



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

4(91)2024

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

№4 (91)

Алматы
«Қазақ университеті»
2024



ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №4 (91) желтоқсан

ISSN 1563-0315; eISSN 2663-2276



04.05.2017 ж. Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникация министрлігінде тіркелген

Қуәлік № 14498-Ж

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

ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

Иманбаева А.К., ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: physicskaz@gmail.com

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

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

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

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

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

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

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

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

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

Буфенди Лайфа, профессор (Франция)

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

Ишицука Эцуо, доктор (Жапония)

Лунарска Элина, профессор (Польша)

Сафарик П., доктор (Чехия)

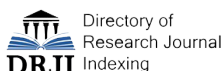
Тимошенко В.Ю., ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

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 Шахкозова

Телефон: +7 701 724 2911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

ИБ 15619

Пішімі 60x84/8. Көлемі 7,5 б.т. Тапсырыс №12800

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

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

1-бөлім

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

Section 1

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

Раздел 1

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

МРНТИ 29.05.23

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a1>М.Н. Ильясов^{1,2} , А.Н. Исадыков^{1,3*} ¹Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан³Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*e-mail: a.issadykov@inp.kz**ВЫЧИСЛЕНИЕ ФОРМ-ФАКТОРОВ, БРЕНЧИНГОВ И УГЛОВЫХ НАБЛЮДАЕМЫХ ДЛЯ ПЕРЕХОДА $B \rightarrow \omega$ В РАМКАХ КОВАРИАНТНОЙ МОДЕЛИ КВАРКОВ**

Статья посвящена исследованию перехода $B \rightarrow \omega$ в рамках ковариантной модели кварков, которая представляет собой теоретический подход для описания динамики адронов с учетом кварковой структуры. Целью работы является вычисление форм-факторов для перехода $B \rightarrow \omega$ во всем диапазоне передаваемого импульса q^2 , а также исследование и расчет бренчингов распадов по лептонным каналам, асимметрии «вперёд-назад», угловых наблюдаемых, продольной и поперечной поляризации для распада $B^0 \rightarrow \omega l^+ l^-$ (где $l - e; \mu; \tau$). Научная значимость работы заключается в её вкладе в проверку Стандартной модели и возможности обнаружения новой физики, связанной с нарушением лептонной универсальности и другими аномалиями. Практическое значение исследования выражается в возможности использования полученных результатов для дальнейших экспериментальных и теоретических исследований в физике элементарных частиц. Методология исследования основана на ковариантной модели кварков, которая описывает адроны как составные системы, состоящие из кварков и антикварков, взаимодействующих через эффективные вершинные функции. Форм-факторы вычисляются с использованием программного обеспечения на языках Fortran и Mathematica, а их параметризация позволяет проводить дальнейшие расчеты бренчингов и угловых наблюдаемых. Полученные результаты показывают хорошее согласие с имеющимися теоретическими прогнозами. Расчеты демонстрируют значимость ковариантной модели кварков в описании редких распадов мезонов, подтверждая её применимость для анализа переходов с изменением аромата. Вклад данной работы в область знаний состоит в предоставлении новых данных для проверки теоретических моделей и в изучении возможных проявлений новой физики.

Ключевые слова: стандартная модель, квантовая теория поля, В мезоны, форм-факторы, бренчинг, угловые наблюдаемые, продольная поляризация.

М.Н. Ильясов^{1,2}, А.Н. Исадыков^{1,3*}¹Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан³Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна қ., Ресей*e-mail: a.issadykov@inp.kz**Кварктардың ковариантты моделі шеңберінде $B \rightarrow \omega$ ауысуы үшін форм- факторлары, бренчингі және бұрыштық бақылауларын есептеу**

Мақала кварк құрылымын ескере отырып, адрондардың динамикасын сипаттаудың теориялық тәсілі болып табылатын кварктардың ковариантты моделіндегі $B \rightarrow \omega$ ыдырауының зерттеуге арналған. Жұмыстың мақсаты – q^2 берілетін импульстің барлық диапазонында $B \rightarrow \omega$ ыдырауының форм-факторларын есептеу, сондай-ақ лептондық арналар арқылы ыдырау бренчингтерін, «алға-артқа» асимметриясын, $B^0 \rightarrow \omega l^+ l^-$ ыдырауы үшін бұрыштық бақыланатын, бойлық және көлденең поляризацияны зерттеу және есептеу (мұндағы $l - e; \mu; \tau$ лептондар). Жұмыстың ғылыми маңыздылығы оның стандартты модельді тексеруге және лептондық әмбебаптықтың бұзылуымен және басқа да ауытқулармен байланысты жаңа физиканы анықтау мүмкіндігіне қосқан үлесі болып табылады. Зерттеудің практикалық мәні алынған нәтижелерді бөлшектер физикасындағы одан әрі эксперименттік және теориялық зерттеулер үшін пайдалану мүмкіндігінде көрінеді. Зерттеу әдістемесі кварктардың ковариантты моделіне негізделген, ол адрондарды тиімді шыңдық функциялар арқылы өзара әрекеттесетін кварктар мен антикварктардан тұратын құрама жүйелер ретінде сипаттайды. Форма

факторлары Fortran және Mathematica тілдеріндегі бағдарламалық жасақтаманың көмегімен есептеледі және олардың параметрленуі бренчингтер мен бұрыштық бақыланатын есептеулерді одан әрі жүргізуге мүмкіндік береді. Алынған нәтижелер қолда бар Теориялық болжамдармен жақсы келісімді көрсетеді. Есептеулер кварктардың ковариантты моделінің сирек кездесетін мезон ыдырауын сипаттаудағы маңыздылығын көрсетеді, бұл оның хош иістің өзгеруімен ауысуларды талдауға қолданылуын растайды. Бұл жұмыстың білім саласына қосқан үлесі теориялық модельдерді тексеру және жаңа физиканың мүмкін көріністерін зерттеу үшін жаңа мәліметтер беруден тұрады.

Түйін сөздер: стандартты модель, өрістің кванттық теориясы, В мезондар, форм- факторлар, бренчинг, бұрыштық бақылау, бойлық поляризация.

M.N. Ilyassov^{1,2}, A.N. Issadykov^{1,3*}

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³Joint institute for nuclear research, Dubna, Russia

*e-mail: a.issadykov@inp.kz

Calculation of form factors, stringing and angular observables for the $B \rightarrow \omega$ transition in the framework of the covariant quark model

The paper is devoted to the study of the $B \rightarrow \omega$ transition in the framework of the covariant quark model, which is a theoretical approach to describe the hadron dynamics taking into account the quark structure. The aim of the work is to calculate the form factors for the $B \rightarrow \omega$ transition in the whole range of the transmitted momentum q^2 , as well as to investigate and calculate the lepton channel decay branchings, forward-backward asymmetry, angular observables, longitudinal and transverse polarization for the decay $B^0 \rightarrow \omega l^+ l^-$ (where $l = e, \mu, \tau$). The scientific significance of the work lies in its contribution to the verification of the Standard Model and the possibility of discovering new physics related to the violation of lepton universality and other anomalies. The practical significance of the study is expressed in the possibility of using the results obtained for further experimental and theoretical studies in elementary particle physics. The methodology of the study is based on the covariant model of quarks, which describes hadrons as composite systems consisting of quarks and antiquarks interacting through effective vertex functions. The form factors are calculated using Fortran and Mathematica software, and their parameterization allows for further calculations of branchings and angular observables. The results are in good agreement with available theoretical predictions. The calculations demonstrate the importance of the covariant quark model in the description of rare meson decays, confirming its applicability to the analysis of flavor-changing transitions. The contribution of this work to the field of knowledge is to provide new data to test theoretical models and to explore possible manifestations of new physics.

Keywords: standard model, quantum field theory, B mesons, form factors, branching, angular observables, longitudinal polarization.

Введение

Исследование распадов с изменением аромата, такие как $b \rightarrow dl^+l^-$, является важным направлением в физике элементарных частиц. Эти процессы связаны с трансформациями ароматов кварков при сохранении электрического заряда, что делает их особенно интересными для проверки Стандартной модели (СМ) и поиска признаков новой физики [1-6]. Нейтральные токи с изменением аромата, такие как $b \rightarrow dl^+l^-$, представляют интерес для поиска новой физики за пределами Стандартной модели [7,8]. Теоретически также редко имеется какая-либо информация о переходах, соответствующих $B \rightarrow$

ωl^+l^- [9-13]. В настоящей работе мы анализируем этот редкий распад в рамках стандартной модели, используя ковариантную модель ограниченного кварка, разработанную Г. В. Ефимовым и М. А. Ивановым [14-17].

В данной статье мы сосредотачиваемся на расчете редких распадов с переходами $b \rightarrow d$, включая такие каналы, как $B \rightarrow \omega l^+l^-$, в рамках ковариантной модели кварка. В статье представлены вычисления форм-факторов для распадов $B \rightarrow \omega l^+l^-$ на всем динамическом диапазоне передаваемого импульса, а также результаты расчетов вероятностей распада, асимметрии вперед-назад, продольной поляризации и других угловых наблюдаемых.

Теоретическая часть

В данной работе рассматривается ковариантная модель кварка (CCQM, Covariant Confined Quark Model), которая представляет собой теоретический подход, разработанный для описания динамики адронов, таких как мезоны и барионы, с учетом кварковой структуры этих частиц. Модель основывается на квантово-полевом формализме и предполагает, что адроны состоят из кварков, которые связаны сильным взаимодействием. Главная особенность модели заключается в том, что она учитывает эффект конфайнмента, то есть невозможность существования свободных кварков, что является одним из ключевых аспектов квантовой хромодинамики (КХД).

CCQM описывает адроны как составные системы, состоящие из кварков и антикварков или трех кварков, которые взаимодействуют через эффективные вершинные функции. Эти функции представляют собой распределение вероятностей для кварков внутри адрона и зависят от их относительных импульсов и внутренних структурных параметров адрона.

В рамках Стандартной модели редкие распады типа $b \rightarrow dl^+l^-$ описываются с использованием эффективного гамильтониана, который может быть выражен через разложение операторного произведения. Эффективный гамильтониан для распада $b \rightarrow dl^+l^-$ имеет следующий вид [18-20]:

$$H_{SM}^{eff} = -\frac{4G_F}{\sqrt{2}} V_{td}^* V_{td} \left(\sum_{i=10}^{10} C_i(\mu) O_i(\mu) + \lambda_u \sum_{i=10}^{10} C_i(\mu) [O_i(\mu) - O_i^u(\mu)] \right), \quad (1)$$

где C_i — коэффициенты Вильсона, а O_i — набор локальных операторов, полученных в рамках СМ для перехода $b \rightarrow dl^+l^-$.

Операторы включают такие вклады, как токи кварков, глюонов и фотонов,

взаимодействующих с кварками внутри мезонов.

Форм-факторы перехода $B \rightarrow \omega$ выражены в следующем виде в рамках ковариантной модели кварков с конфайнментом

$$\begin{aligned} \langle \omega^0(p_2, \epsilon) | \bar{d} O^\mu b | B(p_1) \rangle = \\ = \frac{\epsilon_\nu^\dagger}{m_1 + m_2} [-g^{\mu\nu} P \cdot q A_0(q^2) + P^\mu P^\nu A_+(q^2) + q^\mu P^\nu A_-(q^2) + i \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} P_\alpha q_\beta V(q^2)], \\ \langle \omega^0(p_2) | \bar{d} \sigma^{\mu\nu} q_\nu (1 + \gamma^5) b | B(p_1) \rangle = \\ = \epsilon_\nu^\dagger \left(- \left(g^{\mu\nu} - \frac{q^\mu q^\nu}{q^2} \right) P \cdot q a_0(q^2) + \left(P^\mu P^\nu - q^\mu P^\nu P \cdot \frac{q}{q^2} \right) a_+(q^2) + i \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} P_\alpha q_\beta g(q^2) \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где $P = p_1 + p_2$, $q = p_1 - p_2$. В приведенных выше уравнениях p_1 и p_2 импульсы B мезона с массой m_1 и дочернего мезона с массой m_2 , ϵ — вектор поляризации дочернего мезона, а $O^\mu = \gamma^\mu (1 - \gamma^5)$ — слабая матрица Дирака. Также условие «оболочки» требует, чтобы

$$p_1^2 = m_1^2 = m_b^2 \text{ и } p_2^2 = m_2^2 = m_\omega^2.$$

Параметры модели, такие как массы составляющих кварков и размерные параметры мезонов, определяются на основе экспериментальных данных, таких как лептонные константы и электромагнитные ширины распада, а также массы мезонов. Эти параметры фиксируются с использованием метода наименьших квадратов (Таблица 1).

Таблица 1 — Параметры ковариантной модели кварков

$m_{u/d}$	m_s	m_c	m_b	λ	Λ_B	Λ_ω	m_B	m_ω
0.241	0.428	1.67	4.68	0.181	1.963	0.488	5.279	0.785

Форм-факторы вычисляются для различных значений переданного импульса q^2 с использованием кодов, написанных на языках программирования FORTRAN и Mathematica. Полученные форм-факторы могут быть выражены через параметризацию двойного

полюса, что позволяет упростить дальнейшие вычисления:

$$F(q^2) = \frac{F(0)}{1 - as + bs^2}, s = \frac{q^2}{m_B^2}, \quad (3)$$

где $F(0)$, a и b — параметры, определяемые из численных расчетов, а m_B — масса B мезона.

Эта параметризация обеспечивает точное представление форм-факторов на всем диапазоне q^2 и позволяет использовать их в последующих вычислениях брэнчингов распада и других наблюдаемых величин. Ширина этих спадов вычисляется путем интегрирования по q^2 дифференциального распределения [21]

$$\frac{d\Gamma(b \rightarrow dl^+l^-)}{dq^2} = \frac{G_F^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{\alpha\lambda_d}{2\pi} \right)^2 \frac{|\mathbf{p}_2|q^2\beta_l}{12m_1^2} \mathcal{H}_{tot},$$

$$\mathcal{H}_{tot} = \frac{1}{2}(\mathcal{H}_U^{11} + \mathcal{H}_U^{22} + \mathcal{H}_L^{11} + \mathcal{H}_L^{22}) +$$

$$+ \delta_U \left(\frac{1}{2}\mathcal{H}_U^{11} - \mathcal{H}_U^{22} + \frac{1}{2}\mathcal{H}_L^{11} - \mathcal{H}_L^{22} + \frac{3}{2}\mathcal{H}_S^{22} \right). \quad (4)$$

В дальнейшем мы используем краткое обозначение $m_1 = m_B$, а m_2 – это масса ρ мезона, $\beta_l = \sqrt{1 - 4m_l^2/q^2}$, $\delta_U = 2m_l^2/q^2$ – коэффициент подавления сдвига спиральности, $|\mathbf{p}_2| =$

$$H_{t0}^i = \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{1}{2m_2\sqrt{q^2}} (Pq(-A_0^i + A_+^i) + q^2 A_-^i),$$

$$H_{\pm 1 \pm 1}^i = \frac{1}{m_1 + m_2} (-PqA_0^i \pm 2m_1|\mathbf{p}_2|V^i), \quad (6)$$

$$H_{00}^i = \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{1}{2m_2\sqrt{q^2}} (-Pq(m_1^2 - m_2^2 - q^2)A_0^i + 4m_1^2|\mathbf{p}_2|^2 A_+^i).$$

Для редких распадов, таких как $B \rightarrow \omega l^+ l^-$ форм-факторы, вычисленные в рамках CCQM, могут быть использованы для определения амплитуд распада и предсказания вероятностей распада, асимметрии вперед-назад, поляризации конечных частиц и других наблюдаемых величин. Одним из ключевых наблюдаемых параметров при исследовании распада $B \rightarrow \omega l^+ l^-$ – является асимметрия вперед-назад (A_{FB}). Этот параметр позволяет характеризовать угловое распреде-

$\lambda^{1/2}(m_1^2, m_2^2, q^2)/(2m_1)$ – импульс ω мезона в системе отсчета с помощью функции Келлена $\lambda(a, b, c) = a^2 + b^2 + c^2 - 2(ab + ac + bc)$. Также $\lambda_d = |V_{tb}^* V_{td}|$ – произведение элементов матрицы СКМ.

В приведенном выше уравнении билинейные комбинации структурной функции спиральности для каналов распада $B \rightarrow \omega$ определяются как [21]:

$$\mathcal{H}_U^{ii} = |H_{+1+1}^i|^2 + |H_{-1-1}^i|^2,$$

$$\mathcal{H}_L^{ii} = |H_{00}^i|^2, \quad (5)$$

$$\mathcal{H}_S^{ii} = |H_{t0}^i|^2,$$

где амплитуды спиральности выражаются через форм-факторы, входящие в матричный элемент $b \rightarrow dl^+ l^-$ редкого распада, как:

ление продуктов распада и для поиска отклонений, которые указывают на наличие новой физики.

Асимметрия вперед-назад A_{FB} определяется как разность между вероятностями распада, при которой лептон l движется вперед (в направлении движения мезона B°) и назад, относительно направления переданного импульса q^2 . Она выражается следующей формулой

$$A_{FB}^l = \frac{1}{d\Gamma/dq^2} \left(\int_0^1 - \int_{-1}^0 \right) d \cos \theta \frac{d^2\Gamma}{dq^2 d \cos \theta} = \frac{3}{4} \beta_l \frac{\mathcal{H}_P^{12}}{\mathcal{H}_{tot}}, \quad (7)$$

где A_{FB} – асимметрия вперед-назад; $d\Gamma/dq^2$ – дифференциальная ширина распада по q^2 ; θ – угол между направлением передаваемого импульса и направлением движения мезона B° в системе покоя лептонной пары $e^+ e^-$; β – фактор, зависящий от энергии лептонов; $\mathcal{H}_P^{12}$ и $\mathcal{H}_{tot}$ – спиральные амплитуды, характеризующие взаимодействие частиц.

Поляризация продольного компонента – это величина, которая характеризует ориентацию спина (или углового момента) конечных частиц в распаде относительно их направления движения. В контексте распадов $B \rightarrow \omega l^+ l^-$, продольная поляризация (F_L) указывает на вероятность того, что спин векторной частицы ориентирован вдоль ее направления движения или поперек него. Значение F_L близкое к 1 означает, что частица в

основном продольно поляризована, тогда как значение близкое к 0 говорит о поперечной поляризации.

$$F_L = \frac{1}{2} \beta_l^2 \frac{\mathcal{H}_L^{11} + \mathcal{H}_L^{11}}{\mathcal{H}_{tot}}. \quad (8)$$

Поперечная поляризация – это поляризация, направленная перпендикулярно направлению движения частицы (F_T). Данный компонент поляризации вместе с продольным важен для описания полного состояния спина частицы. Поперечная поляризация важна при анализе угловых распределений продуктов распада, так как она влияет на то, как распределяются продукты распада относительно оси движения материнской частицы.

$$F_T = \frac{1}{2} \beta_l^2 \frac{\mathcal{H}_U^{11} + \mathcal{H}_U^{11}}{\mathcal{H}_{tot}}. \quad (9)$$

Угловые наблюдаемые – это величины, которые описывают распределение углов между направлениями движения продуктов распада в системе покоя исходной частицы: P_i и $P_i'^{**}$ – это наблюдаемые, которые описывают угловые корреляции между направлениями движения лептонов спином материнской частицы. Они зависят от передаваемого импульса q^2 и могут быть использованы для исследования динамики распада и проверки теоретических моделей. Эти наблюдаемые величины определены в работах [22, 23]. Для данной работы мы вычисляем эти наблюдаемые величины P , используя соотношения, выраженные в ссылках [24, 25].

Результаты и обсуждение

В данной работе были вычислены форм-факторы для перехода $B \rightarrow \omega$, определенные в уравнении (2), в рамках ковариантной модели кварков во всей кинематической области квадрата переданного импульса q^2 и приведены в таблице 2. На рисунке 1 представлены форм-факторы перехода $B \rightarrow \omega$ во всей кинематической области $0 \leq q^2 \leq q_{max}^2$. Определив параметры модели и форм-факторы переходам во всей кинематической области квадрата переданного импульса q^2 , мы также сравниваем наши результаты с предсказаниями из других теоретических подходов.

Для сравнения с другими теоретическими подходами мы приводим уравнение наших форм-факторов в вид форм-факторов Бауэр-Стеч-Вирбель (BSW) из [26].

