментальных и теоретических данных по упрочнению сплавов FeCrAl под действием облучения. Рассматривается влияние состава и структурные изменения до и после облучения ионами и нейтронами. Статья включает экспериментальные исследования (наноиндентация, микротвердость) и теоретические подходы (модели Никса Гао для эффекта размера, упрочнение дисперсионными барьерами, DFT, MD и DDD).

Теоретические исследования упрочнения при облучении в сплавах FeCrAl

Теоретические модели, такие как модель упрочнения за счет дислокационного барьера (DBH) [31], модель Ника-Гао [33], молекулярная динамика (MD) [34], теория функционала плотности (DFT) [35,36] и термодинамические расчеты [32,36], играют ключевую роль в изучении и понимании упрочнения, вызванного облучением. Эти теоретические подходы помогают понять основные аспекты дефектов, вызванных облучением, таких как вакансии, интерстиции, дислокационные линии, петли, пустоты и пузырьки, которые влияют на твердость материала. Совместно с экспериментальными подходами, эти модели позволяют предсказывать поведение материала под воздействием радиации, что способствует разработке радиационно-стойких материалов для ядерных реакторов, космических приложений и других условий, где радиационные повреждения имеют важное значение. Соединяя атомарные явления и макроскопические механические свойства, эти модели незаменимы для продвижения материаловедения в области радиационных материалов.

Модель Никса-Гао

Большинство экспериментальных испытаний твердости проводятся с использованием наноиндентационных или микротвердостных тестов, где размер отпечатка влияет на общую твердость материала. В ходе тестов при уменьшении глубины вдавливания твердость материала возрастает, что может приводить к недостоверным результатам [37-40].

Эффект размера отпечатка (ISE) относится к явлению, когда механические свойства материала, такие как твердость, жесткость или прочность, зависят от размера отпечатка или глубины проникновения. Как правило, ISE характеризуется увеличением твердости или прочности по мере уменьшения глубины проникновения, особенно заметным на глубинах менее 1 мкм, как показано Фарром и др. [41]. Этот эффект часто наблюдается в микротвердостных и наноиндентационных тестах и объясняется различными факторами, такими как поверхностные эффекты, трение между индентором и образцом и упрочнение за счет градиента деформации [42].

Модель Ника-Гао в первую очередь используется для описания упрочнения, зависящего от размера, в частности для отношения Холла-Петча, которое связывает предел текучести

материала с размером зерна. Эта модель была расширена для учета других эффектов размера, таких как влияние толщины пленки в тонкопленочных материалах и эффект размера отпечатка. Модель Ника-Гао связывает увеличение предела текучести или твердости с плотностью геометрически необходимых дислокаций (GND), которая увеличивается по мере уменьшения характерного размера (размера зерна, толщины пленки, размера отпечатка). В области радиационно-стойких материалов, где радиация вызывает значительные микроструктурные изменения, такие как измельчение зерна или образование зон с высокой концентрацией дефектов, дефекты, вызванные облучением, могут увеличивать плотность GND, особенно в областях с высокими градиентами деформации, что способствует упрочнению. Модель Ника-Гао помогает объяснить, как эти изменения приводят к упрочнению, зависящему от размера.

Модель Ника-Гао была применена для оценки твердости материалов FeCrAl. Эта модель оказалась полезной для понимания механического поведения материалов, включая сплавы FeCrAl, предоставляя информацию о зависимости между твердостью и глубиной вдавливания в этих материалах [43]. Способность модели Ника-Гао учитывать эффект размера отпечатка имеет важное значение при изучении механических свойств сплавов FeCrAl и других материалов на микро- и наноуровне. Модель предполагает линейную зависимость между квадратом твердости и обратной величиной глубины вдавливания, как это описано в уравнении (1).

$$\frac{H}{H_0} = \sqrt{1 + \frac{h^*}{h}}, \quad (1)$$

где H – твердость, h – глубина вдавливания, H_0 – твердость при бесконечно большой глубине, что фактически соответствует объемной твердости материала, h^* – характерная длина, зависящая как от индентера, так и от конкретного материала.

Как показано на рисунке 1, кривые для необлученных образцов демонстрируют устойчивую линейную зависимость от обратной глубины вдавливания по всему диапазону. В отличие от этого, кривые для облученных образцов отклоняются от этой линейной зависимости на малых глубинах ($h > 0,005 \text{ нм}^{-1}$, что соответствует глубине вдавливания менее 200 нм). Тест на нанотвердость особенно чувствителен к условиям в этой малой области. Поэтому данные по нанотвердости от 0 до $0,005 \text{ нм}^{-1}$ для облученных образцов были использованы для аппроксимации с использованием модели Ника-Гао [43].

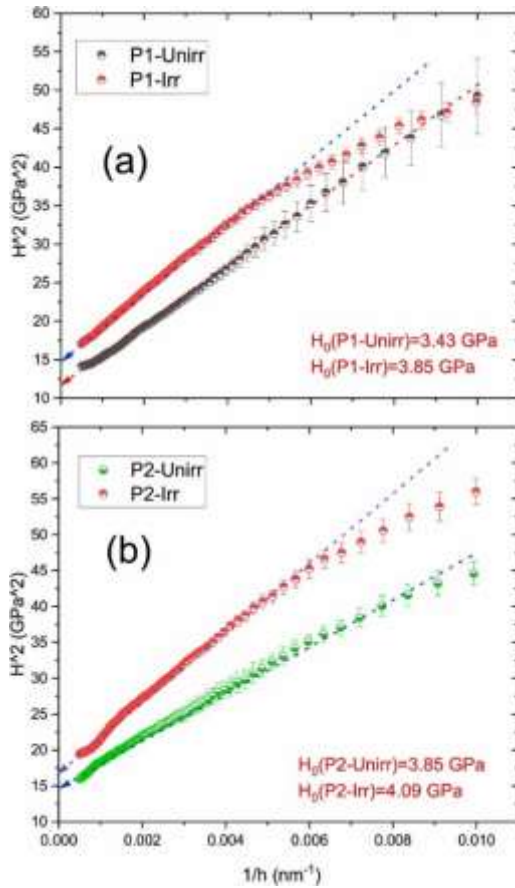


Рисунок 1 – Графики зависимости H^2 от $\frac{1}{h}$ для (а) P1 и (б) P2 в необлученных и облученных состояниях. Пунктирные точки представляют значения, предсказанные моделью Ника-Гао [43]

Упрочнение за счет дисперсионного барьера

Теоретически значения упрочнения при облучении можно количественно оценить с помощью модели упрочнения за счет дисперсионного барьера (ДВН). Эта модель качественно описывает зависимость между облучением, вызванным дефектом, и механическими свойствами материала. Считается, что упрочнение при облучении приводит к линейному увеличению предела текучести. Используя упрощенную модель ДВН и статистические данные о дислокационных петлях из ТЕМ, можно теоретически рассчитать степень упрочнения [38]. Изменение предела текучести, σ_{tot} , может быть выражено следующим образом:

$$\sigma_{tot} = \sqrt{\sum_i (\Delta\sigma_{SR,i}^2)} + \Delta\sigma_{LR}, \quad (2)$$

$$\Delta\sigma_{SR} = \Delta\sigma_{ppt} + \Delta\sigma_{void} + \Delta\sigma_{loops}, \quad (3)$$

$$\Delta\sigma_{LR} = \Delta\sigma_{dislocations}, \quad (4)$$

где $\Delta\sigma_{SR}$ связано с краткодействующими препятствиями, такими как преципитаты $\Delta\sigma_{ppt}$, пустоты $\Delta\sigma_{void}$ и дислокационные петли $\Delta\sigma_{loops}$, в то время как $\Delta\sigma_{LR}$ обусловлено далекодействующими препятствиями, такими как дислокационные линии и сети. В большинстве случаев основными дефектами после облучения являются дислокационные петли. Пустоты и преципитаты Cr редко наблюдаются в материалах FeCrAl. Следовательно, увеличение прочности, вызванное дислокационными петлями после облучения, описывается следующим образом [44]:

$$\Delta\sigma = M\alpha_l\mu b\sqrt{Nd}, \quad (5)$$

где $\Delta\sigma$ представляет собой изменение предела текучести по сравнению с необлученным значением; M – фактор Тейлора (3,06 для большинства материалов с ОЦК решеткой); α_l – прочность барьера (82 ГПа); b – вектор Бюргерса движущейся дислокации, примерно 0,248 нм; N и d – обозначают плотность и средний размер дефекта, соответственно. Для дефектов типа петель α_l в железе составляет 0,38, а для учета далекодействующих дефектов, таких как дислокации, α_{dis} будет равна 0,3. Значения прочности барьера получены экспериментально. Следовательно, σ_{tot} будет следующим:

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= M\alpha_l\mu b\sqrt{Nd} + M\alpha_{dis}\mu b\sqrt{\rho_d} \\ &= M\mu b(\alpha_l\sqrt{Nd} + \alpha_{dis}\sqrt{\rho_d}). \end{aligned} \quad (6)$$

Соответственно, модель ДВН использовалась для изучения упрочнения при облучении оболочек FeCrAl ATF. Изменения в твердости по ДВН следуют тенденции, аналогичной экспериментальной твердости и эквивалентной объемной твердости, показанной на рис. 2 (а) и (б). Однако по мере увеличения дозы повреждений значение упрочнения оказывается значительно ниже, чем экспериментальные данные, что приводит к снижению кривой твердости. Определение значения α в модели ДВН с высокой точностью затруднительно. Одним из объяснений является то, что в статистические результаты включены только четко определенные дислокационные петли и дислокационные линии; очень маленькие дислокационные петли были неразличимы, и черные точки, вызванные облучением, не учитывались. Кроме того, α' -преципитаты Cr не

наблюдались на изображениях ТЕМ, вероятно, из-за их слишком малых размеров для методов электронной микроскопии. Подтверждение образования кластеров, обогащенных Cr, в результате ионного облучения требует более точных испытаний. Подобные тенденции наблюдались в других исследованиях [44,45].

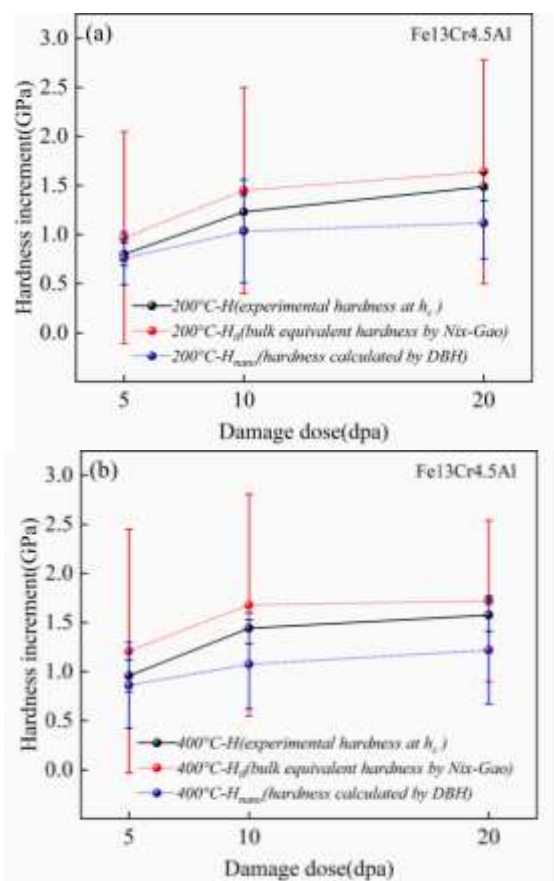


Рисунок 2 – (а, б) Значения экспериментальных изменений твердости по сравнению с изменениями твердости, рассчитанными с использованием модели Никса-Гао и модели DBH [38].

Теоретические симуляции: подходы теории функционала плотности (DFT), молекулярной динамики (MD) и дискретной динамики дислокаций (DDD)

Несмотря на приближения, используемые в теоретических вычислительных симуляциях, они точно описывают физические, химические и механические свойства материалов [46-48]. Теория функционала плотности (DFT) — это квантовомеханический метод, используемый для исследования электронной структуры многотельной системы, особенно атомов, молекул и твердых тел. Этот метод основан на концепции, что энергия основного состояния

системы может быть определена по плотности электронов системы. Основные принципы DFT основаны на теоремах Хоэнберга-Кона [49,50]

Первая теорема Хоэнберга-Кона утверждает, что свойства основного состояния системы многих электронов однозначно определяются плотностью электронов ρ . Это означает, что все наблюдаемые величины основного состояния являются функционалами плотности электронов. Вторая теорема Хоэнберга-Кона вводит понятие функционала энергии и устанавливает, что плотность электронов в основном состоянии минимизирует этот функционал [51]. Идея основывается на вариационном принципе: энергия основного состояния E_0 получается минимизацией функционала энергии $E[\rho]$:

$$E_0 = \min_{\rho} \{E[\rho]\}, \quad (7)$$

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho} \Big|_{\rho=\rho_0} = 0. \quad (8)$$

Для практической реализации DFT используется уравнение Кона-Шэма, которое описывает плотность невзаимодействующих электронов в заданном внешнем потенциале [52].

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + U_{eff}(r)\right)\psi_i(r) = \epsilon_i\psi_i(r), \quad (9)$$

где $U_{eff}(r)$ — эффективный потенциал, $\psi_i(r)$ — волновая функция невзаимодействующих электронов, а ϵ_i — собственные значения системы.

$$U_{eff}(r) = U_{ext}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + U_{xc}(r), \quad (10)$$

$$U_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}(r)}{\delta \rho(r)}. \quad (11)$$

Уравнение является самосогласованным: начальное предположение для плотности электронов уточняется итеративным решением уравнений Кона-Шэма и обновлением плотности электронов до достижения сходимости. Сложной частью уравнения является последняя часть, отвечающая за обменно-корреляционные взаимодействия, которая включает квантовое взаимодействие частиц, такие как взаимодействия Паули. Существует несколько видов потенциалов, отличающихся точностью и сложностью. Наиболее популярным является обобщенное градиентное приближение (GGA) Пердью-Берке-Эрнзергофа (PBE) [53]. В последнее время наблюдается значительный интерес к атомис-

тическим симуляциям оболочек ATF с использованием DFT. В частности, DFT эффективно иллюстрирует поведение материала при коррозии, напряжение и деформацию после добавления небольших количеств легирующих элементов, а также позволяет рассчитывать термические и оптические свойства материала. Например, Ли и др. (2021) исследовали влияние адсорбции водорода на поверхность FeCrAl в различных положениях. Результаты показывают, что адсорбция водорода оказывает значительное влияние на различные элементы. В частности, алюминий (Al) имеет наименьшее взаимодействие с водородом. Однако, когда водород находится в мостиковом положении между адсорбцией Al и Cr, энергия возрастает [54]. Аналогичные исследования были проведены для адсорбции воды и кислорода [55,56]. Эти исследования подчеркивают важность расчетов DFT для задач, связанных с коррозией, окислением и поглощением водорода. Тем не менее, исследования механических свойств и влияния элементарных дефектов на физико-химические свойства FeCrAl с использованием DFT пока не проводились. Кроме того, влияние химического шима на коррозию материала во время нормальной работы реактора, а также атомистические симуляции механических эффектов добавления ODS в материалы являются актуальными темами для обсуждения.

Помимо исследований DFT, исследования с использованием дискретной динамики дислокаций (DDD) и MD-симуляций для материалов FeCrAl предоставили ценные сведения о их механическом поведении в различных условиях. Молекулярная динамика (MD) – это метод компьютерного моделирования, используемый для изучения физических движений атомов и молекул. Основной принцип MD основан на уравнениях движения Ньютона. Дискретная динамика дислокаций (DDD) — это вычислительный метод, используемый для моделирования поведения дислокаций в кристаллических материалах. В отличие от MD, который моделирует движение атомов, DDD фокусируется на коллективном поведении дислокаций — линейных дефектов внутри кристаллической структуры, которые играют ключевую роль в пластической деформации. Дислокации представляются в виде дискретных линий внутри кристаллической решетки, где каждая линия описывается вектором Бюргерса $\mathbf{b}$, который определяет величину и направление искажения решетки. Движение дислокаций определяется силой Пича-Келера:

$$F_{PK} = (\sigma * \mathbf{b}) * l, \quad (12)$$

где σ – тензор напряжений, $\mathbf{b}$ – вектор Бюргерса, l – направление линии дислокации. Учитывая, что упрочнение при облучении в материалах, особенно в ядерных приложениях, происходит из-за взаимодействия дислокаций с дефектами, вызванными радиацией, такими как пустоты, интерстиции и кластеры вакансий, методы MD и DDD предоставляют мощный инструмент для изучения этих взаимодействий и их влияния на свойства материала. Например, в недавнем исследовании пластичности облученных FeCrAl наностолбиков с использованием симуляций DDD подчеркивалось влияние дефектов, вызванных облучением, на поведение напряжение-деформация, отмечая необычное сочетание эффектов упрочнения, вызванное неоднородностью состава и радиационными петлями [57]. В другом исследовании наноиндентации сплавов FeNiCr, проведенном Домингес-Гутьерресом и др. (2022), было обнаружено, что хром снижает подвижность призматических дислокационных петель, тем самым увеличивая твердость этих сплавов [58]. Кроме того, MD-симуляции сплавов FeCrAl показали, что более высокое содержание хрома и алюминия приводит к увеличению скорости ползучести, при этом напряжение влияет на переход от ползучести по Коблу к дислокационной ползучести [59]. Включение графовых нейронных сетей для ускорения симуляций DDD обещает улучшить эффективность этих вычислительных методов [60]. Наконец, многоуровневое исследование, проведенное Цяо и Чжу (2023) на высокоэнтропийных сплавах Fe₂Ni₂CrAl, подчеркнуло их отличные механические характеристики при разных температурах благодаря взаимодействиям дислокаций и двойникованию [61].

Будущие направления и заключительные замечания

На основе обзора литературы можно выделить несколько ключевых направлений для будущих исследований FeCrAl-сплавов как оболочек топливных элементов с повышенной толерантностью к аварийным условиям (ATF), особенно в контексте радиационного упрочнения.

- **Необходимость изучения воздействия высоких доз и длительного облучения нейтронами и ионами.** Для более точного воспроизведения условий в реакторах при аварийных ситуациях важно проведение исследований в условиях высоких доз и длительного облучения.

- **Исследования с использованием нейтронного и делящихся продуктов (ксенон, криптон).**

Дополнительные эксперименты с нейтронным облучением, а также облучением продуктами деления, такими как ксенон (Xe) и криптон (Kr), позволят более точно моделировать реальные условия в реакторах. Это даст ценные данные о стабильности и целостности сплавов FeCrAl под воздействием радиации.

- **Оптимизация состава сплавов FeCrAl.**

Изменение содержания легирующих элементов, таких как хром и алюминий, может существенно повлиять на их устойчивость к радиационному упрочнению и хрупкости. Систематические исследования, связывающие состав сплавов с их реакцией на облучение, являются важным шагом в создании более устойчивых материалов. Также требуется углубление сотрудничества между экспериментаторами и теоретиками: экспериментальные данные необходимы для проверки и улучшения моделей, а теоретические исследования могут направлять разработку новых экспериментов. Для такого сотрудничества требуется создание обширных экспериментальных баз данных, включая детальную микроструктурную характеристику материалов до и после облучения. Рекомендуются проведение кросс-валидации с использованием различных источников облучения, таких как нейтроны, ионы и продукты деления, для получения комплексного представления о влиянии радиации на FeCrAl и их роли в повышении безопасности реакторов.

- **Современные методы производства FeCrAl.**

Современные технологии, такие как аддитивное производство, предоставляют возможность создания сложных форм и деталей из порошков FeCrAl, что делает процесс более гибким и экономичным. Также перспективной методикой является продвинутая порошковая металлургия, включая быстрые методы затвердевания и механическое легирование, которые позволяют улучшить механические свойства, такие как прочность и устойчивость к деформации при высоких температурах.

- **Экономическая оценка производства FeCrAl.**

Необходим анализ экономической

целесообразности производства FeCrAl и его использования с различными ядерными топливами. Также важно провести сравнительный анализ с другими материалами ATF-оболочек, такими как композиты SiC/SiC, высокоэнтропийные сплавы (HEA) и традиционные материалы, например, Zircaloy-4.

Заключение

В исследованиях и разработке систем сплавов FeCrAl для оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям в ядерных реакторах получены обнадеживающие результаты, особенно с учетом упрочнения при облучении. Сплавы FeCrAl являются идеальными кандидатами для повышения производительности и безопасности легководных реакторов благодаря их исключительной стойкости к коррозии и высокотемпературному окислению.

Микроструктурные изменения, вызванные облучением, такие как образование дислокационных петель и преципитатов α' , обогащенных Cr, значительно способствуют упрочнению этих сплавов. При облучении использование передовых методов, таких как добавление компонентов ODS, дополнительно улучшает их механические свойства. Тем не менее, остаются многочисленные препятствия, включая необходимость более углубленных исследований долгосрочных эффектов радиации и оптимизации состава сплавов. Будущие исследования должны быть сосредоточены на детальном теоретическом и экспериментальном исследовании, чтобы полностью понять взаимодействия между дефектами и легирующими элементами, что в конечном итоге приведет к разработке более совершенных материалов для оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям.

Финансирование

Данное исследование было профинансировано Министерством науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP23489124).

Литература

- 1 W.S. Ebhota, T.-C. Jen, *Int. J. Precis. Eng. Manuf. Technol.* **7**, 97–117 (2020). <https://doi.org/10.1007/s40684-019-00101-9>
- 2 R.E.H. Sims, *Sol. Energy* **76**, 9–17 (2004). [https://doi.org/10.1016/S0038-092X\(03\)00101-4](https://doi.org/10.1016/S0038-092X(03)00101-4)
- 3 H.S. Hirsh, Y. Li, et al., *Adv. Energy Mater.* **10**, 202001274 (2020). <https://doi.org/10.1002/aenm.202001274>
- 4 D. Takata, *Agric. Implic. Fukushima Nucl. Accid.* 143–162 (2013). https://doi.org/10.1007/978-4-431-54328-2_14

- 5 P. Robbins, *Encyclopedia of Environ. Soc.* (SAGE Publications, Inc., 2007).
<https://doi.org/10.4135/9781412953924>
- 6 Y. Morino, T. Ohara, et al., *Geophys. Res. Lett.* **38** (2011). <https://doi.org/10.1029/2011GL048689>
- 7 P. Chen, B. Qiu, et al., *Nucl. Eng. Des.* **371**, 110889 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2020.110889>
- 8 R.T. Sweet, G. Pastore, et al., *Nucl. Eng. Des.* **414**, 112556 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2023.112556>
- 9 B. Cheng, Y.-J. Kim, et al., *Nucl. Eng. Technol.* **48**, 16–25 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.net.2015.12.003>
- 10 H.V. Pham, M. Kurata, et al., *Thermo.* **1**, 151–167 (2021). <https://doi.org/10.3390/thermo1020011>
- 11 P.S. Sokolov, V.A. Mukhanov, et al., *J. Superhard Mater.* **34**, 339–341 (2012).
<https://doi.org/10.3103/S1063457612050097>
- 12 M.N. Gushev, K.G. Field, et al., *Mater. Des.* **129**, 227–238 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.05.009>
- 13 K. Hironaka, T. Nozawa, et al., *J. Nucl. Mater.* **307–311**, 1093–1097 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01049-8](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01049-8)
- 14 W. Feng, L. Zhang, et al., *Fusion Eng. Des.* **90**, 110–118 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2014.12.005>
- 15 N.M. George, K. Terrani, et al., *Ann. Nucl. Energy* **75**, 703–712 (2015).
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.09.005>
- 16 M. Hussain, V. Mandal, et al., *Opt. Laser Technol.* **97**, 46–59 (2017).
<https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2017.06.006>
- 17 A. Ghosh, H.-G. Brokmeier, et al., *Int. J. Fatigue* **125**, 35–46 (2019).
<https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2019.03.035>
- 18 A. Bansal, A.K. Sharma, et al., *Proc. Inst. Mech. Eng. Part B J. Eng. Manuf.* **230**, 439–448 (2016).
<https://doi.org/10.1177/0954405414558694>
- 19 J.C. Simmons, X. Chen, et al., *Addit. Manuf.* **32**, 100996 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.addma.2019.100996>
- 20 A. Veverková, D. Preisler, et al., *Materials (Basel)* **14**, 418 (2021). <https://doi.org/10.3390/ma14020418>
- 21 P. Hofmann, D. Kerwin-Peck, *J. Nucl. Mater.* **124**, 80–105 (1984). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(84\)90013-8](https://doi.org/10.1016/0022-3115(84)90013-8)
- 22 F. Han, G. Li, et al., *Mater. Chem. Phys.* **242**, 122539 (2020).
<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122539>
- 23 H. Wang, J. Thomas, et al., *J. Nucl. Mater.* **539**, 152338 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152338>
- 24 I.R. Magalhães, L.V.G. Chaves, et al., *Nucl. Eng. Des.* **422**, 113109 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2024.113109>
- 25 O.O. Bilous, L.V. Artyukh, et al., *Mater. Sci. Eng. A* **402**, 76–83 (2005).
<https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.05.011>
- 26 C.J. Todaro, M.A. Easton, et al., *Nat. Commun.* **11**, 142 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13874-z>
- 27 L. Bolzoni, E.M. Ruiz-Navas, et al., *Mater. Des.* **52**, 888–895 (2013).
<https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.06.036>
- 28 D.J.M. King, A.J. Knowles, et al., *J. Nucl. Mater.* **559**, 153431 (2022).
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153431>
- 29 Y. Chen, Y. Li, et al., *Prog. Nucl. Energy* **129**, 103502 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2020.103502>
- 30 K.A. Gamble, T. Barani, et al., *J. Nucl. Mater.* **491**, 55–66 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.04.039>
- 31 F. Li, Y. Long, et al., *Metals (Basel)* **12**, 1645 (2022). <https://doi.org/10.3390/met12101645>
- 32 X. Wu, P. Sabharwall, et al., Neutronics and Fuel Performance Evaluation of Accident Tolerant Fuel under Normal Operation Conditions, Report (Idaho Falls, ID, United States, 2014). <https://doi.org/10.2172/1166052>
- 33 X. Han, C. Zhang, et al., *Nucl. Mater. Energy* **37**, 101556 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nme.2023.101556>
- 34 Y. Pachaury, G. Warren, et al., *Int. J. Plast.* **167**, 103676 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2023.103676>
- 35 X. Li, Y. Ma, et al., *Front. Energy Res.* **9**, 713493 (2021). <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.713493>
- 36 Y. Yuan, K. Xu, et al., *Surf. Coatings Technol.* **446**, 128774 (2022).
<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2022.128774>
- 37 P. Song, K. Yabuuchi, et al., *Acta Mater.* **234**, 117991 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117991>
- 38 Y. Luo, J. Wang, et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **547**, 165215 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165215>
- 39 R. Kögler, W. Anwand, et al., *J. Nucl. Mater.* **427**, 133–139 (2012).
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.04.029>
- 40 R. Wang, H. Wang, et al., *J. Nucl. Mater.* **557**, 153243 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153243>
- 41 G.M. Pharr, E.G. Herbert, et al., *Annu. Rev. Mater. Res.* **40**, 271–292 (2010). <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070909-104456>
- 42 J. Sort, N. Van Steenberge, et al., *Open Mater. Sci. J.* **2**, 1–5 (2008).
<https://doi.org/10.2174/1874088X00802010001>
- 43 X. Han, C. Zhang, et al., *Int. J. Press. Vessel. Pip.* **194**, 104522 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.ijpvp.2021.104522>
- 44 X. Zhou, H. Wang, et al., *J. Mater. Sci. Technol.* **95**, 181–192 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.04.020>
- 45 X. Han, C. Zhang, et al., *Mater. Sci. Eng. A* **841**, 143050 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.143050>

- 46 M. Islam, M.A. Rob Sheikh, *Phys. B Condens. Matter* **668**, 415244 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415244>
- 47 E. Kiely, R. Zwane, et al., *CrystEngComm* **23**, 5697–5710 (2021). <https://doi.org/10.1039/D1CE00453K>
- 48 M.I. Khan, H. Arshad, et al., *J. Alloys Compd.* **819**, 152964 (2020).
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152964>
- 49 N. Salami, A. Shokri, [Book Chapter – *Electronic Structure of Solids and Molecules*] 325–373 (2021).
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818806-4.00002-4>
- 50 J. Hafner, *J. Comput. Chem.* **29**, 2044–2078 (2008). <https://doi.org/10.1002/jcc.21057>
- 51 P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864–B871 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- 52 W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133–A1138 (1965). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- 53 J.P. Perdew, K. Burke, et al., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865–3868 (1996).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- 54 X. Li, Y. Ma, et al., *Front. Energy Res.* **9**, 713493 (2021). <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.713493>
- 55 J. Wei, S. Li, et al., *Appl. Surf. Sci.* **465**, 259–266 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.09.202>
- 56 J. Wang, K. Yan, et al., *Appl. Surf. Sci.* **644**, 158782 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.158782>
- 57 Y. Pachaury, G. Warren, et al., *Int. J. Plast.* **167**, 103676 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2023.103676>
- 58 F.J. Dominguez-Gutierrez, A. Ustrzycka, et al., *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **30**, 085010 (2022).
<https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac9d54>
- 59 A.A. Al Anazi, G.R.L. Al-Awsi, et al., *Mech. Adv. Mater. Struct.* 1–10 (2023).
<https://doi.org/10.1080/15376494.2023.2179706>
- 60 N. Bertin, F. Zhou, *J. Comput. Phys.* **487**, 112180 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112180>
- 61 L. Qiao, J. Zhu, *Mater. Today Commun.* **34**, 105296 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.105296>

История статьи:

Поступила – 25.11.2025

Поступила в доработанном виде – 09.05.2025

Принята – 20.05.2025

Article history:

Received 12 November 2025

Received in revised form 9 May 2025

Accepted 20 May 2025

Информация об авторах:

1. **Абылай Тәңірберген** (автор корреспонденции) – докторант 2-го года обучения Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Астана, Казахстан. e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

2. **Нурлан Амангелді** – доцент Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Исполняющий обязанности заведующего лабораторией ядерной физики. Астана, Казахстан. e-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com

3. **Шрипад Реванкар** – профессор ядерной инженерии и директор исследовательской лаборатории многофазных и топливных элементов в Университете Пердью. Индиана, США. e-mail: shripad@purdue.edu

4. **Гани Ергалиұлы** – старший преподаватель Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева и старший научный сотрудник Национальной лаборатории Астаны. Астана, Казахстан. e-mail: gani.yergaliuly@gmail.com

Information about authors:

1. **Abylay Tangirbergen** (corresponding author) – 2nd year PhD student at L.N. Gumilyov Eurasian National University. Astana, Kazakhstan. e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

2. **Nurlan Amangeldi** – Ass. Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University. Acting Head of the Nuclear Physics Laboratory. Astana, Kazakhstan. e-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com

3. **Shripad Revankar** – Dr., Professor of Nuclear Engineering at Purdue University, Head of the Research Laboratory of Multiphase and Fuel Cells, Indiana, USA. e-mail: shripad@purdue.edu

4. **Gani Yergaliuly** – Senior Lecturer at the L.N. Gumilyov Eurasian National University and Senior Researcher at the Astana National Laboratory, Astana, Kazakhstan. e-mail: gani.yergaliuly@gmail.com

Б.М. Усеинов , А.Г. Маркова , Я.Р. Самуткин ,

А.А. Солодовник , С.А. Касимова 

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

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ РАЗЛИЧНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Сканирующие зондовые микроскопы являются передовым средством получения информации о строении поверхности в размерных областях, где оптические микроскопы уже бессильны. Целью настоящей работы является исследование физических особенностей поверхностей различных материалов с помощью сканирующего зондового микроскопа и выявление корреляции краевого угла смачивания и шероховатости поверхности. Методы, использованные в данной работе: получения изображений поверхностей методами атомно-силовой микроскопии на сканирующем зондовом микроскопе, программная обработка и анализ изображений в программе Nova Pх. Результаты исследования данной работы представлены в виде информации о шероховатости поверхности, о свойствах взаимодействия с водой. Анализ краевого угла смачивания может позволить судить о состоянии поверхности, ее шероховатости в условиях отсутствия дорогого оборудования. В ходе работы исследовались как калибровочные образцы, так и природные, техногенные и биологические поверхности. Было также установлено, что коэффициент корреляции между полной высотой профиля и краевым углом составляет 0,71, что свидетельствует о наличии устойчивой связи. Полученные данные могут использоваться для прогнозирования гидрофобности по параметрам структуры в наномасштабе.