Обозначив их надстрочным индексом, чтобы отличать от наших форм-факторов, мы получаем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} A_1^c, \\ A_- &= \frac{2m_2(m_1 + m_2)}{q^2} (A_3^c - A_0^c), \\ A_+ &= A_2^c, \\ a_+ &= T_2^c + \frac{q^2}{m_1^2 - m_2^2} T_3^c, \\ V &= V^c, \\ a_0 &= T_2^c, \\ g &= T_1^c. \end{aligned} \quad (10)$$

Таблица 2 – Форм-факторы перехода $B \rightarrow \omega$ в рамках модели

Форм-фактор	$F(0)$	a	b
A_+	0.206 ± 0.016	1.390	0.375
A_-	-0.214 ± 0.017	1.442	0.417
A_0	0.288 ± 0.023	0.557	-0.325
V	0.229 ± 0.023	1.504	0.472
a_0	0.206 ± 0.017	0.618	-0.275
a_+	0.206 ± 0.017	1.401	0.384
g	0.206 ± 0.017	1.506	0.472

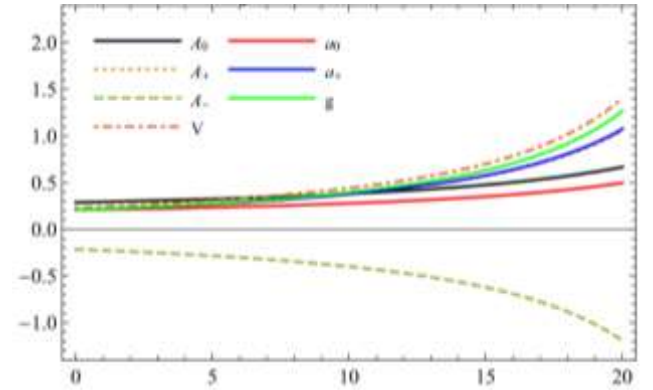


Рисунок 1 – Форм-факторы перехода $B \rightarrow \omega$ в зависимости от квадрата переданного импульса q^2

Кроме того, мы также отмечаем, что форм-факторы, указанные выше, должны удовлетворять следующим ограничениям:

$$\begin{aligned} A_0^c(0) &= A_3^c(0), \\ 2m_2 A_3^c(q^2) &= (m_1 + m_2) A_1^c(q^2) - (m_1 - m_2) A_2^c(q^2). \end{aligned} \quad (11)$$

Поскольку $a_0(0) = a_+(0) = g(0)$, представим форм-факторы $A_0^c = \frac{(m_1 - m_2)[A_0(0) - A_+(0)]}{2m_2}$,

$$A_1^c(0) = \frac{A_0(0)(m_1 - m_2)}{m_1 + m_2}, A_2^c(0) = A_+(0),$$

$$T_1^c = g(0) \text{ и}$$

$$T_3^c(0) = \lim_{q^2 \rightarrow 0} (m_1^2 - m_2^2)(a_+ - a_0)/q^2,$$

полученные в нашей модели, и сравним их с результатами других подходов. Необходимо обратить внимание, что для сравнения с другими подходами мы опускаем верхний индекс для упрощения. Сравнение форм-факторов для перехода $B \rightarrow \omega$ с данными из других теоретических подходов приведены в Таблице 3.

Таблица 3 – Сравнение форм-факторов перехода $B \rightarrow \omega$ с данными из других теоретических подходов

	Наша модель	[9]	[10]	[11]	[12]	[13]
$V(0)$	0.229 ± 0.023	$0.268^{+0.014}_{-0.015}$	0.3293	0.304 ± 0.038	0.275	0.27
$A_0(0)$	0.236 ± 0.011	-	0.281	0.328 ± 0.048	0.240	0.28 ± 0.01
$A_1(0)$	0.214 ± 0.017	$0.214^{+0.013}_{-0.012}$	0.219	0.243 ± 0.031	0.209	0.23
$A_2(0)$	0.206 ± 0.016	$0.170^{+0.010}_{-0.011}$	0.198	0.270 ± 0.040	0.198	0.21
$T_{1,2}(0)$	0.206 ± 0.017	$0.237^{+0.013}_{-0.014}$	0.242	0.251 ± 0.031	0.239	-
$T_3(0)$	0.158 ± 0.013	0.160 ± 0.009	0.155	0.683 ± 0.090	0.168	-

Таблица 4 содержит результаты расчета бренчингов для переходов $B \rightarrow \omega l^+ l^-$, которые были вычислены с использованием полученных форм-факторов. Сравнение с экспериментальными данными и теоретическими предсказаниями показало, что бренчинги, предсказанные в нашей модели, находятся в согласии с данными из работы [9].

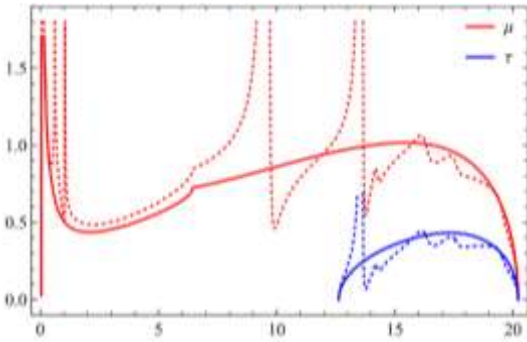


Рисунок 2 – Поведение бренчингов для каналов $B^0 \rightarrow \omega \mu^+ \mu^-$ и $B^0 \rightarrow \omega \tau^+ \tau^-$

Таблица 4 Значения бренчингов распада $B \rightarrow \omega l^+ l^-$ ковариантной модели кварков и сравнение с предсказаниями из другой теоретической модели

Каналы	Наша модель	[9]
$B^0 \rightarrow \omega e^+ e^-$	1.85 ± 0.89	1.3 ± 0.1
$B^0 \rightarrow \omega \mu^+ \mu^-$	1.57 ± 0.55	1.2 ± 0.1
$B^0 \rightarrow \omega \tau^+ \tau^-$	0.25 ± 0.05	0.13 ± 0.01

Также в рамках данной работы были проведены вычисление амплитуд распада и предсказания вероятностей распада, асимметрии вперед-назад, поляризации конечных частиц и других наблюдаемых величин, данные приведены в Таблице 5.

Таблица 5 – Значение угловых наблюдаемых для распада $B \rightarrow \omega l^+ l^-$

Наблюдаемые	$\langle A_{FB} \rangle$	$\langle F_L \rangle$	$\langle F_T \rangle$	$\langle P_1 \rangle$	$\langle P_3 \rangle \times 10^4$	$\langle P'_4 \rangle$	$\langle P'_5 \rangle$	$\langle P'_8 \rangle$
$e^+ e^-$	-0.184	0.415	0.566	-0.322	0.526	0.768	-0.388	290.5
$\mu^+ \mu^-$	-0.229	0.501	0.465	-0.486	2.498	1.017	-0.537	255.9
$\tau^+ \tau^-$	-0.203	0.111	0.218	-0.706	17.584	1.304	-0.970	-44.7

Заклучение

В рамках проведенного исследования была изучена динамика переходов $B \rightarrow \omega l^+ l^-$ в контексте ковариантной модели кварков (CCQM). Основное внимание уделено вычислению форм-факторов для данного канала во всем динамическом диапазоне переданного импульса q^2 . Используя эти форм-факторы, были рассчитаны брэнчинги, а также угловые наблюдаемые, такие как отношение вероятности распада для различных лептонов, асимметрия «вперёд-назад» (A_{FB}), и продольная поляризация векторного мезона ω .

Результаты расчетов показывают хорошее согласие с существующими теоретическими

предсказаниями и подтверждают применимость ковариантной модели кварков для описания таких сложных процессов, как переходы с изменением аромата. Эти процессы играют ключевую роль в проверке Стандартной модели и могут предоставить важную информацию о возможных проявлениях новой физики, таких как нарушение лептонной универсальности или появление новых взаимодействий.

Благодарность

Работа выполнена в рамках проекта (грант №BR21881941) при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

- 1 Aaij R. et al. Measurement of Form-Factor-Independent Observables in the Decay // Phys. Rev. Lett. – 2013. – Vol.111. – Art.No. 191801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.191801
- 2 Aaij R. et al. Measurement of Observables in the Decay // JHEP. – 2017. – Vol.08. – P.055. DOI: 10.1007/JHEP08(2017)055
- 3 Aaij R. et al. Measurement of Angular Distributions in the Decay // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Vol.113. – Art. No. 151601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.151601
- 4 Huschle M. et al. Measurement of Form-Factor Parameters in Semileptonic Decays // Phys. Rev. D. – 2015. – Vol.92(7). – Art. No. 072014. DOI: 10.1103/PhysRevD.92.072014
- 5 Sato Y. et al. Branching Fraction and CP Asymmetry in Decays // Phys. Rev. D. – 2016. – Vol.94(7). – Art. No. 072007. DOI: 10.1103/PhysRevD.94.072007
- 6 Aaij R. et al. Evidence for New Physics in Angular Observables // Phys. Rev. Lett. – 2015. – Vol.115(11). – Art. No. 111803. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.111803. [Erratum: Phys. Rev. Lett. – 2015. – Vol.115. – Art. No. 159901.]
- 7 Hurth T., Nakao M. Theory of Rare Decays and New Physics // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. – 2010. – Vol.60. – P. 104424. DOI: 10.1146/annurev.nucl.012809.104424
- 8 Blake T. et al. Phenomenology of Rare Decays // Prog. Part. Nucl. Phys. – 2017. – Vol.92. – P. 50-91. DOI: 10.1016/j.ppnp.2016.10.001
- 9 Wu Y.L. et al. Physics Beyond the Standard Model in Decays // Int. J. Mod. Phys. A. – 2006. – Vol.21. – P. 6125-6172. DOI: 10.1142/S0217751X06033209
- 10 Ball P., Zwicky R. Analysis of Decay Amplitudes in Rare Decays // Phys. Rev. D. – 2005. – Vol.71. – Art. No. 014029. DOI: 10.1103/PhysRevD.71.014029
- 11 Bharucha A. et al. Theoretical Insights into Decay Channels // JHEP. – 2016. – Vol.1608. – Art. No. 098. DOI: 10.1007/JHEP08(2016)098
- 12 Lu C.D. et al. Theoretical Predictions for Decays // Phys. Rev. D. – 2007. – Vol.76. – Art. No. 014013. DOI: 10.1103/PhysRevD.76.014013
- 13 Verma R. Hadronic Form Factors in Decays // J. Phys. G. – 2012. – Vol.39. – Art. No. 025005. DOI: 10.1088/0954-3899/39/2/025005
- 14 Efimov G.V., Ivanov M.A. The Quark Confinement Model of Hadrons. – Bristol: IOP, 1993. – 179 p.
- 15 Branz T. et al. Decay Dynamics in Heavy Meson Decays // Phys. Rev. D. – 2010. – Vol.81. – Art. No. 034010. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.034010
- 16 Ivanov M.A. et al. Study of Semileptonic Decays // Phys. Rev. D. – 2012. – Vol.85. – Art. No. 034004. DOI: 10.1103/PhysRevD.85.034004
- 17 Ivanov M.A. et al. Analysis of Transition Form Factors // Phys. Rev. D. – 2012. – Vol.86. – Art. No. 074013. DOI: 10.1103/PhysRevD.86.074013
- 18 Buras A.J., Munz M. Effective Hamiltonians in Rare Decays // Phys. Rev. D. – 1995. – Vol.52. – P. 186. DOI: 10.1103/PhysRevD.52.186
- 19 Kruger F., Sehgal L. Angular Distributions in Rare Decays // Phys. Rev. D. – 1997. – Vol.55. – P. 2799. DOI: 10.1103/PhysRevD.55.2799
- 20 Buchalla G. et al. Standard Model Predictions for Rare Decays // Rev. Mod. Phys. – 1996. – Vol.68. – P. 1125. DOI: 10.1103/RevModPhys.68.1125
- 21 Faessler A. et al. Study of Exotic Hadron Decays // Eur. Phys. J. Direct. – 2002. – Vol.4(18). DOI: 10.1007/s1010502c0018

- 22 Aaij R. et al. Experimental Results in Angular Observables // JHEP. – 2016. – Vol.02. – Art. No. 104. DOI: 10.1007/JHEP02(2016)104
- 23 Aaij R. et al. Updated Measurements of Observables // Phys. Rev. Lett. – 2020. – Vol.125(1). – Art. No. 011802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.011802
- 24 Dubnicka S. et al. Hadronic Transition Form Factors // Few Body Syst. – 2016. – Vol.57(2). – P. 121. DOI: 10.1007/s00601-015-1034-4
- 25 Descotes-Genon S. et al. Phenomenological Constraints on Rare Decays // JHEP. – 2013. – Vol.01. – Art. No. 048. DOI: 10.1007/JHEP01(2013)048
- 26 Wirbel M. et al. Quark Models and Decay Amplitudes // Z. Phys. C. – 1985. – Vol.29. – P. 637. DOI: 10.1007/BF01560299

References

- 1 R. Aaij et al., Phys. Rev. Lett., 111, 191801 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.191801
- 2 R. Aaij et al., JHEP 08, 055 (2017). DOI: 10.1007/JHEP08(2017)055
- 3 R. Aaij et al., Phys. Rev. Lett. 113, 151601 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.151601
- 4 M. Huschle et al., Phys. Rev. D 92, 072014 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevD.92.072014
- 5 Y. Sato et al., Phys. Rev. D 94, 072007 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevD.94.072007
- 6 R. Aaij et al., Phys. Rev. Lett. 115, 111803 (2015); Erratum Phys. Rev. Lett. 115, 159901 (2015) DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.111803
- 7 T. Hurth and M. Nakao, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 60, 104424 (2010). DOI: 10.1146/annurev.nucl.012809.104424
- 8 T. Blake et al., Prog. Part. Nucl. Phys. 92, 50-91 (2017). DOI: 10.1016/j.pnpnp.2016.10.001
- 9 Y. L. Wu et al., Int. J. Mod. Phys. A 21, 6125-6172 (2006). DOI: 10.1142/S0217751X06033209
- 10 P. Ball and R. Zwicky, Phys. Rev. D 71, 014029 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevD.71.014029
- 11 A. Bharucha et al., JHEP 08, 098 (2016). DOI: 10.1007/JHEP08(2016)098
- 12 C. D. Lu et al., Phys. Rev. D 76, 014013 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevD.76.014013
- 13 R. Verma, J. Phys. G 39, 025005 (2012). DOI: 10.1088/0954-3899/39/2/025005
- 14 G. V. Efimov and M. A. Ivanov, The Quark Confinement Model of Hadrons (IOP, Bristol, 1993), 179 p.
- 15 T. Branz et al., Phys. Rev. D 81, 034010 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevD.81.034010
- 16 M. A. Ivanov et al., Phys. Rev. D 85, 034004 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevD.85.034004
- 17 M. A. Ivanov et al., Phys. Rev. D 86, 074013 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevD.86.074013
- 18 A. J. Buras and M. Munz, Phys. Rev. D 52, 186 (1995). DOI: 10.1103/PhysRevD.52.186
- 19 F. Kruger and L. Sehgal, Phys. Rev. D 55, 2799 (1997). DOI: 10.1103/PhysRevD.55.2799
- 20 G. Buchalla et al., Rev. Mod. Phys. 68, 1125 (1996). DOI: 10.1103/RevModPhys.68.1125
- 21 A. Faessler et al., Eur. Phys. J. Direct. 4, 18 (2002). DOI: 10.1007/s1010502c0018
- 22 R. Aaij et al., JHEP 02, 104 (2016). DOI: 10.1007/JHEP02(2016)104
- 23 R. Aaij et al., Phys. Rev. Lett. 125, 011802 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.011802
- 24 S. Dubnicka et al., Few Body Syst. 57, 121 (2016). DOI: 10.1007/s00601-015-1034-4
- 25 S. Descotes-Genon et al., JHEP 01, 048 (2013). DOI: 10.1007/JHEP01(2013)048
- 26 M. Wirbel et al., Z. Phys. C 29, 637 (1985). DOI: 10.1007/BF01560299

Article history:

Received 20 August 2024

Received in revised form 28 August 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 20.08.2024

Түзетілген түрде түсті – 28.08.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Mukhammedkhanafiya Ilyassov** – Bachelor of Science, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: vifi5960@gmail.com

2. **Aidos Issadykov** (corresponding author) – PhD, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; Joint institute for nuclear research, Dubna, Russia; e-mail: a.issadykov@inp.kz

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Мұхаммедханафия Ильясов** – жаратылыстану ғылымдарының бакалавры, Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: vifi5960@gmail.com

2. **Айдос Исадыков** (автор корреспондент) – PhD, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан; Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна қ., Ресей; e-mail: a.issadykov@inp.kz

МРНТИ 29.15.19., 29.15.35., 29.15.53

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a2>А.Е. Бактораз^{1*} , Е.С. Мухамеджанов^{1,2} , Д.Е. Мыктыбеков^{1,2} , Ф.Г. Данкенова¹ ¹Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан²Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия*e-mail: a_baktoraz@mail.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ОБРАБОТКА И АНАЛИЗ ПОТОКА НЕЙТРОНОВ В ГОРИЗОНТАЛЬНОМ КАНАЛЕ КРИТИЧЕСКОГО СТЕНДА РЕАКТОРА ВВР-К

В статье рассматривается процесс моделирования и регистрации потоков нейтронов в горизонтальном канале критического стенда реактора ВВР - К. Основное внимание уделено использованию детекторов нейтронов, таких как CHM - 18 и сцинтилляционный детектор на основе ортокарборана. В ходе работы применялись методы моделирования с использованием программного пакета GEANT4, что позволило изучить взаимодействие нейтронов с различными замедлителями, включая полиэтилен и боросодержащий полиэтилен, а также без них.

Проведенные исследования включали разработку и тестирование методик регистрации потоков нейтронов в разных режимах работы критического стенда. Использование сцинтилляторов с добавлением ортокарборана обеспечило высокую чувствительность детекторов, что позволяет регистрировать нейтронные потоки с высокой точностью. Кроме того, данные, полученные при моделировании и экспериментальной работе, были обработаны с использованием современных инструментов анализа, таких как ROOT.

Полученные результаты способствуют дальнейшему развитию технологий в области нейтронных измерений, ядерной физики и радиационной безопасности. Эти подходы могут быть использованы для совершенствования методов регистрации нейтронов, что имеет большое значение как для научных исследований, так и для промышленных применений.

Ключевые слова: нейтронные детекторы, GEANT4, замедлители нейтронов, сцинтилляционные детекторы, реактор ВВР-К.

Ә.Е. Бақтораз^{1*}, Е.С. Мұхамеджанов^{1,2}, Д.Е. Мықтыбеков^{1,2}, Ф.Г. Данкенова¹¹Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан²Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна қ., Ресей*e-mail: a_baktoraz@mail.ru

ССР-Қ реакторының критикалық стендінің көлденең арнасындағы нейтрондар ағынын модельдеу, өңдеу және талдау

Мақалада ССР-Қ реакторының критикалық стендінің көлденең арнасындағы нейтрон ағындарын модельдеу және тіркеу үдерісі қарастырылады. Негізгі назар нейтрон детекторлары, соның ішінде CHM - 18 және орто-карборан негізіндегі сцинтилляциялық детекторды қолдануға аударылған. Жұмыста GEANT4 бағдарламалық пакетін пайдалану арқылы модельдеу әдістері қолданылып, нейтрондардың полиэтилен, бор қосылған полиэтилен сияқты әртүрлі баяулатқыштармен және баяулатқышсыз өзара әрекеттесуі егжей-тегжейлі зерттелді.

Зерттеулерде критикалық стендтің әртүрлі жұмыс режимдерінде нейтрон ағындарын тіркеу әдістерін әзірлеу және сынақтан өткізу жүргізілді. Орто-карборан қоспасы бар сцинтилляторларды пайдалану детекторлардың жоғары сезімталдығын қамтамасыз етіп, нейтрон ағындарын дәл тіркеуге мүмкіндік берді. Сонымен қатар, модельдеу және тәжірибелік зерттеулерден алынған деректер ROOT (Еуропалық ядролық зерттеулер орталығында әзірленген объектіге бағытталған бағдарламалар мен кітапханалар пакеті) сияқты заманауи талдау құралдарын пайдалана отырып өңделді.

Алынған нәтижелер нейтронды өлшеу, ядролық физика және радиациялық қауіпсіздік саласындағы технологияларды одан әрі дамытуға ықпал етеді. Бұл тәсілдер нейтрондарды тіркеу әдістерін жетілдіруге қолданылып, ғылыми зерттеулер мен өндірістік қолданбалар үшін маңызды рөл атқарады.

Түйін сөздер: нейтрондық детекторлар, GEANT4, нейтрон баяулатқыштары, сцинтилляциялық детекторлар, ССР-Қ реакторы.

A.Y. Baktoraz^{1*}, Y.S. Mukhamejanov^{1,2}, D.Y. Myktybekov^{1,2}, F.G. Dankenova¹

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

*e-mail: a_baktoraz@mail.ru

Modeling, processing, and analysis of neutron flux in the horizontal channel of the critical experimental reactor facility of the WWR-K reactor

The article examines the process of modeling and registering neutron flux in the horizontal channel of the critical experimental reactor facility of the WWR-K reactor. The focus is on the use of neutron detectors, such as the SNM-18 and a scintillation detector based on ortho-carborane. The work employed modeling methods using the GEANT4 software package, enabling a detailed study of neutron interactions with various moderators, including polyethylene, boron-containing polyethylene, and configurations without moderators.

The research involved the development and testing of methodologies for registering neutron fluxes in different operating modes of the critical assembly. The use of scintillators with ortho-carborane additives provided high sensitivity, allowing for accurate neutron flux registration. Furthermore, the data obtained from modeling and experimental studies were processed using modern analysis tools such as ROOT.

The results contribute to the advancement of technologies in neutron measurements, nuclear physics, and radiation safety. These approaches can be applied to improve neutron detection methods, which are important for both scientific research and industrial applications.

Keywords: neutron detectors, GEANT4, neutron moderators, scintillation detectors, WWR-K reactor.

Введение

Атомные реакторы широко применяются в таких сферах, как ядерная энергетика, медицина (например, в радиотерапии) и исследования новых материалов, предоставляя значительные энергетические ресурсы и научные возможности. Однако при их эксплуатации образуются нейтроны, которые могут оказывать влияние на окружающую среду [1-9].