Ключевые слова: атомно-силовой микроскоп, гидрофобность, краевой угол смачивания, шероховатость.

Б.М. Усеинов, А.Г. Маркова, Я.Р. Самуткин, А.А. Солодовник, С.А. Касимова

М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Қазақстан, Петропавл

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

Атомдық күшті микроскопия әдістері арқылы түрлі беттердің физикалық ерекшеліктерін зерттеу

Сканерлеуші зондтық микроскоптар оптикалық микроскоптар қазірдің өзінде қуатсыз өлшемді аймақтардағы бет құрылымы туралы ақпаратты алудың жетілдірілген құралы болып табылады. Бұл ұсынылған жұмыстың мақсаты сканерлеуші зондты микроскоптың көмегімен әртүрлі материалдардың беттерінің физикалық сипаттамаларын зерттеу болып табылады. Келесі гипотезаны қарастыруға болады: микро- және нанодоңғайдегі материал бетінің физикалық құрылымы және беттің физикалық сипаттамалары мен жанасу бұрышы арасындағы байланыстың болуы туралы ақпарат алуға болады. Жұмыста қолданылатын әдіс-тәсілдер: сканерлеуші зонд микроскопында атомдық-күштік микроскопия әдістерін қолдана отырып беттердің кескіндерін алу, Nova Pх бағдарламасында кескіндерді бағдарламалық өңдеу және талдау. Зерттеу нәтижелері бетінің кедір-бұдыры және сумен әрекеттесу қасиеттері туралы ақпарат түрінде берілген. Байланыс бұрышын талдау қымбат жабдық болмаған кезде бетінің күйін және оның кедір-бұдырлығын бағалауға мүмкіндік береді. Сондай-ақ, зерттеу барысында әртүрлі үлгілер талданды, соның ішінде биологиялық және табиғи нысандар. Профиль биіктігінің толық мәні мен жанасу бұрышы арасында 0,71 корреляция коэффициенті анықталды, бұл олардың байланысын көрсетеді.

Түйін сөздер: атомдық күштік микроскоп, гидрофобтылық, жанасу бұрышы, кедір-бұдырлық.

B.M. Useinov, A.G. Markova, Ya.R. Samutkin, A.A. Solodovnik, S.A. Kassimova
North Kazakhstan University named after M. Kozybayev, Kazakhstan, Petropavlovsk
*e-mail: b.useinov@gmail.com

Studying the physical features of different surfaces using atomic force microscopy methods

Scanning probe microscopes are an advanced means of obtaining information about the structure of a surface in dimensional regions where optical microscopes are already powerless. The purpose of the work is to study the physical characteristics of the surfaces of various materials using a scanning probe microscope. Hypothesis: it is possible to obtain information about the physical structure of the surface of a material at the micro- and nanolevel, and the existence of a relationship between the physical characteristics of the surface and the contact angle. Methods used: obtaining images of surfaces using atomic force microscopy methods on a scanning probe microscope, software processing and analysis of images in the Nova Px program. The results of the study are presented in the form of information on surface roughness and the properties of interaction with water. Analysis of the contact angle can make it possible to judge the state of the surface and its roughness in the absence of expensive equipment.

Keywords: atomic force microscope, hydrophobicity, contact angle, roughness.

Введение

Изучение мира объектов и явлений микромира перспективно не только с фундаментальной точки зрения, но и из чисто практических соображений. Впервые этот тренд современной науки предельно чётко обозначил ещё в 1959 году Ричард Фейнман в статье “Plenty of Room at the Bottom” (“Внизу много места”) [1].

Как известно, оптические микроскопы имеют ограничения в изучении микромира, определяемые волновыми эффектами, в частности дифракцией световых волн. Влияние этого явления существенно снижено благодаря созданию сканирующих зондовых микроскопов (далее СЗМ). Эти приборы позволяют фактически “осознать” микромир. Сканирующий атомно-силовой микроскоп был изобретен 1986 г. Гердом Бинингом, Келвином Куэйттом и Кристофером Гербером. В современной науке эти приборы используются в самых различных областях. Благодаря им сделаны многие передовые открытия [2]. В наши дни такими микроскопами стали оснащаться лаборатории в образовательных учреждениях. Так в Северо-Казахстанском университете имени М. Козыбаева используется сканирующий зондовый микроскоп Solver NANO, имеющий атомно-силовую и сканирующую туннельную измерительные головки [3].

Наличие прибора такого класса позволяет ставить актуальные исследовательские задачи. Одной из них является изучение свойств гидрофобности и шероховатости поверхностей в зависимости от их физико-химических свойств. В частности, для технологических приложений в

промышленности и сельском хозяйстве важно иметь простые способы оценки зависимости краевого угла смачивания от степени шероховатости поверхности образца, контактирующей с водой или иными жидкостями. Поиск методологических приёмов решения этой задачи и составляет цель нашего исследования.

Информация о краевом угле смачивания весьма востребована при разработке перспективных дорожных покрытий, проектировании изготовлении контейнеров для перевозки нефтепродуктов, а также при изготовлении материалов с целью защиты от повреждений, обусловленных воздействием воды или иных жидких веществ.

Научная новизна работы определяется сравнительно малым числом исследований гидрофобных свойств веществ, проводимых на сканирующих зондовых микроскопах, то есть на субмолекулярном пространственном масштабе, где проявляются весьма специфические физические эффекты.

Метод исследования

Исследование проводилось на сканирующем зондовом микроскопе Solver NANO (Солвер НАНО СЗМ НАНОЭДЮКАТОР 2 производства компании NT-MDT Spectrum Instruments). Использовалась сканирующая туннельная измерительная головка, которая может работать в атомно-силовой методике в полуконтактном колебательном режиме Semicontact. Колеба-

тельные методики являются самыми успешными для получения информации об образце, при этом сохраняя зонд и образец. Максимальная скорость сканирования составляет 32,005 мкм/с. При этом размер максимальной области сканирования равен 92 мкм. Амплитудное значение колебаний зонда составляло 10 нм, при этом вручную задавалось выдвижение сканера на 80% от амплитудного значения этой величины, что позволяет не повреждать зонд и образец. На таких расстояниях действуют силы межмолекулярного взаимодействия, при этом система обратной связи поддерживает приближение зонда к поверхности на уровне нескольких нанометров.

В процессе измерений использовалась атомно-силовая измерительная головка, как в полуконтактном колебательном режиме Semicontact, так и контактном режиме, который позволяет оценивать дополнительные параметры. Скорость сканирования выдерживалась от 20 до 32 мкм/с, при сложных поверхностях скорость понижалась. Оценивалась амплитудная характеристика колебания зонда. Коэффициент усиления обратной связи Gain регулировался по появлению генерации значительной составляющей сигнала Mag – амплитудного значения колебаний зонда.

Полученное изображение не подвергалось фильтрации и обработке, за исключением вычитания наклона второго порядка.

При выборе области сканирования задавалось 256 точек на строку.

Программные средства. Микроскоп имеет управляющую программу Nova Rx. С её помощью осуществляется настройка оптической системы

регистрации изгибов кантилевера (консоль, на которой расположен зонд), подвод образца к зонду, сканирование поверхности образца, получение характеристик шероховатости. [4]. Причем последние данные выдаются программой в соответствии с общепринятыми инженерными требованиями.

Физические свойства поверхностей.

Шероховатость. При производстве и эксплуатации различных деталей, особое значение уделяется контролю качества поверхностного слоя материала. Это внимание отражает необходимость в качественных изделиях с высокими эксплуатационными свойствами. К параметрам, подлежащим контролю относят и шероховатость поверхности. Она определяется суммой всех микронеровностей, которые в процессе производства и эксплуатации появляются на поверхности готовых изделий. [6] Таким образом, шероховатость поверхности является одной из основных геометрических характеристик качества поверхностей деталей, оказывающих влияние на эксплуатационные показатели [5].

Для стандартизации и единообразного понимания заимствованы термины и способы описания характеристик поверхности, представленные на рисунке 1, установленные ГОСТ 25142-82м РФ [7].

Количественно шероховатость оценивалась следующими параметрами: Ra - среднее арифметическое отклонение профиля; Rz - высота неровностей профиля по десяти точкам; R_{max} - наибольшая высота неровностей профиля [8].

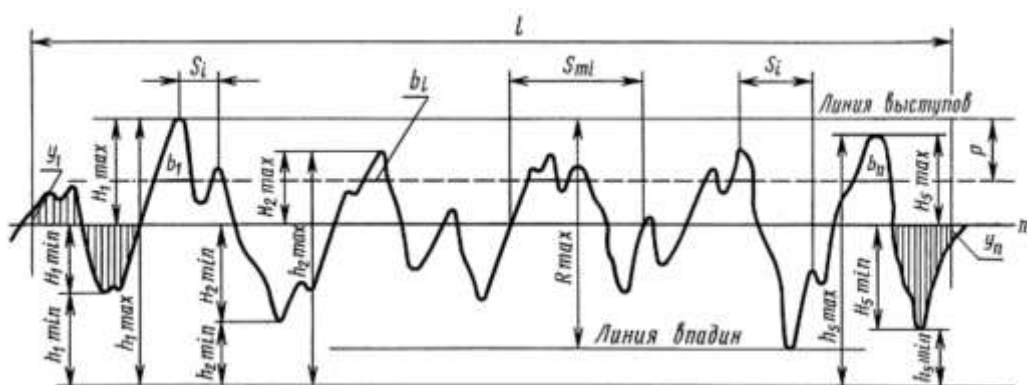


Рисунок 1 - Параметры шероховатости поверхности

Так же фиксировался средний шаг неровностей профиля S_m . После применения в программе Nova Rx к обработанному изображению команды Roughness 2D полученное изображение разбивается на 255 линий, значения шероховатости соответствуют ISO 4287:1997 parameters. Данные о шероховатости внесены в

таблицу 1. Однако, при взаимодействии в системе твёрдое тело – жидкость появляется необходимость учёта явлений смачивания и не смачивания. В этом случае вместо шероховатости при микроскопических и иных исследованиях на первый план выходит параметр, называемый краевой угол.

Краевой угол смачивания. Эксплуатационные свойства поверхности того или иного материала помогает оценить информация о характере взаимодействия поверхности твёрдого тела с жидкостью, чаще всего с водой.

Гидрофобность - характеристика молекул химических веществ, отражающая отсутствие у них склонности к взаимодействию с водной средой. Сверхгидрофобные материалы имеют поверхности, чрезвычайно несклонные к смачиванию (с углом контакта с водой, превышающим 150°) [9]. Гидрофильность происходит от греческого *hydor* - вода и *philia* – любовь. Качественно и количественно оценить эти параметры можно измеряя краевой угол смачивания (рис. 2).

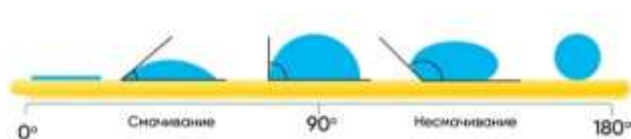


Рисунок 2 - Краевой угол смачивания

Измерение угла смачивания, как правило, осуществляют с помощью фотофиксации методом «сидячей» капли. Для этого каплю воды наносят на горизонтальную поверхность, после чего фотографируют. По полученному снимку определяют угол смачивания [10]. Вода в исследовании используется дистиллированная, чтобы исключить влияние различных примесей на результат. Капля выдавливается шприцом минимально возможного размера. Для определения краевого угла смачивания на образец опускалась капля воды из шприца. Далее производилась фотосъемка в режиме «макро» на уровне поверхности образца. Фотография загружалась в программу «онлайн-транспортир», которая более качественно вычисляла углы, нежели в ручном режиме. Определение краевого угла смачивания представлено на рисунке 3.

Там, где поверхность позволяла измерить углы с двух сторон, за опорный угол бралось среднее арифметическое значение.

Результаты исследования

Самые важные выводы представляет характер связи структурных характеристик поверхности материалов с их способностью взаимодействия с жидкостями. То есть с их гидрофобностью или гидрофильностью.

Для решения этих вопросов был произведен анализ поверхностей как искусственно созданных образцов, которые идут в комплекте с микроскопом, так и поверхностей различных

природных и техногенных материалов, в том числе и биологических объектов. Ниже приведены двумерные представления вида сканированных поверхностей.

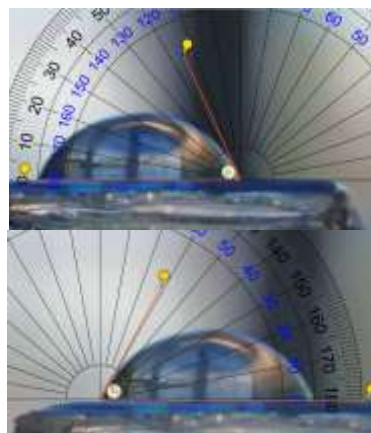


Рисунок 3 - Определение краевого угла смачивания 14 образца

Такие изображения позволяют выделить образцы с пространственной периодичностью. Однако, более наглядно представление о поверхностях материалов могут дать пространственные трёхмерные изображения. Полученные методом сканирования эти картины представлены на рисунке 5.

Разумеется, внешний вид поверхности не позволяет сделать определённых выводов о характере взаимодействия образцов с водой. Для полноты картины определялись характеристики, описывающие свойства шероховатости по горизонтальному и вертикальному сечению, их средние арифметические значения и краевые углы смачивания. Они представлены в таблице 1.

По данным таблицы построены графики зависимости краевого угла смачивания от структурно-физических характеристик поверхностей образцов. Соответствующие графики, представлены на рисунке 6.

На рисунках отчётливо прослеживается связь исследуемых параметров от образца к образцу. Статистические оценки такой связи представлены как коэффициенты корреляции. Коэффициенты корреляции с краевым углом смачивания: для Ra – 0,56, для Rz – 0,63, для $Rmax$ – 0,71, для Sm – 0,11. Их довольно высокие значения для полной высоты профиля позволяют говорить о перспективности предложенной методики исследования. Отсутствие корреляции между краевым углом и средним шагом неровности профиля легко объяснимо тем, что среди образцов не все имели периодическую структуру поверхности.

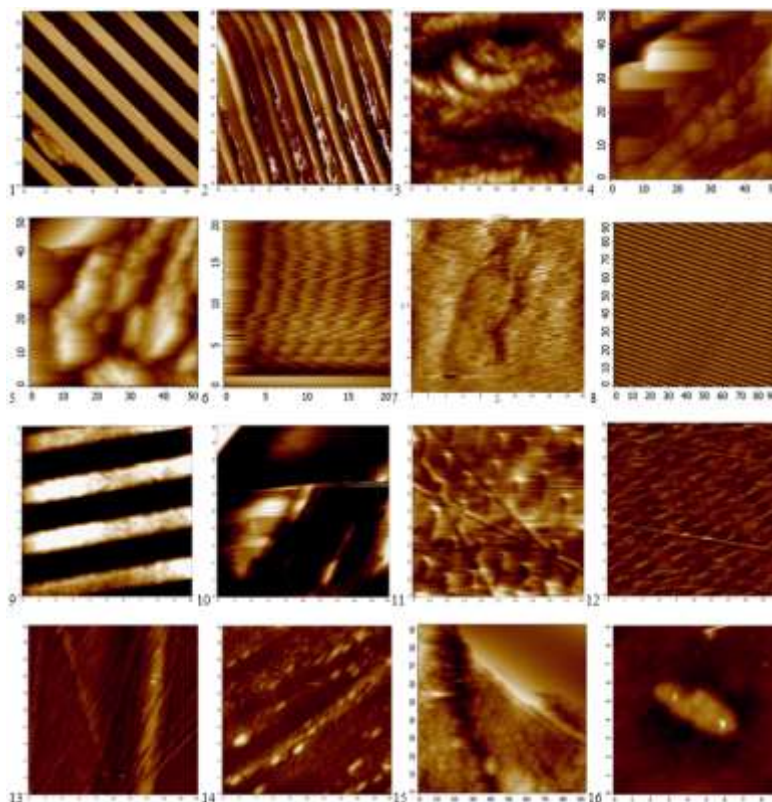


Рисунок 4 – Двумерные представления сканированных поверхностей: 1 – калибровочная решетка 3; 2 – крыло бабочки; 3 – камень гранит; 4 – пленка полиэтиленовая; 5 – бумага; 6 – битум; 7 – пчела; внутреннее крыло; 8 – калибровочная решетка 2; 9 – калибровочная решетка 1; 10 – жук, крыло; 11 – стеклянный образец 1; 12 – стеклянный образец 2; стеклянный образец 3; 14 – стеклянный образец 4; 15 – образец из лаборатории пластмасс, 16 – полиэтилен упаковочный.

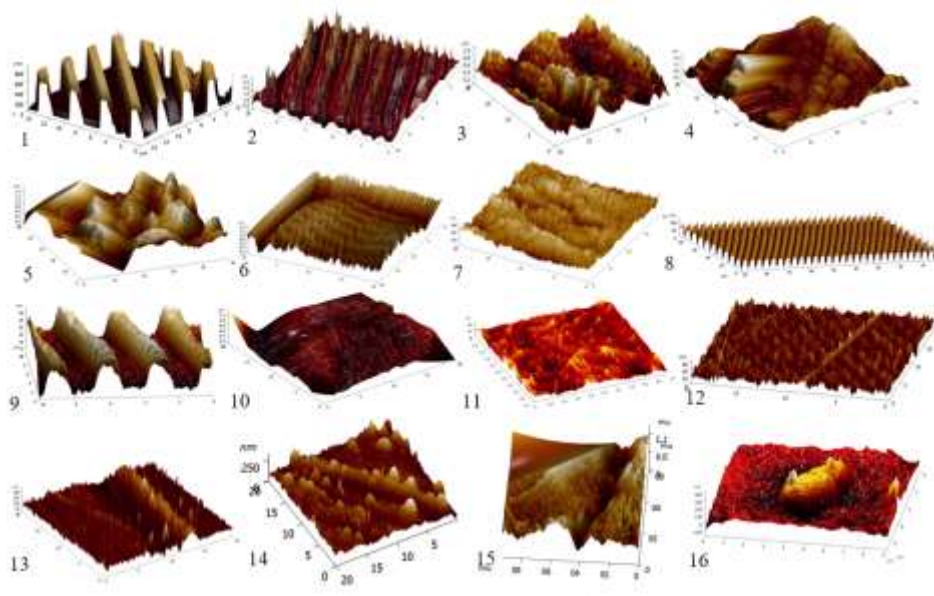
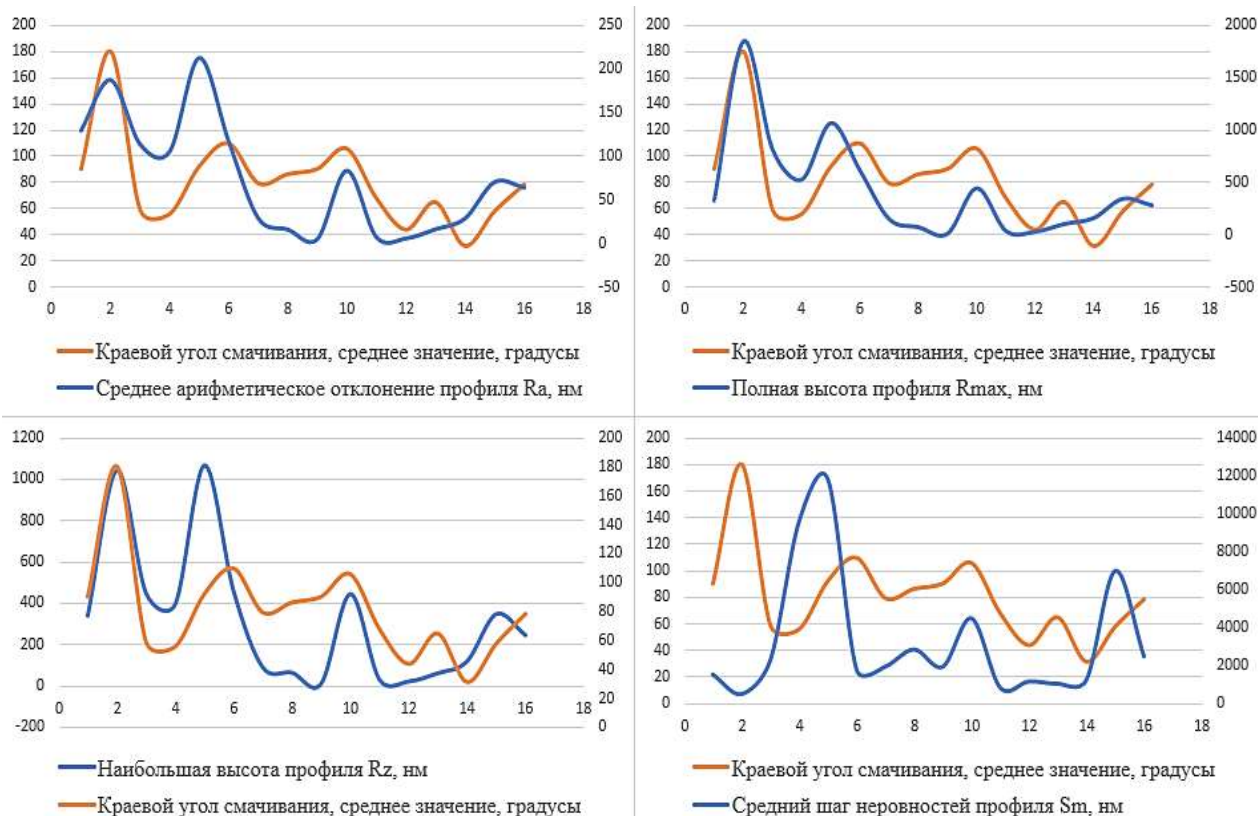


Рисунок 5 – Трёхмерные представления сканированных поверхностей: 1 – калибровочная решетка 3; 2 – крыло бабочки; 3 – камень гранит; 4 – пленка полиэтиленовая; 5 – бумага; 6 – битум; 7 – пчела; внутреннее крыло; 8 – калибровочная решетка 2; 9 – калибровочная решетка 1; 10 – жук, крыло; 11 – стеклянный образец 1; 12 – стеклянный образец 2; стеклянный образец 3; 14 – стеклянный образец 4; 15 – образец из лаборатории пластмасс, 16 – полиэтилен упаковочный.

Таблица 1 - Средние арифметические значения параметров шероховатости образцов, краевых углов смачивания

№ образца	Среднее арифметическое отклонение профиля Ra , нм	Наибольшая высота профиля Rz , нм	Полная высота профиля $Rmax$, нм	Средний шаг неровностей профиля Sm , нм	Краевой угол смачивания, среднее значение, градусы
1	129	342	331	1539	90
2	187	1046	1852	515	180
3	113	450	816	2306	58,5
4	105	399	531	9608	55,5
5	212	1070	1070	11815	92
6	116	461	614	1796	109,5
7	28	91	151	1963	79
8	15	66	75	2864	86
9	4	13	13	1960	90
10	83	447	447	4497	105,5
11	6	32	37	850	67,5
12	5	23	31	1181	43,5
13	15	63	105	1060	64,5
14	28	121	161	1269	31
15	69	350	346	7001	57,5
16	62	221	271	1814	78

**Рисунок 6** - Графики зависимости физических характеристик поверхности от краевого угла смачивания

Высокий коэффициент корреляции для свидетельствует от том, что гидрофобность материала определяется вертикальными параметрами, в значительно меньшей степени – горизонтальными характеристиками.

Для проверки этих зависимостей сначала был определен краевой угол смачивания контрольного образца 16. Он равен 78° . Далее по зависимости на рисунке 7 с указанной линией тренда для тех же параметров было определено предполагаемое значение физических характеристик поверхности и только затем проведено исследование образца на микроскопе, для получения физических характеристик параметров шероховатости.

Предсказанные параметры, основанные на линии тренда, представленной на рисунке 7, имеют следующие значения: $Ra = 60$ нм, $Rz = 263$ нм, $Rmax = 327$ нм, $Sm = 4769$ нм. Измеренные параметры имеют значения: $Ra = 62$ нм, $Rz = 221$ нм, $Rmax = 271$ нм, $Sm = 1814$ нм.

Таким образом, полученные характеристики оказались очень близкими к предполагаемым и укладываются в полученную зависимость, кроме горизонтальных параметров, где коэффициент корреляции близок к нулю.

Наиболее близкий предварительный результат к полученному на микроскопе показал параметр среднее арифметическое отклонение профиля Ra . Именно его в основном используют для описания шероховатости в инженерии. Абсолютная погрешность этого результата: $\Delta Ra = Ra_{изм} - Ra_{пред} = 2$ нм. Относительная погрешность:

$$\varepsilon = \frac{\Delta Ra}{Ra_{изм}} * 100\% = 3\%.$$

Следовательно, предположение о существовании связи шероховатости поверхности с краевым углом смачивания достаточно хорошо обосновано и возможны дальнейшие исследования в этом направлении.

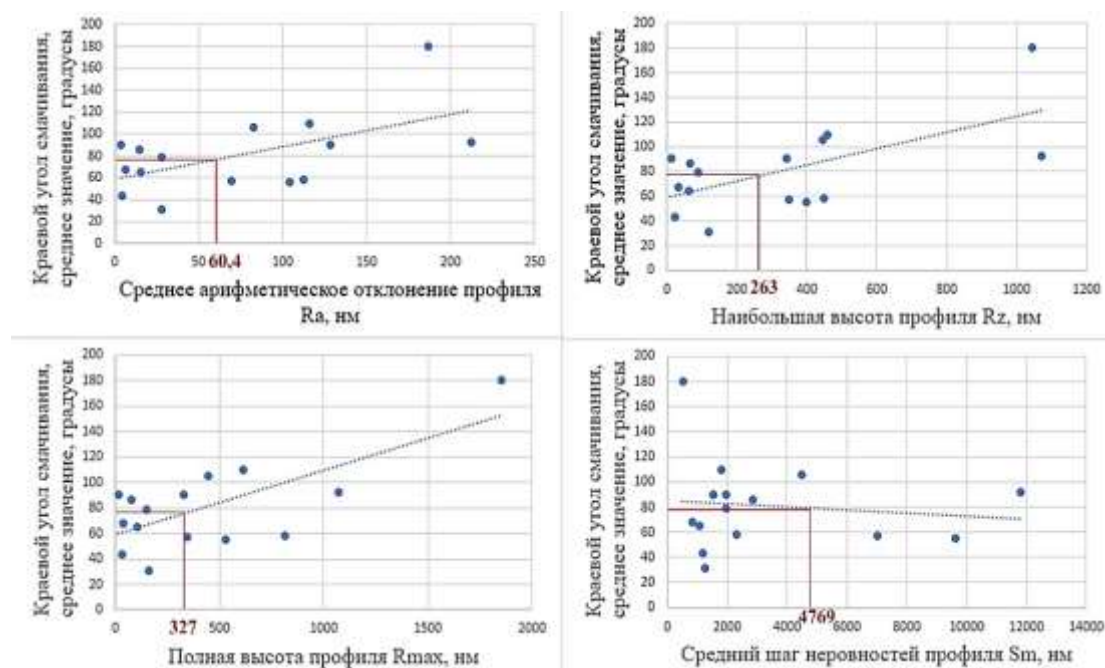


Рисунок 7 - Поиск параметров шероховатости по краевому углу смачивания

Выводы

С целью изучения зависимости гидрофобности различных природных и искусственных поверхностей проведён цикл измерений на АСМ Северо-Казахстанского университета им. М. Козыбаева. С достаточно высокой надёжностью выявлена связь гидрофобных свойств поверхностей разного рода с их шероховатостью в раннее неизученной области пространственных масштабов порядка нанометров.