Измерение нейтронного потока играет ключевую роль в ядерной физике и энергетике. Такие измерения помогают глубже понять и контролировать процессы деления атомных ядер, а также использовать эти данные в научных и промышленных целях [10-12]. Для проведения таких измерений применяются нейтронные счетчики, такие как СНМ-18 [13-15], ортокаборановые сцинтилляционные детекторы и критический стенд. Эти инструменты позволяют лучше изучить физические процессы, происходящие при взаимодействии нейтронов с ядрами и окружающими материалами. Поскольку один счетчик не всегда может предоставить полную картину потока нейтронов, их размещают в разных точках. Это помогает собрать инфор-

мацию о потоке нейтронов с разных углов и направлений, что важно для более точного анализа их характеристик [16].

Методика и методы исследования

Geant4 представляет собой программный пакет, включающий инструменты для точного моделирования взаимодействия частиц с веществом [17-19]. Поддерживаемые физические процессы охватывают широкий спектр, включая электромагнитные, адронные и оптические взаимодействия, а также многочисленные частицы, материалы и элементы с энергиями от 250 эВ до нескольких ТэВ. Моделирование с использованием Geant4 начинается с разработки плана эксперимента и анализа основных характеристик экспериментальной части. На следующем этапе создается программа на языке C++, с применением библиотек Geant4. После компиляции программы выполняется расчет и анализ результатов. По мере необходимости вносятся изменения в программу, и процесс продолжается до получения удовлетворительных данных.

Для оценки эффективности регистрации тепловых нейтронов необходимо провести моделирование нейтронных детекторов с использованием программного пакета GEANT4. В качестве детекторов использовались СНМ-18, установленный внутри полиэтиленового замедлителя в бетонном помещении исследовательского реактора ВВР-К, и газонаполненный детектор straw на основе фторида бора.

Моделирование нейтронного источника с энергетическим спектром типа $\text{PuBe}(\alpha, n)$ и интенсивностью $1.8 \cdot 10^6$ н/с было выполнено с применением общеимперического подхода, как представлено на рисунке 1.

Моделирование процессов взаимодействий нейтронов с веществом и характеристик счетчиков СНМ-18 и газоразрядных трубок было выполнено в программном пакете GEANT4 [20, 21] (рисунок 2). Регистрация тепловых нейтронов производится за счет взаимодействия активного вещества ^{10}B и ^3He , где при взаимодействии

тепловых нейтронов проходят реакции по основным каналам:

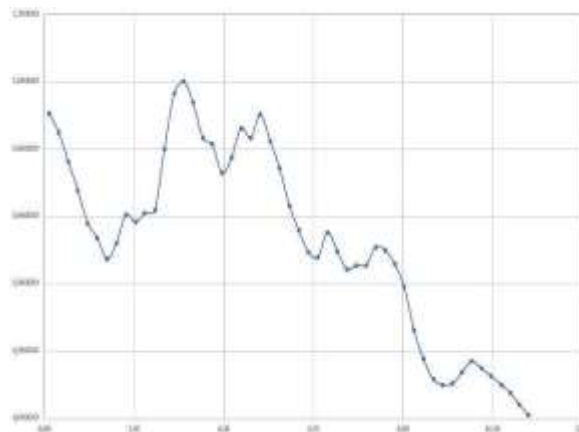
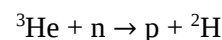
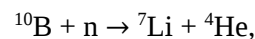


Рисунок 1 – Спектр нейтронов от плутоний-бериллиевого источника

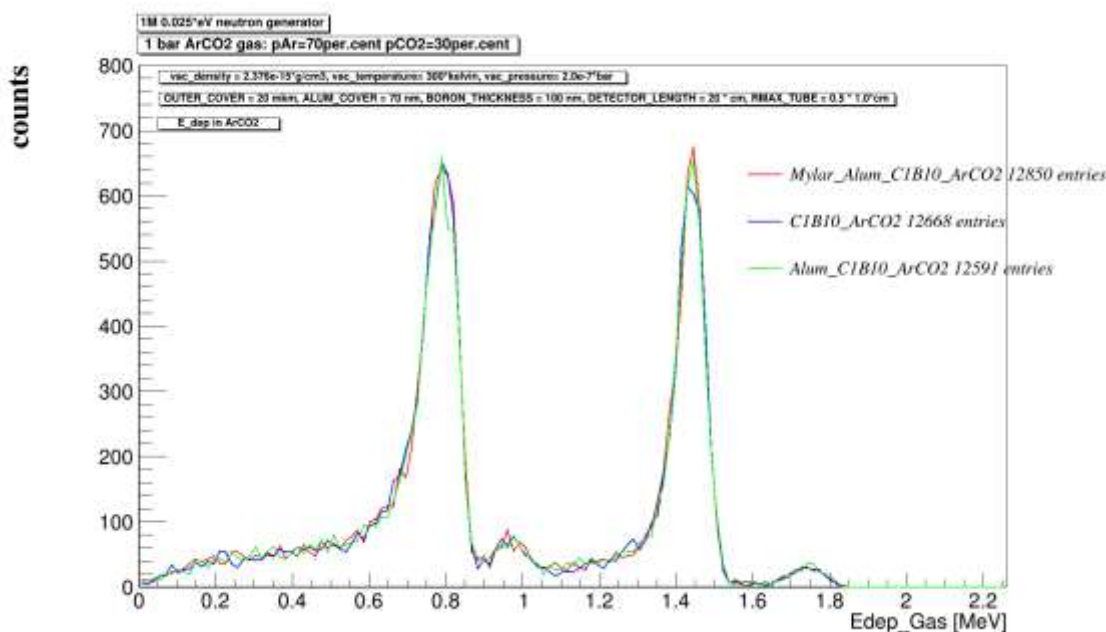


Рисунок 2 – Спектр регистрации нейтронов от плутоний-бериллиевого источника, смоделированный с помощью борсодержащего счетчика в GEANT4

Экспериментальная часть

Разработана и отработана методика регистрации потоков нейтронов в горизонтальном канале критического стенда реактора ВВР-К в Институте ядерной физики г. Алматы. В качестве счетчика используется нейтронный счетчик СНМ-18 и ортокарборановый сцинтилляционный детектор [22], в котором для повышения эффективности счета нейтронов разобраны и отпаяны контактные

элементы. Применяются три методики регистрации тепловых нейтронов с использованием трех счетчиков СНМ-18: один из счетчиков установлен в блоке из полиэтилена, который служит замедлителем и отражателем, второй помещен в блок из борполиэтилена, выполняющего функцию замедлителя, третий используется без какого-либо блока замедлителя или отражателя. Счетчики размещены в нескольких ключевых локациях. Размещение счетчиков над КС позволяет измерять

интенсивность нейтронного потока, выходящего из активной зоны КС в верхнем направлении. Это важно для понимания процессов ядерного деления и взаимодействия, происходящих в активной зоне, и их влияния на выходящие нейтроны. Расположение счетчиков под КС направлено на измерение нейтронов, прошедших через нижний слой активной зоны, что позволяет оценить, сколько нейтронов доходит до нижних уровней КС и имеет значение для оценки безопасности и эффективности работы стенда.

На рисунке 3 представлено сравнение результатов измерений, проведенных с использованием трех различных замедлителей. Как видно из рисунка, счетчик, размещенный в полиэтилене, демонстрирует высокий счет, поскольку в нем нейтроны замедляются до тепловой энергии из активной зоны. В борополиэтилене, из-за поглощения нейтронов бором, счет значительно ниже, а скорость счета потока нейтронов без замедлителя или отражателя примерно на 1,2 раза меньше.

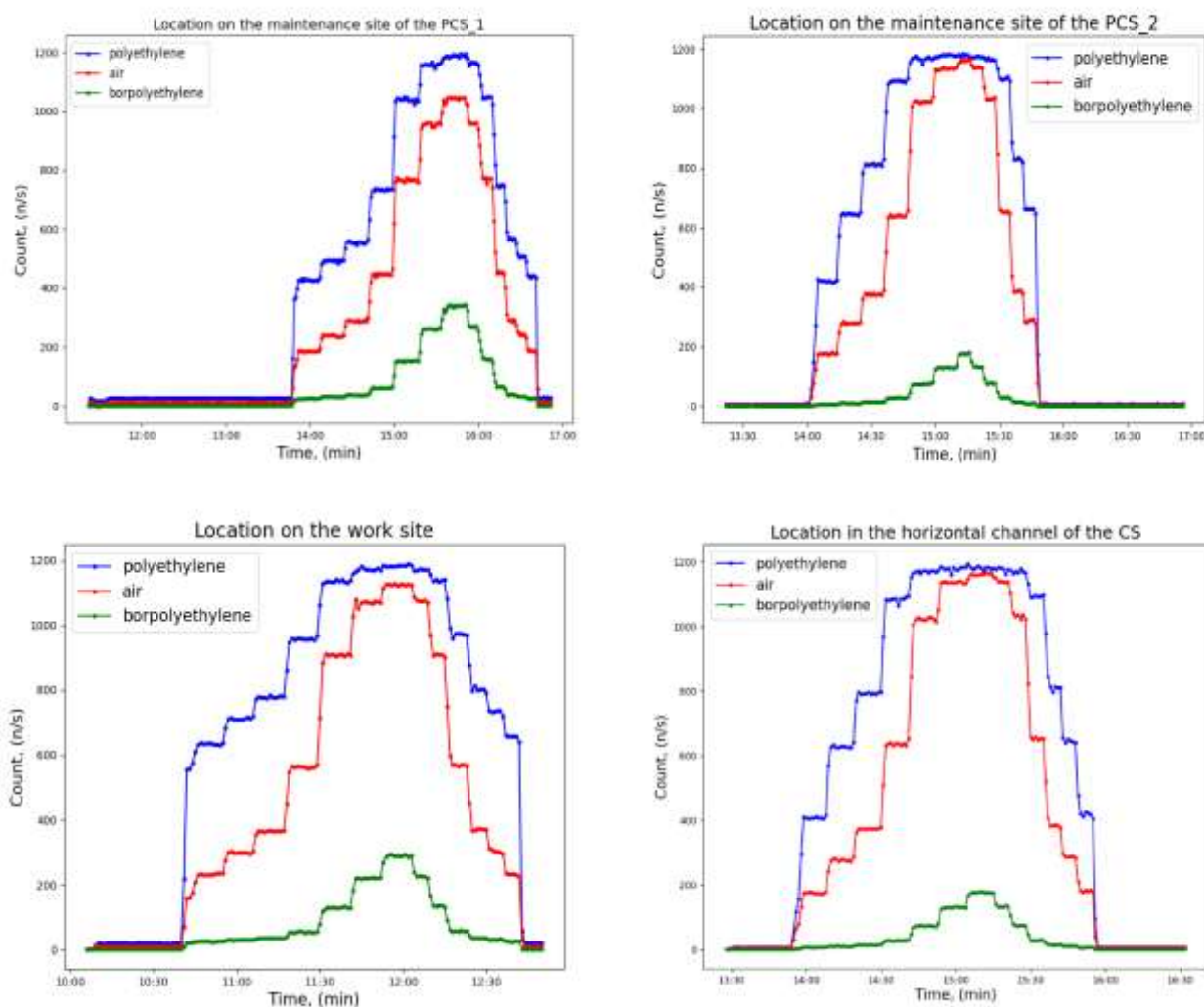


Рисунок 3 – Динамика потока нейтронов во времени (СНМ-18)

На рисунках 4, 5 и 6 показана зависимость скорости счета от мощности по данным аппаратуры контроля нейтронного потока (АКНП) для трех конфигураций счетчиков: без замедлителя (рисунок 4), с борным замедлителем (рисунок 5) и с полиэтиленовым замедлителем (рисунок 6). Данные обработаны с исполь-

зованием инструмента ROOT, и проведено фитирование по функции распределения Ландау. Эта функция имеет вид, схожий с распределением Гаусса, но с характерным "хвостом" вправо. В результате фитирования были получены значения параметров функции Ландау, такие как хи-квадрат и сигма для каждой конфигурации.

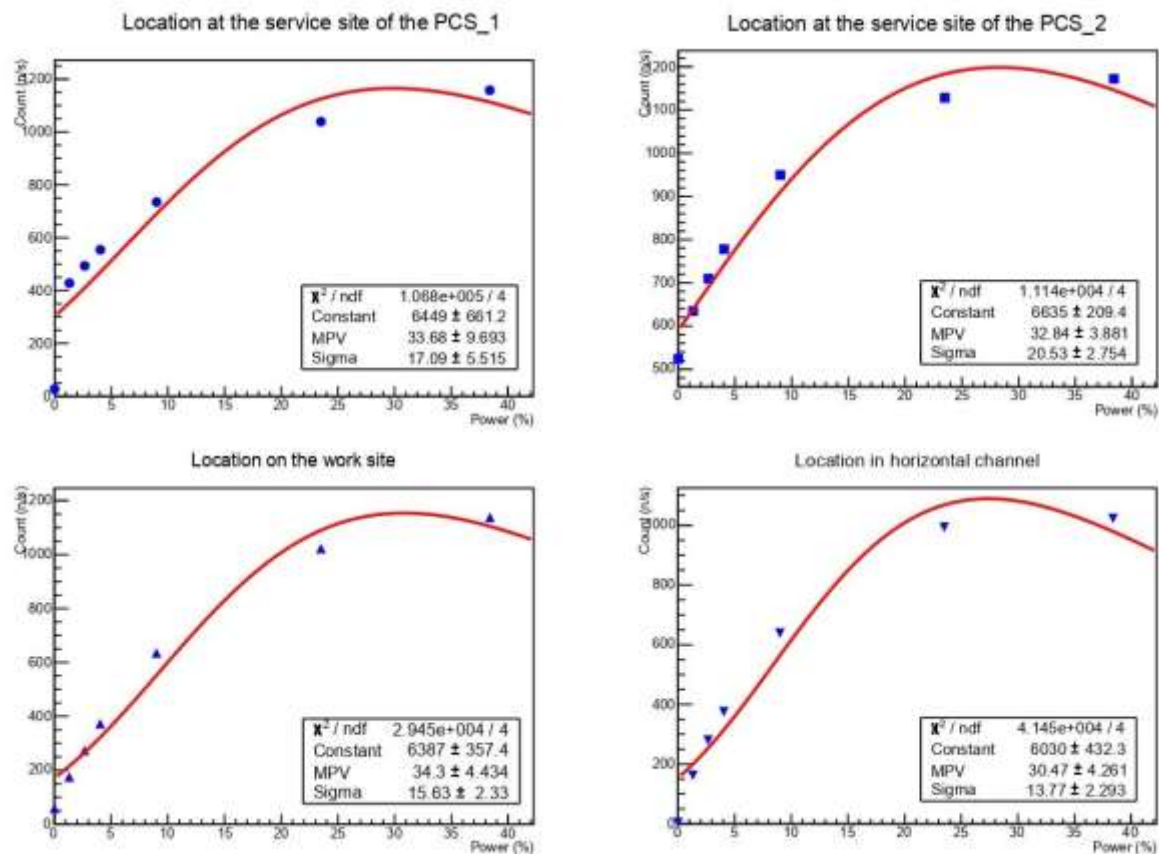


Рисунок 4 – Зависимость скорости счета от мощности по АКНП без замедлителя/отражателя

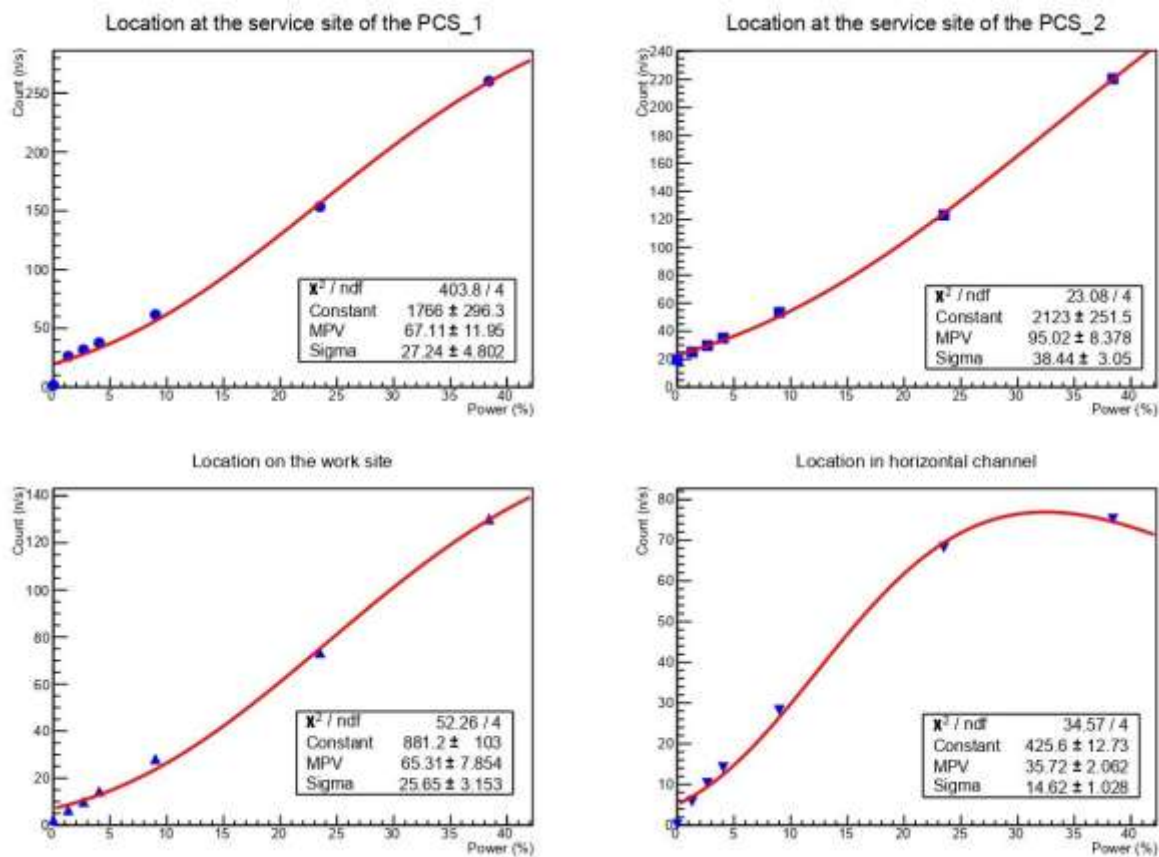


Рисунок 5 – Зависимость скорости счета от мощности по АКНП блока из борополиэтилена

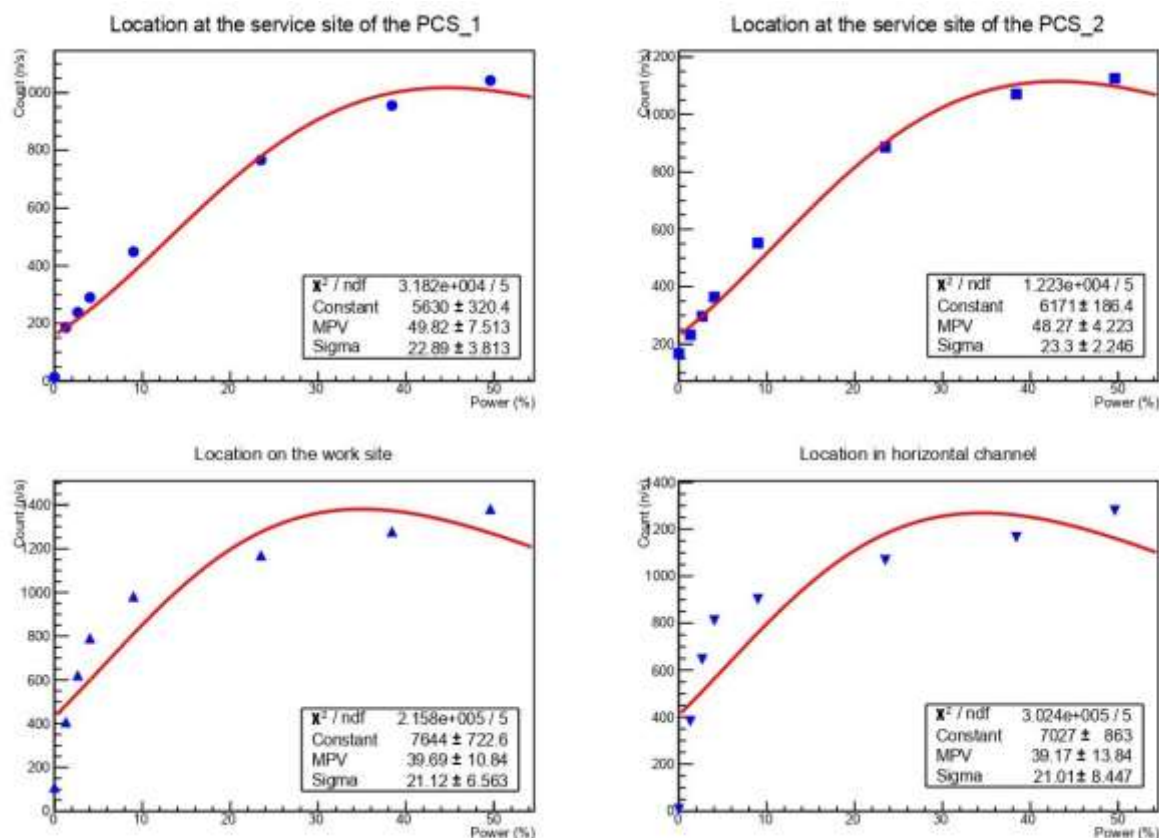


Рисунок 6 – Зависимость скорости счета от мощности по АКНП блока из полиэтилена

Быстродействующие сцинтилляционные детекторы на основе ортокарборана были установлены в различных позициях: на площадке обслуживания СУЗ, на рабочей площадке, в горизонтальном канале КС и в коридоре рядом с аварийным выходом. На рисунках показаны изменения нейтронного поля в разных точках наблюдения (рисунок 7). Сцинтиллятор с добавкой ортокарборана продемонстрировал высокую чувствительность как при высоких, так и при низких уровнях нейтронного поля. Графики полученных данных показывают, что импульсы, зарегистрированные сцинтиллятором с ортокарбораном, хорошо коррелируют с интенсивностью нейтронных потоков в зависимости от пространственного распределения детекторов.