Предложена методика измерения гидрофобности в указанном диапазоне размеров на основе измерения краевого угла смачивания. Изучена зависимость величины этого угла от масштаба неровностей поверхности. Определён коэффициент корреляции зависимости краевого угла смачивания от полной высоты профиля исследуемой поверхности, который составил 0,71. Фактически подтверждено существовании

зависимости гидрофобности поверхностей от параметров их структуры в области нанометрового диапазона. Результаты работы могут лечь в основу метода исследования физических особенностей поверхностей различных материалов с целью оценки их эксплуатационных качеств, прогнозирования износостойкости при влиянии контактов с жидкостями с использованием атомно-силовой микроскопии.

Литература

- 1 R.P. Feynman, The Wonders That Await a Micro-Microscope, in *The Saturday Review*, April 2, 45-47 (1960).
- 2 G. Binnig, C.F. Quate, and C. Gerber, *Phys. Rev. Lett.* **56** (9), 930-933 (1986).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930>
- 3 В.М. Усеинов, А.Г. Маркова, А.В. Пervikov, С.А. Сартин, М.Б. Шогжанова и Г.У. Сейлбекова, *Recent Contributions to Physics* **89**, 69-77 (2024). (In Russ.) <https://doi.org/10.26577/RCPH.2024v89i2-010>
- 4 Reference Manual. Control Program Nova Px. NT-MDT Spectrum Instruments, (Moscow, 2015). (In Russ.)
https://www.ntmdt-si.com/data/media/files/products/Nova_PX/NT-MDT_Nova_PX_Instructsiya_po_expluatcii.pdf
- 5 V.M. Raviolova, *Nauchnyj lider* **52** (97) (2022) (In Russ.) <https://scilead.ru/article/3633-sovremennie-sredstva-i-metodi-izmereniya-sher>
- 6 O.V. Mal'kov, Izmerenie parametrov sherohovatosti poverhnosti detail, [Measuring the surface roughness parameters of a part] (MGТУ im. N. E. Bauman, 2012) 22 p. (In Russ.)
http://mt2.bmstu.ru/books/ish/Roughness_measurement.pdf
- 7 GOST 25142-82 RF Sherohovatost' poverhnosti. Terminy i opredeleniya, [Surface roughness. Terms and definitions] (Moskva, Standartinform, 2018). (In Russ.)
<https://meganorm.ru/Data2/1/4294829/4294829265.pdf>
- 8 <https://roscsm.ru/service/kalibrovka-obrazcov-sherohovatosti/> Kalibrovka obrazcov sherohovatosti, [Calibration of roughness samples] (date of access 15.07.2024) (In Russ.)
- 9 <https://atf.ru/articles/obzory/kraevoy-ugol-smachivaniya-gifrofilnye-i-gidrofobnye-poverkhnosti/> Inzhenernye resheniya v oblasti smazochnyh materialov i kleev-germetikov [Contact angle. Hydrophilic and hydrophobic surfaces] (date of access 15.07.2024) (In Russ.)
- 10 <https://www.ntmdt-si.com/> Sajt NT-MDT Spectrum Instruments (date of access 15.07.2024)

История статьи:

Поступила – 17.01.2025

Поступила в доработанном виде – 21.05.2025

Принята – 30.05.2025

Article history:

Received 17 January 2025

Received in revised form 21 May 2025

Accepted 30 May 2025

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Усеинов Бейбут Мейрамович** (автор корреспондент) - канд. физ.-мат. наук, профессор кафедры математики и физики, Северо-Казакштанский университет им. М. Козыбаева, Петропавловск, Казакштан, e-mail: b.useinov@gmail.com

2. **Маркова Агния Георгиевна** – ст. преподаватель кафедры математики и физики, Северо-Казакштанский университет им. М. Козыбаева, Петропавловск, Казакштан, e-mail: agni.m@bk.ru

3. **Самуткин Ярослав Ростиславович** – учащийся, Петропавловск, Казакштан, e-mail: pluxuryyaroslav0.9@gmail.com

4. **Солодовник Андрей Андреевич** - канд. физ.-мат. наук, профессор кафедры математики и физики, Северо-Казакштанский университет им. М. Козыбаева, Петропавловск, Казакштан, e-mail: aasolodovnik@mail.ru

5. **Касимова Светлана Александровна** – ст. преподаватель кафедры математики и физики, Северо-Казакштанский университет им. М. Козыбаева, Петропавловск, Казакштан, e-mail: kassedy_sa@mail.ru

Information about authors:

1. **Beibut Useinov** (corresponding author)- candidate of physical and mathematical sciences, Prof. of the Department of Mathematics and Physics, M. Kozybaev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan, e-mail: b.useinov@gmail.com

2. **Agniya Markova** – Senior Lecturer, Department of Mathematics and Physics, M. Kozybaev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan, e-mail: agni.m@bk.ru

3. **Yaroslav Samutkin** – student, Petropavlovsk, Kazakhstan, e-mail: pluxuryyaroslav0.9@gmail.com

4. **Andrey Solodovnik** - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of Mathematics and Physics, M. Kozybaev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan, e-mail: aasolodovnik@mail.ru

5. **Svetlana Kasimova** – Senior Lecturer, Department of Mathematics and Physics, M. Kozybaev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan, e-mail: kassedy_sa@mail.ru

A. Abduvalov* , Zh. Taubaldiyeva , K. Baigarin 

Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

*e-mail: alshyn.abduvalov@nu.edu.kz

INFLUENCE OF DEPOSITION PARAMETERS ON THE SURFACE MORPHOLOGY AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF WO₃ THIN FILMS SYNTHESIZED BY MAGNETRON SPUTTERING AT A GLANCING ANGLE DEPOSITION

The growing need for sustainable energy has intensified research on photoelectrochemical (PEC) water splitting for hydrogen production. Tungsten trioxide (WO₃) is a promising photoanode due to its stability, suitable bandgap (~2.4–2.8 eV), and strong visible-light absorption. However, performance limitations arise from short hole diffusion length and high recombination rates. This study examines the effect of substrate rotation during magnetron sputtering on WO₃ thin films' morphology and PEC performance, employing the glancing angle deposition technique to achieve nanostructured films that enhance light trapping.

SEM analysis reveals that films deposited without rotation exhibit greater porosity, improving light absorption and charge transport. As a result, these films demonstrate higher photocurrent density and enhanced electrochemical impedance properties. These findings highlight the significance of deposition dynamics in optimizing WO₃ for PEC applications. This study provides insights into controlling thin film morphology to improve PEC efficiency, contributing to the development of more effective water-splitting devices.

Keywords: tungsten trioxide, PEC water splitting, magnetron sputtering, glancing angle deposition, thin film deposition, nanostructured photoanodes.

А. Абдувалов*, Ж. Таубалдиева, Қ. Байғарин

Назарбаев Университет, Астана, Қазақстан

*e-mail: alshyn.abduvalov@nu.edu.kz

Магнетронды шандату арқылы сүйір бұрышпен синтезделген WO₃ жұқа пленкалардың беттік морфологиясы мен фотокаталитикалық қасиеттеріне синтез параметрлерінің әсері

Тұрақты энергия көздеріне деген өсіп келе жатқан қажеттілік сутегі өндіруге арналған фотоэлектрхимиялық (ФЭХ) су ыдырауын зерттеуді жандандыруда. Вольфрам триоксиді (WO₃) химиялық тұрақтылығы, қолайлы тыйым салынған аймағының ені (~2,4–2,8 эВ) және көрінетін жарықты тиімді сіңіру қабілеті арқасында перспективалы фотоанодтық материал болып саналады. Алайда, оның тиімділігі тасымалдау ұзындығының қысқалығымен және фотогенерацияланған заряд тасымалдаушылардың жоғары рекомбинация жылдамдығымен шектеледі. Осы зерттеуде магнетрондық шашырату процесінде субстраттың айналу жылдамдығының WO₃ жұқа қабықтарының морфологиясы мен ФЭХ қасиеттеріне әсері зерттелді. Наноқұрылымды қабықтардың жарықты тиімді ұстап қалуын қамтамасыз ету үшін қиғаш бұрышпен шөктіру (glancing angle deposition) әдісі қолданылды.

Сканерлеуші электрондық микроскопия (СЭМ) нәтижелері субстрат айналымынсыз алынған қабықтардың жоғары кеуектілікке ие екенін көрсетті, бұл жарық сіңіруді және заряд тасымалын жақсартады. Нәтижесінде, мұндай қабықтар жоғары фототок тығыздығын және жетілдірілген электрхимиялық сипаттамаларды көрсетті. Алынған нәтижелер WO₃ негізіндегі ФЭХ жүйелерінің тиімділігін арттыруда шөктіру параметрлерін оңтайландырудың маңыздылығын айқындайды. Бұл зерттеу жұқа қабық морфологиясын басқару арқылы ФЭХ тиімділігін арттыруға ықпал етіп, су ыдырату технологияларын дамытуға үлес қосады.

Түйін сөздер: вольфрам триоксиді, фотоэлектрхимиялық су ыдырауы, магнетрондық шашырату, қиғаш бұрышпен шөктіру, жұқа қабықты жабындар, наноқұрылымды фотоанодтар.

А. Абдувалов*, Ж. Таубалдиева, К. Байгарин

Назарбаев Университет, Астана, Қазақстан

*e-mail: alshyn.abduvalov@nu.edu.kz

Влияние параметров осаждения на морфологию поверхности и фотокаталитические свойства тонких пленок WO₃, полученных методом магнетронного распыления при скользящем угле осаждения

Возрастающая потребность в возобновляемых источниках энергии стимулирует активные исследования фотоэлектрхимического (ФЭХ) расщепления воды для производства водорода. Триоксид вольфрама (WO₃) является перспективным материалом для фотоанода благодаря своей химической стабильности, оптимальной ширине запрещенной зоны (~2,4–2,8 эВ) и высокой поглощающей способности в видимом диапазоне. Однако его эффективность ограничивается малой длиной диффузии дырок и высокой скоростью рекомбинации фотогенерированных носителей заряда. В данной работе исследуется влияние скорости вращения подложки при магнетронном распылении на морфологию и ФЭХ свойства тонких пленок WO₃ с применением метода осаждения при скользящем угле (glancing angle deposition) для формирования наноструктурированной поверхности, улучшающей поглощение света.

Анализ сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) показал, что пленки, осажденные без вращения подложки, обладают большей пористостью, что способствует повышенному поглощению света и улучшению транспорта заряда. В результате такие пленки имеют более высокую плотность фототока и улучшенные электрохимические характеристики. Полученные результаты демонстрируют важность выбора параметров осаждения для оптимизации свойств WO₃ в ФЭХ приложениях. Проведенное нами исследование вносит вклад в развитие методов формирования тонкопленочных материалов, способствуя созданию более эффективных систем для расщепления воды с целью генерации водорода.

Ключевые слова: триоксид вольфрама, фотоэлектрхимическое расщепление воды, магнетронное распыление, осаждение при скользящем угле, тонкопленочные покрытия, наноструктурированные фотоаноды.

Introduction

The increasing demand for clean and sustainable energy sources has driven extensive research into photoelectrochemical (PEC) water splitting as a promising method for hydrogen production.

Among the various metal oxide semiconductor materials investigated for PEC applications, tungsten trioxide (WO₃) has emerged as a highly attractive candidate due to its comparable chemical stability, suitable bandgap (~2.4–2.8 eV), and strong visible-light absorption [1,2]. WO₃ serves as an efficient photoanode in PEC systems, facilitating water oxidation under solar illumination [3,4]. Its relatively deep valence band edge enables sufficient driving force for oxygen evolution, while its good electron mobility minimizes charge recombination losses. However, despite these advantages, WO₃ suffers

from challenges such as weak absorbance in visible region (more than 450 nm), poor long-term stability in alkaline conditions, short hole diffusion length, and fast recombination of photogenerated carriers [5,6].

To address these limitations, researchers have explored various strategies, including nanostructuring [7], doping [8,9], heterojunction or composite formation [10], and phase changes [11–13], to improve the PEC performance of WO₃ thin films. Nanostructuring of WO₃ thin films plays a critical role in enhancing their performance PEC water splitting applications. The efficiency of PEC processes largely depends on the material's ability to absorb light. Nanostructured WO₃ films, such as those with porous or columnar architectures, offer several advantages in this context [14]. First,

increased surface area resulting from porosity provides more active sites for water oxidation reactions, improving photocurrent generation. Second, nanostructuring enhances light trapping and scattering, leading to improved optical absorbance, especially in the visible spectrum where WO₃ is active. This higher absorbance increases the number of photogenerated electron-hole pairs available for redox reactions. Additionally, the porous structure shortens the diffusion paths for photogenerated holes, thereby reducing recombination losses and enhancing charge separation efficiency. Together, these effects contribute to higher photocurrent density and better overall PEC behavior, making controlled nanostructuring a key strategy in the design of efficient WO₃-based photoanodes.

In previous reported works, using “glancing angle deposition” method (GLAD) [15], Limwichean et al. studied dependence of PEC properties of sputter deposited WO₃ thin films on substrate positions from target material [14]. They reported growth of more porous WO₃ nanoforest thin films at higher glancing

angle and at closer distance between substrate and target. However, they observed better PEC activity on sample deposited at GLAD 61.9° and 85-mm substrate-target distance. Another most important parameter that may affect the growth and PEC of sculptured WO₃ is substrate rotation speed.

This report aims to check effect of the “substrate rotation speed” of WO₃ thin films to its photoactivity and thin film growth while sputter depositing. Surface, morphology and crystalline structures of obtained WO₃ thin films deposited by glancing angle magnetron sputtering under stationary (0 rpm) and rotating substrate (15 rpm) conditions were thoroughly studied and analyzed using electron microscopy and x-ray diffractometer. PEC properties are evaluated and discussed. Substrate rotation plays a crucial role in magnetron sputtering deposition of WO₃ thin films by ensuring uniform thickness. Without rotation, the deposition rate varies across the substrate, leading to non-uniform film thickness and inconsistent PEC performance.

Methodology

Synthesis. Initially, commercial FTO/Glass substrates were cleaned in ethanol by ultrasonic bath for 15 minutes. After, they were held for 15 minutes under UV-Ozone cleaner to remove organic contaminants from the surface. WO₃ nanoforest thin films were synthesized using Kurt Lesker magnetron sputtering system using W target (pure W, 99.9 %). The deposition was carried out under reactive sputtering using oxygen and argon gases in the chamber at overall 5 mTorr pressure. O₂/Ar flow rates were 21/33 sccm. The substrate-target distance was 13 cm. Before deposition, magnetron chamber was pumped down to 9*10⁻⁷ mTorr pressure to ensure high vacuum conditions and experiment contamination prevention. After deposition, all samples were annealed at 500 °C for 1 h on hotplate in air to make them crystalline.

For the experiment, “glancing angle deposition” method is used [15]. It helps to achieve nanostructured (nanoforest) WO₃ thin films that are beneficial for light trapping. Two sets of samples were prepared to study growth morphology and photocatalytic properties depending on substrate holder rotational speed: 0 rpm and 15 rpm. It is worth noting that grown thin films at 0 and 15 rpm have identical thickness to ensure elimination coming from thickness difference.

Characterization. Scanning electron microscopy (SEM) imaging was performed using a Carl Zeiss Crossbeam 540 GEMINI II system. The

crystallographic phases of the samples were identified using a Rigaku SmartLab multifunctional X-ray diffractometer (XRD) equipped with CuK α radiation (λ = 0.1541 nm). Optical properties were evaluated using an Evolution 300 UV-Vis spectrophotometer.

For PEC, linear sweep voltammetry (LSV) measurements of the photoanodes were conducted using a CHI660E potentiostat in a standard three-electrode configuration, employing an Ag/AgCl reference electrode (3.5 M KCl). The electrolyte solution consisted of 0.16 M Na₂SO₄ at pH 7. A PLS-FX300HU solar simulator (AM 1.5, 100 mW/cm²) was used to simulate solar illumination during all PEC experiments. The applied potentials were converted to the reversible hydrogen electrode (RHE) scale using the equation:

$$V_{\text{RHE}} = V_{\text{Ag/AgCl}} + 0.059 \cdot \text{pH} + 0.205$$

where $V_{\text{Ag/AgCl}}$ is the measured potential and 0.205 V corresponds to the standard potential of the Ag/AgCl electrode (3.5 M KCl).

Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) was performed under illumination using a frequency range of 1 Hz to 10 kHz with an AC amplitude of 50 mV at a DC bias of 0.68 V vs Ag/AgCl. The data were fitted to equivalent circuit models using the EIS Spectrum Analyzer software [16].

Results and discussions

Figure 1 shows the SEM images of WO_3 thin films that have a columnar microstructure with vertically aligned grains, characteristic of sputter-deposited films. The cross-sectional views (a, c) reveal a relatively dense structure with some gaps between columns, which may affect charge transport and film stability. The top-view images (b, d) display a cracked, granular morphology with well-defined grains, suggesting good surface coverage but potential mechanical instability due to the presence of cracks. The surface coverage of the WO_3 thin film

deposited at 0 rpm in image (b) is approximately 76.19%, meaning that about 23.81% of the surface consists of cracks or voids. WO_3 thin film deposited at 15 rpm has 77.04% surface coverage indicating 22.96% of cracks or voids. The main difference in growth is density of columnar microstructure: thin films deposited at 15 rpm show accumulated bigger packs of columns with less distance between each column compared to more separated columns of sample grown at 0 rpm at same scale of area.

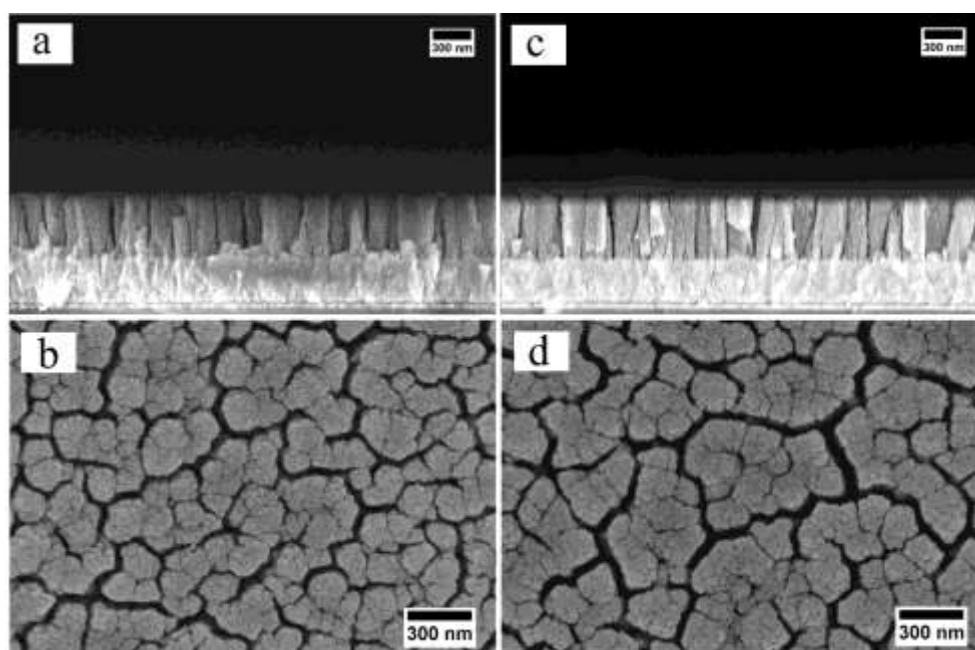


Figure 1 – Cross-sectional and surface SEM images of WO_3 thin films deposited by glancing angle magnetron sputtering under stationary - 0 rpm (a, b) and rotating substrate - 15 rpm (c, d) conditions

The crystalline structure of WO_3 thin films deposited by magnetron sputtering at different substrate holder rotational speeds (0 and 15 rpm) was examined using X-ray diffraction (XRD), and the results are shown in Figure 2. The XRD patterns of both samples display well-defined diffraction peaks corresponding to the triclinic phase of WO_3 , in accordance with JCPDS card no. 00-032-1395. Prominent peaks are observed at 2θ values around 23.18° , 23.68° , 24.33° , 26.62° , 28.7° , 33.69° which correspond to the (002), (020), (200), (1-20), (1-1-2), (022) and FTO (200) planes of substrate respectively.

It can be seen that both samples, regardless of rotation speed, exhibit the same set of diffraction peaks, indicating that the crystal phase of WO_3 is preserved under both deposition conditions. However, noticeable differences in peak intensity and sharpness can be observed between the two. The sample deposited at 15 rpm (red pattern) shows

slightly higher peak intensities and narrower peaks compared to the 0-rpm sample (black pattern), particularly in the (020) and (202) reflections. Despite the increase in rotation speed, no significant shift in peak positions was observed, indicating that there is no substantial strain or phase transformation induced by rotation. This suggests that the microstructural evolution induced by substrate rotation primarily affects the film's crystallinity rather than its phase composition.

The optical properties of obtained samples analysed by UV-Vis spectroscopy. Figure 3 shows absorbance spectra (a) and Tauc plots (b) for samples deposited at 0 and 15 rpm. Despite the differences in surface morphology as seen in SEM images, optical properties of the samples stay the same. Tauc plot method was used to define the band gap of films [17], and it is estimated as 3.05 eV for both samples.

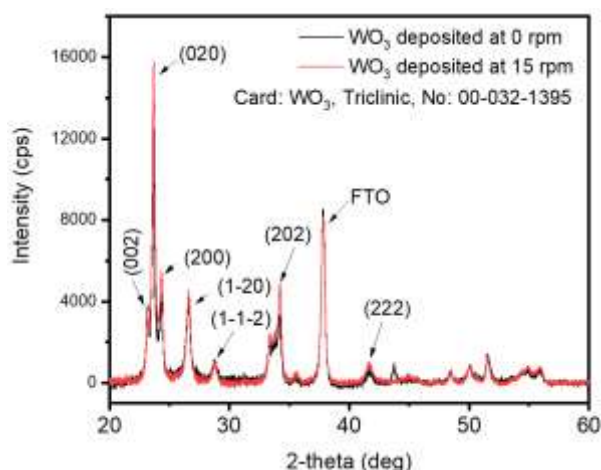


Figure 2 – XRD spectra of WO₃ thin films deposited by glancing angle magnetron sputtering under stationary and rotating substrate conditions

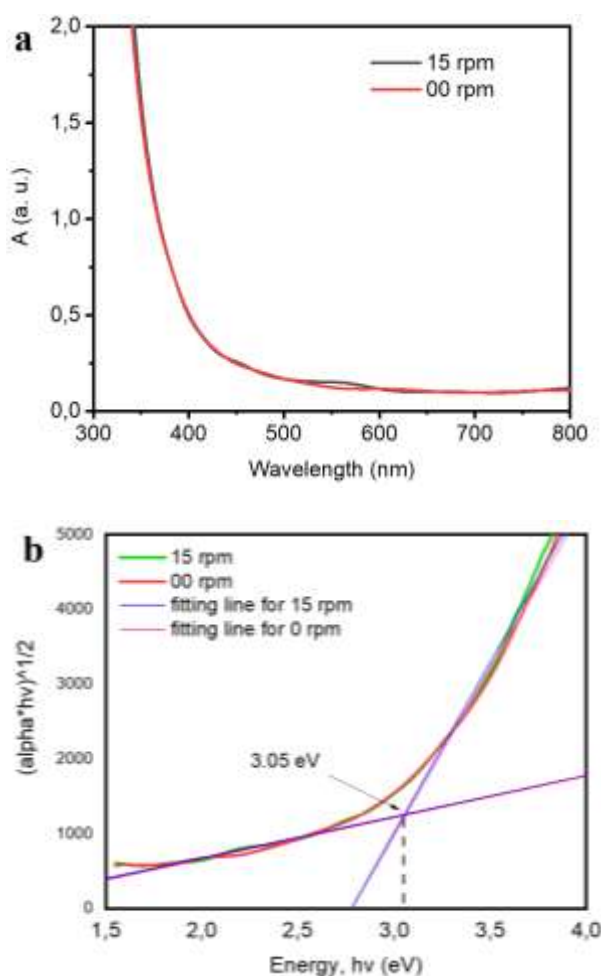


Figure 3 – Absorbance spectra (a) and Tauc plots (b) of WO₃ thin films deposited by glancing angle magnetron sputtering under stationary and rotating substrate conditions

The photoelectrochemical activity of the films was initially evaluated through LSV (Figure 4-a).

Under illumination, the WO₃ thin film deposited at 0 rpm exhibited an 13 % enhanced photocurrent density compared to the film grown at 15 rpm at 1.23 V vs RHE scale ($9.11 \cdot 10^{-4}$ mA/cm² vs $8.05 \cdot 10^{-4}$ mA/cm²). The negligible current recorded under dark conditions for both samples confirmed the photo-induced nature of the observed responses. The improved photocurrent in the 0 rpm sample is indicative of enhanced charge separation and transport kinetics, which can be directly correlated with the superior surface morphology observed via SEM. To further assess the dynamic response of the electrodes under intermittent light conditions, chopped LSV measurements were conducted (Figure 4-b). The 0 rpm sample demonstrated a sharp and stable photocurrent response during light on/off cycles.

Electrochemical impedance spectroscopy was employed to probe the interfacial charge transfer properties under illumination (Figure 4-c). The Nyquist plots revealed that the 0 rpm film exhibited a smaller semicircle, indicative of lower charge transfer resistance (R_{ct}), compared to the 15 rpm counterpart. This observation suggests improved interfacial kinetics for the sample deposited at 0 rpm, and it agrees with the less photocurrent observed in the samples prepared at 15 rpm. Such correlation in dependence of charge transport properties on surface morphology is key factor that explains such PEC enhancement mechanisms. More packed structures on sample deposited at 15 rpm have longer distance for charge to reach surface and back contact than on sample deposited at 0 rpm. Close packed treelike structures deposited at 15 rpm show more charge transfer resistance at 2940 Ohm than 561 Ohm on more separated structures. Charge transfer resistance calculations were done using open-source EIS Spectrum Analyzer software by fitting the obtained data from EIS measurements.

The operational stability of the photoanodes was examined through chronoamperometry under continuous illumination at a fixed potential (Figure 4-d). The WO₃ sample deposited at 0 rpm more stable photocurrent generation over a 200-second duration. The enhanced stability of the 0 rpm sample can be attributed to its denser microstructure, which likely offers better protection against photocorrosion and mitigates charge trapping at defect sites.

Conclusion

The obtained data clearly demonstrate that substrate rotation during RF glancing angle magnetron sputtering significantly enhances the structural and functional properties of WO₃ thin films. Glancing angle magnetron deposition without rotation of substrate improved surface morphology,

leading to superior photocurrent generation, faster and more stable light response, and greater operational durability. These studies are critical for advancing and understanding growth and formation of WO₃-based photoelectrodes in solar-driven water splitting applications and other PEC systems. The

findings highlight the importance of optimizing physical deposition parameters—particularly substrate motion—as a straightforward yet highly effective strategy for tuning the properties of metal oxide photoanodes.

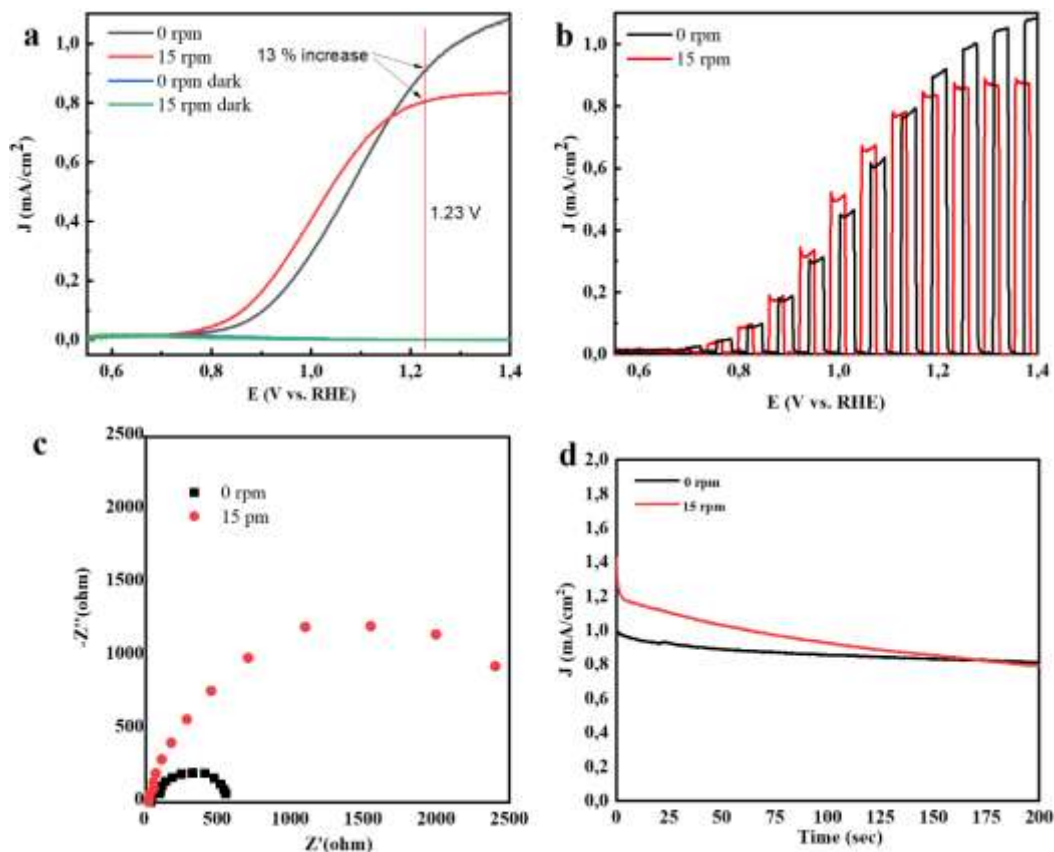


Figure 4 – LSV (a), chopped LSV (b), EIS (c) and current-time (d) plots of WO₃ thin films deposited by glancing angle magnetron sputtering under stationary and rotating substrate conditions

Gratitude, conflict of interest

This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher

Education of the Republic of Kazakhstan Grant No. AP19674485.