Заключение

В заключение проведены эксперименты по регистрации и моделированию потоков нейтронов в горизонтальном канале критического стенда реактора ВВР-К с использованием нейтронных счетчиков большой площади. Интенсивности потоков нейтронов от критического стенда измерялись с помощью счетчика СНМ-18, при этом были разработаны программные приложения для обработки данных на основе Python, а также исследовалась

корреляция между значениями атмосферного давления и числом счетов. Результаты измерений продемонстрировали явный отклик счетчиков как на режим работы реактора, так и на среду-замедлитель, в которую они помещались. Численные результаты измерений на критическом стенде можно считать физически обоснованными. Фоновый счет нейтронов во всех счетчиках, включая полиэтиленовый и боросодержащий, а также без замедлителя, не превышал 1 имп/с. В то же время счет от критического стенда в запущенном режиме показывал, что счет в полиэтилене превышал счет без замедлителя примерно в 4 раза, а в боросодержащем полиэтилене — в 20 раз.

Внедрение сцинтилляторов с ортокарборановой добавкой позволило добиться высокой чувствительности как при высоких, так и при низких интенсивностях нейтронного потока. Полученные данные подтверждают, что регистрируемые импульсы сцинтиллятора хорошо коррелируют с интенсивностью нейтронных потоков и зависят от пространственного распределения детекторов.

Эти результаты открывают широкие перспективы для дальнейших исследований в области нейтронных измерений, ядерной физики и радиационной безопасности.

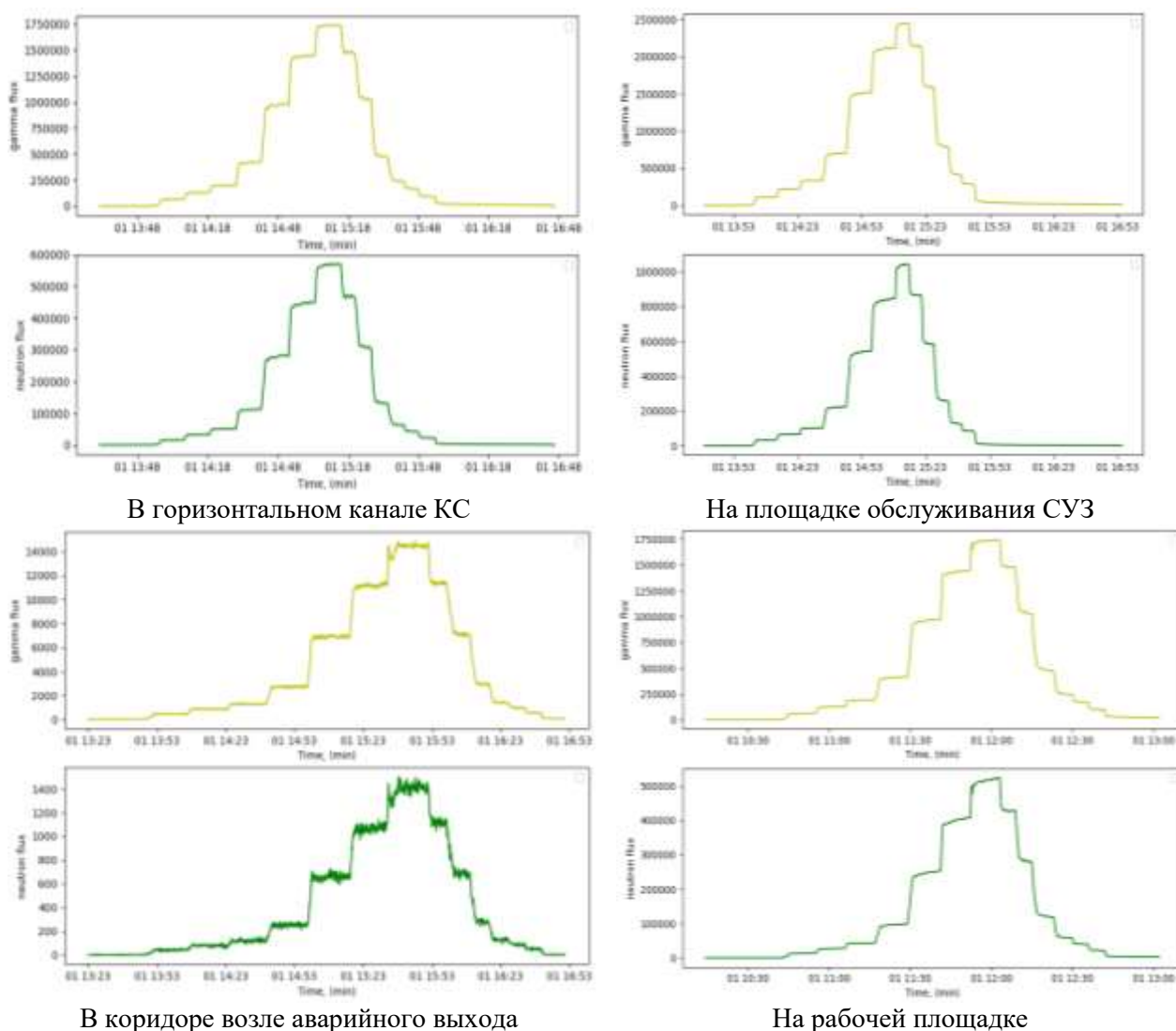


Рисунок 7 – Зависимость нейтронного поля в разных режимах работы КС

Благодарность

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант №

BR21881930 «Реакторные исследования, направленные на обеспечение безопасной и эффективной эксплуатации перспективных ядерных и термоядерных энергетических установок»).

Литература

- Оскомов В.В., Седов А.Н., Садуев Н.О., Каликулов О.А., Мендибаев К.О., Жумабаев А.И., Мухамеджанов Е.С., Исаков Б.А., Байгарашев Д.М., Таутаев Е.М., Кенжина И.Е. Микромощные узлы радиоэлектронного тракта нейтронного детектора // Известия НАН РК, Серия физико-математическая. – 2014. – 2(294). – С.69-73.
- Мухамеджанов Е.С., Каликулов О.А., Шинбулатов С.К., Жумабаев А.И., Утей Ш.Б., Ережел Н.О., Седов А.Н., Сәрсенбай У.С., Бактораз А.Е., Садуев Н.О. Разработка методики и аппаратуры для измерения плотности потока нейтронов от реактора ВВР-К // Вестник КазНУ. Серия физическая. – 2020. – Т. 75, №4. – С. 96–101. DOI: 10.26577/RCPH.2020.v75.i4.10
- Коломеев Е.В., Фридман Ш.Д., Абеленцев В.В., Айтбаев Ф.Б., Воробьев А.А., Ефимов В.В., Оскомов В.В., Пфедфер Р.Г.-Э., Седов А.Н., Стельников Н.В. Разработка способа и автоматической системы по определению влагозапаса в снеге и влажности почв по космическим лучам. – Алматы. – 1986. – 121 с.
- Филиппов М.В., Махмутов В.С., Стожков Ю.И., Максумов О.С., Raulin J.-P., Tacza J. Наземная установка для детектирования нейтральной компоненты космических лучей “Нейтронный детектор” // Приборы и техника эксперимента. – 2020. – № 5. – С. 96–103. DOI: 10.31857/S00328162220050298

- 5 Стенькин Ю.В., Алексеенко В.В., Громушкин Д.М., Сулаков В.П., Щеголев О.Б. Подземная физика и эффект влияния барометрического давления на подземный фоновый поток тепловых нейтронов // ЖЭТФ. – 2017. – Т.151, №5. – С. 845–849.
- 6 Шаймерденов А.А., Гизатулин Ш.Х., Накипов Д.А., Кенжин Е.А., Чихрай Е.В., Заурбекова Ж.А., Толенова А.У., Нестеров Е.А., Кизанэ Г. Экспериментальная база реактора ВВР-К для исследования выхода трития из материалов при их облучении // Вестник НЯЦ РК. – 2020. – Вып.1. – С.104-110. DOI: 10.52676/1729-7885-2020-1-104-111
- 7 Shaimerdenov A.A., Nakipov D.A., Arinkin F.M., Gizatulin Sh.Kh., Chakrov P.V., and Kenzhin Ye.A. The 50 Anniversary of the WWR-K Research Reactor // Physics of Atomic Nuclei. – 2018. – Vol. 81. – P.1408-1411. DOI: 10.1134/S1063778818100162
- 8 Brovchenko M. and et al. Neutron-gamma flux and dose calculations in a Pressurized Water Reactor (PWR) // EPJ Web of Conferences. – 2017. – Vol.153. – Art.No 05008. DOI: 10.1051/epjconf/201715305008
- 9 Brovchenko M., Duhamel I., Dechenaux B. Neutron-gamma flux and dose calculations for feasibility study of DISCOMS instrumentation in case of severe accident in a GEN 3 reactor // EPJ Web of Conferences. – 2017. – Vol.153. – Art.No 07030. DOI: 10.1051/epjconf/20171530
- 10 Van der Ende B.M., Li L., Godin D., Sur B. Stand-off nuclear reactor monitoring with neutron detectors for safeguards and non-proliferation applications // Nature Communications. – 2019. – Vol. 10. – Art.No 1959. DOI: [0.1038/s41467-019-09967-4](https://doi.org/10.1038/s41467-019-09967-4)
- 11 Raj P., Angelone M., Fischer U., Klix A. Computational study of a chromium self-powered detector for neutron flux monitoring in the test blanket module of ITER // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A. – 2018. – Vol. 908. – P.10–17.
- 12 Klix A., Angelone M., Fischer U., Gehre D., Ghidersa B., Lyoussi A., Raj P., Reimann Th., Szalkai D., and Tian K. Neutron Measurement Instrumentation Development at KIT for the European ITER TBM // IEEE. – 2015. – Vol. 47. – P.8. DOI: 10.1109/ANIMMA.2015.7465635
- 13 Филиппов М. В., Махмутов В. С., Стожков Ю. И., Ролан Ж.-П., Калинин Е. В. Исследование вариаций потоков нейтронов с помощью наземного нейтронного детектора // Известия РАН. Серия физическая. – 2019. – Т. 83, № 5. – С. 670–672.
- 14 Мұхаметқалиұлы Ә. Методика измерения потоков тепловых нейтронов с помощью детектора СНМ-18 для прикладных задач // Международная конференция студентов и молодых учёных «ФАРАБИ ӘЛЕМІ». – Алматы, 2022. – С. 151.
- 15 Алейников В.Е., Архипов В.А., Бескровная Л.Г., Тимошенко Г.Н. Сравнительные исследования характеристик газоразрядных детекторов нейтронов при работе в полях с высокими уровнями гамма-излучения // Препринт ОИЯИ, Дубна. –1997. –№ 16. – Р.97-158.
- 16 Шаймерденов А.А., Аринкин Ф.М., Гизатулин Ш.Х., Дюсамбаев Д.С., Колточник С.Н., Чакров П.В., Чекушина Л.В., Шаманин И.В. Пуск и нейтронно-физические характеристики критического стенда РГП «Институт ядерной физики» РК с низкообогащенной активной зоной // Альтернативная энергетика и экология. – 2015. – №23 (187). – С. 51-59.
- 17 Basaglia T., Bell Z.W., Dressendorfer P., Larkin A., and Pia M.G. Writing Software or Writing Scientific Articles? // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 2008. – Vзд. 55. – No. 2. – P. 671-678.
- 18 Allison J., and et al. Geant4 Developments and Applications // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 2006. – Vol. 53. – No. 1. – P. 270-278.
- 19 Тертышников А.В. Модель приземного нейтронного фона в Кабардино-Балкарии и на южном склоне Эльбруса в июне 2014 г. // Гелиогеофизические исследования. – 2015. – №13. – С. 42-48.
- 20 Филиппов М. В., Стожков Ю. И., Махмутов В. С., Максумов О. С., Викторов С. В., А. Н. Квашнин, Квашнин А. А. Разработка компактного наземного нейтронного детектора // Известия РАН. Серия физическая. – 2015. – Т. 79, № 5. – С. 753–756.
- 21 Шинбулатов С.К., Садуев Н.О., Каликулов О.А. и др. Разработка метода и оборудования для измерения потока нейтронов от исследовательского реактора // Recent Contributions to Physics. – 2023. –N2(85). – С.23-28.
- 22 Кузнецов С.П., Мешков И.В., Поташев С.И., Бурмистров Ю.М., Караевский С.Х. Анализ данных, измеренных с помощью детектора нейтронов на основе бора-10 и счетчика с гелием-3 на фотонейтронном источнике нейтронов ИЯИ РАН // Известия РАН. Серия физическая. – 2018. – Т. 82, № 6. – С. 808–810.

References

- 1 V.V. Oskomov, A.N. Sedov, N.O. Saduev, O.A. Kalikulov, K.O. Mendibaev, A.I. Zhumabaev, E.S. Mukhamedzhanov, B. . Iskakov, D.M. Baigarashev, E.M. Tautaev, I.E. Kenzhina, Izvestiya NAN RK, Seriya Fiziko-Matematicheskaya 2(294), 69–73 (2014) (In Russ).
- 2 E.S. Mukhamedzhanov, O.A. Kalikulov, S.K. Shinbulatov, A.I. Zhumabaev, Sh.B. Utei, N.O. Yerezhep, A.N. Sedov, U.S. Sarsenbai, A.E. Bakhtoraz, N.O. Saduev, Recent Contributions to Physics, 75(4), 96–101 (2020) (In Russ). DOI: 10.26577/RCPH.2020.v75.i4.10
- 3 E.V. Kolomeets, Sh.D. Fridman, V.V. Abelentsev, F.B. Aytbaev, A.A. Vorobyev, V.V. Efimov, V.V. Oskomov, R G.-E. Pfeffer, A.N. Sedov, N.V. Stelnnikov, Development of a method and automatic system for determining moisture content in snow and soil moisture using cosmic rays Almaty, 121 p. (1986) (In Russ).

- 4 M.V. Filippov, V.S. Makhmutov, Yu.I. Stozhkov, O.S. Maksumov, J.-P. Raulin, J. Tacza, Pribory i Tekhnika Eksperimenta 5, 96–103 (2020) (In Russ). DOI: 10.31857/S0032816220050298
- 5 Yu.V. Stenkin, V.V. Alekseenko, D.M. Gromushkin, V.P. Sulakov, O.B. Shchegolev, ZhETF 151(5), 845–849 (2017) (In Russ).
- 6 A.A. Shaimerdenov, Sh. Kh. Gizatulin, D.A. Nakipov, E.A. Kenzhin, E.V. Chikhray, Zh.A. Zaurbekova, A.U. Tolenova, E.A. Nesterov, G. Kizane, Vestnik NYATS RK 1, 104–110 (2020) (In Russ). DOI: 10.52676/1729-7885-2020-1-104-111
- 7 A.A. Shaimerdenov, D.A. Nakipov, F.M. Arinkin, Sh.Kh. Gizatulin, P.V. Chakrov, Ye.A. Kenzhin, Phys. Atom. Nucl. 81, 1408–1411 (2018). DOI: 10.1134/S1063778818100162
- 8 M. Brovchenko et al., EPJ Web Conf. 153, Art.No 07030 (2017).
- 9 M. Brovchenko, I. Duhamel, B. Dechenaux, EPJ Web Conf. 153, Art.No 07030 (2017). DOI: 10.1051/epjconf/20171530.
- 10 B.M. van der Ende, L. Li, D. Godin, B. Sur, Nat. Commun. 10, Art.No 1959 (2019).
- 11 P. Raj, M. Angelone, U. Fischer, A. Klix, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 908, 10–17 (2018).
- 12 A. Klix, M. Angelone, U. Fischer, D. Gehre, B. Ghidersa, A. Lyoussi, P. Raj, Th. Reimann, D. Szalkai, K. Tian, IEEE 47, 8 (2015).
- 13 M.V. Filippov, V.S. Makhmutov, Yu.I. Stozhkov, J.-P. Raulin, E.V. Kalinin, Izvestiya RAN, Seriya Fizicheskaya 83(5), 670–672 (2019) (In Russ).
- 14 A. Mukhametkaliuly, Methodology for measuring thermal neutron fluxes using the SNM-18 detector for applied tasks, International Conference of Students and Young Scientists Farabi Aleml, Almaty, 151 (2022) (In Russ).
- 15 V.E. Aleynikov, V.A. Arkhipov, L.G. Beskrovnaya, G.N. Timoshenko, Preprint OIYaI, Dubna 16, 97–158 (1997) (In Russ).
- 16 A.A. Shaimerdenov, F.M. Arinkin, Sh.Kh. Gizatulin, D.S. Dyusambaev, S.N. Koltchnik, P.V. Chakrov, L.V. Chekushina, I.V. Shamanin, Altern. Energy Ecol. 23(187), 51–59 (2015) (In Russ).
- 17 T. Basaglia, Z.W. Bell, P. Dressendorfer, A. Larkin, M. G. Pia, IEEE Trans. Nucl. Sci. 55(2), 671–678 (2008).
- 18 J. Allison et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 53(1), 270–278 (2006).
- 19 A.V. Tertyshnikov, Helio-Geophys. Res. 13, 42–48 (2015) (In Russ).
- 20 M.V. Filippov, Yu.I. Stozhkov, V.S. Makhmutov, O.S. Maksumov, S.V. Viktorov, A.N. Kvashnin, A.A. Kvashnin, Izvestiya RAN, Seriya Fizicheskaya 79(5), 753–756 (2015) (In Russ).
- 21 S.K. Shinbulatov, N.O. Saduev, O.A. Kalikulov et al., Recent Contributions to Physics, 85(2), 23–28 (2023) (In Russ).
- 22 S.P. Kuznetsov, I.V. Meshkov, S.I. Potashev, Yu.M. Burmistrov, S.Kh. Karaevskiy, Izvestiya RAN, Seriya Fizicheskaya 82(6), 808–810 (2018) (In Russ).

Article history:

Received 10 October 2024

Received in revised form 29 October 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 10.10.2024

Түзетілген түрде түсті – 29.10.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Aliya Baktorz** (corresponding author) – Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: a_baktorz@mail.ru

2. **Yerzhan Mukhamejanov** – PhD, Leading Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan, and Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia; e-mail: y.mukhamejanov@gmail.com

3. **Demezhan Myktybekov** – Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan, Junior Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia; e-mail: demezhan04@mail.ru

4. **Fatima Dankenova** – Junior Researcher, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: dankenova.fatyma@mail.ru

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Бактораз Әлия Есімханқызы** – (автор корреспондент) Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: a_baktorz@mail.ru

2. **Мухамеджанов Ержан Серикович** – PhD, Алматы қаласындағы Ядролық физика институтының және Біріккен ядролық зерттеулер институтының (Дубна қ., Ресей) жетекші ғылыми қызметкері; e-mail: y.mukhamejanov@gmail.com

3. **Мықтыбеков Демежан Есенұлы** – Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; Біріккен ядролық зерттеулер институтының кіші ғылыми қызметкері, Дубна қ., Ресей; e-mail: demezhan04@mail.ru

4. **Данкенова Фатима Ғалламқызы** – Ядролық физика институтының кіші ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: dankenova.fatyma@mail.ru

MPНТИ 29.05.45; 29.03.77; 29.15.33; 29.15.35

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a3>Н.О. Ережеп^{1,2*}, Н.О. Садуев^{1,2}, О.А. Каликулов¹, М.А. Банщикова¹¹Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан²Тянь-Шаньская высокогорная научная станция, г. Алматы, Казахстан*[e-mail:n.yerezhep@inp.kz](mailto:n.yerezhep@inp.kz)

СРАВНЕНИЕ АДРОННЫХ МОДЕЛЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ EPOS LHC И QGSJETII-04 ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ШАЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ CORSIKA77410

В представленной статье проводится сравнительный анализ двух моделей высокоэнергетического адронного взаимодействия — EPOS LHC v3400 и QGSJET-II-04 — в сочетании с моделью низкоэнергетического взаимодействия GHEISHA 2002d (double precision) для первичных частиц (протон, кислород и железо) в диапазоне энергий 10^{16} - 10^{19} эВ с использованием программы CORSIKA-7.7410. Проанализированы ключевые параметры ливней, такие как глубина максимума X_{max} , мюонное содержание, распределение энергии вторичных частиц и горизонтальное распределение.

Полученные результаты дают более глубокое понимание характеристик вторичных космических лучей на уровне наблюдений Тянь-Шаньской высокогорной научной станции (ТШВНС, 3340 м над уровнем моря) и могут быть использованы для планирования будущих экспериментов по исследованию стволов ШАЛ «Толчковой Установкой». Определены особенности каждой модели, проведена оценка их влияния на ключевые параметры ШАЛ, а также установлены области их наибольшей применимости для улучшения интерпретации экспериментальных данных.