References

- 1 X. Zhang, Z.-Q. Zhang, Y.-D. Sun, X.-J. Ma, F.-X. Jin, F.-Y. Zhang, W.-G. Han, B.-X. Shen and S.-Q. Guo, *Rare Met.* **43**, 3441–3459 (2024). <https://doi.org/10.1007/s12598-023-02554-z>
- 2 H. Yang, S. Li, S. Yu, X. Yu, H. Zhao, C. Wang, D. Ping and J.Y. Zheng, *Chem. Eng. Sci.* **302**, 120894 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.ces.2024.120894>
- 3 K. Li, Y. Yin and P. Diao, *Small* **20** (40), 2402474 (2024). <https://doi.org/10.1002/sml.202402474>
- 4 F. Bozheyev, S. Fengler, J. Kollmann, D. Abou-Ras, N. Scharnagl and M. Schieda, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 48565–48575 (2024). <https://doi.org/10.1021/acsami.4c09713>
- 5 O.M. Pinto, R.P. Toledo, H.E.D.S. Barros, R.A. Gonçalves, R.S. Nunes, N. Joshi and O.M. Berengue, *Processes* **12**, 2605 (2024). <https://doi.org/10.3390/pr12112605>
- 6 J.C. Expósito-Gálvez, L. Hromadko, M. Sepúlveda, F.J. Peón-Díaz, S.D. Coria-Quñones, O. Jiménez-Sandoval, J.M. Macak and G. Oskam, *Electrochimica Acta* **474**, 143545 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.143545>
- 7 S. Gonçalves, P. Quitério, J. Freitas, D. Ivanou, T. Lopes, A. Mendes, J.P. Araújo, C.T. Sousa and A. Apolinário, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 64389–64409 (2024). <https://doi.org/10.1021/acsami.4c11729>

- 8 K. Syrek, S. Kotarba, M. Zych, M. Pisarek, T. Uchacz, K. Sobańska, Ł. Pięta and G.D. Sulka, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 36752–36762 (2024). <https://doi.org/10.1021/acsami.4c02927>.
- 9 J. Yadav, A. Phutela, J.A. Khan, S. Bhattacharya and J.P. Singh, *Int. J. Hydrog. Energy* **79**, 826–838 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.060>.
- 10 J. Li, S. Hu, S. Liu, S. Hou, L. Li and J. Huang, *Int. J. Hydrog. Energy* **61**, 967–974 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.03.004>.
- 11 H. Kim, J. Lee, H. Kong, T. Park, T.S. Kim, H. Yang and J. Yeo, *Small* **20**, 2402051 (2024). <https://doi.org/10.1002/smll.202402051>.
- 12 L. Carmel, S. Aharon, D. Meyerstein, Y. Albo, L. Friedlander, D. Shamir and A. Burg, *Int. J. Hydrog. Energy* **51**, 1508–1520 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.07.351>.
- 13 J. Xu, F. Yang, X. Guo, S. Wang and L. Feng, *J. Energy Chem.* **105**, 170–177 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2025.01.054>.
- 14 S. Limwichean, N. Kasayapanand, C. Ponchio, H. Nakajima, V. Patthanasettakul, P. Eiamchai, G. Meng and M. Horprathum, *Ceram. Int.* **47**, 34455–34462 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.08.359>.
- 15 M.M. Hawkeye and M.J. Brett, *J. Vac. Sci. Technol. Vac. Surf. Films* **25**, 1317–1335 (2007). <https://doi.org/10.1116/1.2764082>.
- 16 Bondarenko, A.S., Ragoisha, G.A. and Pomerantsev, A.L., *Progress in Chemometrics Research*; Pomerantsev, A.L., Ed. (Nova Sci. Publ. N. Y. NY USA, 2005), pp 89-102.
- 17 P. Makula, M. Pacia and W. Macyk, *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 6814–681 (2018). <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b02892>

Article history:

Received 12 December 2024

Accepted 20 May 2025

Мақала тарихы:

Түсті – 10.12.2024

Қабылданды – 20.05.2025

Information about authors:

1. **Alshyn Abduvalov** (corresponding author) – PhD in Physics, Researcher at Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan, e-mail: alshyn.abduvalov@nu.edu.kz
2. **Zhamilya Taubaldiyeva** – MSc student at Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan, e-mail: zhamilya.taubaldiyeva@nu.edu.kz
3. **Kanat Baigarin** – PhD in plasma physics and chemistry, Chief Officer for Sustainable Development at Nazarbayev University, Project PI, Astana, Kazakhstan, e-mail: kbaigarin@nu.edu.kz

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Абдувалов Алшын** (автор корреспондент) – физика бойынша PhD, Назарбаев Университетінің ғылыми қызметкері, Астана, Қазақстан, e-mail: alshyn.abduvalov@nu.edu.kz
2. **Таубалдиева Жәмиля** – Назарбаев университетінің магистранты, Астана, Қазақстан, e-mail: zhamilya.taubaldiyeva@nu.edu.kz
3. **Байғарин Қанат** – плазма физикасы және химия бойынша PhD, Назарбаев Университетінің тұрақты даму жөніндегі бас директоры, PI жобасы, Астана, Қазақстан, e-mail: kbaigarin@nu.edu.kz

М. Әуелханқызы^{1,2*} , А. Жамаш^{1,2} , Н. Рақымжан² , М. Әуелханқызы¹ ,
Б.Т. Лесбаев^{1,2} 

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

²Жану проблемалар институты, Алматы, Қазақстан

*e-mail: auyelhankyzy.m@kaznu.kz

КӨМІРТЕКТІ НҮКТЕЛЕР: ТҮРЛЕРІ, АЛУ ЖОЛДАРЫ, ҚАСИЕТІ ЖӘНЕ ҚОЛДАНУ АЯСЫ

Нанотехнология – іргелі және қолданбалы ғылымдардың және технологияның қиылысында орналасқан пәнаралық сала. Бұл салада дәстүрлі жолмен алуға мүмкін емес материал түрлерін атомдық және молекулалық деңгейде манипуляция жасау арқылы жаңа және қажетті материалдарды алуды мүмкін етеді. Осы салада соңғы жылдары өзінің көрсететін әртүрлі қасиеттерінің арқасында қарқынды дамып келе жатқан нөл-өлшемді наноматериалдардың бірі – көміртекті нүктелер. Көміртекті нүктелер – фотокатализ, жарық шығаратын құрылғыларда және сенсорларда қолдануға қолайлы қасиеттері бар тартымды көміртекті наноматериалдар.

Бұл шолу мақаласында көміртекті нүктелерді зерттеу барысында жасалған алғашқы қадамдардан басталып, яғни 2004 жылы бұл наноматериалдардың «флуоресцентті нанобөлшектер» деп аталуынан бастап, даму тарихына, яғни 2011 жылдан қазіргі уақытқа дейін жасалған жұмыстарға тоқталынды. Көміртекті нүктелерді графенді кванттық нүктелер, көміртекті кванттық нүктелер және карбонизделген полимерлі нүктелер деп бөліп қарастыру ұсынылып, олар бір-бірімен салыстырылып, жан-жақты зерттелінді. Сонымен қатар, бұл көміртекті нүктелерді синтездеуде қолданылатын «жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдері және оларға жататын әдістер қарастырылды. Көміртекті нүктелерге деген қызығушылықтың артуы олардың көрсететін әртүрлі қасиеттері болғандықтан, олардың оптикалық, электрохимиялық қасиеттері және дисперстілігі мен уыттылығы сипатталды. Бұл мақаланың соңында көміртекті нүктелердің қолдану аясына, яғни сенсорларда, биомедицинада, фототерапиялық нысандарда, энергия сақтауда және катализде қолдануы толықтай қарастырылды.

Түйін сөздер: көміртекті нүктелер, нөл-өлшемді наноматериалдар, фотолюминесценция, сенсор, биомедицина.

M. Auyelkhankyzy^{1,2*}, A. Zhamash^{1,2}, N. Rakhymzhan², M. Auyelkhankyzy¹, B.T. Lesbayev^{1,2}

¹Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan

²Institute of Combustion Problems, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: auyelhankyzy.m@kaznu.kz

Carbon dots: their types, obtaining methods, properties and applications

Nanotechnology is an interdisciplinary field at the intersection of fundamental and applied sciences and technology. This field makes it possible to obtain new and useful materials by manipulating materials that are not available in traditional ways at the atomic and molecular levels. One of the zero-dimensional nanomaterials that has been rapidly developing in this field in recent years due to the diverse properties it exhibits is carbon dots. Carbon dots are attractive carbon nanomaterials with properties suitable for use in photocatalysis, light-emitting devices, and sensors.

This review article focuses on the history of carbon dots, starting from the first steps taken in the study of carbon dots, i.e., from the name of these nanomaterials "fluorescent nanoparticles" in 2004, to the development history, i.e., from 2011 to the present. It is proposed to consider carbon dots as graphene quantum dots, carbon quantum dots, and carbonized

polymer dots, and they are compared and studied in detail. In addition, the “Top-down” and “bottom-up” approaches used in the synthesis of these carbon dots and their related methods were reviewed. Due to the increasing interest in carbon dots due to their diverse properties, their optical, electrochemical properties, dispersibility and toxicity were characterized. At the end of this article, the application of carbon dots in sensors, biomedicine, phototherapy, energy storage and catalysis are fully reviewed.

Keywords: carbon dots, zero-dimensional nanomaterials, photoluminescence, sensors, biomedicine.

М. Ауелханкызы^{1,2*}, А. Жамаш^{1,2}, Н. Рақымжан², М. Ауелханкызы¹, Б.Т. Лесбаев^{1,2}

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

²Институт проблем горения, Алматы, Казахстан

*e-mail: auyelkhankyzy.m@kaznu.kz

Углеродные точки: виды, способы получения, свойства и область применения

Нанотехнологии – междисциплинарная область, находящаяся на стыке фундаментальных и прикладных наук и технологий. Эта область позволяет получать новые и востребованные материалы путем манипулирования типами материалов на атомном и молекулярном уровне, которые невозможно получить традиционными способами. Одним из нульмерных наноматериалов, который в последние годы стремительно развивается в этой области благодаря своим разнообразным свойствам, являются углеродные точки. Углеродные точки – это привлекательные углеродные наноматериалы со свойствами, подходящими для использования в фотокатализе, светоизлучающих устройствах и сенсорах.

В данной обзорной статье рассматривается история исследований углеродных точек, начиная с первых шагов, предпринятых в 2004 году, когда эти наноматериалы были названы «флуоресцентными наночастицами», и продолжая работой с 2011 года по настоящее время. Было предложено выделять углеродных точек как графеновые квантовые точки, углеродные квантовые точки и карбонизированные полимерные точки. Они были сравнены и тщательно изучены. Кроме того, были рассмотрены подходы «сверху вниз» и «снизу вверх», используемые при синтезе углеродных точек, а также связанные с ними методы. Интерес к углеродным точкам растет из-за разнообразных свойств, которые они проявляют; были охарактеризованы их оптические, электрохимические свойства, а также дисперсность и токсичность. В конце статьи подробно обсуждается применение углеродных точек в сенсорах, биомедицине, фототерапии, хранении энергии и катализе.

Ключевые слова: углеродные точки, нульмерные наноматериалы, фотолюминесценция, сенсор, биомедицина.

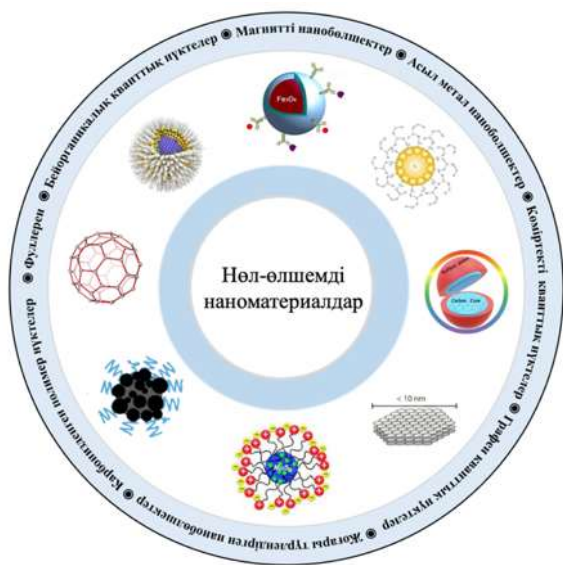
Kіріспе

Нөл-өлшемді наноматериалдар, негізінен, диаметрі 100 нм-ден аз сфералық немесе квазисфералық нанобөлшектер болып табылады. Нөл-өлшемді наноматериалдарды қолдану тарихы бұрыннан зерттеле бастағанымен, негізгі ұғымдар, жетістіктер мен түсініктер 20 ғасырдың ортасынан кейін пайда болды. Нөл-өлшемді наноматериалдар қарапайым материалдардан көптеген сипаттамалары, яғни өлшемі, пішіні, кванттық эффектсі және беттік ауданның көлемге қатынасы бойынша ерекшеленеді. Сонымен қатар, мұндай наноматериалдар

көптеген қолданбаларда олардың керемет сипаттамаларының арқасында қолданылып жүр [1, 2]. Нөл-өлшемді наноматериалдарды соның ішінде «кванттық нүктелерді ашқаны және синтездегені үшін» химия бойынша 2023 жылы ең жоғары ғылыми «Нобель» сыйлығына Мунги Дж. Бавенди, Луи Э. Брус және Алексей Екимов ие болды.

Нөл-өлшемді наноматериалдың түрлері өте көп, 1-сурет, соның ішінде көміртекті наноматериалдарға ғалымдар ерекше қызығушылық танытып жатыр. Себебі көміртек атомдарының

тізбегі берік және көміртектің аллотропиялық модификациясы басқа элементтерге қарағанда көп. Соңғы жылдары нөл-өлшемді көміртекті наноматериалдарға, яғни фуллерен [3] мен көміртекті нүктелерге [4, 5], сонымен қатар бір-, екі- және үш-өлшемді көміртекті наноматериалдарға, яғни көміртекті нанотүтікшелерге [6], графенге [7], көміртекті аэрогельдерге [8, 9, 10, 11] және олардың туындыларына көп көңіл бөлініп, зерттелініп, қолдану аясы көбейіп келеді.



1-сурет – Нөл-өлшемді наноматериалдар

Нанотехнологияның негізгі кванттық объектілері – кванттық нүктелер. Кванттық нүктелер – бұл нанобөлшектер құрамында фосфор, көміртегі, ауыр металдар және басқа элементтер бар әртүрлі материалдардан жасалған наноматериалдар [12]. Кванттық нүктелердің ішінде көміртекті нүктелер ерекше орын алады. Бетінде әртүрлі органикалық функционалды топтары бар кванттық шектеуді көрсетпейтін аморфты көміртек нанобөлшектерін немесе барлық квазисфералық көміртек нанобөлшектерін көміртекті нүктелер деп атауға болады.

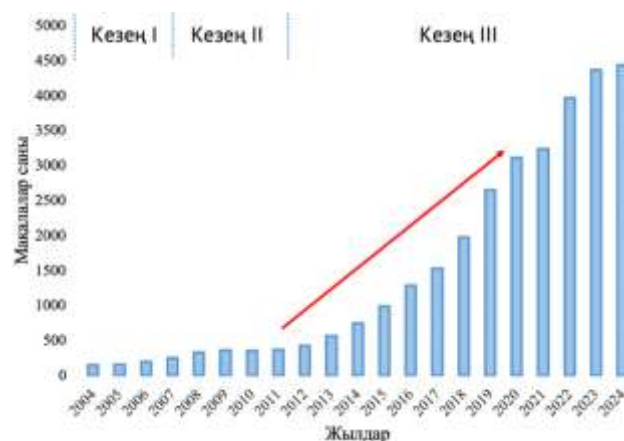
Көміртекті нүкте туралы, әсіресе қолданысы мен қасиеті жайлы ақпараттың дамуын үш кезеңге бөлуге болады, сурет 2.

I-кезеңде Оңтүстік Каролина университетінің ғалымдары 2004 жылы [13] бір қабатты көміртекті нанотүтікшелерді препаративті электрофорез әдісімен тазалау кезінде көміртекті нүктелерді анықтады. Бұл алғашқы еңбекте көміртекті нүктелерді «флуоресцентті нанобөлшектер» деп атады. Содан кейін Клемсон университетінің ғалымдары 2006 жылы [14] бұл нанобөлшектерді «көміртекті кванттық нүктелер»

деп атап, оларды графит ұнтағы мен цементті лазерлік абляциялау арқылы алып, көміртекті нүктенің басқа нанобөлшекті көміртек негізіндегі материалдан айырмашылығын көрсетті. Бұл нанобөлшек туралы іздестірулер жүріп жатты, алайда толыққанды алыну жолдары мен қасиеттері шешілмеді.

II-кезеңде 2007-2010 жылдары көміртекті материалдарды қолдана отырып, көміртекті нүктелердің алыну жолдары қарастырылды. Осы жылдар аралығында көміртекті нүктелердің оптикалық және электрохимиялық қасиеттері тәжірибедегі параметрлердің өзгеруімен қасиеттерінің өзгеретіні дәлелденіп, ғалымдардың көміртекті нүктенің құрылымы мен қолдану аясына қызығушылығы арта түсті.

III-кезеңде шамамен 2011 жылдан бастап көміртекті нүктелер туралы мақалалар күрт ұлғая бастады. Оның негізінде көміртекті нүктенің қасиеттері зерттеліп, әртүрлі қолдану салалары қарастырылды. Мысалға: сенсор қосымшалары, энергия сақтау құралдары, био-сурет, катализ және т.б.



2-сурет – ISI Web of Science-тен алынған 2004 жылдан 2024 жылға дейінгі көміртекті нүктелер туралы мақалалар санын көрсететін гистограмма

Бұл мақаланың негізгі мақсаты көміртекті нүктелер туралы толық мәлімет беру, яғни көміртекті нүктелерінің жіктелуін, олардың алыну жолдарын, қасиеттерін, және қолдану аясын ашып көрсету болып табылады. Сонымен қатар, көміртекті нүктелер саласындағы соңғы прогрестер сипатталады. Себебі, ғалымдардың зерттеу нәтижесі көміртекті нүктелердің көптеген салаларда қолдануға мүмкін болатынын көрсетті. Мысалы, олардың фотоэлектроникалық және люминисценция қасиеттеріне байланысты ғалымдар және инженерлер көміртекті нүктелерді оптоэлектроникада қолдану мүмкіндігін көрсетті [1].

Көміртекті нүктелердің жіктелуі

Көміртекті нүктелердің алуан түрлілігіне байланысты олардың нанокұрылымдарын дәл анықтау және жіктеу қиын болып табылады. Жүргізілген алдыңғы жұмыстарға [15, 16] сүйене отырып, көміртекті нүктелердің көміртегі ядросына сәйкес үш түрге бөліп қарастырылады. Олар графенді кванттық нүктелер (ГКН), көміртекті кванттық нүктелер (ККН) және карбонизделген полимерлі нүктелер (КПН), 3-сурет. 1-ші кестеде аталған көміртекті нүктелердің құрылымдық сипаттамасы, фотолюминесценция (ФЛ) механизмі, синтезделу тәсілі, артықшылығы, кемшілігі және қолдану аясы салыстырылып көрсетілген.

Графенді кванттық нүктелер (ГКН) – нөл-өлшемді, 2-50 нанометр аралығында болатын, флюоресцентті қасиетімен танымал көміртекті наноматериалдар. ГКН-дерді «жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдерімен синтездеуге болады. «Жоғарыдан төмен» тәсілдеріне жататын лазерлік абляция, доғалық разряд, электрохимиялық тотығу, химиялық тотығу және ультрадыбыстық өңдеу әдістерімен, яғни графен, көміртекті талшықтар, наноалмаздар, көміртекті күйелер сияқты көміртекті материалдарды ұсақтау арқылы ГКН алуға болады.

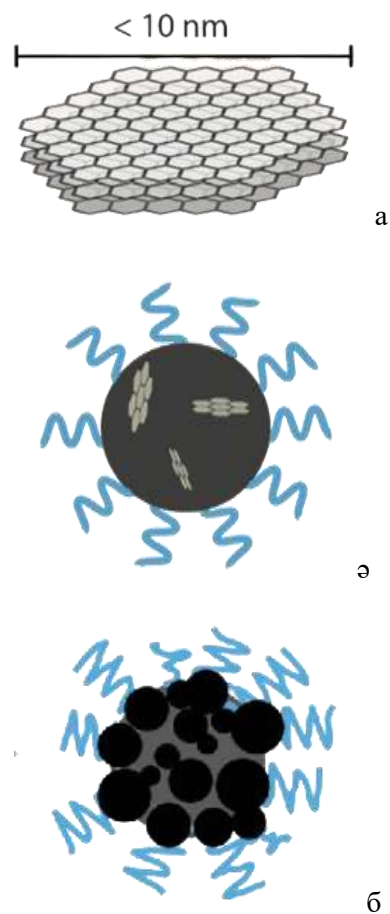
Кванттық көміртекті нүктелер (ККН) – құрамында sp^2 және sp^3 көміртегі қоспасына негізделген кристалды ядросы бар квазисфералық көміртекті нанобөлшектер. ККН суда жақсы ериді, жоғары люминесценцияға ие, сонымен қатар химиялық инерттілігі жоғары және фототүссіздендіруге төзімді [17].

Карбонизделген полимерлі нүктелер (КПН) жоғарыда аталған көміртекті нүктелерден айтарлықтай ерекшеленетін сызықтық полимерлерді немесе мономерлерді біріктіру, тігу арқылы алынған көміртекті нанобөлшектерді қамтиды. Яғни, бұл көміртек атомдарының полимерлік тізбектерінің нәтижесінде пайда болатын микроскопиялық немесе нанометрлік құрылым. Олардың өлшемдері әдетте 10 нанометрден аспайды. Сонымен қатар, КПН полимерлер сияқты әртүрлі қасиеттерге ие және олардың құрамы әртүрлі болып келеді

Көміртекті нүктелерді алу жолдары

Көміртекті нүктелер табиғатта және адам өмірінде кең таралған, бірақ олардың тазалығы өте төмен болғандықтан, оларды кез-келген салада қолдануға болмайды [18, 19]. Сондықтан, тазалығы жоғары көміртекті нүктелерді синтездеу үшін синтетикалық жолдар қолданылады. Соңғы онжылдықтарда көміртекті нүкте-лерді

синтездеудің көптеген жолдары ұсынылды, оларды бастапқы заттар мен алынатын көміртекті нүктелердің өлшемдеріне байланысты «жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдеріне бөлуге болады, 4-сурет. 2-кестеде көміртекті нүктелерді синтездеуде қолданылатын тәсілдер және оларға жататын синтетикалық әдістердің дайындау процесіндегі ерекшеліктер, қолданылатын прекурсорлары және алынған көміртекті нүктелердің кванттық кірістілігі, ерігіштігі және шығару түсі көрсетілген.



3-сурет – Көміртекті нүктелер түрлері:
а - ГКН; б - ККН; в - КПН [14]

«Жоғарыдан төмен» тәсілінде көміртекті нүктелерді физикалық немесе химиялық әдістерді қолдана отырып, мысалы графит оксидін, көміртекті нанотүтікшелерді, көмірді, графен және басқа да үлкен өлшемді көміртекті құрылымдарды нөл-өлшемді материалдарға бөлу арқылы жасалады.

Бөлшектердің өлшемдері біркелкі болғанымен, кванттық шығымы әдетте төмен болады,

сонымен қатар өңдеу кезінде күшті химиялық заттар мен беттің активтігін азайту процессі қолданылады. Керісінше, «төменнен жоғары» тәсілінде дегидратация, полимерлеу, айқас

байланыстыру және белгілі бір жағдайларда кіші молекулаларды ірі бөлшектерге карбонизациялау арқылы көміртекті нүктелерді синтездейді.

1-Кесте – ГКН, ККН және КПН арасындағы айырмашылық

Көміртекті нүктелердің түрлері	ГКН	ККН	КПН
Құрылымдық сипаттамасы	Графеннің бірнеше қабаттары, қалыңдығы <2 нм және бүйір өлшемдері <10 нм, беттерінде /жиектерінде функционалдық топтары бар	Квазисфералық нанобөлшектер, диаметрі <10 нм, айқын кристалдық торы бар толық карбонизация ядросы, беттерінде функционалдық топтары бар	Квазисфералық нанобөлшектер, диаметрі <10 нм, полимер/көмір-текті гибридті қаңқа, беттерінде функционалдық топтары бар
ФЛ механизмі	Кванттық шектеу эффектісі және беттік/жиек күйі	Кванттық шектеу эффектісі, беттік күй және молекула күйі	Кванттық шектеу әсері, беттік күй және кросс-байланыс күшейтілген эмиссия эффектісі
Синтезделу тәсілі	«Жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдері	«Жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдері	«Төменнен жоғары» тәсілі
Артықшылығы	Жоғары кристалдылық, тиімді электронды тасымалдау, төменгі кванттық кірістілік, төмен уыттылық	Жеңіл функционалдық, жоғары меншікті бетінің ауданы, жоғары кванттық кірістілік, төмен уыттылық	Жоғары өнімділік, жақсы химиялық инерттілік, жоғары кванттық кірістілік, фосфоресценция, хиральділік
Кемшілігі	Шығымдылығы төмен, қымбат, кванттық кірістілігі төмен, май ерігіштігі нашар	Төмен кірістілік, нашар зарядты тасымалдау	Зарядтың нашар тасымалдануы, полимердің жоғары уыттылығы
Қолдану аясы	Күн элементтері, қайта зарядталатын батареялар, суперконденсатор, электрохимиялық зондтау, жарықдиоды	Биобейнелеу, дәрі-дәрмек жеткізу, жарықдиоды, фотокатализ	Сенсор, жарықдиодты, контрафактілікке қарсы, көміртегі негізіндегі прекурсор



4-сурет – «Жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдері [20]

2-кесте – Көміртекті нүктелерді синтездеуде қолданылатын синтетикалық әдістер

Тәсілдер	Әдістер	Прекурсорлар	Дайындау процесі	Ерігіштік	Кванттық кірістілік (%)	Шығару түсі немесе толқын ұзындығы
«Жоғарыдан төмен»	Лазерлік абляция	Графит	Ar, лазерлік абляция, азот қышқылында рефлюкс, пассивация	Суда таралады	4–10 %	450-650 нм
	Доғалы разряд	Тотыққан КНТ	Доға разряды, ультрадыбыс, фильтр, және центрифуга қолдану	Судағы агрегация	-	Көктен сарғыш жасылға дейін
	Электрохимиялық тәсіл	Графит	100 В ультрадыбыстық электролиз 20 мин	Суда еритін Тұнбаның дисперстілігі	8.9 %	450нм
	Плазмалық өңдеу	Бензол	Доғалық плазмалық өңдеу	Суда еритін	-	Жасыл
«Төменнен жоғары»	Микротолқынды пешті қолдану	Сірке қышқылы	Микротолқынды пеште 40 сек қыздыру	Суда дисперсті	18,9%	460 нм
	Шаблон әдісі	Глицерин	230 °С, 30мин, центрифуга қолдану		~32 %	450–480 нм
	Гидротермиялық	Лимон қышқылы, этилендиамин	160 °С, 4 сағ	Суда таралатын	94%	450 нм
	Пиролитикалық процесс	Лимон қышқылы, глутатион	200 °С, 10 мин	Суда еритін	~80.3 %	Көк

«Жоғарыдан төмен» тәсіліне лазерлік абляция, доғалық разряд, ультрадыбыстық пассивация, электролиз (электрохимиялық тотығу) және плазмалық өңдеу әдістері жатады. «Төменнен жоғары» тәсілдеріне пиролитикалық процесс, шаблон әдісі, микротолқынды пешті қолдану әдісі, химиялық тотығу, гидротермиялық әдіс, ультрадыбыстық әдіс, жану және термиялық тотығу әдістері жатады

Көміртекті нүктелердің қасиеттері

Көміртекті нүктелердің құрылымдары мен компоненттері олардың әртүрлі қасиеттерін анықтайды. Көміртекті нүктелер бетіндегі көптеген карбоксил фрагменттері суда тамаша ерігіштік пен биожетімділікті береді. Сонымен қатар, олар химиялық модификацияға және бетті әртүрлі органикалық, полимерлі, бейорганикалық немесе биологиялық материалдармен пассивациялауға жарамды. Беттік пассивация арқылы көміртекті нүктелердің флуоресцентті қасиеттерін және физикалық қасиеттері жақсартуға болады.

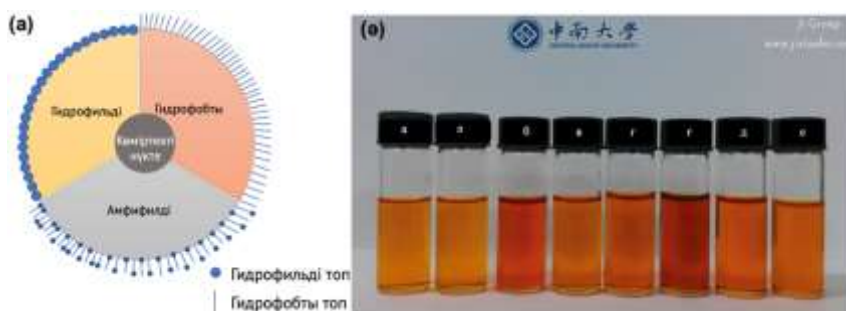
Көміртекті нүктелердің дисперстілігі

Көміртекті нүктелерді суда немесе органикалық еріткіштерде ерекше «ерігіштік» дәрежесіне қарай оларды үш түрге, яғни гидрофильді, гидрофобты және амфифильді деп бөліп қарастыруға болады, 5а-сурет [21, 22]. Көміртекті нүктелердің беткі күйі олардың дисперстілігін реттеуде маңызды рөл атқарады. Егер олардың беті негізінен гидрофильді функционалдық топтардан (мысалы, -ОН, -COOH) тұратын болса, онда өміртекті нүктелер гидрофильді болып табылады. Сонымен қатар, көбінесе көміртекті нүктелердің гидрофильді болуына оларды дайындау процесінде оттегімен қамтамасыздандырылатыны болып табылады.