В работе отражены основные принципы и характеристики, а также теоретические знания, необходимые для понимания моделируемых эффектов, определена область применения, показан процесс настройки данных и сложность вычислений моделей EPOS и QGSJET. Проведено сравнение общего количества частиц, как для протона, кислорода, так и для железа, в модели EPOS и QGSJET II.

Ключевые слова: широкие атмосферные ливни (ШАЛ), адронное взаимодействие, энергетические спектры, космические лучи.

Н.О. Ережеп^{1,2*}, Н.О. Садуев¹, О.А. Каликулов¹, М.А. Банщикова¹¹Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан²Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясы, Алматы қ., Қазақстан*[e-mail:n.yerezhep@inp.kz](mailto:n.yerezhep@inp.kz)

CORSIKA-77410 көмегімен КАН модельдеу кезінде EPOS LHC және QGSJETII-04 адрондық өзара әрекеттесуінің модельдерін салыстыру

Мақалада EPOS LHC v3400 және QGSJET-II-04 жоғары энергиялы адрондық өзара әрекеттесу модельдерінің, сондай-ақ төмен энергиялы өзара әрекеттесу моделі GHEISHA 2002d (double precision) негізінде 10^{16} - 10^{19} эВ энергия диапазонында протон, көміртек және темір сияқты алғашқы бөлшектер үшін CORSIKA-7.7410 бағдарламасын қолдану арқылы салыстырмалы талдау жүргізілді. Кең атмосфералық нөсерлер (КАН) негізгі параметрлері, мысалы, максимум тереңдігі X_{max} , мюондардың сандық таралуы, екінші реттік бөлшектердің энергиясын таралуы және көлденең таралу қимасы талданды.

Алынған нәтижелер екінші реттік ғарыштық сәулелердің Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясының (теңіз деңгейінен жоғары 3340 м биіктігі) бақылау деңгейіндегі сипаттамаларын тереңірек түсінуге мүмкіндік береді және «Жұлқылама Қондырғы» арқылы КАН зерттеулеріне бағытталған болашақ эксперименттерді жоспарлауға негіз бола алады. Әр модельдің ерекшеліктері анықталып, олардың ШАЛ негізгі параметрлеріне әсері мен эксперименттік деректерді түсіндіруді жақсартудағы қолдану аймақтары бағаланды.

Жұмыста EPOS және QGSJET модельдерінің негізгі қағидаттары, олардың теориялық негізі, қолдану салалары, модельденетін эффектілер, деректерге баптау және есептеулердің күрделілігі көрсетілді.

Протон, оттегі және темір үшін бөлшектердің жалпы саны EPOS және QGSJET-II модельдерінде салыстырылды.

Түйін сөздер: кең атмосфералық нөсер (КАН), адрондық әсерлесу, энергия спектрлері, ғарыштық сәулелер.

N. Yerezhpev^{1,2*}, N. Saduyev¹, O. Kalikulov¹, M. Banshchikova¹

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Tien-Shan High Altitude Science Station (TSHASS), Almaty, Kazakhstan

*[e-mail:n.yerezhpev@inp.kz](mailto:n.yerezhpev@inp.kz)

Comparison of hadron interaction models of EPOS LHC and QGSJETII-04 in the simulation of EAS using CORSIKA-77410

The article presents a comparative analysis of two high-energy hadronic interaction models, EPOS LHC v3400 and QGSJET-II-04, combined with the low-energy interaction model GHEISHA 2002d (double precision), for primary particles such as protons and iron in the energy range of 10^{16} - 10^{19} eV using the CORSIKA-7.7410 program. Key air shower parameters, including the depth of maximum X_{max} , muon distributions, energy distribution of secondary particles, and horizontal distribution, were analyzed. The results reveal the strengths and limitations of each model, providing recommendations for their application in cosmic ray research.

The results provide a deeper understanding of the characteristics of secondary cosmic rays at the observation level of the Tien Shan High-Altitude Scientific Station (3340 m above sea level) and are intended to support future experiments focused on EAS core studies by the «Burst Detector». The features of each model were determined, and their influence on key EAS parameters, as well as their applicability in improving the interpretation of experimental data, were assessed.

The study outlines the fundamental principles and characteristics, as well as the theoretical knowledge required to understand the simulated effects. The scope of application is defined, and the data calibration process and computational complexity of the EPOS and QGSJET models are described. A comparison of the total number of particles for protons, oxygen, and iron between the EPOS and QGSJET-II models is provided.

Keywords: extensive air showers (EAS), hadronic interaction, energy spectra, cosmic rays.

Введение

Широкие атмосферные ливни (ШАЛ), возникающие при взаимодействии высокоэнергетических космических лучей с атмосферой Земли, предоставляют уникальную возможность изучать физику адронных взаимодействий при энергиях, значительно превышающих возможности современных коллайдеров. Для интерпретации данных экспериментов по ШАЛ критически важным является моделирование процессов высокоэнергетических столкновений, которое выполняется с использованием специализированных программных пакетов, таких как CORSIKA [1, 2].

CORSIKA (от англ. COsmic Ray SIMulations for KAscade), как и большинство программ для моделирования, работающих с большими массивами данных, в своей основе имеет метод Монте-Карло. Для описания взаимодействий в данном программном пакете используется несколько моделей. Такие модели адронных взаимодействий, как EPOS LHC [3, 4] и QGSJETII-04 [5-8] играют ключевую роль в симуляции развития ШАЛ. Они описывают физические процессы,

происходящие на разных стадиях ливня, включая генерацию вторичных частиц, их взаимодействие с атмосферой и пространственное распределение. EPOS LHC и QGSJETII-04 широко применяются в задачах космической физики, но их предсказания для определённых параметров ШАЛ, таких как глубина максимума X_{max} , число мюонов и профили энергии, могут заметно отличаться. Эти различия обусловлены разницей в теоретической основе и подходах к описанию процессов взаимодействия.

В настоящей работе проводится сравнительный анализ моделей EPOS LHC и QGSJETII-04 при моделировании ШАЛ с использованием CORSIKA 7.7410. Цель исследования – выявить особенности каждой модели, оценить их влияние на ключевые параметры ШАЛ и определить области их наибольшей применимости. Это позволит внести вклад в улучшение интерпретации экспериментальных данных и более точное понимание природы космических лучей, а также может быть использовано для планирования будущих экспериментов по исследованию стволов ШАЛ «Толковой Установкой» на уровне

наблюдений Тянь-Шаньской высокогорной научной станции (ТШВНС, 3340 м над уровнем моря) [9-13].

Метод моделирования

Моделирование широких атмосферных ливней (ШАЛ) проводится с использованием программного пакета CORSIKA (COsmic Ray Simulations for KASCADE), который является стандартным инструментом для детального анализа каскадов частиц, возникающих при взаимодействии космических лучей с атмосферой Земли. Этот пакет позволяет учитывать как физику высокоэнергетических взаимодействий, так и сложные процессы, связанные с распространением вторичных частиц в атмосфере.

Программа CORSIKA это универсальный программный пакет для детального моделирования широких атмосферных ливней (ШАЛ) в эксперименте KASCADE [14]. Данная программа разработана в Институте физики ядерных частиц Карлсруэ (KIT) и поддерживает широкий спектр моделей взаимодействий, а также несколько моделей адронных взаимодействий для высоко- и низкоэнергетических процессов. Для описания высокоэнергетических процессов доступны такие модели как EPOS LHC [15], QGSJET-II-04 [16], SIBYLL [17-20], DPMJET [21-23], VENUS [20], NEXUS [21] и другие. Низкоэнергетические взаимодействия моделируются с использованием пакетов FLUKA [26], GHEISHA [27-29]. Такие алгоритмы как NKG [30] и EGS4 [31] используются для расчёта электромагнитного каскада. Эта гибкость позволяет адаптировать программу для различных задач, связанных с космическими лучами, а также учитывать особенности первичных частиц, включая протоны, альфа-частицы, ядра различных элементов, гамма-кванты, мюоны и нейтрино. Диапазон энергий может достигать десятков ГэВ до сверхвысоких энергий 10^{21} эВ. Включает различные модели атмосферы для корректного описания взаимодействий на разных высотах, например, стандартная атмосфера США (USA), основанная на измерениях плотности, температуры и давления на разных высотах. Процессы генерации вторичных частиц учитывают все стадии ливня, начиная от генерации вторичных частиц (пионы, каоны, мюоны) до их распространения и взаимодействий. Рассчитываются траектории частиц в магнитном поле Земли и их энергетические потери при прохождении через атмосферу.

При изучении физики адронных взаимодействий ШАЛ в диапазоне энергий 10^{16} -

10^{19} использованы две модели высокоэнергетических взаимодействий — EPOS LHC и QGSJET-II-04 и получено сравнение адронных моделей взаимодействия для версии CORSIKA77410. Используемые модели адронных взаимодействий учитывают нелинейные эффекты и насыщение партонов.

Особенности моделей адронных взаимодействий EPOS и QGSJET

Обе модели EPOS и QGSJET, как упоминалось ранее, являются основными инструментами для моделирования адронных взаимодействий при высоких энергиях в CORSIKA. Они активно используются в задачах моделирования широких атмосферных ливней (ШАЛ), вызванных космическими лучами, а также в анализе экспериментальных данных с ускорителей, таких как Большой адронный коллайдер (LHC). Каждая из моделей имеет свои уникальные теоретические основы и подходы к описанию физических процессов, что делает их дополняющими друг друга для различных задач.

Обе модели используют схожие подходы к описанию процессов, таких как партонные каскады и многократные рассеяния. Однако EPOS делает акцент на учёте коллективных эффектов и гидродинамических процессах, в то время как QGSJET-II-04 ориентирована на точное описание нелинейных взаимодействий в рамках обмена померонами. Это различие приводит к различным предсказаниям для параметров ШАЛ, включая глубину максимума X_{max} , количество мюонов и распределение энергии вторичных частиц. Для задач моделирования ШАЛ выбор модели может существенно повлиять на результаты, поэтому их сравнительный анализ, проведённый в данной работе, позволяет выявить сильные и слабые стороны каждой из них и определить наиболее подходящую модель для конкретной задачи.

Совокупность характеристик EPOS и QGSJET делает их незаменимыми инструментами для изучения высокоэнергетических взаимодействий. Эти модели дополняют друг друга, предоставляя исследователям гибкость в выборе подхода в зависимости от природы изучаемого явления и экспериментальных условий (таблица 1). Таким образом, QGSJET-II — эффективен для задач, где важны нелинейные эффекты в динамике и точность при экстремально высоких энергиях. EPOS — предпочтителен в исследованиях, где требуется учитывать коллективные явления (например, в тяжёлых ионных столкновениях). Отличие в времени вычисления были сравнены нами в работе [32].

Таблица 1 – Сравнение EPOS и QGSJET

Характеристика	QGSJET-II	EPOS
Теоретическая база	Квантовая теория полей	Партонные каскады, гидродинамика
Область применения	Широкие атмосферные ливни	Космические лучи, тяжелые ионы
Моделируемые эффекты	Нелинейные эффекты насыщения	Коллективные эффекты (flow)
Настройка на данные	Косвенно через эксперименты по космическим лучам	Прямо через данные LHC
Сложность вычислений	Быстрее, проще	Более сложные вычисления

Модель QGSJET (Quark-Gluon String Jet Model)

QGSJET (Quark-Gluon String Jet Model) представляет собой теоретически строгую модель, основанную на теории поля Грибова [33], которая описывает взаимодействия в терминах обмена померонами. Модель QGSJET-II, и особенно её версия QGSJETII-04, расширяет описание взаимодействий, учитывая нелинейные эффекты, такие как насыщение партонных и взаимодействие померон-померон [34, 35]. Эти эффекты играют ключевую роль при экстремально высоких энергиях, где плотность партонных становится значительной, а их взаимодействия начинают существенно влиять на динамику процесса. QGSJET-II-04 также улучшает описание зарядового обмена в столкновениях с π -мезонами, что приводит к более точным предсказаниям содержания мюонов в широких атмосферных ливнях. Одним из ключевых преимуществ модели является её способность описывать не только адрон-адронные взаимодействия, но и столкновения ядер, что делает её полезной для задач космической физики, связанных с изучением состава первичных космических лучей.

Базовые принципы: модель основана на теории Грибова, которая описывает взаимодействия в терминах «обмена партонных»; предполагается, что партонны являются эффективным описанием каскадов партонных (кварков и глюонов) в высокоэнергетических столкновениях; модель включает как мягкие (непертурбативные), так и полумягкие процессы (с участием умеренно высоких переданных импульсов).

Расширенная версия QGSJET-II: учитываются нелинейные эффекты, такие как насыщение партонных и взаимодействие померон-померон; Улучшено описание процессов обмена

зарядом и генерация мюонов, что имеет важное значение для симуляций широких атмосферных ливней; Данная версия ориентирована на обработку как адрон-адронных, так и ядро-ядерных взаимодействий.

Применение: используется в моделировании характеристик ШАЛ, таких как распределение мюонов, глубина максимума X_{max} , продольные и поперечные профили ливней; Сильная сторона модели — точное описание многократных рассеяний при сверхвысоких энергиях.

Модель EPOS (Energy-conserving Parton-based Object-oriented Simulation)

Модель EPOS (Energy-conserving Parton-based Object-oriented Simulation) разработана для точного описания многократных взаимодействий и учёта коллективных эффектов, таких как гидродинамическое расширение (flow) в столкновениях протонов, ядер и других частиц. EPOS основана на подходе партонных каскадов, где взаимодействия описываются в терминах мягких и полумягких померонов, с явным учётом сохранения энергии на всех этапах моделирования. Одной из уникальных особенностей модели является включение остатков ядра (remnants), что улучшает предсказания для тяжёлых ядерных взаимодействий и позволяет точнее моделировать странные частицы и мультичастичные потоки. Версия EPOS LHC оптимизирована для учёта данных LHC [36], полученных в экспериментах ALICE [37], CMS [38] и ATLAS [39], что обуславливает актуальность ее применения для решения задач современной физики высоких энергий. Особое внимание уделено описанию квазиабсолютных столкновений с малым поперечным импульсом, что важно для задач, связанных с описанием коллективных эффектов и изучением кварк-глюонной плазмы.

Базовые принципы: модель основана на подходе каскадов кварков и глюонов, подобно QGSJET, но включает несколько уникальных аспектов; проводит учет коллективных эффектов, таких как гидродинамическое расширение (flow), что особенно важно для тяжелых ионов; энергия сохраняется на всех этапах взаимодействия, включая генерацию вторичных частиц и каскадов.

Особенности EPOS LHC: модель настроена на данные экспериментов LHC (например, ALICE, CMS, ATLAS); подразумевает улучшенное описание потоков частиц, возникающих в столкновениях протонов, протон-ядер и ядер-ядер; использует подход трех объектов: партонные лестницы, остатки (remnants) ядра и их взаимодействие.

Применение: Важна для задач, где требуется точное описание мультиплетных взаимодействий, таких как генерация странных частиц или потоков при низких поперечных импульсах; применяется как в космических исследованиях (моделирование EAS), так и в физике тяжелых ионов.

Результаты моделирования. Обсуждение

Для сравнения моделей EPOS LHC и QGSJETII-04 были выбраны следующие ключевые параметры ШАЛ:

- 1) Глубина максимума X_{max} : уровень, на котором достигается наибольшее развитие ливня.
- 2) Число мюонов: общее количество мюонов на наблюдательном уровне.
- 3) Распределение энергии: распределение вторичных частиц по энергии.
- 4) Продольное распределение: распределение вторичных частиц в ливне на уровне наблюдения.

В результате моделирования широких атмосферных ливней (ШАЛ) с использованием программного пакета CORSIKA 7.7410 и моделей адронных взаимодействий EPOS LHC и QGSJETII-04 были получены данные о ключевых параметрах, таких как глубина максимума X_{max} , мюонное содержание, распределение энергии вторичных частиц и горизонтальные распределения. Эти параметры позволяют проанализировать различия в подходах моделей и их влиянии на характеристики ливней. В качестве первичных частиц используются протоны, ядро кислорода (O) и ядра железа (Fe), покрывающие диапазон энергий от 10^{15} до 10^{19} эВ. Уровень наблюдения – поверхность земли с учётом высоты ТШВНС (3340 м над уровнем моря) и геомагнитного поля согласно координатам 29.69 долготы и 47.45 широты. Использована стандартная модель атмосферы. Обработки

данных Corsika выполнялось на python [40] с импортированием библиотек ROOT CERN [41] для построения графиков и получения фитов.

Глубина максимума X_{max}

Глубина максимума, определяющая положение точки наибольшей плотности вторичных частиц в атмосфере, является одним из наиболее чувствительных параметров для определения природы первичных частиц.

Глубина максимума ливня X_{max} содержит информацию как о массе первичной космической частицы, инициирующей ливень, так и о свойствах адронных взаимодействий, участвующих в процессе развития каскада. Среднее значение X_{max} зависит от энергии первичной частицы E и количества нуклонов A в её составе, что выражается уравнением:

$$X_{max} = \beta(\ln E - \ln A) + \alpha, \quad (1)$$

где β и α зависят от особенностей адронных взаимодействий, если первичная частица фиксирована. Эти параметры очень чувствительны к изменениям в сечении взаимодействия, мультиплетности и упругости. Уравнение (1) может быть выведено из простой обобщённой каскадной модели для адронных первичных частиц, но оно также находится в хорошем согласии с описанием эволюции X_{max} , предсказанной современными адронными моделями.

Уравнение (1) также можно представить в следующей форме:

$$X_{max} = ER_{10}(\lg E - \lg A) + X_{init}, \quad (2)$$

где ER_{10} и X_{init} — параметры, зависящие от энергии и начальных условий формирования ливня.

Средние значения глубины максимума X_{max} для двух моделей показаны в зависимости от энергии на рисунке 1. Как и ожидалось, более тяжёлая первичная частица формирует максимум ливня на меньшей глубине по сравнению с более лёгкой частицей.

Значение X_{max} и наклон кривой для протона в модели EPOS немного выше, чем в QGSJET. Аналогично, для железа наклон кривой также выше в EPOS, в то время как значения для кислорода наклон кривой выше в энергиях 10^{17} и ниже с возрастанием до 10^{19} . И это скорее всего обусловлено недостаточностью количества итерации при моделировании, связи с нехваткой

постоянной памяти. Подобранные значения наклона ER_{10} и перехвата X_{init} приведены в таблице 2.

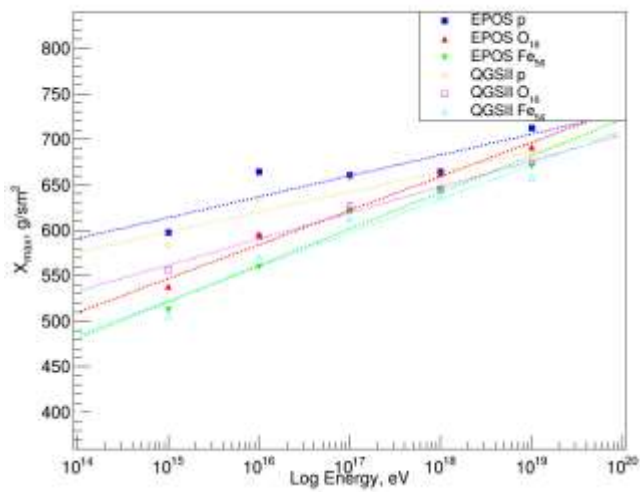


Рисунок 1 – Зависимость среднего значения X_{max} от энергии первичных частиц

Таблица 2 – Наклон X_{max}

Модель и частица	$\alpha (X_{init})$		$\beta (ER_{10})$	
	среднее	+/-	среднее	+/-
EPOS –p	269.158	115.795	9.98094	2.94801
EPOS –O	-14.2782	47.6991	16.2519	1.21436
EPOS –Fe	-80.1332	76.7562	17.4202	1.95412
QGSII –p	267.246	89.1434	9.57887	2.26948
QGSII –O	131.897	32.0413	12.4484	0.81573
QGSII –Fe	-37.6379	89.8482	16.2196	2.28743

Количество электронов и мюонов

Количество мюонов в ливне является ключевым параметром для изучения адронных взаимодействий, поскольку мюоны образуются в результате распада заряженных мезонов (таблицы 3-4). Средние значения общего числа электронов N_e , мюонов N_{mu} , адронов N_h , а также суммы энергий всех адронов E_h , зарегистрированных на уровне земли, для моделей взаимодействий EPOS и QGSJET II показаны в зависимости от энергии на рисунках 2, 3, 4 и 5, соответственно.

Видно, что обе модели демонстрируют линейную зависимость этих компонентов от энергии в логарифмическом масштабе.

На рисунках 2–5 видно, что нет значительных различий в размере заряженных частиц ливня, мюонов, адронов и суммарной энергии адронов

для двух рассматриваемых моделей при выбранных энергиях первичных частиц (протона, кислорода и железа). Хотя в предыдущих работах при сравнении версий CORSIKA v6990 [42] для мюонов различия между предсказаниями моделей EPOS 1.99 и QGSJET II-03 были значительны.