Гидрофобты көміртекті нүктелерді зерттеуге деген қызығушылық соңғы кездері кейбір қолданбаларда, мысалы, оларды органикалық электролиттік қоспа ретінде қолдануда артты. Хоу және т.б. [23] көміртекті нүктелерді әртүрлі органикалық еріткіштерде, соның ішінде этанол, ацетон, бензил спирті, тетрагидрофуран, диметилформамид, 1-метил-2-пирролидинон, диметилсульфоксид және пропилен карбонатында жақсы дисперстілік көрсеткенін айтты. Сонымен

қатар, бұл ерітінділер біркелкі, мөлдір және тұрақты, бұл көміртекті нүктелерді әртүрлі салаларды қолдануын жеңілдететінін көрсетті, сурет 5ә. Органикалық еріткіштердегі тамаша дисперстілік метил топтарындағы көміртегі-сутектік біртұтас байланыстың (C-H) созылу және иілу тербелістеріне жатқызылуы мүмкін. Гидрофобты көміртегі нүктелерін беттік пассивтелген

гидрофобты молекулалардан да алуға болады. Пан және т.б. [24] алдын-ала дайындалған көміртек нанобөлшектердің бетіндегі карбоксил тобымен ковалентті байланысқан, пассивтенген агент ретінде додециламинді (DDA) пайдалана отырып, гидрофобты көміртегі нанобөлшектерін дайындады..



а - этанол; ә - ацетон; б - бензил спирті; в - тетрагидрофуран; г - диметилформамид; д - 1-метил-2-пирролидинон; е - диметилсульфоксид; е - пропилен карбонаты

5-сурет – Көміртекті нүктелердің «ерігіштік» дәрежесіне қарай жіктелуі [21] (а); Әртүрлі органикалық еріткіштерде көміртекті нүктелердің ерігіштігі (ә) [23]

Оптикалық қасиеттері

Көміртекті нүктелердің (ГКН, ККН және КПН) қасиеттері бастапқыда қолданылған көміртек көзіне және қолданылған синтетикалық әдіске байланысты болады. Мысалы, Көміртекті нүктелердің абсорбция қасиетін қарастыратын болсақ, алынған материалдың сіңіру қасиеті қолданылған көміртек көзіне және әдіске тікелей байланысты. Дегенмен, олар әдетте ультракүлгін (УК) аймағында (200-400 нм) күшті сіңіруді көрсетеді.

Көміртекті нүктелердің іргелі және қолданбалы тұрғыдан ең басты қасиеттерінің бірі фотолюминесценция болып табылады. Фотолюминесценция ол материалдың бетіне әр түрлі толқын ұзындықтағы жарықты түсіру арқылы оның сәуле шығаруын қоздыру процессі. Материалдың фотолюминесценциясы қоздырушы жарықтың толқын ұзындығына тәуелді болып табылады.

Көміртекті нүктелердің құрамында кадмий /қорғасын, сирек-жер наноматериалдары және органикалық бояғыштары бар кванттық нүктелер сияқты басқа флуоресцентті материалдармен салыстырғанда, олар өте жақсы жарық тұрақтылық, жоғары шығымға, төмен уыттылық, синтездеу үшін арзан және өте көп шикізаттардың қолданылуымен қатар өте жоғары биоүйлесімділікпен ерешеленеді. Бұл олардың әртүрлі салаларда, маңызды қолданбаларда қолданылуын қамтамасыз етеді.

Көміртекті нүктелердің фотолюминесценциясы сандық түрде кванттық шығымның мәнімен көрінеді, оған қолданылған көміртегі көздері, синтетикалық тәсілдер және пассивациядан кейінгі әсерлер қатты әсер етеді. Дегенмен, «жоғарыдан төмен» тәсілдер бойынша дайындалған көміртекті нүктелер әдетте «төменнен жоғары» тәсілдерімен салыстырғанда салыстырмалы түрде төмен кванттық шығымға ие. Сондықтан, ГКН кванттық шығымы әрқашан ККН және КПН-ге қарағанда төмен.

Көп жағдайда көміртекті нүктелер көк немесе жасыл түсті флуоресценция шығарады, бұл олардың биомедицинадағы әрі қарай қолданылуын шектейді, ал соңғы зерттеулер реакция жағдайларын немесе көміртек көздерін реттеу арқылы қызыл және NIR эмиссиялық көміртекті нүктелерді алуды сәтті көрсетті.

Электрохимиялық қасиеттері

Көміртекті нүктелер қазіргі уақытта келесі қасиеттерінің арқасында электрохимия және электрокатализ саласында қолданылады [25]:

1. Көміртек негізіндегі басқа наноматериалдармен салыстырғанда көміртекті нүктелер ерекше заряд тасымалдау қабілетімен, электрөткізгіштігімен, беттік ауданның үлкендігімен және салыстырмалы түрде үнемділігімен ерекшеленеді.

2. Көміртекті нүктелердің бетінде көптеген функционалды топтар бар, мысалы, гидроксил,

карбоксил, амин және т.б., олар бетті модификациялауға мүмкіндік береді, сонымен қатар молекулааралық электр өткізгіштігін жеделдету арқылы электрокаталитикалық белсенділікті арттырады.

3. Көміртекті нүктелерді азот, фосфор, күкірт, бор және т.б. сияқты гетероатомдармен легирлеу арқылы олардың электронды қасиеттерін молекулаішілік заряд тасымалдау есебінен айтарлықтай жақсартуға болады.

4. Көміртекті нүктелерді оттегінің және сутегінің бөліну, оттегінің тотықсыздану және спирттің тотығуы сияқты электрохимиялық реакциялар кезінде электрокатализ процесін айтарлықтай жақсарты алады.

Көміртекті нүктелердің жоғарыда аталған артықшылықтары оларды қажетті электрохимиялық қолданбаларға қызмет ету үшін тамаша электрокаталитикалық агенттер ретінде қолданады. Сонымен қатар, көміртекті нүктелер тамаша электрөткізгіштігін көрсетеді және оларды электрокаталитикалық реакциялар жағдайында электрокатализатор ретінде пайдаланған кезде электролит-катализатор түйісуінде пайда болған Шоттки ақауларын оңай жоюға болады. Бұл энергияның тиімді түрлендіруін растай алады. Оның үстіне кванттық нүктелердің тамаша электр өткізгіштігінің арқасында олар электрохимиялық реакциялар кезінде электрондарды өте жылдам тасымалдай алады.

Электрохимиялық реакциялар кезінде көміртекті нүктелер тамаша электр өткізгіштікке, көптеген ақаулы аймақтар мен белсенді аймақтар және олардың беттік ауданының көлеміне қатынасына байланысты тиімді әрекет ете алады. Көміртекті нүктелер өткізгіш материалдармен біріктірілгенде, олар электрохимиялық қасиеттері мен өнімділікті айтарлықтай жақсарты алады [25].

Гетероатомдық допинг – электронды құрылымды реттеу

Көміртекті нүктелер азот, фосфор, күкірт, бор және т.б. сияқты гетероатомдармен легирленгенде, бұл олардың химиялық құрылымының өзгеруіне әкеледі, ал электр заряды көрші көміртек атомдарынан тиімді тасымалдана алады. Гетероатомдармен легирленген кванттық нүктелер беттік функционалдық орталықтардың меншікті белсенділігінің күшеюіне, олардың электрондық конфигурациясының өзгеруіне, адсорбция мен десорбцияның жылдамдатылуына байланысты жақсы электрохимиялық сипаттамалар көрсетеді.

Гетероатомды легирлеу және беткі функционализация ККН электрохимиялық сипаттамаларын оңтайландырудың тиімді стратегиясы болуы

мүмкін. Электронды тасымалдау тұрғысынан, негізінен, электронды иондаушы гетероатомдарды (мысалы, азот) қосу гетерогенді электронды тасымалдаудың (ГЭТ) жоғары жылдамдығына әкелуі мүмкін, ал электрондарды шығаратын гетероатомдармен (мысалы, галогендер) допинг ГЭТ жылдамдығының төмендегенін көрсетеді. ККН-де көбірек функционалды оттегі топтарының болуы өткізгіш көміртегі конфигурациясы sp^2 бұзылуына байланысты электронды тасымалдаудың баяулауына әкелуі мүмкін. Көптеген зерттеулер қосарланған/көп элементті бірлескен допингтің көміртекті нүктелер электрондарының берілуіне әсерін зерттеуге арналған. Металл легирлеуші қоспалар көміртекті нүктелер зарядының берілуін едәуір арттыра алады. Көміртекті нүктелер жоғары электр өткізгіштікке (171,8 лс см⁻¹) мыс атомымен (Cu) допинг арқылы қол жеткізілді деп болжады. Cu (II) иондары және көміртекті нүктелер функционалды топтары Cu лиганд байланысын құра алады және осылайша ККН ішіндегі заряд тасымалын оңтайландырады, бұл Cu қосылмаған көміртекті нүктелермен салыс-тырғанда электрондарды (2,5 есе) және беру (1,5 есе) қабілетін едәуір арттырады [20].

Көміртекті нүктелерден электронды тасымалдау флуоресценцияның резонанстық энергия тасымалына (ФЭРТ) әкеледі. ФЭРТ термині әдетте шамамен 10 нм қашықтықта орналасқан екі флуоресцентті компоненттің өзара әрекеттесуін қамтиды. Энергияны донордан (жоғары энергиямен) акцепторға (төмен энергиямен) беру акцептордың флуоресценциясын жоғарылату арқылы жүреді, бірақ донордың флуоресценциясын немесе жойылуын қамтамасыз етеді. Бұл құбылыс сенсор аймағында көміртекті нүктелерді қолдану үшін жұмыс негізі болып табылады. Флуоресценцияның жойылуын болдырмау үшін көп күш жұмсалды. Мысалы, Ли және басқалары [20] бор атомдарымен допинг арқылы қатты күйдегі флуоресцентті көміртекті нүктелерді алды, олар зарядтың берілуіне кедергі келтіретін электронды ақаулар тудыруы мүмкін. Табиғи көміртекті нүктелер флуоресценциясын матрицадағы поливинил спирті және крахмал сияқты материалдармен біріктіру арқылы да тежеуге болады.

Тұрақтылықты арттыру қасиеттері

Көміртекті нүктелердің бетінде көптеген белсенді функционалды топтардың болуына, сондай-ақ олардың еріткіштердің кең спектрінде ұзақ химиялық тұрақтылығына байланысты олар гибриді катализаторлар ретінде идеалды наноматериалдар болып табылады. Сонымен қатар, көміртекті нүктелердің металдармен және металл

оксидтерімен гибриді нанокомпозиттерін дайындау кезінде тасымалдаушы материал ретінде пайдалануға болады, бұл агломерацияны болдырмайды және сол арқылы электрокаталитикалық белсенділікті арттырады. Көміртекті нүктелер гибриді катализаторлардың тұрақтылығына ықпал ете алатын электростатикалық тұрақтандыруға байланысты сулы ортада жақсы тұрақтылықты көрсете алады. Көміртекті нүктелер электростатикалық әрекеттесу арқылы катализаторлармен күшті әрекеттесе алатындықтан, олар тұрақтылықты айтарлықтай жақсартады [25].

Көміртекті нүктелердің уыттылығы

Жартылай өткізгіш не кванттық нүктелермен салыстырғанда көміртекті нүктелердің ең маңызды артықшылықтарының бірі ретінде «төмен уыттылық» қарастырылады, бұл олардың биобейнелеуде қолдануға мүмкіндігін береді. Көптеген зерттеулер көміртекті нүктелерді орташа концентрация деңгейінде әртүрлі жасуша желілеріне (мысалы, HeLa жасушалары, адамның сүт безі қатерлі ісігінің жасушасы) аз емес цитотоксикалық әсер береді деп болжайды. Бірақ «төмен уыттылық» терминін дұрыс түсінген жөн. Себебі, көміртекті нүктелердің уыттылығын сыртқы әсермен (ерітінділермен) де өзгертуге болады [20].

Көміртекті нүктелердің қолдану аясы

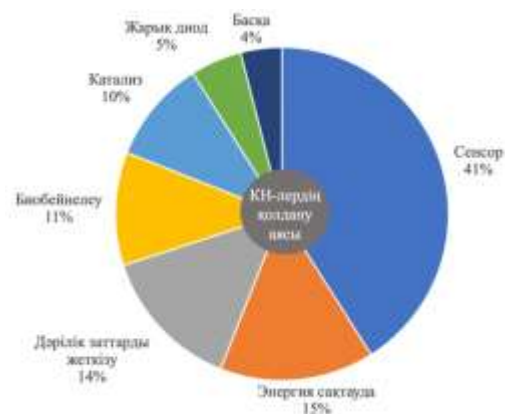
Сенсорларда қолдану

Кванттық нүктелер мен көміртегі негізіндегі наноматериалдардың артықшылықтарын біріктіре отырып, көміртекті нүктелер әр түрлі мақсатта қолданады. Статистика бойынша, өзінің фотолюминесценттік және флуоресценциялық қасиеттеріне байланысты сенсор саласында көміртекті нүктелер жиі қолданылады, 6-сурет. Әр түрлі механизмдеріне сәйкес көміртекті нүктелер негізіндегі сенсорларды люминесценциялық-, фотолюминесценттік-, электролюминесценттік- және электрохимиялық- сенсорлар деп бөлуге болады.

Люминесценциялық сенсорлар талданатын зат қатысында көміртекті нүктелердің флуоресценциясының сәулеленуін басу немесе басудың алдын алуына негізделген. Джин ғалымы [26] 2012 жылы Fe^{3+} иондарын анықтауға арналған ГКН негізінде бірінші ФЛ сенсорды ұсынды. Кейінірек «талданатын зат» металл иондарына, сутегі иондарына, аниондарға, органикалық молекулаларға, бейорганикалық молекулаларға, биомакромолекулаларға және т.б. дейін көбейді.

Функционалды полиамин топтары қатысында көміртекті нүктелердің жоғары селективтілік

пен сыртқы орта әсеріне реактивтілік қасиеттері артатын, Cu^{2+} иондарының сөнуін мысалға қарастыруға болады [20]. Әдетте көміртекті нүктелер карбосилат және амин секілді беттік функционалды топтарды байланыстыратын Pt^{2+} , Hg^{2+} , Zn^{2+} , $ONOO^-$, CLO^- катиондар мен аниондарды анықтауда қолданады. Соның негізінде Янг және т.б. [27] этилендиаминтетра сірке қышқылы мен Zn^{2+} ионының селективті түрде анықтауға арналған қайтымды флуоресцентті наносенсорды шығарды. Өзінің идеалды электрохимиялық сипатына байланысты көміртекті нүктелерсонымен қатар электролюминесценция және электрохимиялық зондтау процесінде сигналды күшейткіш ретінде қолданыла алады. Электрохимиялық антидене сенсорларында, электродты модификатор ретінде қолданылған, жоғары кристалды графит нитридті көміртекті нүктелер жүрек ауруларын бақылауда да нәтиже көрсетті. Түрлі электрохимиялық жауап алу үшін, сипаттамаларды анықтаудың дифференциалды және дифференциалды импульстік вольтамперометрия, тікбұрышты вольтамперометрия немесе импульстік амперометрия әдістері қолданылды. Сонымен қатар, жақында нанотермометрлер және термоэлектрлік құрылғылар салаларында температураны өзгерту арқылы көміртекті нүктелердің физика-химиялық қасиеттерін пайдаланып, термиялық сенсорлардың жаңа класына қол жеткізілді.



6-сурет – Көміртекті нүктелердің қолдану аясы

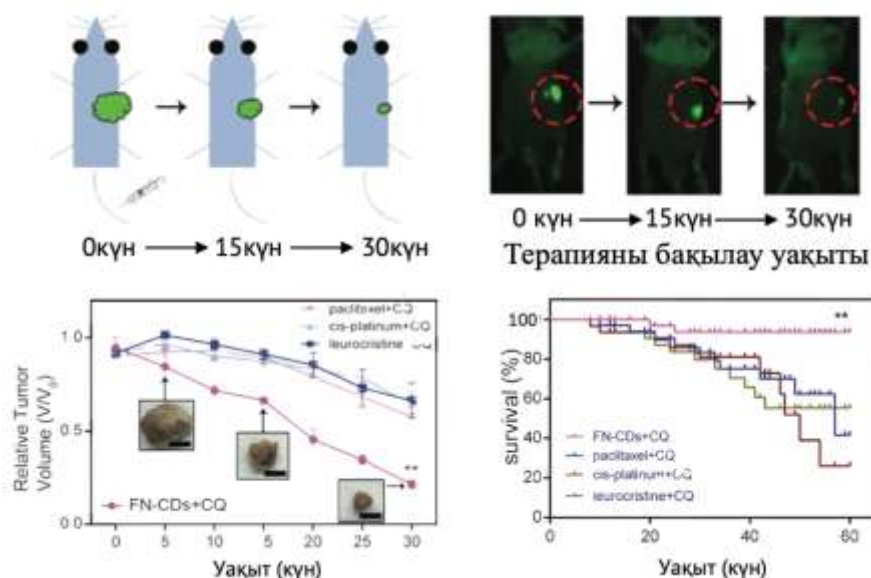
Биомедицинада қолдану

Биомедицина ғылымы – бұл көміртекті нүктелерге негізделген материалдар химиясын қолданудың айқын саласы. Көміртекті нүктелердің фотоэффективтілік, жоғары селективті және биожетімді қасиеттері қолайлы болғандықтан оны *vivo/vitro*-да қолданылады. Бұл *vivo* тәжірибесінде егеуқұйрықтың гепатобилиарлы жүйесінен көміртекті нүктелер оңай шығатыны көрсетіліп, көміртекті нүктелер әсері жүрек, бүйрек, бауыр мүшелеріне еш зақым келтірмей,

биомедицинада қолдануда қауіпсіз екендігі дәлелденді, сурет 7 [28]. Осы салада көміртекті нүктелердің қолданылуын биосенсор, био-сурет, дәрі-дәрмектерді, гендерді жеткізу, фототерапия, наномедицинаға бөлуге болады [27, 29].

Көптеген көміртекті нүктелер негізіндегі оптикалық биосенсорлар көміртекті нүктелердің флуоресценциялық қасиетінің арқасында жұмыс істейді. Осындай көміртекті нүктелер негізіндегі оптикалық сенсорлар биомедицинада қоспа

құрамынан әртүрлі бактерияларды анықтауда қолданады. Ғалымдар сүт құрамынан табылған пеницилин антибиотигін анықтауда көк-сары түсте сәулелендіретін флуоресцентті МІР сенсорды пайдаланған. Тәжірибеде сары түсті шығаратын көміртекті нүктелердің флуоресценциясы бәсеңделіп, көк түске өзгере, тұрақты қалыпқа келді. Яғни, флуоресценция спектрлері пеницилин концентрациясының сызықты түрде 1 ден 32 нм-ге дейін өскенін көрсетті.



7-сурет– КРН-ді *vivo* негізінде ісікке бағытталған терапияның тиімділігі мен мониторингі

Көміртекті нүктелердің био-суретте қолданылуы флуоресцентті бейне әдісімен айқындалады. Көміртекті нүктелердің жоғары селективтілігі био-бейненің негізгі факторы болып табылады, ол нысананың түрі мен жағдайы туралы ақпарат беру арқылы диагноз қоюға көмектеседі. Селективті мақсатқа жету үшін көміртекті нүктелерге бірқатар тану фрагменттері енгізілді. Көміртекті нүктелер фотолюминесценциясының қарқындылығын никотинамид аденин динуклеотидпен күшейтуге болады, оның концентрациясы ісік жасушаларында қалыпты жасушаларға қарағанда едәуір жоғары. Ұйты қасиетін аз болуымен және биоорганизммен қатынаса алатындықтан, адамның рак жасушаларын және көптеген дәрі-дәрмектерге тұрақты бактериялардың биосуреттерінде көміртекті нүктелер тиімді қоланысқа ие. Тетрафенилпорфиринді немесе оның өтпелі металл кешенін (Pd немесе Pt) қолдана отырып, ғалымдар гидротермалдық технологияның көмегімен азот пен металмен қоспаланған көміртекті нүктелер синтездеді. Мұнда дайындалған көміртекті нүктелер көк түсті жасушаларды бейнелеу үшін флуоресцентті

зондтар ретінде пайдаланылды. МТТ талдауы төмен цитоуытты КРН-дің маңыздылығын зерттеді.

Сонымен қатар, көміртекті нүктелерді «*S. aureus* және *P. Aeruginosa*» жасушаларының био-бейнесі үшін қолдана, нәтижесінде минималды ингибиторлық концентрациялар (MIC) үшін өте аз мәндер табылып, бұл алынған көміртекті нүктелердің бактерицидтік немесе бактериостатикалық белсенділікті көрсете алмайтындығын растады. Осы «*S. aureus* және *P. Aeruginosa*» жасушаларымен көміртекті нүктелер инкубацияланғаннан кейін флуоресцентті кескіндер 545-570 нм, 450-490 нм және 365-395 нм толқын ұзындығында қызыл, жасыл және көк көміртекті нүктелердің сәулеленуін көрсетті. Бұл көп түсті сәулелену көміртекті нүктелердің «*S. aureus* және *P. Aeruginosa*» жасушаларына сәтті енгізілгенін білдіреді [25].

Көміртекті нүктелер және олардың наногибридтері үлгіні жеткізудің тиімді жүйелері болып табылады. Бетті дайындау мен пассивациялаудың әртүрлі әдістерін қолдана отырып, көміртекті нүктелер бетін полимерлі материалдармен, металлды нанобөлшектермен,

ұсақ бөлшектермен функционализациялау арқылы өзгертуге болады, нәтижеде органикалық молекулалар және т.б. иондық, сутегі немесе коваленттік байланыстардың пайда болуы арқылы фотолюминесценцияның жоғарылауына, сондай-ақ судағы көміртекті нүктелердің ерігіштігінің ерекшеліктеріне әкелуі мүмкін. Бұл өзгертілген көміртекті нүктелердің тераностикалық қосымшалардың кең спектрі үшін, әсіресе дәрі-дәрмектерді жеткізу және гендерді жеткізу үшін тиімді қолданыла алады. Көміртекті нүктелер гендерді/ дәрі-дәрмектерді жеткізуді күшейту және негізгі емдік тәсілдерді дамыту үшін, мақсатты және реттелетін нано-кешендерді бейнелеу үшін гендермен немесе дәрі-дәрмектермен біріктіруге болады. Осы уақытқа дейін әртүрлі дәрі-дәрмектер көміртекті нүктелерге сәтті енгізілді. Көміртекті нүктелер және олардың наногибридтері әртүрлі ауруларға қарсы дәрі ретінде тікелей қолданылады, соның ішінде бактериялық кератит, коронавирус, Альцгеймер ауруы және Паркинсон ауруы [20]. Әдетте ісік басатын ген ісік жасушаларына еніп, гендік терапия немесе гендік жеткізілім кезінде өсуді тежейді. Алайда, көміртекті нүктелер сияқты наноматериалдар өздерінің биожетімділігі мен усыздығының арқасында генді жеткізуде немесе гендік терапияда нано/гендік тасымалдаушы ретінде тиімді қолданылуы дәлелденді. Қазіргі уақытта жоғары тиімді трансферлік көміртекті нүктелер нуклеин қышқылын жеткізу үшін кеңінен қолданылады. Оған кіші интерферентті РНҚ (siRNA), кодталмайтын РНҚ және ДНҚ сияқты қышқылдар жатқызуға болады, себебі көміртекті нүктелер гендерді эндоцитоз, макропиноцитоз және фагоцитоз арқылы жеткізуге қабілетті.

Фототерапиялық нысандарда қолдану

Көміртекті нүктелердің фототұрақтылық, оптикалық және суда жақсы еру қасиеті бойынша бұл нанобөлшектер фототерапияда қолданылады. Фототерапия фотодинамикалық және фототермиялық болып бөлінеді. Соның ішінде фотодинамикалық терапия рак клеткаларында жинақталған фотосенсибилизаторлық агенттердің жасуша ішінде жинақталған оттегіні белсенді түрге ауыстыра отырып, қауіпті жасушалардың жоюына әкеледі. Бұл фотосенсибилизаторлар теріге төмен фотоуыттылық әсер беріп, сәулені жұту қабілеті жоғары болып, рак жасушаларында жақсы жұтылатындай болу керек. Көміртекті нүктелердің гидрофильді және фотон жұтатын қасиеттеріне байланысты ол осы фотосенсибилизаторлармен қосыла рак жасушаларына кіруде жақсы биоқолданыс болып табылады. Метилді

көк, күкіртпен легирленген көміртекті нүктелер сияқты фотосенсибилизаторлар фотодинамикалық терапияда көміртек негізіндегі наноматериалдармен байланыса төмен цитоуыттылық және биожетімді қасиет көрсетіп, ДНК-мен араласуда тұрақтылықты береді. S-KH ауыз қуысының қатерлі ісігінің фотодинамикалық терапиясын импровизациялау үшін тиімді болып табылады, ол ісік жасушаларына оңай еніп, жарықпен сәулелендіру кезінде жасушалардың өліміне әкеледі. Қатерлі ісікті емдеуде электростатикалық өзара әрекеттесу арқылы алынған KH@Ptpor, яғни көміртекті нүктелер мен байланысқан платиналық порфиридін наногибрид қолданысқа ие болды. Алайда, бұл KH@Ptpor наногибридтері синглетті оттегін шығару қабілеті жоғары болуынан *in vitro*-да аз жанама әсерлерді және ісікті тежейтін импровизацияланған қабілетті көрсетуі мүмкін. Сонымен қатар рак жасушаларын тежеуде хитозан мен моногидроксифенилприфенилпорфиридін (TPP) қолдану арқылы алынған порфиринге негізделген CDS (TPP CDs) синтезі жүзеге асырылды.

Фототермиялық терапия қатерлі ісік түрлерін емдеуде қолданылады, ол энергияны сіңіру арқылы жылу шығаруға негізделген. Бұл терапияға жасуша өліміне немесе жасушалардың қайтымсыз бұзылуына қол жеткізу үшін гипертермияны индукциялауға арналған NIR-сіңіргіш материалы кіреді. NIR-жарық фотоуыттылық және жасушаларға ерудің қарқынды қабілетіне ие. Фототермиялық терапевтік агенттер био-бейнемен біріктірілген кезде, олар ісіктің орналасқан жері мен мөлшерін дәл анықтау арқылы, терапевтік реакцияны нақты уақыт режимінде бақылай алады. Көміртекті нүктелердің осы терапиядағы рөліне келсек, көміртекті нүктелер көптеген π электрондардан тұра, металлдық наноматериалдардың бос электрондарымен эквивалентті түрде жұмыс жасап, сәулелендірген кезде температураның өзгерісіне алып келеді. S, N-KH бүйрек экскрециясы арқылы шығарылатын басқа наноматериалдарға қарағанда, пассивті нысана арқылы рак клеткаларына оңай енгізілуі мүмкін екендігі анықталды. Бұл S, N-KH синтезі NIR бағытында күшті сіңіруді, фототермиялық түрлендірудің жоғары тиімділігін көрсетіп, фотолюминесцентті визуализацияда, сондай-ақ фотоакустикалық визуализацияда өзінің артықшылығын көрсетті [25].

Энергия сақтауда қолдану

Көміртекті нүктелер өзінің реттелетін оптикалық қасиеттері, құнының төменділігі, төмен уыттылығы, үлкен меншікті бет ауданына

иелігі, тамаша электрон қабылдаушы/донорлық сипаттамалары және электрондық өткізгіштік қасиеттерінің арқасында энергия саласында, оның ішінде фото-/ электрокатализаторлар, жарық диодтары, суперконденсаторлар, қайта зарядталатын батареялар, яғни металл-ауа батареялары және отын элементтері ретінде кеңінен қолданылады. Электр энергиясын жарыққа айналдыруға арналған қатты күйдегі жарықтандыру құрылғылары көптеген жылдар бойы біздің күнделікті өмірімізде сұйық кристалды дисплейлерде, толық түсті дисплейлерде және жарықтандыру құрылғыларында қолдануға бағытталған ғылыми зерттеулердің тақырыбы болып табылады. көміртекті нүктелер жарық диодтарында фосфор немесе электролюминесцентті құрылғыларда белсенді қабаттар ретінде әрекет ете алады. Ал CCd^{2+} -Mds негізделген светодиодтар жарықты әлдеқайда жақсартады. Температура мен ылғалдылыққа қарсы тұра алатын және қауіпті ультракүлгін түсті көрінетін жарыққа айналдыра алатын көміртекті нүктелер күн батареяларында да зерттеліп, қолданысқа жарады. Суперконденсаторларда қолданысы негізінен жоғары қуатты тығыздығы және ұзақ қызмет мерзімін көрсетеді, бірақ энергияның тығыздығы төмен болғандықтан бұл олардың практикалық қолданылуын шектейді. Дегенмен де басқа көміртегі материалдарымен, полимерлермен немесе металл оксидтерімен будандастырылған көміртекті нүктелер суперконденсаторлардың электрохимиялық сипаттамаларын жақсартады [27].

Катализде қолдану

Көміртекті нүктелер флуоресцентті, жоғарыөткізгіш, аз уытты, суда еру қабілеттеріне сай ол композитті нанокатализаторларда жақсы каталитикалық әсер береді. Көміртекті нүктелер негізіндегі композитті катализаторлар фотокатализ, пероксидаза, электрокатализ химиялық катализде қолданылады. Қазіргі кезде көміртекті нүктелер негізіндегі фотокатализаторлар органикалық ластағыштарды фотоыдырату ретінде қолданылады. Жарық сіңіре алатындықтан көміртекті нүктелер күн сәулесімен сәулелендіру кезінде де фотокатализді жүргізуге болады. Бұл фотокаталитикалық реакцияның тиімділігін арттырып қана қоймай, ультракүлгін сәуленің орнына күн сәулесін немесе көрінетін жарықты қолдану арқылы шығындарды едәуір төмендетеді. Сондықтан көміртекті нүктелер өте тиімді және тұрақты композитті дамытуға үміткер фотокатализатор болып табылады.