Таблица 3 – Количество мюонов $\lg(N)$

Модель и частица	$\lg(N)$	
	Среднее значение	отклонение
EPOS –p	0.727826	0.007301
EPOS –O	0.883716	0.000085
EPOS –Fe	0.887186	0.000064
QGSII –p	0.881919	0.000084
QGSII –O	0.870927	0.000229
QGSII –Fe	0.888974	0.000084

Таблица 4 – Количество заряженных частиц $\lg(N)$

Модель и частица	$\lg(N)$	
	Среднее значение	отклонение
EPOS –p	0.725499	0.014184
EPOS –O	0.891483	0.001008
EPOS –Fe	0.893778	0.000071
QGSII –p	0.890923	0.000024
QGSII –O	0.878806	0.000019
QGSII –Fe	0.893987	0.000070

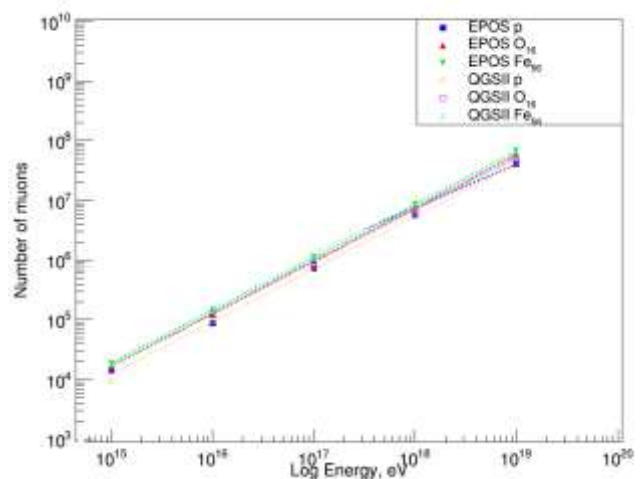


Рисунок 2 – Зависимость среднего количества мюонов ливня от энергии первичных частиц

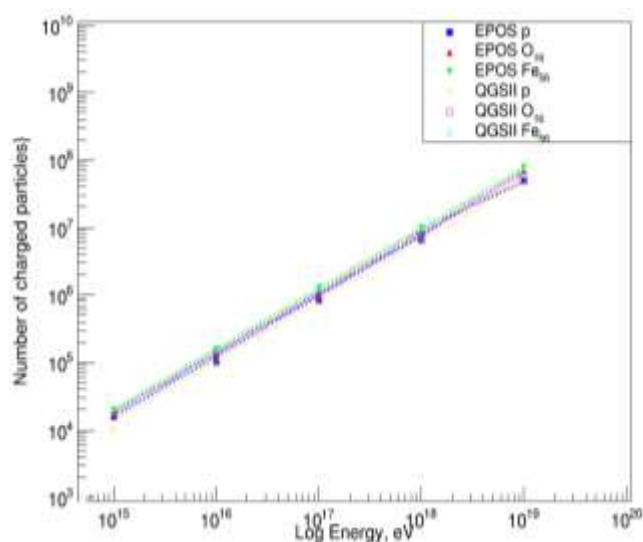


Рисунок 3 – Зависимость среднего количества заряженных частиц от энергии первичных частиц

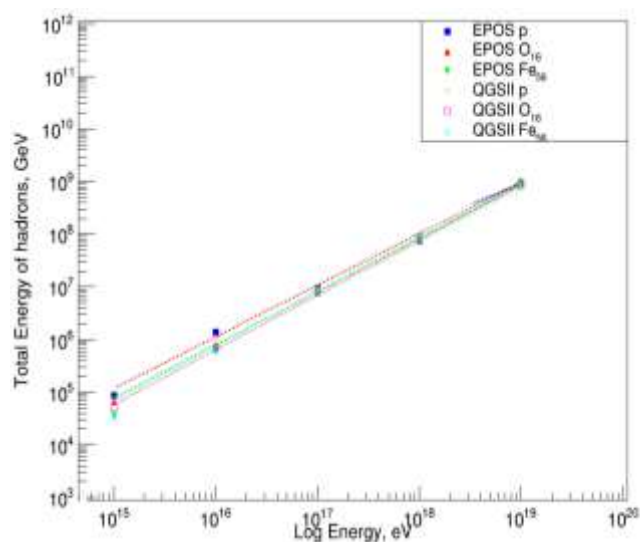


Рисунок 5 – Зависимость суммарной энергии адронов от энергии первичных частиц

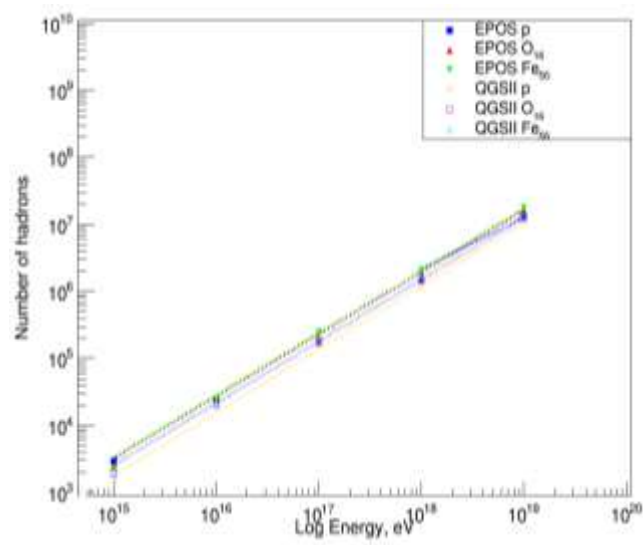


Рисунок 4 – Зависимость количества адронов от энергии первичных частиц

Для адронов общее количество частиц, как для протона, кислорода, так и для железа, в модели EPOS оказывается незначительно больше, чем в QGSJET II (рисунок 4).

Однако, если рассматривать суммарную энергию всех адронов E_h , значительных различий между моделями с возрастанием энергий не наблюдается (рисунок 5).

Распределение адронов и их энергии

Распределение энергии вторичных частиц также демонстрирует заметные различия между моделями.

Среднее количество адронов в зависимости от числа мюонов представлено на рисунке 6 для двух моделей. Наклоны всех кривых практически одинаковы.

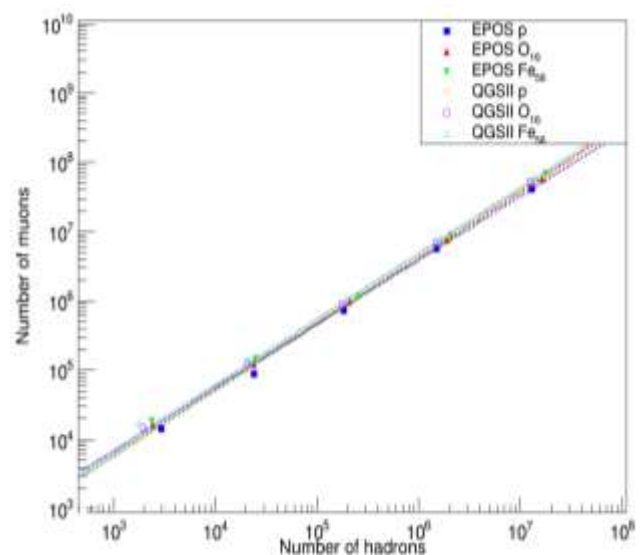
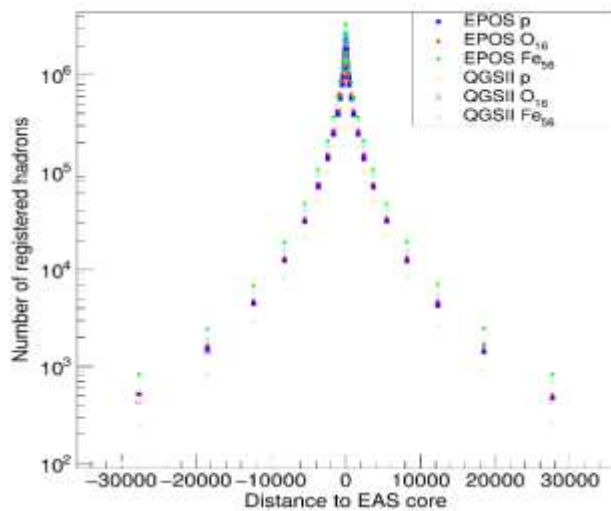


Рисунок 6 – Соотношение количества мюонов на количество адронов

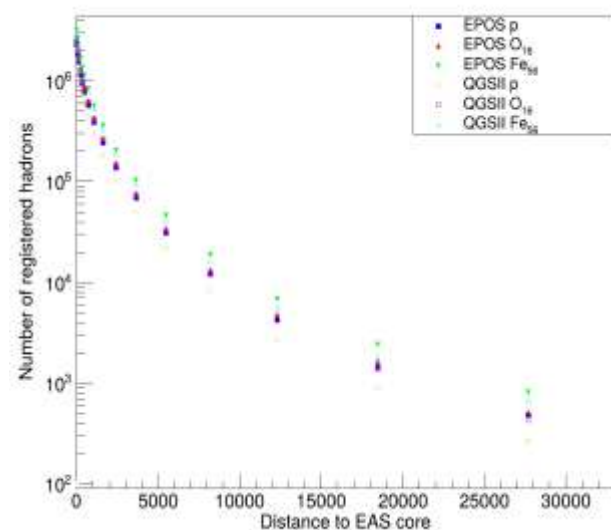
Продольное распределение

Продольное распределение частиц (их плотность на разных расстояниях от оси ливня) также демонстрирует влияние моделей.

Видимых различий общего среднего количества зарегистрированных адронов для первичных частиц всех пяти значений энергии (рисунки 7-12) между двумя моделями практически нет.



a)



б)

Рисунок 7 – Распределения количества адронов от центра ШАЛ (а). Увеличенный участок правой ветви (б)

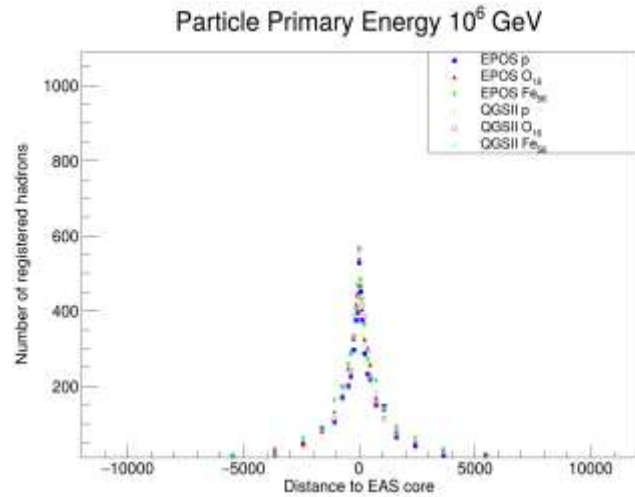


Рисунок 8 – Распределение количества адронов от центра ШАЛ для энергий 10^6 ГэВ

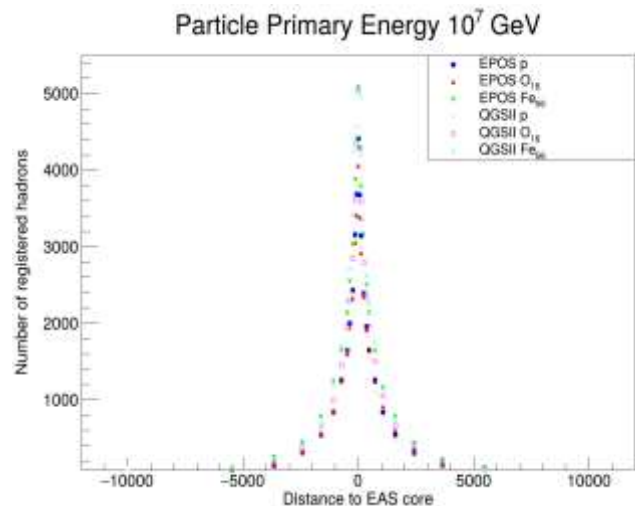


Рисунок 9 – Распределение количества адронов от центра ШАЛ для энергий 10^7 ГэВ

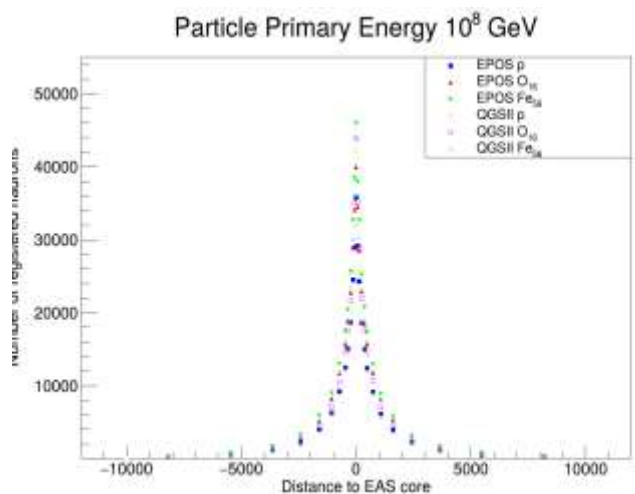


Рисунок 10 – Распределение количества адронов от центра ШАЛ для энергий 10^8 ГэВ

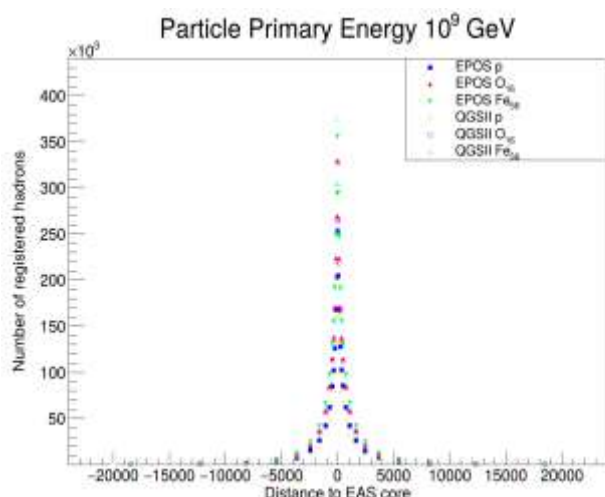


Рисунок 11 – Распределение количества адронов от центра ШАЛ для энергий 10^9 ГэВ

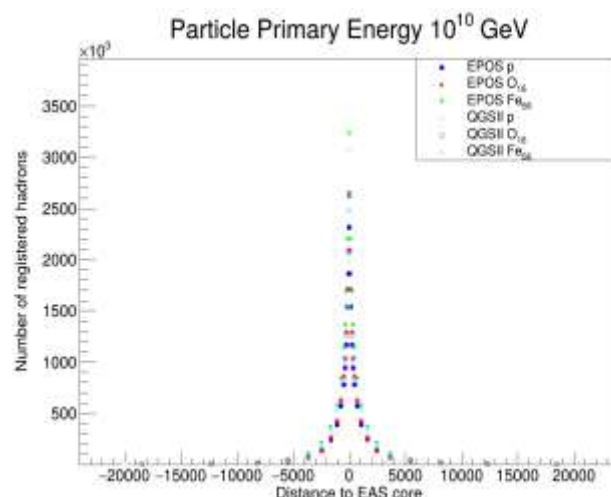


Рисунок 12 – Распределение количества адронов от центра ШАЛ для энергий 10^{10} ГэВ

Заключение

Полученные результаты по различиям моделей EPOS и QGSJET II в CORSIKA v77410 указывают на проведенную многошаговую модификацию версий CORSIKA v6990 одной или обеих моделей, чтобы согласовать их предсказания с экспериментальными данными.

Из графиков видно, что для первичных протонов модель EPOS предсказывает немного больше мюонов (около 2%) для ливней до энергий 10^{16} эВ, практически равное число электронов (разница менее 1%) при 10^{16} эВ и немного меньше мюонов (около 2%) после энергий 10^{16} эВ.

Результаты показывают, что различия между моделями зависят как от энергии, так и от типа первичной частицы.

Благодарность

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № BR21881941 «Экспериментальные и теоретические исследования в области высоких и сверхвысоких энергий для решения актуальных задач астрофизики и физики космических лучей»).

Литература

- 1 Heck D., Knapp J., Capdevielle J., Schatz G., Thouw T. CORSIKA: A Monte Carlo code to simulate extensive air showers // *Physics*. – 2022. – Vol.9. – P.35-40. DOI:10.5445/IR/270043064
- 2 Sandrock A. Status and prospects of the CORSIKA 8 air shower simulation framework // *PoS ECRS*. – 2023. – Vol. 075. – P. 1-8. DOI: 10.22323/1.423.0075
- 3 Pierog T., Karpenko Iu., Katzy J. M., Yatsenko E., Werner K. EPOS LHC: Test of collective hadronization with data measured at the CERN Large Hadron Collider // *Phys. Rev.* – 2015. – Vol. 92, No. 3. – P. 034906. DOI: 10.1103/PhysRevC.92.034906
- 4 Pierog T. LHC results and High Energy Cosmic Ray Interaction Models // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2013. – Vol. 409. – P. 012008. DOI: 10.1088/1742-6596/409/1/012008
- 5 Ostapchenko S. QGSJET-II: towards reliable description of very high energy hadronic interactions // *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* – 2006. – Vol. 151. – P. 143-146. DOI: 10.1016/j.nuclphysbps.2005.07.026
- 6 Ostapchenko S. Nonlinear screening effects in high energy hadronic interactions // *Phys. Rev.* – 2006. – Vol. D74. – P. 014026. DOI: 10.1103/PhysRevD.74.014026
- 7 Ostapchenko S. Monte Carlo treatment of hadronic interactions in enhanced Pomeron scheme: QGSJET-II model // *Phys. Rev.* – 2011. – Vol. D83. – P. 014018. DOI: 10.1103/PhysRevD.83.014018
- 8 Ostapchenko S. QGSJET-II: physics, recent improvements, and results for air showers // *EPJ Web Conf.* – 2013. – Vol. 52. – P. 02001. DOI: 10.1051/epjconf/20135202001
- 9 Kalikulov O.A., Saduyev N.O. Study of the spatiotemporal structure of extensive air showers at high energies // *Journal of Instrumentation*. – 2022. – Vol. 17, No. 41. – P. C04014. DOI: 10.1088/1748-0221/17/04/C04014

- 10 Shaulov S.B. Method for determining angles in x-ray emulsion chambers // *Recent Contributions to Physics*. – 2019. – Vol. 69, No. 2. – P. 61-70. DOI: 10.26577/RCPH-2019-i2-9
- 11 Shinbulatov S.K. Study of the angular spectra of hadrons in x-ray emulsion chamber // *Proc. 36th International Cosmic Ray Conference*. – 2019. – July 24th - August 1st.
- 12 Shaulov S.B. Autonomous station for recording radiation in a thunderstorm atmosphere at the Tien Shan high mountain cosmic-ray station // *Recent Contributions to Physics*. – 2019. – Vol. 70, No. 3. – P. 13-21. DOI: 10.26577/RCPH-2019-i3-2
- 13 Kalikulov O.A. Прототип установки временных детекторов для исследования оси прихода ШАЛ // *Вестник КазНУ. Серия Физическая*. – 2021. — Том 79, №. 4. – С. 4-9. DOI: 10.26577/RCPH.2021.v79.i4.01
- 14 Antoni T. The cosmic-ray experiment KASCADE // *Nucl. Instr. Meth. A*. – 2003. – Vol. 513. – P. 490-510. DOI: 10.1016/S0168-9002(03)02076-X
- 15 Pierog T. EPOS LHC: Test of collective hadronization with data measured at the CERN Large Hadron Collider // *Phys. Rev. C*. – 2015. – Vol. 92. – P. 034906. DOI: 10.1103/PhysRevC.92.034906
- 16 Ostapchenko S. LHC data on inelastic diffraction and uncertainties in the predictions for longitudinal extensive air shower development // *Phys. Rev. D*. – 2014. – Vol. 89. – P. 074009. DOI: 10.1103/PhysRevD.89.074009
- 17 Riehn F., Engel R., Fedynitch A., Gaisser K., Todor S. A new version of the event generator SIBYLL // *Proc. Sci.* – 2015. – July 30th. – P. 558.
- 18 Riehn F., Engel R., Fedynitch A., Gaisser T.K., Stanev T. Charm production in SIBYLL // *EPJ Web of Conferences*. – 2015. – Vol. 99. – P. 12001. DOI: 10.1051/epjconf/20159912001
- 19 Riehn F. The hadronic interaction model SIBYLL 2.3c and Feynman scaling // *Proc. 35th Int. Cosmic Ray Conf., Bexco, Busan (Korea)*. – 2017. – Contr. 301. DOI: 10.48550/arXiv.1709.07227
- 20 Engel R. Hadronic interaction model SIBYLL 2.3d and extensive air showers // *Phys. Rev. D*. – 2019. – Vol. 102. – P. 063002. DOI: 10.1103/PhysRevD.102.063002
- 21 Roesler S., Engel R., Ranft J. The Monte Carlo event generator DPMJET-III // *Proc. 2000 Conf., Lisbon (Portugal)*. – 2000. – Oct. 23-26.
- 22 Kling A. et al. eds. *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications* // Springer (Berlin). – 2001. DOI: 10.1007/978-3-642-18211-2
- 23 Fedynitch A., Engel R. Nuclear model developments in FLUKA // *Nuclear Reaction Mechanisms*. – 2015. – Vol. 14. – P. 291.
- 24 Werner K. Strings, pomerons and the VENUS model of hadronic interactions at ultrarelativistic energies // *Phys. Rep.* – 1993. – Vol. 232. – P. 87-299. DOI: 10.1016/0370-1573(93)90078-R
- 25 Drescher H.J., Hladik M., Ostapchenko S., Pierog T., Werner, K. Parton-based Gribov–Regge theory // *Phys. Rep.* – 2001. – Vol. 350. – P. 93-289. DOI: 10.1016/S0370-1573(00)00122-8
- 26 Fassò A., Ferrari, A., Roesler, S. The physics models of FLUKA: status and recent development // *Computing in High Energy and Nuclear Physics 2003 Conference (CHEP2003)*. – 2003. – Vol. C0303241. – P. 1–5. DOI: 10.48550/arXiv.hep-ph/0306267
- 27 Fesefeldt H. The e/h ratio and energy resolution of hadron calorimeters // *Nucl. Instr. Meth. A*. – 1988. – Vol. 263, No. 1. – P. 114-135.
- 28 Bass S.A. Microscopic models for ultrarelativistic heavy ion collisions // *Prog. Part. Nucl. Phys.* – 1998. – Vol. 41. – P. 225-369. DOI: 10.1016/S0146-6410(98)00058-1
- 29 Bleicher M. Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* – 1999. – Vol. 25. – P. 1859. DOI: 10.1088/0954-3899/25/9/308
- 30 Kamata K., Nishimura J. The Lateral and the Angular Structure Functions of Electron Showers // *Suppl. Progr. Theoret. Phys.* – 1958. – Vol. 6. – P. 93-155. DOI: 10.1143/PTPS.6.93
- 31 Nelson W.R., Hirayama H. Report SLAC 265, Stanford Linear Accelerator Center. – 1985.
- 32 Yerezhap N.O., Sadykov T.K., Burtebayev N., Saduyev N.O. Comparison of GHEISHA QGSJET and UrQMD EPOS Interaction Models to Compare Experiments with Observation Parameters of TSHSS // *Acta Physica Polonica B, Proceedings Supplement*. – 2023. – Vol.16. – A5.
- 33 Gribov V. N. A reggeon diagram technique. // *Soviet Physics JETP*. – 1968. – Vol. 26, No. 2. – P. 414–422.
- 34 Gribov, V. N. Glauber corrections and the interaction between high-energy hadrons and nuclei. // *Soviet Physics JETP*. – 1969. – Vol. 29, No. 3. – P. 483–487.
- 35 Kalmykov N.N., Ostapchenko S.S., Pavlov A.I. Quark-gluon-string model and EAS simulation problems at ultra-high energie // *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)*. – 1997. – Vol.52. – P.17-28. DOI: 10.1016/S0920-5632(96)00846-8
- 36 Evans L., Bryant P. LHC Machine // *JINST*. – 2008. – Vol.3. – S08001. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08001
- 37 The ALICE Collaboration, Aamodt K. The ALICE experiment at the CERN LHC // *Journal of Instrumentation* – 2008. – Vol.3. – S08002. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08002
- 38 The CMS Collaboration, Chatrchyan S. The CMS experiment at the CERN LHC // *Journal of Instrumentation* – 2008. – Vol.3. – S08004. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004
- 39 The ATLAS Collaboration, Aad G. The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider // *Journal of Instrumentation*. – 2008. – Vol.3. – S08003. DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08003
- 40 Van Rossum G. Python tutorial Technical Report CS-R9526. Centrum voor Wiskunde en Informatica, Amsterdam. – 1995.

41 Brun R., Rademakers An object oriented data analysis framework // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 1997. – Vol.389 (1-2). – P.81-86. DOI: 10.1016/S0168-9002(97)00048-X

42 Chabin Ch. Thakuria, and Boruah K. Comparison of EPOS and QGSJET-II in EAS Simulation using CORSIKA // High Energy Astrophysical Phenomena. – 2012. – 7 p. DOI: 10.48550/arXiv.1202.3661

References

- 1 D. Heck, J. Knapp, J. Capdevielle, G. Schatz, T. Thouw, Physics 9, 35-40 (2022). DOI: 10.5445/IR/270043064
- 2 A. Sandrock, PoS ECRS 075, 1-8 (2023). DOI: 10.22323/1.423.0075
- 3 T. Pierog, Iu. Karpenko, J. M. Katzy, E. Yatsenko, K. Werner, Phys. Rev. 92, 034906 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevC.92.034906
- 4 T. Pierog, J. Phys.: Conf. Ser. 409, 012008 (2013). DOI: 10.1088/1742-6596/409/1/012008
- 5 S. Ostapchenko, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 151, 143-146 (2006). DOI: 10.1016/j.nuclphysbps.2005.07.026
- 6 S. Ostapchenko, Phys. Rev. D74, 014026 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevD.74.014026
- 7 S. Ostapchenko, Phys. Rev. D83, 014018 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevD.83.014018
- 8 S. Ostapchenko, EPJ Web Conf. 52, 02001 (2013). DOI: 10.1051/epjconf/20135202001
- 9 O. A. Kalikulov, N. O. Saduyev, Journal of Instrumentation 17, C04014 (2022). DOI: 10.1088/1748-0221/17/04/C04014
- 10 S.B. Shaulov, Recent Contributions to Physics 69, 61-70 (2019). DOI: 10.26577/RCPH-2019-i2-9
- 11 S.K. Shinbulatov, Proc. 36th International Cosmic Ray Conference, July 24 - August 1 (2019).
- 12 S.B. Shaulov, Recent Contributions to Physics 70, 13-21 (2019). DOI: 10.26577/RCPH-2019-i3-2
- 13 O.A. Kalikulov, Recent Contributions to Physics 79, 4-9 (2021). DOI: 10.26577/RCPH.2021.v79.i4.01 (In Russ)
- 14 T. Antoni, Nucl. Instr. Meth. A 513, 490-510 (2003). DOI: 10.1016/S0168-9002(03)02076-X
- 15 T. Pierog, Phys. Rev. C 92, 034906 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevC.92.034906
- 16 S. Ostapchenko, Phys. Rev. D 89, 074009 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevD.89.074009
- 17 F. Riehn, R. Engel, A. Fedynitch, K. Gaisser, S. Todor, Proc. Sci., July 30, 558 (2015).
- 18 F. Riehn, R. Engel, A. Fedynitch, T. K. Gaisser, T. Stanev, EPJ Web Conf. 99, 12001 (2015). DOI: 10.1051/epjconf/20159912001
- 19 F. Riehn, Proc. 35th Int. Cosmic Ray Conf., Bexco, Busan (Korea), Contr. 301 (2017). DOI: 10.48550/arXiv.1709.07227
- 20 R. Engel, Phys. Rev. D 102, 063002 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevD.102.063002
- 21 S. Roesler, R. Engel, J. Ranft, Proc. 2000 Conf., Lisbon (Portugal), Oct. 23-26 (2000).
- 22 A. Kling et al., eds., Springer (Berlin) (2001). DOI: 10.1007/978-3-642-18211-2
- 23 A. Fedynitch, R. Engel, Nuclear Reaction Mechanisms 14, 291 (2015).
- 24 K. Werner, Phys. Rep. 232, 87-299 (1993). DOI: 10.1016/0370-1573(93)90078-R
- 25 H.J. Drescher, M. Hladik, S. Ostapchenko, T. Pierog, K. Werner, Phys. Rep. 350, 93-289 (2001). DOI: 10.1016/S0370-1573(00)00122-8
- 26 A. Fassò, A. Ferrari, S. Roesler, Computing in High Energy and Nuclear Physics 2003 Conference (CHEP2003) C0303241, 1-5 (2003). DOI: 10.48550/arXiv.hep-ph/0306267
- 27 H. Fesefeldt, Nucl. Instr. Meth. A 263, 114-135 (1988).
- 28 S. A. Bass, Prog. Part. Nucl. Phys. 41, 225-369 (1998). DOI: 10.1016/S0146-6410(98)00058-1
- 29 M. Bleicher, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 25, 1859 (1999). DOI: 10.1088/0954-3899/25/9/308
- 30 K. Kamata, J. Nishimura, Suppl. Progr. Theoret. Phys. 6, 93-155 (1958). DOI: 10.1143/PTPS.6.93
- 31 W.R. Nelson, H. Hirayama, Report SLAC 265, Stanford Linear Accelerator Center (1985).
- 32 N.O. Yerezhep, T.K. Sadykov, N. Burtabayev, N.O. Saduyev, Acta Physica Polonica B, Proceedings Supplement 16, A5 (2023).
- 33 V.N. Gribov, Soviet Physics JETP 26, 414-422 (1968).
- 34 V.N. Gribov, Soviet Physics JETP 29, 483-487 (1969).
- 35 N.N. Kalmykov, S.S. Ostapchenko, A.I. Pavlov, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 52, 17-28 (1997). DOI: 10.1016/S0920-5632(96)00846-8
- 36 L. Evans, P. Bryant, JINST 3, S08001 (2008). DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08001
- 37 The ALICE Collaboration, K. Aamodt, Journal of Instrumentation 3, S08002 (2008). DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08002
- 38 The CMS Collaboration, S. Chatrchyan, Journal of Instrumentation 3, S08004 (2008). DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08004
- 39 The ATLAS Collaboration, G. Aad, Journal of Instrumentation 3, S08003 (2008). DOI: 10.1088/1748-0221/3/08/S08003
- 40 G. Van Rossum, Python Tutorial, Technical Report CS-R9526, Centrum voor Wiskunde en Informatica, Amsterdam (1995).

41 R. Brun, F. Rademakers, Nucl. Instr. Meth. A 389, 81-86 (1997). DOI: 10.1016/S0168-9002(97)00048-X

42 Ch. Chabin, K. Thakuria, K. Boruah, High Energy Astrophysical Phenomena, 7 p. (2012). DOI: 10.48550/arXiv.1202.3661

Article history:

Received 28 November 2024

Accepted 18 December 2024

Information about authors:

1. **Nurzhan Yerezhep** (corresponding author) – Researcher, Laboratory of Cosmic Ray Physics, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; Tien-Shan High Altitude Science Station (TSHASS), Almaty, Kazakhstan; e-mail: n.yerezhep@inp.kz

2. **Nurzhan Saduyev** – PhD, Deputy Director for Research Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; Shan High Altitude Science Station (TSHASS), Almaty, Kazakhstan; e-mail: n.sadyev@inp.kz

3. **Orazaly Kalikulov** – PhD, Head of the Cosmic Rays Laboratory Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: o.kalikulov@inp.kz

4. **Margarita Banshchikova** – Junior Researcher, Laboratory of Cosmic Ray Physics Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: margaretbanshchikova@gmail.com

Мақала тарихы:

Түсті – 28.11.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Ережеп Нұржан Оразбекұлы** (автор корреспондент) – Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясы, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: n.yerezhep@inp.kz

2. **Садуев Нұржан Орынбасарович** – PhD, Ядролық физика институт директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары; Тянь-Шань биік таулы ғылыми станциясы, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: n.sadyev@inp.kz

3. **Каликулов Оразалы Абилякасимович** – PhD, Ядролық физика институтының Ғарыштық сәулелер зертханасының меңгерушісі, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: o.kalikulov@inp.kz

4. **Банщикова Маргарита Александровна** – Ядролық физика институтының Ғарыштық сәулелер зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: margaretbanshchikova@gmail.com

2-бөлім

ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ

Section 2

PLASMA PHYSICS

Раздел 2

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Seyedeh Nasrin Hosseinimotlagh

Department of Physics, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran

e-mail: nasrinhosseinimotlagh@gmail.com

IRRADIATION OF D-³HE FUEL BY D-BEAM TO ENHANCE FUSION ENERGY GAIN VIA ICF USING INNOVATIVE WHISTLER WAVE COLLAPSE BY MCNPX SIMULATION

In this article, we used as another new method to achieve higher fusion energy gain. In this approach, the ultimate goal is to heat the ions to a large amount of temperature to enhance the number of nuclear reactions. In the design of laser fusion, as much as possible, it is necessary to convert the laser energy into the energy of fuel ions by various types of laser-plasma interactions. But the main problem is that the electrons absorb a lot of laser energy in the first phase of interaction. The transfer of energy from electron to ion through collisional processes happens slowly and is not very efficient. Thus, the matter of transferring energy directly from electromagnetic waves to ions can overcome this basic problem.

Therefore, the aim of this research is to investigate the effective mechanism of energy transfer directly from the laser to the super dense ions of D³He fuel due to the collapse of standing whistler waves (SWW).

In this article, through the numerical solution of coupled point nonlinear kinetic differential equations governing this fuel, taking into account the effect of the collapse of whistler waves, we obtained the desired fuel energy gain of approximately 74 using D-beam along whistler standing waves collapse via MCNPX simulation, which is compared to the mode of without considering these electromagnetic waves is a high gain.

Keywords: ignition, deuteron beam, collapse, energy gain, whistler waves.

Сейеде Насрин Хосейнимотлаг

Физика кафедрасы, Шираз филиалы, Ислам Азад университеті, Шираз қ., Иран

e-mail: nasrinhosseinimotlagh@gmail.com

MCNPX симуляциясын пайдалана отырып, инновациялық ысқырық толқынының құлдырауымен инерциалдық отынды басқару арқылы энергия тиімділігін арттыру үшін D-шоғымен D-³He отынын сәулелендіру

Бұл мақалада термоядролық синтез энергиясын өндірудің жоғары жылдамдығына қол жеткізу үшін жаңа әдіс пайдаланады. Бұл тәсілде негізгі мақсат – иондарды ядролық реакциялардың санын арттыру үшін жоғары температураға дейін қыздыру. Лазерлік синтезді жобалағанда, мүмкіндігінше, лазер-плазмалық әрекеттесулердің әртүрлі түрлері арқылы лазер энергиясын отын ионының энергиясына түрлендіру қажет. Дегенмен, негізгі мәселе электрондар өзара әрекеттесудің бірінші кезеңінде лазерлік энергияның көп бөлігін жұтады. Соқтығыс процесі арқылы энергияның электрондардан иондарға ауысуы баяу және онша тиімді емес. Осылайша, энергияны электромагниттік толқындардан иондарға тікелей беру мүмкіндігі бұл негізгі мәселені жеңеді.

Бұл зерттеудің мақсаты тұрақты ысқырық толқындарының (SWW) күйреуі салдарынан лазерден D-³He отынының ультра тығыз иондарына тікелей энергия берудің тиімді механизмін зерттеу болып табылады.

Бұл жұмыста осы отынды сипаттайтын біріктірілген бейәсызықты кинетикалық дифференциалдық теңдеулер жүйесін сандық шешу арқылы ысқырық толқынның құлау әсерін ескере отырып, MCNPX симуляциясын пайдаланып, тұрақты ысқырық толқындары бойымен D-сәулесінің көмегімен шамамен 74 отын энергиясының шығымына қол жеткізілді. Бұл осы электромагниттік толқындарды есепке алмаған режимде энергия өндіру коэффициентінен айтарлықтай асып түседі.

Түйін сөздер: тұтану, дейтрон шоғы, коллапс, энергия коэффициенті, ысқырық толқындары

Сейеде Насрин Хоссейнимотлаг
Ширазский филиал, Кафедра физики, Исламский университет Азад, г. Шираз, Иран
e-mail: nasrinhosseinimotlagh@gmail.com

Облучение топлива D-³He пучком D для усиления энергетического прироста синтеза посредством инерциального УТС с использованием инновационного коллапса свистящей волны с помощью моделирования MCNPX

В данной статье использован новый метод для достижения более высокого коэффициента выработки энергии термоядерного синтеза. В этом подходе конечной целью является нагревание ионов до высоких температур для увеличения числа ядерных реакций. При проектировании лазерного синтеза необходимо, насколько это возможно, преобразовывать энергию лазера в энергию ионов топлива с помощью различных типов взаимодействий лазера с плазмой. Однако основной проблемой является то, что электроны поглощают большую часть энергии лазера на первом этапе взаимодействия. Передача энергии от электронов к ионам через процесс столкновений происходит медленно и не очень эффективно. Таким образом, возможность прямой передачи энергии от электромагнитных волн к ионам позволяет преодолеть эту основную проблему. Цель данного исследования – изучение эффективного механизма прямой передачи энергии от лазера к сверхплотным ионам топлива D-³He за счет коллапса стоячих свистящих волн (SWW). В данной статье с помощью численного решения системы связанных нелинейных кинетических дифференциальных уравнений, описывающих это топливо, с учетом эффекта коллапса свистящих волн был достигнут коэффициент энерговыработки топлива приблизительно равный 74 при использовании D-пучка вдоль стоячих свистящих волн с помощью симуляции MCNPX. Это значительно превышает коэффициент выработки энергии в режиме без учета этих электромагнитных волн.

Ключевые слова: зажигание, дейтронный пучок, коллапс, коэффициент энерговыработки, свистящие волны.

Introduction

Under extreme temperatures and pressures, two nuclei can overcome the Coulomb barrier and join together via the tunneling effect to create a larger nucleus, releasing high amount of energy in the process. This reaction is known as NF (NF). During NF, lighter nuclei fuse to produce heavier nuclei and produce energy, so that the energy of the sun and stars is also released based on the NF process [1]. NF has the ability to produce almost super-high energy for human society because fuel sources are highly abundant [2] and there is no risk of sudden meltdown. It also does not produce long-lived radioactive waste or greenhouse gases. [3]. In this way, the possibility of building a star on Earth and using the energy from the NF reaction has been announced as the key to solving all of the energy problems of human society [4]. NF was observed before nuclear fission. The first experiment of NF was performed by Oliphant, Hartek and Lord Rutherford in 1934. They observed that, by bombarding deuterium-containing target compounds with deuterium ions, a new isotope of hydrogen and a neutron can be produced [5]. They reported that a "hydrogen conversion effect" had occurred [6] and this effect was later proven to be the deuterium-deuterium NF reaction. Although this reaction was

discovered before World War II, despite the efforts made, the use of the fusion reaction as an energy source was not realized until the 1950s [7].

In the early 1960s, scientific understanding of nuclear fission reaction energy production methods led to the rapid commercialization of fission technology. But in the same period, NF studies was very slow [8]. However, unlike nuclear fission, which occurs spontaneously in some cores in nature, NF only occurs in stars with intense gravitational pressure and high temperatures. Considering the complexity of the conditions required for NF, it was obvious that imitating a star and exploiting the energy resulting from NF reaction on Earth is a challenging issue.

Interesting test results were reported by the Soviet Union in 1965 on a tokamak fusion device. A tokamak is a donut-shaped device used to confine fusion plasma using a strong magnetic field. Initially, the experimental results of the tokamak were ignored by the NF research scientists. Following that, in the early 1970s, the effectiveness of the tokamak was noticed and number of countries developed their own tokamak devices, which continue to operate today, to the point where the European Union currently includes the countries of India, Japan, and Russia. the United States, South Korea and China are jointly

involved in the construction of the ITER (International Nuclear Experimental Reactor) tokamak. ITER is one of the most important NF reactors in the world today. Currently, access to the first D-D fusion plasma at ITER is scheduled to begin in 2025, but full-power D-T fusion plasma operations will begin in 2035.

In 2017, Sano and colleagues investigated the interaction of a dense plasma with an ultra-high intensity laser by applying a strong B_{ext} (external magnetic field). They found that if the ω_c (cyclotron frequency) of the environment magnetic field is more than the ω_0 (laser frequency), the laser electromagnetic wave propagates in the form of a whistle along the field line. Due to the whistler wave behavior, the laser beam stops inside the compressed plasma and superheated electrons are created through cyclotron resonance. As a result, the emission of a whistling wave with a large amplitude can increase the probability of heating the plasma and accelerating the particles in the depth of the dense plasma [9]. In 2018, Sakata and colleagues conducted studies on how to isochorically heat a pre-condensed fusion plasma.

This work was done with a short pulse ultra-intense laser to create states with extremely high energy density such as ICF. In this research, they used a B-field of about hundreds of Teslas [10]. In 2019, Sano and his colleagues, considering the problem that the energy of laser waves is quickly transferred to plasma electrons, they focused on the rapid energy transfer of wave particles to ions caused by the collapse of SWW through numerical and theoretical simulations. They concluded that ions in SWW obtain high energy directly from waves in a very short time scale compared to wave oscillation period [11]. The heated T_i (ion temperature) enhances proportionally to the wave amplitude square and becomes much more than T_e (electron temperature) in a wide interval of fusion plasma conditions. In the same year, Kli and his colleague researched laser emission in hyperdense magnetic plasma.

Another method to increase the energy gain of the D-³He fuel is to irradiate the fuel pellet by a high-energy deuteron beam. According to this method, the deuteron (D)- beam is introduced for FI. [12] These

deuteron beams have very high energy to create a hot-spot (HS).

These deuteron beams can be produced with the help of a laser-plasma accelerator. Deuterons not only exhibit ballistic focusing, but also fuse with the considering fuel (here both D and ³He), and producing "reward" energy and increasing the energy gain of fusion. Depending on the desired plasma conditions, this increase in fusion gain can have a special role. Therefore, if we can achieve a very high deuteron flux, a FI D- beam can be very desirable. [13] In this paper, we use this idea to calculate the reward energy released by using high-energy deuterons with the desired fuel ions in the range of 10-190 keV. This reward energy increases the energy released in the desired system. We use a modified energy enhancement factor φ to estimate the additional energy in terms of additional HS heating in the target D+³He fuel. The deposited energy of deuteron beam is calculated here by MCNPX code.