Пероксидазалар тиімді ферменттер класы болып табылады және биотехнология және химия

өнеркәсібі сияқты әртүрлі салаларда кеңінен қолданылады. Алайда, табиғи пероксидазалар әрқашан өндіріске және тазартуға кететін шығындардан, сондай-ақ олардың каталитикалық белсенділігінің қоршаған ортаға сезімталдығынан зардап шегеді. Сол себепті жасанды катализаторлар яғни көміртекті нүктелер көміртегі наноферменті қолданылады. Мұнда көміртекті нүктелер негізіндегі пероксидаза тәрізді катализатор жүйелеріндегі көміртекті нүктелер көп әсер береді.

Электрохимиялық жолмен суды ыдыратқанда бөлінетін сутегі мен оттегі алуда кернеуді жоғарылатқанда, не кеміткенде Pt немесе Ir, Ru негізіндегі катализаторлар қолданады. Алайда, жоғары өндірістік шығындар мен төмен беріктілігі Pt негізіндегі катализаторлардың кең қолданылуын шектейді. Көміртекті нүктелер негізіндегі композиттер сутегі және оттегі үшін керемет электрокатализаторлар екендігі дәлелденді. Соның негізінде оттегінің бөлінуіне көміртекті нүктелер және графен оксиді (КН/ГО) түрдегі композитті электрокатализатор ойлап табылды. Композит КН/ГО электрокаталитикалық белсенділігі және кинетикалық ток тығыздығының жоғары мәнін көрсетті.

Біртекті және гетерогенді жүйелердегі өтпелі металл иондарымен катализденетін H_2O_2 ыдырауы Фентонға ұқсас реакциялар немесе $\cdot\text{OH}$ радикалдарын алу үшін қолданылатын модификацияланған Фентон процестері деп қарастырылады. Алайда реакцияның тар рН диапазоны және темір шөгінділерінің жиналуы сияқты кемшіліктер олардың дамуын айтарлықтай шектейді. Біртекті Фентон процесінің осы кемшіліктерді еңсеру үшін, мұндай металл немесе металл емес материалдар ретінде Фентон тәрізді катализаторлар әзірленді және жақсы каталитикалық белсенділігін көрсетеді. Оған Dot-DBS-LDH көміртегі нанокатализаторы мысал бола алады.

Соңғы жылдары катализ синтетикалық органикалық айналымдарды ынталандыру үшін кеңінен қолданылады. Бұл катализаторлар әдетте наноөлшемді белсенді компоненттерден тұрады, мысалға қатты ортада таралған металл және металл оксидтері. Жоғарыда сипатталған катализден басқа, химиялық катализ саласында көміртекті нүктелер негізіндегі композиттерді қолдану салыстырмалы түрде сирек кездеседі, оның орнына негізінен тотығу реакциясы, тотықсыздану реакциясы, Сузуки-Мияур реакциясы, биодизель өндірісі, сақинаның ашылу реакциясы, майлар реакциясы және қышқыл катализіне этерификация, альдол конденсациясы кіреді [30].

Қорытынды

Мақалада көміртекті нүктелердің ашылу және даму тарихына, жіктелуіне, алынуы және зерттеу әдістеріне, қасиеттері мен қолдану аясы сипатталды. Нөл өлшемді наноматериалдар (0D) дегеніміз – бұл кеңістікте барлық өлшемі наноөлшеммен шектелген материалдар. Мұндай материалдарға бейорганикалық кванттық нүктелерді, көміртекті нүктелерді, магнитті нанобөлшектерді, асыл метал нанобөлшектерін, жоғары түрлендірген нанобөлшектерді жатқызуға болады. Бұл нөл-өлшемді наноматериалдардың ішінде соңғы кездері көміртекті нүктелерге олардың бірегей химиялық және физикалық қасиеттерінің арқасында оларға деген қызығушылық артып отыр.

Көміртекті нүктелер – бұл наноөлшемді (<10 нм) көміртектің сферикалық бөлшектері, олар келесі бірегей қасиеттерімен ерекшеленеді: фототүрлену мен жоғары фототұрақтылық, сәуле шығару спектрлерінің икемділігі, төмен молекулалық салмақ, тамаша биосәйкестік және уыттылығының төмен деңгейі. Бұл қасиеттер оларды биологиялық таңбалау мен бейнелеуде қолдануда жартылай өткізгіш кванттық нүктелер мен дәстүрлі органикалық бояғыштарға қарағанда тиімдірек етеді.

Бұл шолу мақалада көміртекті нүктелер графенді кванттық нүктелер (ГКН), көміртекті кванттық нүктелер (ККН) және карбонизделген

полимерлі нүктелер (КПН) деп жіктеліп қарастырылды. Олардың құрылымдық сипаттамасы, ФЛ механизмі, синтезделу тәсілі, артықшылығы, кемшілігі және қолдану аясы салыстырылып сипатталды. Сонымен қатар алу жолдары мен қасиеттері көрсетіліп, көміртекті нүктелердің қасиеттері көміртекті нүктелердің синтезделу жолдарына байланысты болатыны көрсетілді. Қазіргі кезде алу әдістері жеткілікті болғанымен әлі де алу не синтездеу әдістерін жақсарту қажет. Әсіресе, көп мөлшерде көміртекті нүктелер алу жолдарын және әртүрлі еріткіштердегі көміртекті нүктелердің люминесценция қасиеттерін толық түсіну механизмдерін оңтайландыру қажет. Дегенмен, көміртекті нүктелер наноматериалдар мен нанотехнологияларды одан әрі дамытуда маңызды рөл атқаратын наноматериал болып қала береді.

Алғыс

Авторлар Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржылық қолдау көрсеткені үшін («AP23485972 Интерметаллидтер мен кеуекті көміртек негізіндегі бөлме температурасында сутекті сақтауға арналған композиттік материалдар») алғыс білдіреді.

Әдебиеттер

- 1 M. Sajid, *Current Opinion in Environmental Science & Health* **256** 100319 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.coesh.2021.100319>
- 2 V. Renuga, X. Vinoliya, A. Dinesh, S. Suthakaran, M. Ayyar, V. Mohanavel, L. Gnanasekaran, P. Paramasivam, R. Bousbih, M.K. Hossain, A. Rajendran and S. Santhoshkumar, *Sensing and Bio-Sensing Research* **47**, 100751 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2025.100751>
- 3 H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl and R.E. Smalley, *Nature* **318**(6042), 162-163 (1985). <https://doi.org/10.1038/318162a0>
- 4 Y. Wang and A. Hu, *Journal of Materials Chemistry C* **34**, 6921 (2014). <https://doi.org/10.1039/C4TC00988F>
- 5 S. Sen and A. Bose, *Inorganic Chemistry Communications* **173**, 113852 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2024.113852>
- 6 S. Iijima, *Nature* **354**, 56-58 (1991). <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- 7 K. Novoselov, G. Andre, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva and A. Firsov, *Science* **306** (5696), 666-669 (2004). <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- 8 C.T. Alviso, R.W. Pekala, J. Gross, X. Lu, R. Caps and J. Fricke, *MRS Proceedings* **431**, 521-525 (1996). <https://doi.org/10.1557/PROC-431-521>
- 9 M.B. Bryning, D.E. Milkie, M.F. Islam, L.A. Hough, J.M. Kikkawa and A.G. Yodh, *Advanced Materials*, **19**(5), 661-664 (2007). <https://doi.org/10.1002/adma.200601748>
- 10 J. Wang and M. Ellsworth, *ECS Transactions* **19** (5), 241-247 (2009). <https://doi.org/10.1149/1.3119548>
- 11 M. Auelkhankizi, M. Nazhipkizi, S. Taupixova, A. Talgatqizi, M. Auelkhankizi, *Toraygirov universitetinin Xabarsisi, Ximiya-biologiyalik seriyasi* **1** 5-17 (2024). (In Kazakh). <https://doi.org/10.48081/AFVW5822>
- 12 H.J. Yoo, B.E. Kwak and D.H. Kim, *Physical Chemistry Chemical Physics* **22**, 20227-20237 (2020). <https://doi.org/10.1039/D0CP02120B>
- 13 X. Xu, R. Ray, Y. Gu, H.J. Ploehn, L. Gearheart, K. Raker and W.A. Scrivens, *Journal of the American Chemical Society* **126** (40), 12736-12737 (2004). <https://doi.org/10.1021/ja040082h>

- 14 Y.-P. Sun, B. Zhou, Y. Lin, W. Wang, K.A.S. Fernando, P. Pathak and S.-Y. Xie, *Journal of the American Chemical Society* **128**(24), 7756-7757 (2006). <https://doi.org/10.1021/ja062677d>
- 15 S. Li, L. Li, H. Tu, H. Zhang, D.S. Silvester and C.E. Banks, *Materials Today* **51**, 188-207 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2021.07.028>
- 16 S. Tao, T. Feng, C. Zheng, S. Zhu and B. Yang, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **10** (17), 5182-5188 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.9b01384>
- 17 N.J. Jilkibayeva, G.K. Sadikov, G.Q. Mussabek., S.Z. Baqtigerey, V. Lisenko, V.V. Lesnyak, *Recent Contributions to Physics* **4**(79), 55-71 (2021). (In Kazakh). <https://doi.org/10.26577/RCPH.2021.v79.i4.08>
- 18 S.M. Mandal, T.K. Sinha, A.K. Katiyar, S. Das, M. Mandal and S. Ghosh, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* **19**(11), 6961-6964 (2019). <https://doi.org/10.1166/jnn.2019.16628>
- 19 S. Mandani, D. Dey, B. Sharma and T.K. Sarma, *Carbon* **119**, 569-572 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.04.075>
- 20 S. Li, L. Li, H. Tu, H. Zhang, D.S. Silvester, C.E. Banks and X. Ji, *Materials Today* **51**, 188-207 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2021.07.028>
- 21 P. Zhao and L. Zhu, *Chemical Communications* **54**, 5401 (2018). <https://doi.org/10.1039/C8CC02279H>
- 22 M. Cai, L. Lai and M. Zhao, *Carbon* **233**, 119921 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119921>
- 23 H. Hou, L. Shao, Y. Zhang, G. Zou, J. Chen and X. Ji, *Advanced Science* **4**, 1600243 (2017). <https://doi.org/10.1002/advs.201600243>
- 24 D. Pan, J. Zhang, Z. Li, Z. Zhang, L. Guo and M. Wu, *Journal of Materials Chemistry* **21**, 3565 (2011). <https://doi.org/10.1039/C0JM03763J>
- 25 B.D. Mansuriya and Z. Altintas, *Nanomaterials* **11**(10), 2525 (2021). <https://doi.org/10.3390/nano11102525>
- 26 D. Wang, L. Wang, X. Dong, Z. Shi and J. Jin, *Carbon* **50**(6), 2147-2154 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.01.021>
- 27 J. Liu, R. Li and B. Yang, *ACS Central Science* **6**(12), 2179 (2020). <https://doi.org/10.1021/acscentsci.0c01306>
- 28 J. Li, Y. Deng, P. Chai, X. He, H. Zhou and X. Fan, *Advanced Functional Materials*, 1800881 (2018). <https://doi.org/10.1002/adfm.201800881>
- 29 H. Chen, K. Luo, C. Xie and L. Zhou, *Chemical Engineering Journal* **496**, 153915 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.153915>
- 30 B.C Chen., M.L. Liu and C.Z. Huang, *Green Chemistry* **22**, 4034 (2020). <https://doi.org/10.1039/d0gc01014f>

Мақала тарихы:

Түсті – 10.02.2025

Түзетілген түрде түсті – 16.04.2025

Қабылданды – 20.05.2025

Article history:

Received 10 February 2025

Received in revised form 16 April 2025

Accepted 20 May 2025

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Әуелханқызы Мөлдiр** (автор корреспондент) – наноматериалдар және нанотехнологиялар мамандығы бойынша PhD, Химиялық физика және материалтану кафедрасы-ның қауымдастырылған профессордың м.а., әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан. e-mail: auyelkhankyzy.m@kaznu.kz

2. **Жамаш Аяжан** – наноматериалдар және нанотехнология білім беру бағдарламасының 2 курс магистранты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан. e-mail: aasszhamashaass@gmail.com

3. **Рақымжан Нұрғали** – аға ғылыми қызметкер, Жану проблемалар институты, Алматы, Қазақстан. e-mail: nurrt@mail.ru

4. **Әуелханқызы Мадина** – оқытушы, техника және технологиялар магистрі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан. e-mail: m.auyelkhankyzy@gmail.com

5. **Лесбаев Бахытжан Тастанович** – химия ғылымдарының кандидаты, Химиялық физика және материалтану кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан. e-mail: lesbayev@mail.ru

Information about authors:

1. **Moldir Auyelkhankyzy** (corresponding author) – PhD in Nanomaterials and Nanotechnologies, Acting Associate Professor of the Department of Chemical Physics and Materials Science, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: auyelkhankyzy.m@kaznu.kz

2. **Ayazhan Zhamash** – 2nd year master's student of the educational program Nanomaterials and Nanotechnology, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: aasszhamashaass@gmail.com

3. **Nurgali Rakhymzhan** – Senior Researcher, Institute of Combustion Problems, Almaty, Kazakhstan. e-mail: nurrt@mail.ru

4. **Madina Auyelkhankyzy** – Teacher, Master of Engineering and Technologies, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: m.auyelkhankyzy@gmail.com

5. **Bakhytzhane Lesbayev** – Candidate of Chemical Sciences, Professor of the Department of Chemical Physics and Materials Science, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: lesbayev@mail.ru

Г.Б. Ешманова* , И.А. Манакова , М.Ф. Верещак , Ж.К. Тлеубергенов 

Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

*e-mail: g.yeshmanova@inp.kz

КИНЕТИКА ОБРАТНОГО МАРТЕНСИТНО-АУСТЕНИТНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДУПЛЕКСНОЙ СТАЛИ CF8 ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

С использованием методов мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции изучена кинетика мартенситно-аустенитного превращения при термическом воздействии (300–850 °C) в дуплексной стали CF8, предварительно подвергнутой холодной пластической деформации со степенью деформации $\varepsilon = 55\%$. Динамика обратного α' -мартенсит $\rightarrow$ γ -аустенит превращения не наблюдалась при температурах до 500 °C. Однако, замечен рост среднего сверхтонкого магнитного поля $\langle H_n \rangle$ от 241 ± 1 до 269 ± 1 кЭ. Дальнейшее увеличение температуры отжига привело к уменьшению среднего эффективного сверхтонкого поля $\langle H_n \rangle$. При этом распределение магнитного поля $p(H_n)$ показало постепенное увеличение вклада с $H_n \geq 330$ кЭ, что связано с уменьшением количества атомов хрома в ближайшем окружении железа. Интенсивный $\alpha' \rightarrow \gamma$ переход происходил в интервале температур 600–700 °C. При 850 °C завершилось восстановление исходной структуры γ -аустенита. Процесс $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращений преимущественно происходил путем сдвигового механизма. Результаты рентгено-дифракционного анализа подтверждают данные мессбауэровской спектроскопии: структура стали CF8 до отжига представляет собой ферромагнитную фазу (α' -мартенсит), после отжига при 850 °C на рентгенограмме отражены рефлексы, характерные для γ -аустенита.

Ключевые слова: нержавеющая сталь CF8, аустенит, мартенсит, отжиг, мессбауэровская спектроскопия.

Г.Б. Ешманова*, И.А. Манакова, М.Ф. Верещак, Ж.К. Тлеубергенов

Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

*e-mail: g.yeshmanova@inp.kz

Термиялық әсер ету кезінде CF8 дуплексі болатқа кері мартенсит-аустенит түрленуінің кинетикасы

Мессбауэр спектроскопиясы мен рентгендік дифракция әдістерін қолдана отырып, алдын ала деформация дәрежесі $\varepsilon = 55\%$ тең суық пластикалық деформацияға ұшыраған CF8 дуплексі болатта термиялық әсер ету кезінде (300 – 850 °C) мартенсит-аустенитті түрлендірудің кинетикасы зерттелді. Кері α' -мартенсит $\rightarrow$ γ -аустенит түрлену динамикасы 500 °C дейінгі температурада байқалмады. Алайда, орташа өте жұқа магнит өрісінің $\langle H_n \rangle$ 241 ± 1 -ден 269 ± 1 кЭ-ге дейін айтарлықтай өсуі байқалды. Күйдіру температурасының одан әрі жоғарылауы орташа тиімді өте жұқа өрістің төмендеуіне әкелді $\langle H_n \rangle$. Сонымен қатар, магнит өрісінің таралуы $p(H_n)$ үлестің $H_n \geq 330$ кЭ біртіндеп өсуін көрсетті, бұл темірдің жақын ортасындағы хром атомдарының санының азаюымен байланысты. Қарқынды $\alpha' \rightarrow \gamma$ түрлену 600–700 °C температура аралығында болды. 850 °C -де бастапқы γ -аустенит құрылымын қалпына келтіру аяқталды. $\alpha' \rightarrow \gamma$ түрлену процесі негізінен ығысу механизмі арқылы жүрді. Рентгендік-дифракциялық талдаудың нәтижелері Мессбауэр спектроскопиясының деректерін растайды: күйдіруге дейінгі CF8 болаттың құрылымы ферромагниттік фаза (α' -мартенсит) болып табылады, 850 °C күйдіруден кейін рентгенограммада γ -аустенитке тән рефлекстер көрсетілді.

Түйін сөздер: тот баспайтын болат CF8, аустенит, мартенсит, күйдіру, Мессбауэр спектроскопиясы.

G. Yeshmanova*, I. Manakova, M. Vereshchak, Zh. Tleubergenov
 Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan
 *e-mail: g.yeshmanova@inp.kz

Kinetics of reverse martensitic-austenitic transformation in duplex steel CF8 under thermal action

Using the methods of Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction, the kinetics of martensitic-austenitic transformation under thermal action (300 - 850 °C) in duplex steel CF8, previously subjected to cold plastic deformation with a deformation degree of $\varepsilon = 55\%$, was studied. The dynamics of the reverse α' -martensite $\rightarrow \gamma$ -austenite transformation was not observed at temperatures up to 500 °C. However, there was a noticeable increase in the average hyperfine magnetic field $\langle H_n \rangle$, from 241 ± 1 to 269 ± 1 kOe. A further increase in the annealing temperature led to a decrease in the average effective hyperfine field. At the same time, the distribution of the magnetic field $p(H_n)$ showed a gradual increase in the contribution from $H_n \geq 330$ kOe, which is associated with a decrease in the number of chromium atoms in the nearest iron environment. The intense $\alpha' \rightarrow \gamma$ transition occurred in the temperature range of 600-700 °C. At 850 °C, the restoration of the original structure of γ -austenite was completed. The process of transformations mainly occurred by means of a shear mechanism. The results of X-ray diffraction analysis confirm the data of Mossbauer spectroscopy: the structure of CF8 steel before annealing is a ferromagnetic phase (α' -martensite), after annealing at 850°C, the X-ray diffraction patterns characteristic of γ -austenite are reflected.

Key words: CF8 stainless steel, austenite, martensite, annealing, Mössbauer spectroscopy.

Введение

Метод мессбауэровской спектроскопии (МС) очень чувствителен практически к любому изменению окружения исследуемого резонансного ядра. Это делает его возможным для применения в диагностике нарушений кристаллической решетки железосодержащих сплавов [1-3]. Немалое количество работ посвящено изучению структурных изменений и объемной доли выделений при мартенситно-аустенитном превращении в стали путем деформационного, термического и радиационного воздействия с использованием эффекта Мессбауэра [4-8]. В большинстве работ приводится изучение влияния пластической деформации на структурные изменения в стали, что является следствием возникновения дефектов в кристаллической решетке [9-11]. Известно, что мартенситное превращение, вызванное деформацией, в метастабильных аустенитных нержавеющей сталях, повышает прочность при существенном сохранении пластичности [12]. Изменение интенсивности линии аустенита при деформировании является результатом изменения фазового состава стали, а значительное уширение линий мартенсита по сравнению с аустенитной линией свидетельствует о неоднородности внутреннего магнитного поля у ядра железа в решетке мартенсита, которое вызывается различным

окружением атомов железа. В работе [13] на примере сплавов Fe-Cr, содержащие до 15 ат.% хрома, было показано, что среднее значение сверхтонких полей, действующих на ядрах ^{57}Fe , является функцией содержания хрома в ближайшем окружении атомов железа.

Изучение влияния термического воздействия на структурные изменения и магнитные свойства деформированных сплавов стали описаны в работах [14-18]. Авторами в [14] было исследовано влияние отпуска при 400-600°C на структурно-фазовые изменения сплава Fe-12Ni-11Cr-2Mo. Выявлено, что наряду с процессами $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращения в α -твердом растворе протекают процессы перераспределения атомов, приводящие к образованию концентрационных неоднородностей. В работе [15] установлено, что α' -фаза стабильна при температуре отжига ниже 770 K, а переход от ОЦК к структуре ГЦК возникает при температуре ~ 770 K и завершается при температуре ~ 1070 K. В работе [16] описывается, что переход от α' к γ происходит в диапазоне температур примерно 450-680 °C. Более того, механизм превращения мартенсита в аустенит в сплавах системы Fe-Cr-Ni при различных температурах были подробно охарактеризованы процессами сдвига и диффузии [17, 18].

В данной работе была изучена кинетика обратного мартенситно-аустенитного превраще-

ния при термическом воздействии в дуплексной стали CF8, предварительно подвергнутой холодной пластической деформации.

Методология

Для исследования были представлены Аргонской национальной лабораторией (США) образцы состаренной при температуре 350°C в течение 10 000 часов стали CF8 в виде пластин с размерами 10 мм × 10 мм толщиной 600 мкм. Образцы были прокатаны до толщины 100 мкм и подвергнуты отжигу при температуре 900°C в вакууме $1 \cdot 10^{-6}$ мм.рт.ст. продолжительностью 4 часа. Структура таких образцов представляла из себя γ -аустенит. Для получения образцов со степенью деформации $\varepsilon=55\%$ отожженные образцы были прокатаны до толщины 45 мкм. Полученная толщина позволила использовать образцы для исследования методом МС, широко используемым для изучения химического состояния железа в структуре железосодержащих материалов, в том числе нержавеющей сталей [19, 20]. Для изучения кинетики обратного мартенситно-аустенитного превращения было проведено термическое воздействие на сталь путем изохронного отжига при 300 - 850 °C продолжительностью 2 часа предварительно деформированных образцов.

Измерение МС спектров осуществляли при комнатной температуре в режиме постоянного ускорения на спектрометре MS-1104Em.

Источником γ -квантов служил ^{57}Co в матрице хрома. Анализ и обработку полученных спектров выполняли с помощью программного комплекса SpectrRelax [21]. Парциальные спектры (подспектры) характеризовались параметрами сверхтонкого взаимодействия на ядрах ^{57}Fe , а именно изомерным сдвигом относительно металлического железа I_s , квадрупольным расщеплением Δ , квадрупольным сдвигом Q_s для магниторасщепленных спектров, магнитным полем H_n и интегральной интенсивностью подспектра S.

Для определения кристаллической структуры изучаемых образцов был использован рентгено-дифракционный анализ (РДА). Измерения проводили на дифрактометре D8 ADVANCE (Bruker, Германия) с Cu анод. Рабочие параметры 40 кВ, 40 мА, шаг 0.02°, скорость сканирования 1.0 сек./шаг. Фазовый анализ выполняли в программе EVA с интегрированной базой ICDD. Элементный анализ приповерхностного слоя образцов определяли методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с помощью микроскопа Hitachi TM4000 Plus, оснащенного приставкой для энергодисперсионного микроанализа Quantax75c энергетическим разрешением на линии характеристического излучения Mn $K\alpha_{1,2}$ 137 эВ при ускоряющем напряжении 5 - 15 кВ и временем накопления 60 секунд.

Элементный состав нержавеющей дуплексной стали CF8 приведен в Таблице 1.

Таблица 1 – Химический состав стали CF8 (масс. %)

C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni	Fe
< 0.08	< 2	< 1.5	< 0.04	< 0.04	18.0 – 21.0	8.0 – 11.0	основа ASTM A743
0.07	1.56	0.96	-	-	19.41	8.63	69.31 измерено

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 приведены МС-спектры и распределения сверхтонкого магнитного поля $p(H_n)$ образцов деформированной при 55 % нержавеющей стали CF8 до и после отжигов при температуре 300-850 °C. Площадь под кривой интегрального профиля подспектра S пропорциональна вероятности эффекта Мессбауэра и количеству атомов железа в неэквивалентных положениях. Это позволило провести количественный анализ железосодержащих фаз, содержащихся в стали. Первым этапом обработки МС-спектров было восстановление распределения сверхтонких параметров, а именно распределения магнитного поля $p(H)$. Далее

расчетные данные $p(H)$ были использованы для создания конкретной физической модели. Модельное декодирование спектров было заключительным этапом обработки спектров. Расчет спектров и распределений $p(H)$ мартенситной составляющей МС-спектра проводился аналогично расчету в случае бинарных сплавов Fe–Cr с ОЦК кристаллической решеткой [22]. Экспериментальный спектр α -фазы был смоделирован как сумма подспектров, каждый из которых соответствует различному окружению ^{57}Fe атомами примесей (хрома) в двух ближайших координационных сферах.

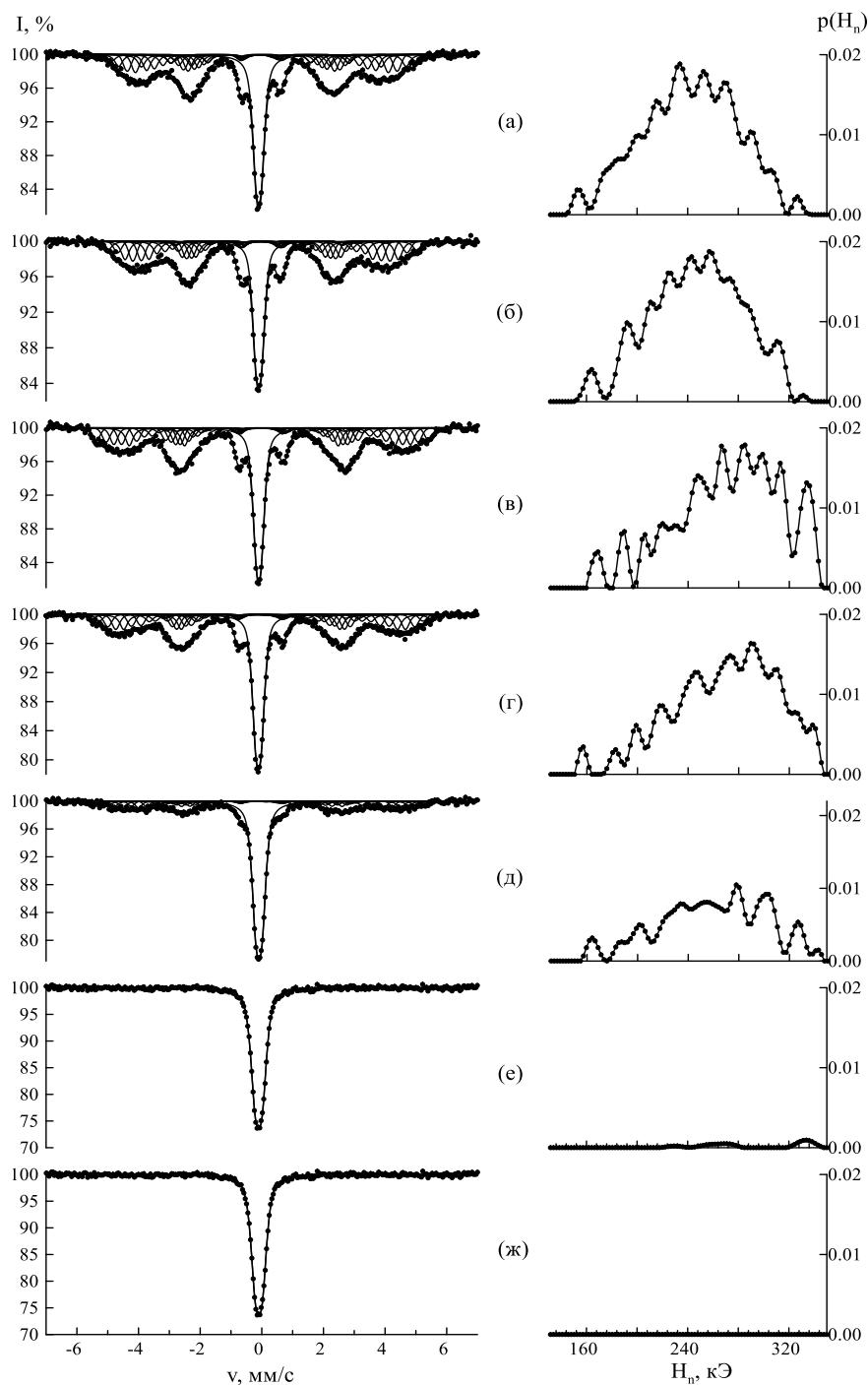


Рисунок 1 – МС-спектры и распределения сверхтонкого магнитного поля $p(H_n)$ на ядрах ^{57}Fe образцов деформированной нержавеющей стали CF8 до (а) и после отжига при температуре 300 (б), 500 (в), 600 (г), 700 (д), 800 (е) и 850 °C (ж)

Из рисунка 1 видно, что с увеличением температуры отжига происходит уменьшение интенсивности ферромагнитной фазы (мартенсита) и после отжига при 850 °C на спектре представлена только парамагнитная линия аустенита. На рисунке 2(а) приведена зависимость относительной интенсивности подспектра α' -мартенсита от температуры последовательного

отжига. Результаты показали, что динамика обратного $\alpha' \rightarrow \gamma$ -превращения наблюдается от 500 °C, при 600 °C происходит видимое уменьшение относительной интенсивности α' -фазы. Дальнейший отжиг приводит к распаду α' -мартенсита и росту содержания γ -аустенита. При 850 °C происходит завершение образования γ -аустенита.

На рисунке 2(б) показана зависимость среднего эффективного сверхтонкого поля на ядрах ^{57}Fe в α' -мартенсите от температуры отжига. С увеличением температуры до $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ наблюдался заметный рост среднего сверхтонкого магнитного поля $\langle H_n \rangle$, от 241 ± 1 до 269 ± 1 кЭ. При этом распределение магнитного поля $p(H_n)$ (рисунок 1) показало постепенное увеличение вклада с $H_n \geq 330$ кЭ, что, вероятно, связано с уменьшением количества атомов хрома в ближайшем окружении железа [23-25].

Дальнейшее увеличение температуры отжига привело к уменьшению $\langle H_n \rangle$. Относительная интенсивность дублета, описывающего γ -аустенит, увеличивалась с ростом температуры отжига. Изомерный сдвиг оставался постоянным ($\sim 0.10 \pm 0.01$ мм/с), указывая на неизменность электронной структуры аустенита. Ширина линии дублета увеличивалась от 0.29 ± 0.01 до 0.36 ± 0.01 . Это объясняется влиянием замещающих и внедренных атомов (преимущественно Cr и Ni) в аустенит.

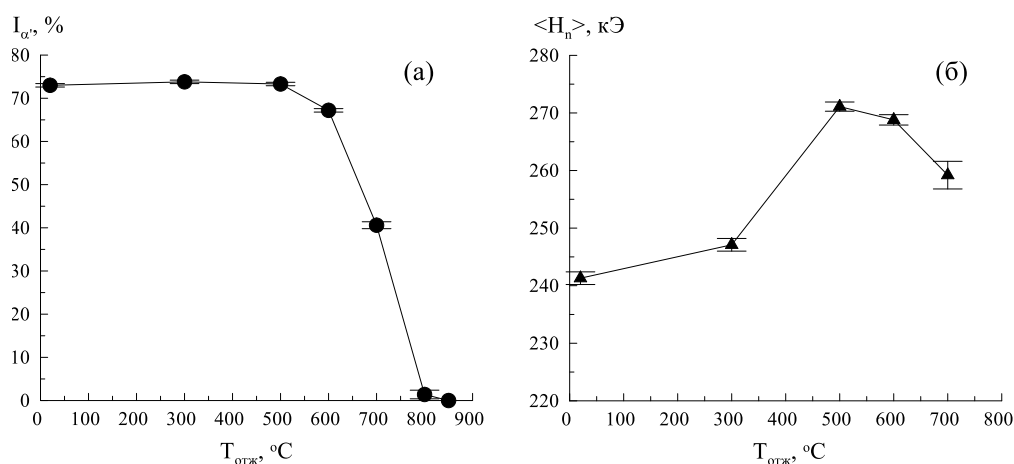


Рисунок 2 – Зависимость относительной интенсивности α' -мартенсита и среднего эффективного поля на ядрах ^{57}Fe в МС спектрах образца стали CF8 от температуры отжига

На рисунке 3 приведены рентгеновские дифрактограммы предварительно деформированных образцов стали, снятые до отжигов и после отжига при $850\text{ }^{\circ}\text{C}$. Результаты демонстрируют в снятом до отжигов образце

наличие α' -мартенсита на отражениях (110), (200) и (211), что подтверждает результаты МС. После отжига при $850\text{ }^{\circ}\text{C}$ структура образца состоит только из γ -аустенита.

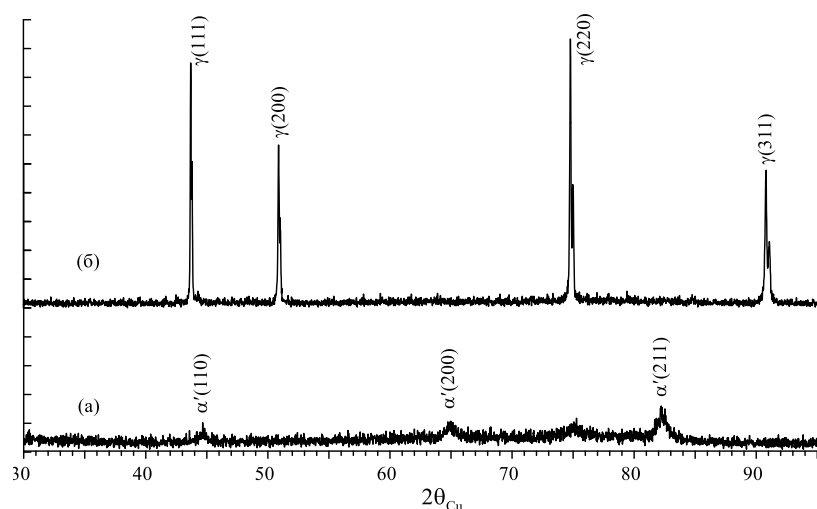


Рисунок 3 – Дифрактограммы образца нержавеющей стали CF8 до отжигов (а) и после отжига при температуре $850\text{ }^{\circ}\text{C}$ (б)

Как было описано в работе [26] в зависимости от температуры мартенсит, вызванный деформацией, может быть метастабильным, и его превращение в аустенит может происходить по диффузионному или сдвиговому механизму. Диффузионный механизм характеризуется, в основном, широким диапазоном температур отжига, при котором происходит $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращение. Более того, диффузионное превращение происходит при высоких температурах (Stout, 1976:10). В механизме сдвига процесс превращений происходит в узком диапазоне температур и становится диффузионно-зависимым процессом только после того, как происходит первоначальное превращение мартенсита при сдвиге в аустенит с высокой плотностью дислокаций. Так, по данным настоящих исследований, процесс $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращений преимущественно происходил путем сдвигового механизма в диапазоне температур 600–700 °С. Схожие результаты сообщили авторы в (Tomimura, 1991:31), где в сплаве Fe–16Cr–10Ni процесс бездиффузионной обратной трансформации произошел между 530 °С и 630 °С, а диапазон температур превращения составлял около 100 °С независимо от скорости нагрева. Узкий диапазон температур превращения может заключаться в более высокой стабильности аустенита.

Заключение

С использованием методов мессбауэровской спектроскопии в геометрии на пропускание и рентгеновской дифракции изучена кинетика обратного мартенситно-аустенитного превращения в предварительно деформированной ($\varepsilon = 55\%$) дуплексной стали CF8 при термическом воздействии в диапазоне температур 300–850 °С. Динамика обратного $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращения не наблюдалась при температурах до 500 °С. Интенсивный $\alpha' \rightarrow \gamma$ переход происходил в интервале температур 600–700 °С. Восстановление исходной структуры γ -аустенита завершилось при 850 °С. Процесс $\alpha' \rightarrow \gamma$ превращений преимущественно происходил путем сдвигового механизма. Фазовый состав стали CF8, предварительно подвергнутой холодной пластической деформации, до отжига представляет собой α' -мартенсит, и после отжига при 850 °С структура стали состоит из γ -аустенита.

Благодарность, конфликт интересов

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (AP19679693).

Литература

- 1 S.M. Dubiel, *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences* **49**(5), 1–52 (2023). <https://doi.org/10.1080/10408436.2023.2273462>
- 2 D. Košovský, M. Miglierini, M. Pavúk, K. Sedláčková, T. Kmjec and J. Kopeček, *Physica status solidi (b)* **259**(6), 2100632 (2022). <https://doi.org/10.1002/pssb.202100632>
- 3 M.B. Miglierini, L. Pašteka, M. Cesnek, et al., *J Radioanal Nucl Chem.* **322**, 1495–1503 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06737-w>
- 4 J. Pechousek, L. Kouril, P. Novak, J. Kaslik and J. Navarik, *Meas.* **131**, 671–676 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2018.09.028>
- 5 M. Vereshchak, I. Manakova and A. Shokanov, *Materials* **16**, 3813 (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16103813>
- 6 E.A. Eid and M.M. Sadawy, *Met. Mater. Int.* **27**, 4536–4549 (2021). <https://doi.org/10.1007/s12540-020-00722-9>
- 7 D.A. Oliveira, P.P. Brito, F.C. Magalhaes, P.C. Azzi, J.D. Ardisson and A.M. Abrao, *J. Mater. Res. Technol.* **27**, 4573–4594 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.10.133>
- 8 J. Ramos, J.F. Piamba, H. Sanchez, et al., *Hyperfine Interact* **238**, 55 (2017). <https://doi.org/10.1007/s10751-017-1425-7>
- 9 J. Li, Y. Wang, X. Chen, X. Yan and L. Xiang, *Mater. Charact.* **148**, 266–271 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.12.026>
- 10 E. Aldırmaz, M. Güler and E. Guler, *The European Physical Journal Plus* **136**(1), 98 (2021). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-020-01021-3>
- 11 M. Vereshchak, I. Manakova, G. Yeshmanova and Zh. Tleubergenov, *Metals* **14**(12), 1449 (2024). <https://doi.org/10.3390/met14121449>
- 12 Sh.T. Yang, T.W. Shyr, W.S. Hwang and Ch.N. Ko, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **330**, 147–151 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.11.008>
- 13 S.M. Dubiel, *Acta Physica Polonica* **A49**(5), 619–626 (1976).
- 14 P.L. Gruzın, M.N. Rayevskaya, Y.L. Rodionov, V.S. Mkrtchyan, *FMM* **35**, 157–162 (1973). (in Russ)

- 15 B. Boubeker, J.P. Eymery, P.Auric and M. Rahmoune, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **101**, 267-274 (1995).
- 16 R.K. Stout and C.R. Brooks, *Scripta Metallurgica*, **10**, 741-746 (1976). [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(76\)90354-9](https://doi.org/10.1016/0036-9748(76)90354-9)
- 17 T.H. Coleman and D.R.F. West, *Metal Science* **9(1)**, 342-345, (1975). <https://doi.org/10.1179/030634575790445035>
- 18 K. Tomimura, S. Takaki and Y. Tokunaga, *ISIJ International* **31(12)**, 1431-1437 (1991).
- 19 V. Shabashov, V. Sagaradze, K. Kozlov and Y. Ustyugov, *Metals* **8**, 995 (2018). <https://doi.org/10.3390/met8120995>
- 20 G.Principi, *Metals* **10**, 992 (2020). <https://doi.org/10.3390/met10080992>
- 21 M.E. Matsnev and V.S. Rusakov, *AIP Conf. Proc.* **1489**, 178-185 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.4759488>
- 22 K.A. Kozlov, V.A. Shabashov, A.E. Zamatovskii, V.V. Sagaradze and K.A. Lyashkov, *Physics of Metals and Metallography* **119(11)**, 1093-1100 (2018). <https://doi.org/10.1134/S0031918X18110121>
- 23 K. Kozlov, V. Shabashov, A. Kozlov, V. Sagaradze, V. Semyonkin, V. Panchenko, A. Zamatovskii, N. Kataeva and A. Nikitina, *J. Nucl. Mater.* **558**, 153384 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153384>
- 24 K. Kozlov, V. Shabashov, A. Zamatovskii, E. Novikov and Y. Ustyugov, *Metals* **10**, 659 (2020). <https://doi.org/10.3390/met10050659>
- 25 S.M. Dubiel, J. Cieslak and J. Zukrowski, *Appl. Surf. Sci.* **359**, 526–532 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.10.152>
- 26 J. Zhao and Zh. Jiang, *Progress in Materials Science* **94**, 174-242 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.01.006>

История статьи:

Поступила – 10.02.2025

Кабылданды – 20.05.2025

Article history:

Received 10 February 2025

Accepted 20 May 2025

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Ешманова Гаухар Бауыржанқызы** (автор-корреспондент) – МНС, Институт ядерной физики, Алматы Казахстан. e-mail: g.yeshmanova@inp.kz

2. **Манакова Ирина Анатольевна** - зав. лаб., Институт ядерной физики, Алматы Казахстан. e-mail: manakova@inp.kz

3. **Верешак Михаил Федорович** – к.ф.-м.н., ВНС, Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан. e-mail: m.vereshchak@inp.kz

4. **Тлеубергенов Жандос Қанатбекұлы** – МНС, Институт ядерной физики, Алматы Казахстан. e-mail: z.tleubergenov@inp.kz

Information about authors:

1. **Gaukhar Eshmanova** (corresponding Author) – Junior Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty Kazakhstan. e-mail: g.yeshmanova@inp.kz

2. **Irina Manakova** – Head of Lab, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan. e-mail: manakova@inp.kz

3. **Mikhail Vereshchak** – Cand. Phys.-Math.Sci, Leading Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan. e-mail: m.vereshchak@inp.kz

4. **Zhandos Tleubergenov** – Junior Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty Kazakhstan. e-mail: z.tleubergenov@inp.kz

Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы

Thermophysics and Theoretical Heat Engineering

Теплофизика и теоретическая теплотехника

N.B. Uralov* , Kh.Kh. Turaev , A.X. Toshkulov , B.A. Normurodov ,
I.A. Umbarov , F.B. Kurbonov 
Termez State University, Termez, Uzbekistan
*e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com

STUDYING THE COMPOSITION OF IODINE-RICH KHAUDAK AND UCHKIZIL UNDERGROUND BRINES IN THE SOUTHERN REGIONS OF UZBEKISTAN BASED ON X-RAY FLUORESCENCE ANALYZER

This study investigates the underground brines of Khaudak and Uchkizil in southern Uzbekistan, which are rich in various mineral salts, including iodine. The chemical composition of these brines and their time-dependent transformations under environmental exposure were analyzed using X-ray fluorescence spectroscopy (XRF).

The results demonstrate that iron compounds present in the brine gradually precipitate over time. The original iron content of the water was approximately 0.130%, with up to 65% of it forming sediment. Additionally, upon adding specific iodine oxidizing agents and storing the sample for one month, a reddish-brown precipitate was formed. This precipitate mainly consisted of iron and chlorine compounds, with minor contributions from iodine and similar elements. The precipitate contained 1.317% iodine, corresponding to 7.66% (21.32 mg/L) of the total iodine in the Khaudak water sample. Exposure to ultraviolet radiation caused further oxidation and volatilization of iodine into the atmosphere. These findings emphasize the importance of timely iodine separation for recovery from brines under natural and controlled conditions.

Keywords: Khaudak brine, Uchkizil brine, iron(III) chloride, iodine precipitation, X-ray fluorescence spectroscopy.

Н.Б. Уралов*, Х.Х. Тураев, А.Х. Тошқулов, Б.А. Нормуродов,
И.А. Умбаров, Ф.Б. Курбонов
Термез мемлекеттік университети, Термез, Ўзбекистон
*e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com

Ўзбекистанның оңтүстік аймақтарындағы йодқа бай Хаудак және Учкизил жер асты суларының құрамын рентгендік флуоресцентті анализатор негізінде зерттеу

Бұл зерттеуде Ўзбекистанның оңтүстігінде орналасқан және йод қосылған әртүрлі минералды тұздардан тұратын Хаудак және Учкизил жер асты суларына арналған және бұл сулардың өзара ұқсастығы мен олардың уақытқа байланысты өзгерістері талданған. Сыртқы ортаның әсерінен су құрамынан алынған бірнеше сынамалар мен бөлшектердің өзгерістері анықталды.

Алынған тұзды ерітінді құрамы рентгендік флуоресцентті анализаторды талдау негізінде сипатталған. Оған сәйкес уақыт өте келе судағы темір қосылыстары шөгіндіге түсетіні анықталды. Бастапқыда судың құрамында темірдің шамамен 0,130% - ы болады және белгілі бір уақыт аралығында баяу батып кетеді. Бұл тұнбаның құрамында темірдің мөлшері шамамен 65% құрайды. Сонымен қатар, жаңадан алынған су үлгісінде йодқа арнайы тотықтырғыштарды қосып, оны 1 ай бойы сақтау арқылы йодтың белгілі бір бөлігінің тұнбаға түскені байқалды. Нәтижесінде негізінен темір мен хлордан және сирек йодпен және ұқсас элементтермен қосылыстардан тұратын қоңыр-қызыл түсті тұнба пайда болды. Тұнбаның құрамында 1,317% йод бар, ал Хаудак суындағы йодтың 7,66% (21,32 мг/л) тотығу арқылы тұнбаға түскен. Алайда, бұл су ашық ауада ультракүлгін сәулениң әсеріне ұшыраған кезде, судағы йодтың тотығуы және ауа қабатына шығуы байқалды.

Тўйин сөздер: Хаудак тұзды суы, Учкизил тұзды суы, темір(III) хлориді, йод тұнбасы, рентгендік флуоресцентті талдау.

Н.Б. Уралов*, Х.Х. Тураев, А.Х. Тошқулов, Б.А. Нормуродов,
И.А. Умбаров, Ф.Б. Курбонов

Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

*e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com

Изучение состава йодсодержащих подземных рассолов Хаудака и Учкизила в южных районах Узбекистана на основе рентгенофлуоресцентного анализа

В настоящем исследовании рассматриваются подземные рассолы Хаудака и Учкизила, расположенные в южных регионах Узбекистана, обладающие высокой минерализацией и содержанием йода. Состав и трансформация рассолов при воздействии внешней среды исследованы с применением рентгенофлуоресцентного анализа (XRF).

Показано, что содержащиеся в воде соединения железа со временем постепенно выпадают в осадок. Исходное содержание железа составляло около 0,130%, из которых до 65% оседает. При добавлении специализированных окислителей йода и выдержке образца в течение одного месяца наблюдалось образование буро-красного осадка, преимущественно состоящего из соединений железа и хлора, а также незначительного количества йодсодержащих соединений. Выявлено, что содержание йода в осадке составило 1,317 %, что соответствует 7,66 % от общего количества йода в воде Хаудака (21,32 мг/л). Воздействие ультрафиолетового излучения приводило к дальнейшему окислению и улетучиванию йода в атмосферу. Таким образом, полученные результаты исследования подчеркивают необходимость своевременной экстракции йода из минеральных вод для предотвращения его потерь в естественных условиях.

Ключевые слова: Хаудакский рассол, Учкизильский рассол, хлорид железа (III), осаждение йода, рентгенофлуоресцентный анализ.

Introduction

Interest in underground brines has increased significantly in recent years due to their industrial and medical importance. Some of these highly mineralized waters are used for therapeutic purposes, while others serve as valuable sources for the extraction of trace elements such as iodine and bromine. Studies on iodine-rich groundwater in South China have revealed average iodine concentrations of 890 µg/L, with maximum levels reaching 6,350 µg/L—far exceeding the WHO's recommended range of 5–300 µg/L. Iodine enrichment typically occurs under acidic conditions (pH ≈ 6.6) and in low-redox environments (Eh ≈ 198.4 mV) [1]. Iodine in water exists in various forms, including molecular iodine (85.6%), iodide ions (3.2%), iodate (9.1%), and iodine chloride (2.1%) [2].

Microbial activity plays a critical role in iodine cycling through oxidation, reduction, volatilization, and deiodination processes. Recent metagenomic analyses of deep groundwater in the North China Plain have identified microbial gene clusters linked to dissimilatory iodine reduction. Iron- and sulfur-reducing bacteria can further mobilize iodine by

facilitating the reductive dissolution of iron minerals [3]. In the CIS region, major iodine-rich aquifers have been reported in Turkmenistan, Russia, Azerbaijan, Uzbekistan, and Ukraine. Iodine reserves in these countries are distributed as follows: Turkmenistan (40%), Russia (34%), Azerbaijan (22%), Ukraine (3%), and Uzbekistan (1%) [4]. In studies related to sea mud, the amount of iodine was ten times higher than in water and was 0.002–0.01%, and in oil and adjacent waters it was 0.01%; the amount of iodine from mineral ore deposits is around 1% in Chilean saltpeter deposits, 280 mg/kg with phosphorites, and up to 6 mg/kg in some coal deposits. It also contains up to 0.1 mg/kg of table salt obtained from seawater, 0.25 mg/kg of rock salt, and 0.06 mg/kg of potassium salts. In this place, the lack of iodine in salt deposits is recognized by the absence of the ability of iodide ions to isoform the position of chlorine in the crystal lattice. [5]. The main amount of iodine is located in the center of this basin, with iodine concentrations ranging from 3.31 to 1890 µg l⁻¹. Most samples with iodine concentrations above 500 µg l⁻¹ were obtained from wells between 75 and 120 m deep.

High pH and reducing environment are favorable for the enrichment of iodine in groundwater, which is 63.2-99.3% of total iodine. Sediment samples from the drilled well contained 0.18-1.46 mg kg⁻¹ of iodine, which was moderately correlated with total organic carbon (TOC). According to experiments, iodine binds mainly to iron oxyhydroxides and organic substances in sediments. Iodine mobilization processes are proposed to involve the reductive dissolution and transformation of iron oxyhydroxide between iodide, iodine, and organic iodine caused by microbial activity under alkaline and reducing conditions [6]. The conversion of iodide to elemental iodine in an acidic solution significantly resists the formation of iodide or has almost no effect on the conversion of iodide to molecular iodine. In some versions of the study, pre-acidification of aqueous brine with metered hydrochloric or sulfuric acid is the optimal condition for this method [7]. As a continuation of the above scientific work, salt water was heated to a sufficient level, the pH level was

brought to 2 to 4, and an oxidizing agent was added to form free iodine from the iodide in the water, and it was desorbed by airflow [8]. Sodium chloride, which contains iodine, is concentrated in underground saltwater using an electrodialysis device. In Japan, many types of table salt are produced industrially in this way. In this case, crystals containing sodium chloride as the main component are precipitated and separated into crystals by separating methods [9]. The results of research on the adsorption of organic iodine on activated carbon [10, 11] and similarly synthesized sorbents are also important [12-14].

Brines from Khaudak and Uchkizil in Uzbekistan are characterized by exceptionally high mineralization levels (up to 300 g/L) and significant iodine content (>20 mg/L), making them promising for iodine extraction. This study aims to analyze the compositional features of these brines using XRF spectroscopy and evaluate iodine transformation and stability under environmental conditions [15].

Methods

The X-ray fluorescence analysis

EDX-8100P Energy Dispersive X-Ray Fluorescence Spectrometer (SHIMADZU). This spectrometer with ranges of detectable elements from C to U. The X-ray tube consists of a Rh-anode and operates at a voltage of 4-50 kV. The given range of concentrations is from ppm to 100%.

Experimental part

Khoudak water is extracted from the ground from a depth of about 3,000 meters, and three-red water from a depth of about 400 meters. They are mainly present at temperatures of 70-80 °C and 25-30 °C, respectively, at the time they are mined

underground. A solution of a brown-reddish suspension is formed when the water of the tank drops from its initial temperature to room temperature (15-25 °C) and gradually forms a precipitate for 5-6 days. The Uchkizil water will not be significantly hot when mined, and the color of the solution will also be clear and close to transparency. Therefore, brown-reddish sediment from it falls less often. Below, a brown-reddish sediment obtained over 30 days from Uchkizil water was separated and dried, and the spectra obtained from the X-ray fluorescent analyzer (Figure 1) and images in a scanning electron microscope (Figure 2) obtained at a particle size of 10 μm were given (Table 1).

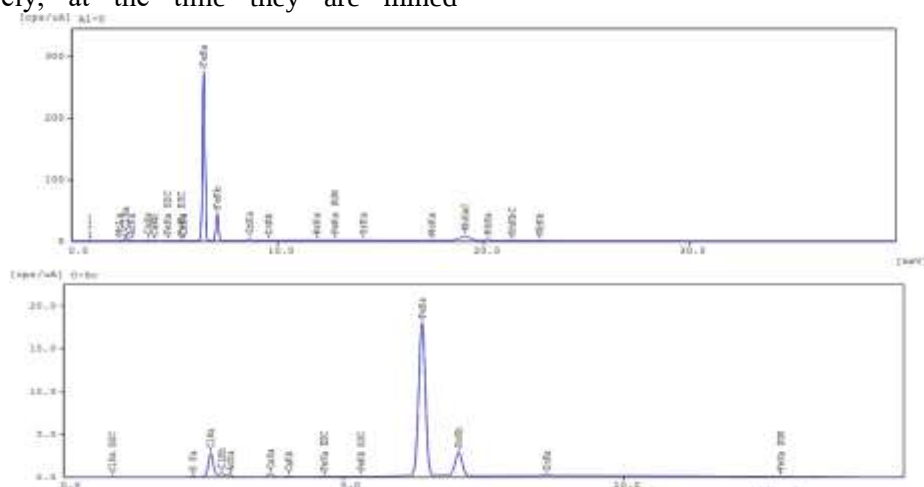


Figure 1 – X-ray fluorescence analyzer spectrum of sediment taken from Uchkizil water

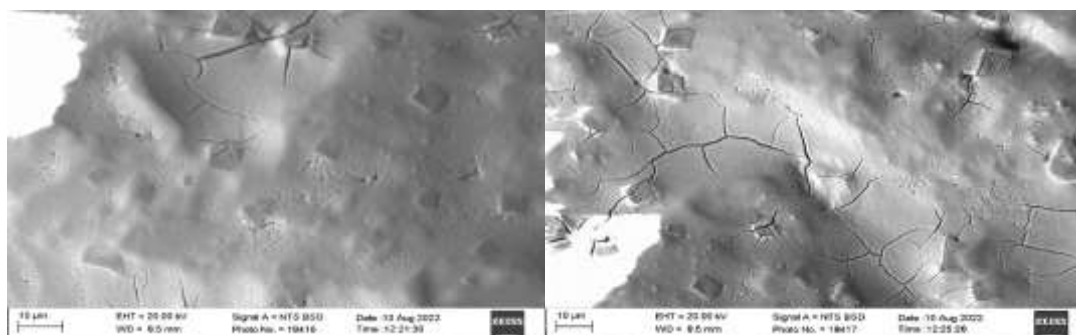


Figure 2 – SEM image of the sediment taken from Uchkizil water

Table 1 – Quantitative result of the X-ray fluorescence analyzer of the sediment obtained from Uchkizil water

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Fe	77.398 %	[0.193]	Quan-FP	FeKa	320.6805
Cl	14.894 %	[0.369]	Quan-FP	ClKa	0.6529
Ca	3.336 %	[0.097]	Quan-FP	CaKa	1.8473
Si	3.227 %	[0.369]	Quan-FP	SiKa	0.1098
Pb	0.332 %	[0.012]	Quan-FP	PbLb1	0.1781
As	0.197 %	[0.071]	Quan-FP	AsKb	0.3581
K	0.197 %	[0.034]	Quan-FP	K Ka	0.0250
Sr	0.183 %	[0.010]	Quan-FP	SrKa	2.5602
Br	0.121 %	[0.005]	Quan-FP	BrKa	0.1427
Zn	0.096 %	[0.009]	Quan-FP	ZnKa	0.0305
Hg	0.020 %	[0.006]	Quan-FP	HgLa	0.0061

It can be seen from this table that there is no iodine in the precipitate, and iron, chlorine, and calcium can be mentioned as the main elements. It was observed that certain water-soluble compounds of iron precipitate when brought from 70-80 °C to room temperature (15-25 °C) or hydrolyze and form water-insoluble compounds and sink to the bottom of

the solution. The solution left after the separation of the brown-reddish sediment that fell under the water of the Khaudak is clear, it was dried at a temperature of 20-30 °C under the influence of sunlight and examined in an X-ray fluorescent analyzer (Figure 3, Table 2).

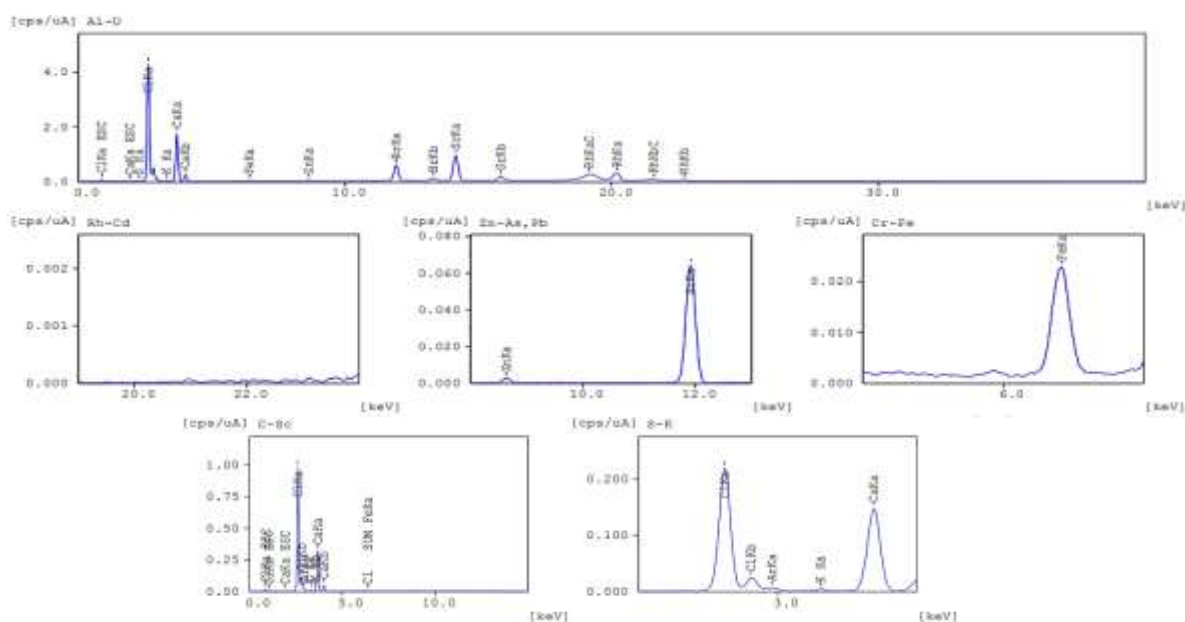


Figure 3 – X-ray fluorescence analyzer spectrum of salt obtained as a result of evaporation of Khaudak water

Table 2 – Quantitative result of X-ray fluorescence analyzer of the salt obtained as a result of the evaporation of water from in Khaudak

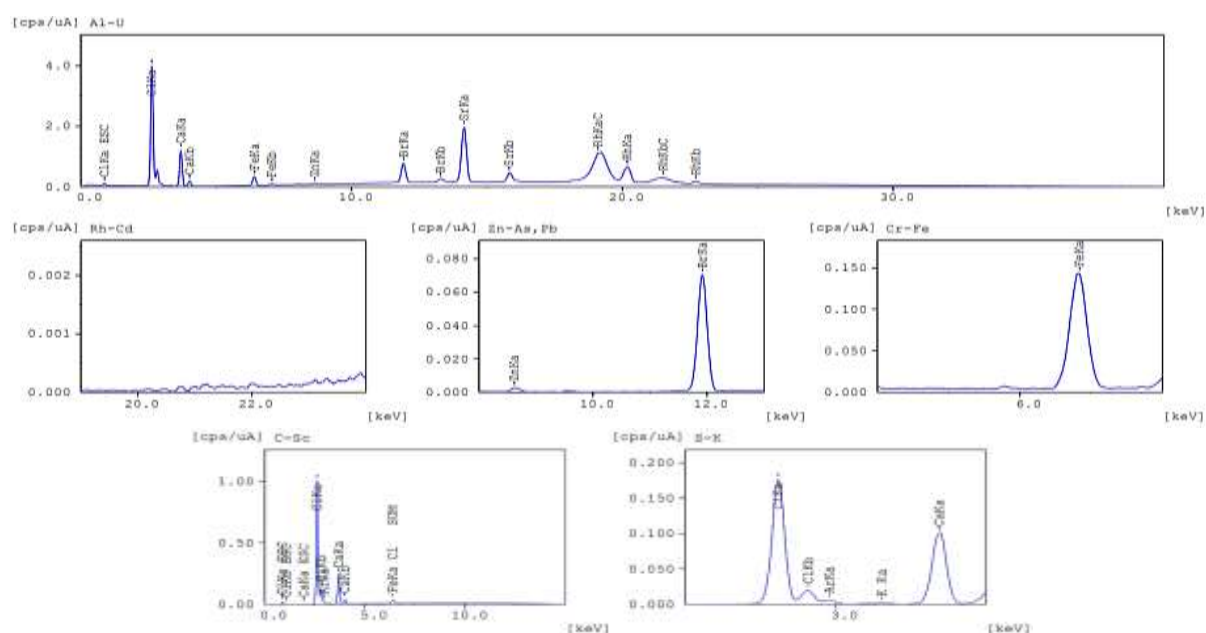
Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	70.093 %	[0.833]	Quan-FP	ClKa	2.2786
Ca	26.982 %	[0.429]	Quan-FP	CaKa	3.5882
K	1.273 %	[0.101]	Quan-FP	K Ka	0.0399
Sr	0.703 %	[0.009]	Quan-FP	SrKa	10.1298
Br	0.514 %	[0.011]	Quan-FP	BrKa	0.6417
S	0.235 %	[0.054]	Quan-FP	SKa	0.0980
Fe	0.130 %	[0.006]	Quan-FP	FeKa	0.1543
Zn	0.070 %	[0.008]	Quan-FP	ZnKa	0.0229

Below, Uchkizil water was left in the open air, under the influence of sunlight, for 1 week after it was taken from the ground. Then it was analyzed in an X-ray fluorescence analyzer (Fig. 4, Table 3). This table lists chlorine as the main constituent and calcium as the main mass.

After extracting the water from the underground, it was left in the open air for 2 weeks under the

influence of sunlight. Sample 2. Then it was analyzed in an X-ray fluorescence analyzer (Fig. 5, Table 4).

As can be seen from this table, little change has occurred compared to the value of iron in the previous table. Uchkizil water was left in the open air for 6 weeks after being extracted from the ground, under the influence of sunlight. Sample 3. Then it was analyzed in an X-ray fluorescence analyzer (Fig. 6, Table 5)

**Figure 4** – X-ray fluorescence analyzer spectrum of 1-week-old water of Uchkizil water, sample 1.**Table 3** – Quantitative X-ray fluorescence analyzer result of Uchkizil water, sample 1

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	11.715 %	[0.155]	Quan-FP	ClKa	1.8506
Ca	2.110 %	[0.039]	Quan-FP	CaKa	2.6479
Fe	0.073 %	[0.002]	Quan-FP	FeKa	1.0001
Sr	0.125 %	[0.002]	Quan-FP	SrKa	20.0853
K	0.064 %	[0.007]	Quan-FP	K Ka	0.0176
Br	0.047 %	[0.001]	Quan-FP	BrKa	0.6858
Zn	0.006 %	[0.001]	Quan-FP	ZnKa	0.0221
H ₂ O	85.860 %	[-----]	Balance	-----	-----

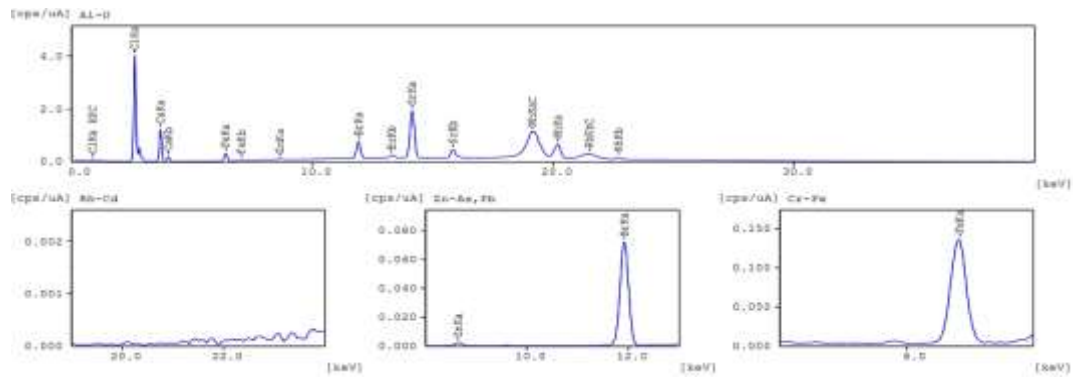


Figure 5 – The X-ray fluorescence analyzer spectrum of 2-week-old water of Uchkizil water, sample 2.

Table 4 – Quantitative X-ray fluorescence analyzer result of Uchkizil water, sample 2

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	11.754 %	[0.155]	Quan-FP	ClKa	1.8559
Ca	2.120 %	[0.039]	Quan-FP	CaKa	2.6555
Sr	0.125 %	[0.002]	Quan-FP	SrKa	20.0113
Fe	0.071 %	[0.002]	Quan-FP	FeKa	0.9690
K	0.062 %	[0.007]	Quan-FP	K Ka	0.0170
Br	0.048 %	[0.001]	Quan-FP	BrKa	0.7012
Zn	0.005 %	[0.001]	Quan-FP	ZnKa	0.0202
H ₂ O	85.815 %	[-----]	Balance	-----	-----

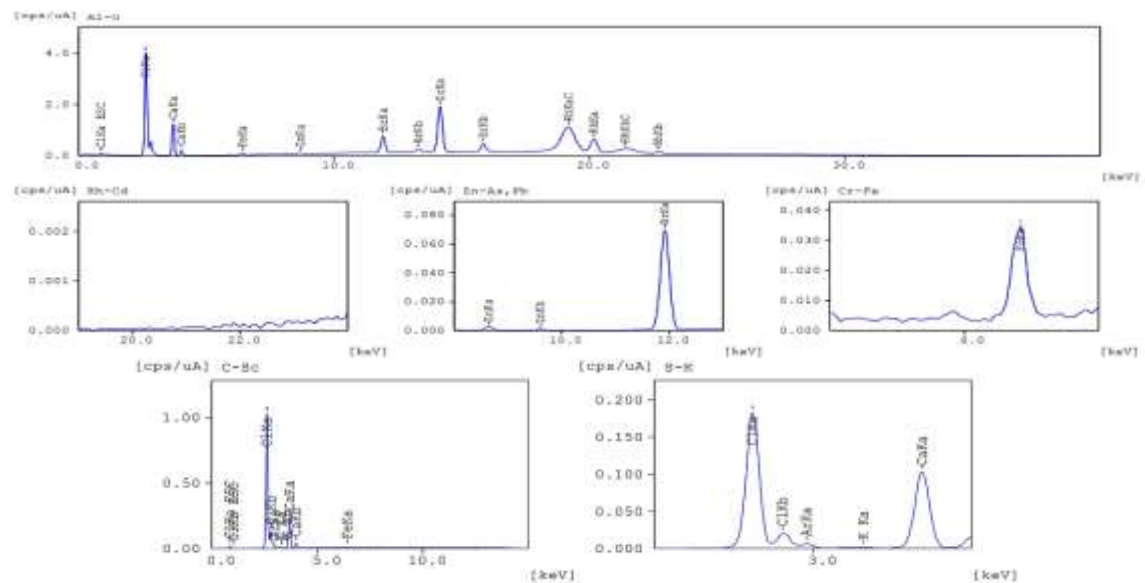


Figure 6 – The spectrum of Uchkizil water 2 weeks in an X-ray fluorescent analyzer, sample 3.

Table 5 – Uchkizil water, quantitative result of sample 3 from X-ray fluorescent analyzer

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	12.099 %	[0.157]	Quan-FP	ClKa	1.9070
Ca	2.171 %	[0.040]	Quan-FP	CaKa	2.6739
Sr	0.124 %	[0.002]	Quan-FP	SrKa	19.7715
K	0.056 %	[0.006]	Quan-FP	K Ka	0.0151
Br	0.048 %	[0.001]	Quan-FP	BrKa	0.6904
Fe	0.016 %	[0.001]	Quan-FP	FeKa	0.2160
Zn	0.006 %	[0.001]	Quan-FP	ZnKa	0.0214
H ₂ O	85.481 %	[-----]	Balance	-----	-----

The underground water of Khaudak was kept for 4 weeks in an open environment under the influence

of light, then the analysis of the analyzer was carried out (Fig. 7, Table 6).

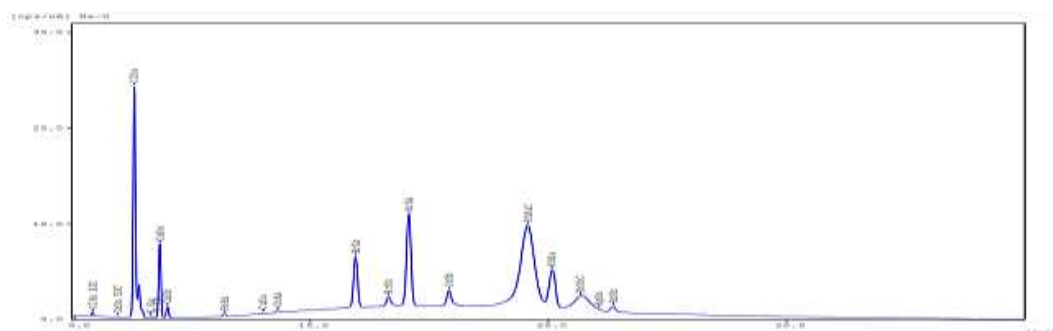


Figure 7 – X-ray fluorescence analyzer spectrum of Khaudak 1-month-old water

Table 6 – Quantitative result of X-ray fluorescence analyzer of Khaudak 1 month water

Analyte	Result (ppm)	Result (%)	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	133682.9 ppm	13.368	[823.663]	Quan-FP	ClKa	128.4750
Ca	17710.98 ppm	1.771	[184.954]	Quan-FP	CaKa	47.1744
K	829.649 ppm	0.083	[94.152]	Quan-FP	K Ka	1.1207
Sr	662.721 ppm	0.066	[4.040]	Quan-FP	SrKa	106.8234
Br	426.566 ppm	0.043	[3.461]	Quan-FP	BrKa	53.5927
Fe	71.311 ppm	0.0071	[6.599]	Quan-FP	FeKa	2.0086
Ag	52.328 ppm	0.0052	[10.472]	Quan-FP	AgKa	2.1917
Zn	41.250 ppm	0.0041	[4.122]	Quan-FP	ZnKa	2.6987
Cu	18.408 ppm	0.0018	[4.054]	Quan-FP	CuKa	1.0050
H ₂ O	84.650 %	84.650	[-----]	Balance	-----	-----

It can be seen that the values in this table are very close to the elements and their amounts in the above Uchkizil water. There is an oil production area around

Khaudak water, and the following indicators were obtained when analyzing the composition of the water separated from this oil (Figure 8, Table 7).

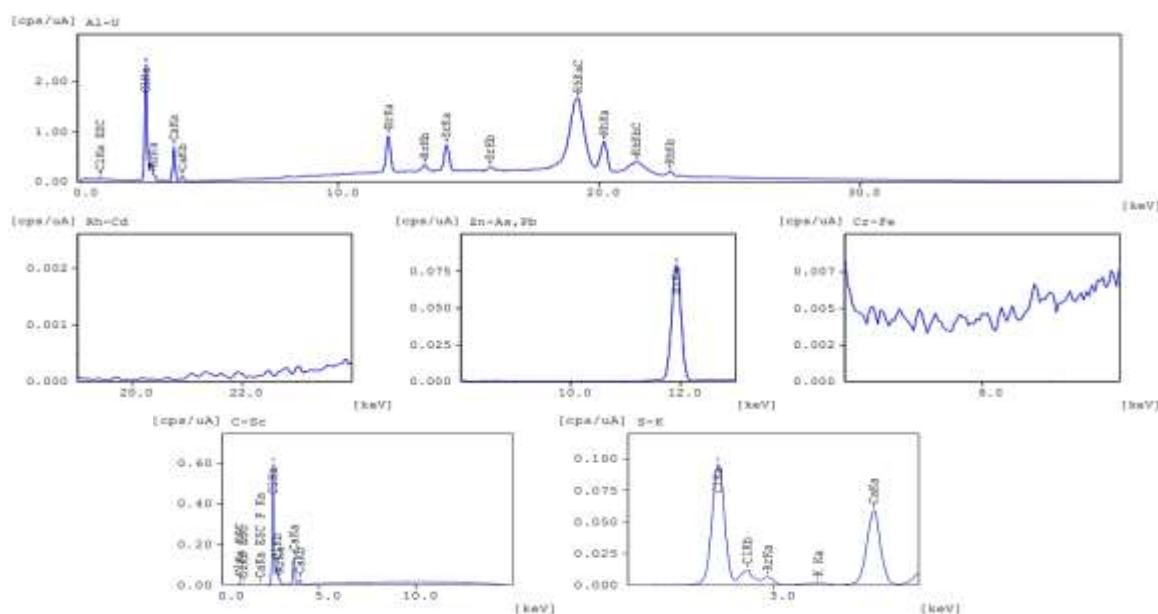


Figure 8 – Spectrum of oil water in X-ray fluorescence analyzer.

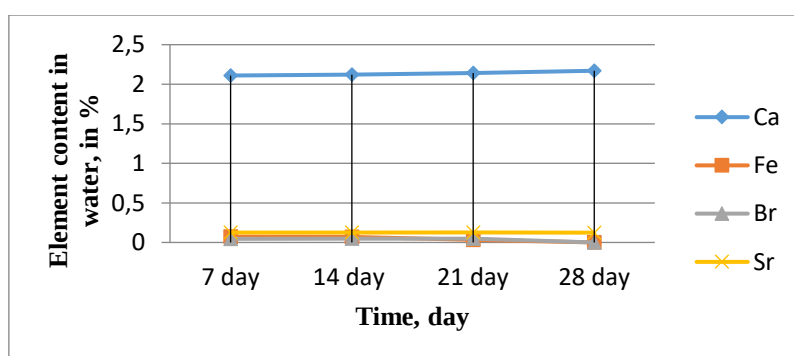
Table 7 – Quantitative result of oil water from X-ray fluorescence analyzer

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Cl	5.189 %	[0.092]	Quan-FP	ClKa	1.0113
Ca	0.695 %	[0.017]	Quan-FP	CaKa	1.5505
K	0.031 %	[0.003]	Quan-FP	K Ka	0.0148
Br	0.030 %	[0.001]	Quan-FP	BrKa	0.7932
Sr	0.021 %	[0.001]	Quan-FP	SrKa	5.6960
P	0.004 %	[0.011]	Quan-FP	P Ka	0.0014
H ₂ O	94.030 %	[-----]	Balance	-----	-----

Results and discussion

The contents of Uchkizil, Khaudak underground waters, which are rich in various mineral salts, and

water separated from Khaudak oil were studied. According to it, the change and stability indicators of the amount of Ca, Fe, Br and Sr in Uchkyzil water based on 3 samples are shown in Fig. 9.

**Figure** –. Quantitative diagram of elements Ca, Fe, Br and Sr in the water of Uchkizil

In this diagram, it can be seen that the concentration of Br and Sr compounds in the waters presented based on 3 samples has not changed for different periods. If we explain that strontium salts dissolve well in water and do not form precipitates, we can see that Br is stable to the effects of external environmental factors, such as the sun, ultraviolet rays, and air. It can be seen that the amount of Fe has decreased by a small amount.

A sample of 5 l of Haudak water was taken and a 30% Fe (III) chloride solution was added to it, shaken for 5 minutes, and kept for 1 month. As a result, a brown-red precipitate was formed, the main part of which consists of iron and chlorine, and a smaller part of compounds with iodine and similar elements. The composition of this precipitate was imaged in an X-ray fluorescence analyzer (Fig. 10, Table 8).

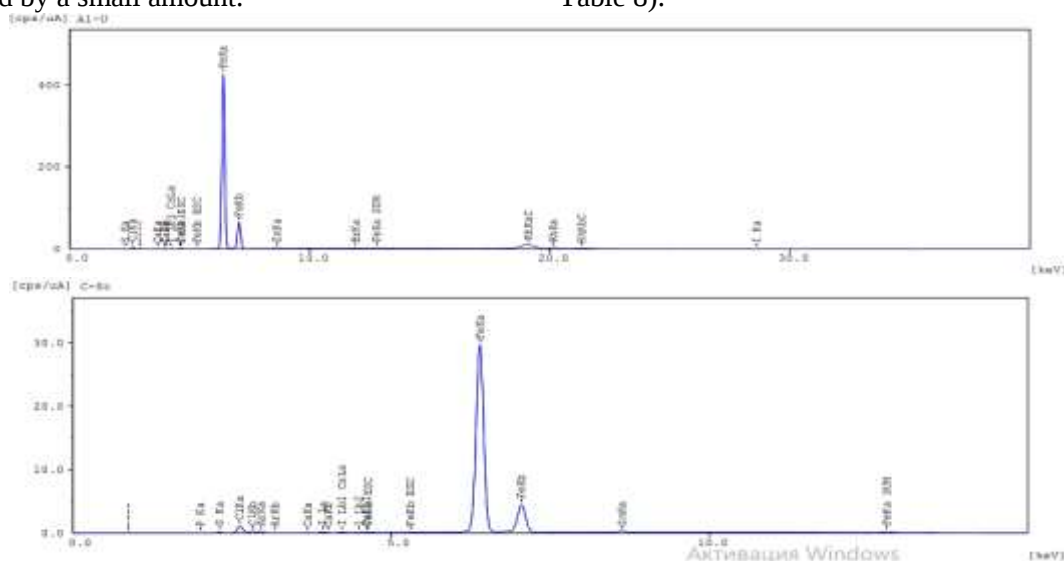
**Figure 9** – The spectrum of the sediment in the X-ray fluorescence analyzer.

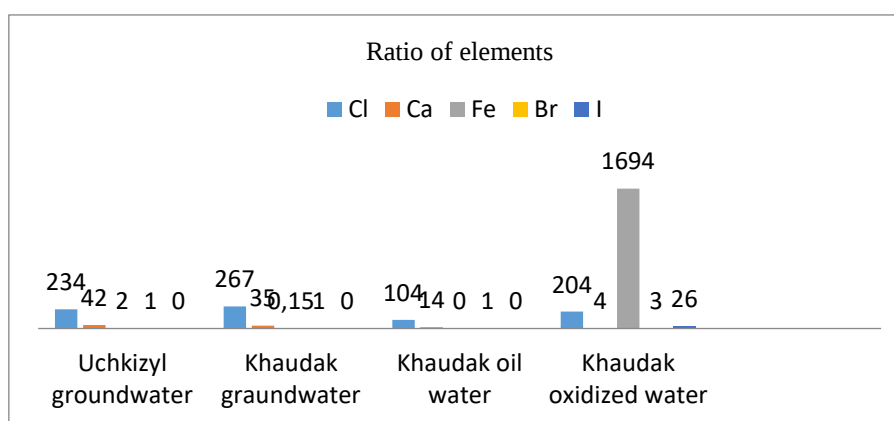
Table 8 – Quantitative result of precipitation obtained from X-ray fluorescence analyzer

Analyte	Result	[3-sigma]	Proc.-Calc.	Line	Int.(cps/uA)
Fe	84.717 %	[0.243]	Quan-FP	FeKa	3046.5512
Cl	10.196 %	[0.160]	Quan-FP	ClKa	11.9197
S	1.614 %	[0.066]	Quan-FP	SKa	1.5363
I	1.317 %	[0.047]	Quan-FP	I Ka	7.3613
Zn	0.977 %	[0.037]	Quan-FP	ZnKa	23.7076
P	0.701 %	[0.104]	Quan-FP	P Ka	0.2426
Ca	0.211 %	[0.027]	Quan-FP	CaKa	0.5385
Br	0.135 %	[0.026]	Quan-FP	BrKa	5.9278
Cs	0.131 %	[0.086]	Quan-FP	CsLa	0.7456

The precipitated part is 1.24 g and we can see that it consists of 1.317% I iodine. This value is 7.66% of the total iodine in water (21.32 mg/l).

Based on the analytical analysis presented above, the quantitative ratios of certain elements in

Uchkizil, Khaudak and Khaudak oil waters oxidized based on FeCl_3 salt of Khaudak water are presented in the diagram in Fig. 11.

**Figure 11** – Quantitative description of water samples and sediment content obtained from them.

In this picture, it can be seen that the amount of iodine in various water samples containing iodine has decreased or completely disappeared due to the passage of time due to external factors. Only if the

obtained water sample is oxidized in a short time or separated using special sorbents, it becomes important for practice.

Conclusion

In this study, several groundwater samples containing iodine were studied by X-ray fluorescence analysis. It has been proven that certain salts in water form precipitates due to the decrease in solubility as a result of lowering the temperature to room temperature, and they form precipitates as a result of hydrolysis. In this case, it was determined that iron salts have a high precipitation forming ability. It has been proven that iodine contained in waters with high mineral content is oxidized and released into the air under the influence of ultraviolet rays contained in

sunlight and air oxygen. It was found that iron compounds in salt water settle over time.

As a result of adding special oxidants for iodine to the water of the newly obtained sample, it was observed that iodine precipitated over a certain period of time. The reasons for the relatively high amount of iodine in the mud at the bottom of the water, given in the above literature, have been confirmed. 7.66% of the iodine in the water containing 21.32 mg/l was precipitated by oxidation.

References

1. F. Zhou, Q. Xu, Y. Chen, W. Zhang, R. Qiu, *Journal of Environmental Sciences* 142, 226-235 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.jes.2023.07.017>
2. I. Umbarov, Kh. Turayev, N. Uralov, S. Abduraxmonov, C. Musayev, K. Tursunov, K. Eshonqulov, and N. Kadirova, *BIO Web of Conferences* 105, 05019 (2024). <https://doi.org/10.1051/bioconf/202410505019>
3. Z. Jiang, M. Huang, Y. Jiang, Y. Dong, L. Shi, J. Li, Y. Wang, *Biogeochemical Cycling*, January 20 (2023). <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.est.2c06657>
4. Obzor rynka yoda v SNG, Izdaniye 5-ye dopolnennoye i pererabotannoye [Review of the iodine market in the CIS], (Moscow, 2010), pp.10-13. (In Russ.)
5. A.P. Vinogradov, *Izvestiya of the USSR Academy of Sciences, geological series* 11, 3-17 (1962). (In Russ.)
6. J. Li, Y. Wang, X. Xie, L. Zhang, W. Guo, *Environ. Sci.: Processes Impacts* 15, 848-859 (2013). <https://doi.org/10.1039/C3EM30841C>
7. T. Brix, J.E. Reynolds, Iodine recovery systems and methods, Patent. Inventors: Publication No 20100074836, March 25 (2010), Patent Grant No: 8496815, Applicant: Arysta LifeScience North America, LLC.
8. S. Tikhonov, L. Neumann, Technology of iodine extracting from formation and associated water of oil and gas fields, Patent. Inventors, Publication No 20210122633, April 29 (2021), Patent Grant No: 11040879.
9. M. Doya (Niigata), T. Tsukagoshi (Niigata), Patent. Inventors: Method for co-producing iodine and salt, Publication No: 20230069167, Mar 2 (2023).
10. Y.A. Geldiev, Kh.Kh. Turaev, Sh.A. Kasimov, O.N. Ruzimuradov, O.A. Shilova, *Glass Phys Chem* 49, 186–192 (2023). <https://doi.org/10.1134/S1087659622601149>
11. I. Umbarov et al. *BIO Web of Conferences* 105, 06016 (2024). <https://doi.org/10.1051/bioconf/202410506016>
12. M.G. Yulchieva, Kh.Kh. Turaev, Sh.A. Kasimov, D.A. Nabiev, N.B. Chorlieva, *International Journal of Engineering Trends and Technology* 71(8), 161-167 (2023). <https://doi.org/10.14445/22315381/IJETT-V71I8P214>
13. B. Kholnazarov, K. Turaev, A. Djalilov, *International Journal of Engineering Trends and Technology* 70(12), 351-358 (2022). <https://doi.org/10.14445/22315381/IJETT-V70I12P234>
14. G.A. Umirova et al., *ChemChemTech* 66(5), 41-51, 2023. <https://doi.org/10.6060/ivkkt.20236605.6728> (In Russ.)
15. N.B. Uralov, Kh.Kh. Turayev, A.T. Djalilov, B.A. Normurodov, and M.U. Karimov, *Multidisciplinary Journal of Science and Technology* 3 49–54 (2023). <https://doi.org/10.5281/zenodo.8221990>

Article history:

Received 22 October 2024

Accepted 11 June 2025

Мақала тарихи:

Түсті – 22.10.2024

Қабылданды – 11.06.2025

Information about authors:

1. **Nuriddin Uralov** (corresponding author) - PhD doctorate, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com
2. **Khayit Turaev** – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. e-mail: hhturayev@rambler.ru
3. **Abduqodir Toshkulov** - Doctor of Economics, Professor, Rector of Termiz State University, Termez State University, Termez, Uzbekistan. e-mail: abduqodir76@gmail.com
4. **Bakhtiyor Normurodov** – DSc associate professor Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. e-mail: normurodovbakhtiyor@gmail.com
5. **Ibrahim Umbarov** - Doctor of technical sciences, Professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan. e-mail: umbarov@mail.ru
6. **Fakhriddin Kurbonov** - Teacher of the Faculty of Chemistry of Termez State University. Termez, Uzbekistan. e-mail: bekzur22@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Оралов Н.Б.** (автор корреспондент) – PhD, Термез мемлекеттік университетінің химия факультеті, Термез, Ўзбекстан. e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com
2. **Тураев Х.Х.** - химия ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Ўзбекстан, Термез. e-mail: hhturayev@rambler.ru
3. **Тошкуллов А.Х.** - экономика ғылымдарының докторы, профессор, Термиз мемлекеттік университетінің ректоры, Термез, Ўзбекстан. e-mail: abduqodir76@gmail.com
4. **Нормуродов Б.А.** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің доценті, Термез, Ўзбекстан. e-mail: normurodovbakhtiyor@gmail.com
5. **Умбаров И.А.** - техника ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез, Ўзбекстан. e-mail: umbarov@mail.ru
6. **Курбанов Ф.Б.** - Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің оқытушысы, Термез, Ўзбекстан. e-mail: bekzur22@gmail.com

МАЗМУНЫ – CONTENTS – СОДЕРЖАНИЕ

Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика	Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics	Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика
<i>С.У. Шарипов, И.Ф. Спивак-Лавров</i> Магниттік экрандары бар екі өлшемді магниттік призмадағы зарядталған бөлшектер шоғының динамикасын зерттеу 4		
<i>С.А. Жаугашева, Г.Г. Сайдұллаева, Е.С. Бақтыгереева</i> Тетрақварк мезонның байланысқан күйдің қасиеттерін сипаттайтын релятивистік кварктық моделі 12		
<i>А.Ж. Акниязова, А.С. Мирошниченко, З.Ж. Жанабаев</i> Комплексный анализ спектральных и фотометрических характеристик объекта с феноменом В[Е] MWC 342 за 40-летний период наблюдений 21		
Плазма физикасы	Plasma Physics	Физика плазмы
<i>В.К. Rakhadilov, N.M. Magazov, G.K. Uazyrkhanova, Z.E. Aringozhina, Z.K. Uazyrkhanova, A.N. Askhatov</i> Ion-plasma nitriding of titanium alloys: technologies, advantages, and limitations 33		
Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
<i>А. Танирберген, Н. Амангелди, С. Реванкар, Г. Ергалиулы</i> Роль сплавов FeCrAl в обеспечении радиационной стойкости и безопасности ядерных реакторов 42		
<i>Б.М. Усеинов, А.Г. Маркова, Я.Р. Самуткин, А.А. Солодовник, С.А. Касимова</i> Исследование физических особенностей различных поверхностей методами атомно-силовой микроскопии 52		
<i>А. Abduvalov, Zh. Taubaldiyeva, K. Baigarin</i> Influence of deposition parameters on the surface morphology and photocatalytic properties of WO ₃ thin films synthesized by magnetron sputtering at a glancing angle deposition 60		
<i>М. Әуелханқызы, А. Жамаиш, Н. Рақымжан, М. Әуелханқызы, Б.Т. Лесбаев</i> Көміртекті нүктелер: түрлері, алу жолдары, қасиеті және қолдану аясы 67		
<i>Г.Б. Ешманова, И.А. Манакова, М.Ф. Верещак, Ж.К. Тлеубергенов</i> Кинетика обратного мартенситно-аустенитного превращения в дуплексной стали CF8 при термическом воздействии 81		
Жылу физикасы және теориялық жылу техникасы	Thermophysics and Theoretical Heat Engineering	Теплофизика и теоретическая теплотехника
<i>N.B. Uralov, Kh.Kh. Turaev, A.X. Toshkulov, B.A. Normurodov, I.A. Umbarov, F.B. Kurbonov</i> Studying the composition of iodine-rich Khaudak and Uchkizil underground brines in the southern regions of Uzbekistan based on x-ray fluorescence analyzer 88		