In addition to obtaining the deposited energy, they also had studies in the fields of inertial confinement fusion. In 2020, Sano and his colleagues conducted research on thermonuclear fusion through the collapse of SWW [14]. Because in both MCF and ICF methods, high energy gain has not yet been achieved and some of the problems have not been solved. For this reason, in this work we present another new method for the first time to achieve higher energy gain in D-³He fusion reactors, which includes D-beam irradiation D-³He fuel pellet along with collapse SWW via MCNPX simulation. Therefore, in order to achieve this goal, NF methods are briefly introduced. After that, the reasons for choosing aneutronic fuel D-³He compared to D-T fuel and major challenges on the way of fusion reactors are introduced. Also, the sources of ³He in the solar system is described. Then, we conduct a study on the heating process of the SWW in creating NF based on the theoretical model. Also, we write the particle and energy balance equations to control D-³He fusion. After that, we present the results of our numerical calculations with Maple 20 programming. Also, simulation results via MCNPX are given and finally we present conclusions.

Materials and Methods

NF methods

Although there are several methods for controlling and restraining fusion plasmas, the two main methods that are discussed are based on the concepts of MCF and ICF. MCF reactors use B fields created by superconductor coils to confine the NF plasma in a donut-shaped container. One torus fusion

device is the ITER tokamak, which uses magnetic coils, which create a primary toroidal B field to enclose the fusion plasma and a secondary poloidal B field to drive currents in the fusion plasma. [15]. Another type of tokamak available is the spherical tokamak device, which has a smaller aspect ratio, and shows better plasma performance, but it does not have a simple engineering design [16]. One of the other of MCF devices is Stellarator, which uses as

superconductor coils in a helical configuration around a plasma chamber, creating a helical B field that is applied to conduct current. Stellators are considered as a high-potential and long-term solution, and therefore fusion reactors based on Stellators are actively being analyzed, but like spherical tokamaks, they are associated with a great engineering design challenge [17]. Unlike MCF, ICF researchers are trying to achieve the higher temperatures and densities needed to initiate NF by heating and compressing fusion fuel targets. It should be noted that in most ICF approaches, ultra-intense lasers are used to heat and compress the target. Another method that has been of interest to scientists is magnetized target fusion (MTF) or magnetic inertial fusion (MIF). In this method, fusion plasma with higher density is used compared to MCF, while low power lasers and other drivers are used compared to ICF methods.

Selection of D-³He fuel as an alternative to D-T fuel

NF is a nuclear reaction in which the Coulombic repulsion between two nuclei is overcome and as a result producing heavier nucleus and subatomic particles, releasing a large amount of energy. Some types of NF reactions to produce energy are those that use hydrogen isotopes (deuterium and tritium), ³He or ¹¹B as reactants:

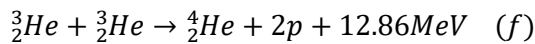
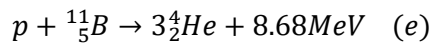
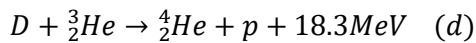
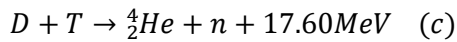
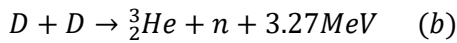
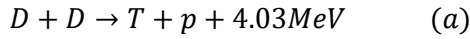


Figure 1 shows the NF reactivity for common fusion reactions in terms of temperature [18,19].

A better option than D-T reactors is to use D-³He, which includes the main reaction (d) and side D-D fusion reactions ((a) and (b)). Each of a) and b) reactions will occur with a probability of 50%, and it can be seen that even this fuel cycle is neutron productive, although it creates less energy and neutrons than the D-T reaction. However, the D³He target becomes nearly neutron-free [4-7] when the amount of deuterium is equal or less than the ³He. There are two reasons why the D³He fuel cycle has never been seriously considered for a fusion reactor. The first reason, which is also significant, is the

severe lack of ³He in the earth. Fortunately, samples of moon soil sent back to Earth by the astronauts and revealed the presence of a lot of ³He on the moon surface, which had been deposited on the moon surface through the solar winds over many years.

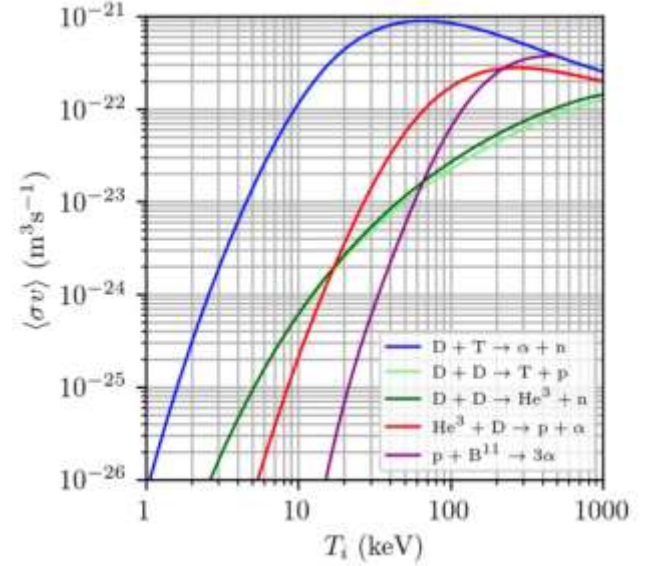


Figure 1 – Fusion reactivity as a function of temperature [18,19].

Researchers have stated that there is about 10^6 tons of ³He on the surface of the moon and up to a depth of several meters. How to extract and transfer it to the earth in the article by Schmidt [8] described in detail. Undoubtedly, extracting ³He on the moon will be a very expensive task, but considering that it produces high electrical power, it is worth considering [6]. Another reason is that the $\langle \sigma v \rangle$ parameter of D³He is lower than that of D-T, therefore the reactor must operate at much higher densities and temperatures compared to D-T. This creates a fundamental problem for ITER tokamaks because the beta of plasma cannot be increased by a few percent and therefore the utilizing of ³He requires high B fields [9]. In fact, the tokamak required for D³He ignition experiments requires a 13T toroidal B-field and a 17T transformer. Therefore, such a model for a tokamak device is very complex, if not impossible.

Challenges governing the realization of NF power plant

There are many challenges such as science, engineering and technological in the commercialization of NF. Basically, to have a D-T reactor of MCF type, the leading technical issues that should be considered are [15]:

- (i) steady state operation of NF plasmas, (ii) construction of advanced diverter system, (iii) development of materials resistant to neutrons, (iv) providing low-cost tritium production technology,

and (v) improving reliable magnetic confinement systems.

Controlling a high efficiency fusion plasma is critical to the success of any fusion device. The development of methods to prevent NF plasma instabilities and disturbances in the commercialization of power plants is the subject of many researches around the world and currently the main focus is on the ITER project [17]. Additionally, a divertor is required to control the NF plasma heat, and to remove the helium "ash" created via the deuterium-tritium reaction itself. Diverters are specific to MCF power plants, or perhaps even MTF approaches. Also, special materials must be made to create a radiation shield to protect the magnets, diagnostic and control equipment, and allow neutrons to enter the tritium breeding blanket to maintain the fusion fuel cycle.

Since the neutrons released from D-T fuel have high energy, fusion reactor manufacturers must ensure that long-lived radioactive waste is not created via the neutrons interaction with the vessel structure containing the NF core [11]. Excluding special isotopes, the required materials list for applying in NF reactors is limited, thus an additional challenge added to the previous problems [17]. In the construction of tritium breeding blankets, the materials of neutron resistant have a special role. Tritium production blankets pursue the following two important goals: a) producing new tritium fuel from neutrons interaction created by the D-T NF reaction with lithium and b) extracting the energy transferred by neutrons in heat form. There are many problems in the design, construction and selection of tritium breeding blankets. The thermo-hydraulic, tritium breeding process, and heat removal challenges all create complex problems, so an integrated solution is essential.

Although a series of different plans based on the concept of tritium breeding technology have been presented, no evidence of the concept of tritium breeding technology has been presented yet, however, even if tritium breeding technology is developed, the challenges related to the sustainability of the tritium breeding blankets is still standing [17]. Therefore, one of the main reasons that we have chosen D³He fuel is that there is no need to design a tritium breeding blanket.

One of the main challenges in NF through MCF is the development of efficient networks of magnetic superconductors, which are required to create a strong B-field in order to confine the NF plasma. To date, most of the efforts of scientists focused on the application of low-temperature superconducting (LTS) magnets which have the ability to carry high currents and B-fields in the MCF reactors with large-

scale. Today, we are witnessing the development of high-temperature superconductors (HTS), which are capable of generating stronger field currents than LTS and with higher cooling efficiency due to the operating temperature. The improvement of HTS systems can lead to the development of smaller and more efficient NF reactors, because these systems will be able to work in stronger B-fields [18,19]. These challenges are interdependent and require an integrated solution [20-23].

The source of ³He in the solar system

The ³He isotope is not that abundant in the Earth, and currently, only 30 kg of it exist on Earth [14]. ³He occurs naturally in the Earth's atmosphere, as well as in natural gas wells, but the amount is very small, as described by Ref. [15]. One important aspect is that the Earth itself does not produce ³He, because it is only a fusion product of the sun in our solar system, which only the sun can produce naturally. For this reason, it can be found in the solar wind, where the ⁴He/³He ratio is about 500 ppm: the wind has been depositing ³He throughout the solar system for billions of years, but the Earth's atmosphere cannot retain it, except to a relatively small extent. Another way to produce it is as a result of the radioactive decay of tritium. There are also many interstellar sources for this isotope, including the Moon, because the Moon has collected and stored all the ³He from the solar wind during its lifetime. And this has made the moon a great source of ³He. [15]. ³He may also exist on Mars, Venus and Mercury. Studies show that if we use the ³He available on the moon, considering that deuterium is abundantly available in the ocean waters, we will have 163 million terawatt hours of energy available as a result of the D-³He reaction.

Theoretical role of SWW in heating of NF plasma

The ICF laser driven is divided into two types: (i) direct and (ii) indirect laser driven fusion. In type (i) a spherical fuel is directly exposed to very intense laser radiation. In practice, it is very difficult to achieve a spherically symmetrical explosion with laser beams.

A lot of progress has been made in this field and today, the most energetic laser in the world has 60 beams and it is designed at the Omega center with direct drive principles. In the NIF, the ICF concept is also used through a direct drive. This approach is simple and relatively cheap and has a higher energy efficiency than the indirect drive. But due to the significant target sensitivity to the intense variations of the laser beams and their asymmetry effect, there is a possibility of destroying the surface of the fuel capsule and destroying it due to Rayleigh-Taylor

hydrodynamics instability. The indirect derive is such that laser beams shine on the surface of a cylindrical chamber, which is usually made of gold, and excite the gold atoms, X-rays are released and the fuel capsule is exposed to radiation. The main drawback of this method is spending a lot of initial energy to produce beams inside the chamber. Therefore, the gain of energy of this approach is not high. Now, in this article, we use fusion through inertial confinement and introduce it further below [24].

The plasma momentum of a spherical target containing an expanding deuterium-tritium fuel is balanced by the momentum of the interior of the fuel. This action causes the target to explode and compress the fuel. Decreasing the explosive target volume is possible by increasing the temperature within it and growing the density of the fuel (the process is almost isobaric). As the volume decreases sufficiently, the temperature in the center of a carefully designed fuel pellet reaches values above 10 keV. A HS is created, which allows for self-ignition of the target. This type of fuel ignition is called "central HS ignition".

Since the fusion energy resulting from the desired fusion reaction (E_{fus}) must be greater than the laser driven energy (E_{las}) (i.e., $G = E_{fus}/E_{las} > 1$), therefore, the density of the compressed fuel pellet must be very large, and its mass must exceed a special limit. Acquiring such a high temperature and density in a supercritical mass deuterium-tritium target using the central HS ignition approach requires the use of a 10 ns laser with energy higher than $10^6 J$. Also, it is technically very difficult to achieve a very high symmetry of the target illumination and apply several conditions [25]. To decrease these requirements, several alternative methods for fuel ignition have been proposed, including: 1) FI [26]; 2) Shock Ignition [27] and 3) Impact Ignition [28,29]. Among these three types of ignitions, FI is a modern laser fusion approach. This ignition will have the potential to generate a much higher gain than common ignition in HS. In the first step, the fuel shell detonates at a low speed, ideally forming an isochoric compact core. Then, a laser with significant energy and ultra-intensity causes ignition in a small area of the compressed area. This action is performed by electrons or ions with high energy as a result of laser-fuel interactions. Since an explosion creates at a much slower rate than common ignition in the HS, more mass will accumulate for the same energy of the laser, and in case of fuel ignition, it will lead to energy growth. In general, there are two methods of hole boring and cone guided for rapid ignition, both of these methods aim to eliminate the large barrier of FI. This barrier is such that the ignition laser can only propagate to the extent that the frequency of the laser

is the same as the frequency of the plasma electrons. It is not possible to carry out FI by hole boring method due to the presence of instabilities during propagation, and the laser light cannot penetrate much and goes back. There are also problems in the path of the channel towards the dense center, so that the beams tend to return to lower densities.

As a result, the densest areas are completely lost [30]. As a result, the propagation of strong pulses in this method is complicated. Therefore, in order to solve these problems, a new method for FI called "cone guided method" has been predicted. This method consists of a hollow gold cone with a closed top, which is placed inside a spherical fuel capsule. The hollow cone is applied to provide the igniter laser pulse path to reach the dense fuel [31]. In this case, the plasma corona with a lower density interacts with the laser and the explosion occurs around the compressed plasma at the tip of the cone. The installation of a hollow cone causes the laser light to converge and focus within it, and very hot electrons are created at its tip close to the compressed plasma.

In this paper, the guided cone FI is used. ICF differs from MCF because in ICF the fuel pellet is confined and compressed through its inertia at high fusion densities and temperatures. In both methods of inertial and magnetic confinement fusion, high energy gain has not yet been achieved and some of the problems are not still solved. For this reason, in this work, we present another new method for the first time to achieve higher energy gain. In this method, the main purpose of fusion is to raise the temperature of the ions to a high level to increase the NF reactions.

In the design of fusion through laser confinement, it is necessary to transfer the laser energy to the fuel ions as much as possible via different types of laser-plasma interactions.[32] But, the main problem is that the electrons receive a large amount of laser energy in the first step of the interaction. The transfer of energy from electron to ion through collision processes is slow and generally not very efficient. The development of energy transfer directly from electromagnetic waves to ions can overcome this fundamental problem. The question raised in the FI scheme is how to increase T_i of the explosive plasma [20]. The purpose of the authors in presenting our work is to investigate how to transfer energy from the laser to ultra-dense ions directly and efficiently. Now the question that exists is what is ion heating and how is it created. In response, it should be said that ion heating occurs when circular polarization electromagnetic standing waves are formed inside the ultra-dense plasma, where the n_e (electron density) exceeds the critical value, $N_c = \epsilon_0 m_e \omega_0^2 / e^2$.

This newly proposed mechanism stems from collapse of SWW [33]. In order to propagate electromagnetic waves in ultra-dense environments, the existence of an external magnetic field (B') is a necessary condition. When B' is greater than the critical magnetic field, $B_c = m_e \omega_0 / e$, the whistling branch of right-handed circularly polarized light with a smaller frequency is seen in the dispersion equation. Whistling waves are defined as electromagnetic waves that move along magnetic field lines. This wave can be propagated in any plasma density due to the absence of cut-off density. Then it finds the necessary condition for direct interaction with ultra-dense plasma. A SWW is essentially generated by the head-on collision of two propagating whistler waves. SWW heating appears only in a standing wave.

On the other hand, left-handed light has a cut-off density N_L , which is defined by $N_L = N_c(1 + B'/B_c)$. However, the SWW can also propagate in ultra-dense conditions under $B' > B_c$. Of course, we focus our studies on whistling waves, because the high density and relatively weak field intensity and preferred conditions of plasma core are compatible with our demand. The appropriate advantage for this FI design is energy transfer to ions with high efficiency in an ultra-fast time scale of the order of laser periodicity. The component of the electric field tangential to the right and polarized in the direction B' is right-handed circular polarization. Thanks to the non-interruption of the whistler wave, the energy of laser is transferred to ultra-dense plasma. This allows the direct interaction of electromagnetic waves with plasma ions. Electrons behave on the time scale of the laser frequency, similar to a fluid in a ultra-dense plasma. If n_e is less than N_c , the standing wave energy is mainly given to electrons via random acceleration [23-28].

The appearance of the electromotive force redistributes the density of electrons and the electrons tend to move towards the anti-nodes of the standing waves. Therefore, the longitudinal electric field component is produced in balance with the $E_x = -(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_x$. This electromotive force becomes zero in the longitudinal direction, $(\mathbf{v} \times \mathbf{B})_x$, wherever the whistler wave exists alone. Note that $\mathbf{v}$ and $\mathbf{B}$ are the tangential components of the electron vibration speed and the magnetic field of the whistler's special mode, respectively. It is reminded that based on the behavior of the SWW, the electromotive force is limited and the amplitude of the longitudinal force does not change with time and is sinusoidal in the x-direction in a half period of the whistler's wavelength. On the other hand, the electromotive force has no effect on the ion equation of motion. The ions are accelerated via the longitudinal electric field component and

move towards the antinodes. Fluctuation of ion density causes the amplitude of the electric field to decrease. However, as long as there is a standing wave, the electromotive force remains unchanged. In addition, the electron density condensation balances the longitudinal component of the force in the electron fluid. Therefore, the longitudinal component of electric field remains stable in a constant domain. This positive feedback ensures the acceleration of the ions in the SWW until the acceleration of the ions is interrupted by the collapse of the wave.

Therefore, the accelerated ions are completely heated by this action, and T_i is obtained by: $\frac{k_B T_i}{m_e c^2} \sim \frac{2\pi Z}{3} \frac{a_0^2}{(n-1)^2(\bar{B}'-1)}$, here k_B , Z , a_0 , and n are Boltzmann's constant, ion charge the laser amplitude, and refractive index of the whistler mode of the laser, respectively. The whistling wave amplitude is given by: $a_w^\pm = 2a_0/(n+1)$. The refractive index of the whistler mode is expressed by the relation n : $n = (1 + \tilde{n}_{e0}/(\bar{B}'-1))^{1/2}$. Then, the transmitted energy of laser gradually decreases with growing density of target. To reach ion saturation acceleration, a limited time is needed [23], which is defined through the

relation $\tau_{sat} \sim \left(\frac{\pi}{16} \frac{m_i}{Z m_e} \frac{(n+1)^2(\bar{B}'-1)}{N^2 a_0^2} \right)^{1/2}$. The saturation time scale is determined by ion movements and T_e caused by resistive heating is given by: $\frac{k_B T_e}{m_e c^2} \sim \left(\frac{40\sqrt{2}\pi \ln \Lambda}{9} \frac{Z r_e}{\lambda_0} \frac{\tilde{n}_{e0} a_0^2}{(n+1)^2(\bar{B}'-1)^2} \tilde{t} \right)^{2/5}$ [24, 28], where $r_e = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2)$ is classical electron radius. It can be seen that the T_i is heated by the collapse of SWW and is often higher than T_e . What affects the ions is longitudinal component of electric field. Therefore, the electric field amplitude which is defined as: $a_x \sim \frac{8N a_0^2}{(n+1)^2(\bar{B}'-1)} \sin(2k_w x)$ should be maximized.

It can be seen that the maximum value of electric field amplitude depends on the initial value n_e of the target, external B field, and on the laser amplitude. Now, if these three items increase, we reach the maximum electric field, and the ion acceleration grows. This causes the growth of the n_i (ion density) and the subsequent collapse of the standing wave. After the collapsing of the ion wave, the ion beams face to face coexists in many places. Subsequently, a high amount of accelerated ions energy is converted into thermal form via two-stream instabilities. Considering the periodic structure of the longitudinal electric field component in addition to the small-scale wavelength of the whistler wave, the significant advantage of this process is the existence of an efficient mechanism for the acceleration of ions and

their simultaneous heating. The main requirement for SWW heating is the presence of a magnetic field stronger than the critical intensity. So far, several research groups have reported how to achieve strong magnetic fields in the kilo-tesla range in laser labs [28-32]. In this case, the magnetic field caused by the laser is compressed due to the explosion, and it is possible to increase the intensity of this field by an order of magnitude and reach the critical value B_c . Although, the maximum intensity of the available magnetic field is not enough to propagate whistler waves in ultra-dense plasma, but soon it will be possible to use ultra-intense lasers in acceptable supercritical field conditions to excite relativistic whistler waves. Moreover, the intensity of the critical magnetic field is proportional to the inverse of the laser wavelength. In fact, this process can occur with a suitable field intensity in the conditions governing the laboratory plasma [33-35].

We note that in addition to the external B-field, creating a magnetic field inside the plasma produced by the laser is one of the important points. This is especially important when one micrometer lasers are used. This field, originally proposed by Korobkin and Servo, is effective in preventing thermal conduction in the corona of target. They generated a plasma spark using a focal ruby laser and reported the generation of a magnetic field through the induced current in the coil. We know that the efficiency of energy conversion from whistling waves to ions depends on the laser and plasma parameters. The method used in this article is the use of whistler waves. This method can be considered as a new model for the production of thermal fusion plasma even with smaller heating lasers. By using this model, we can achieve higher energy gain for aneutronic and neutronic fuels.

Balance equations of particles and energy for NF control

In our research, we used as the balance equations of particles and energy related to aneutronic D³He fuel in order to determine the density of consumed and produced particles, the NF power density and finally the fusion gain. Therefore, we write these equations as follows:

Point kinetic nonlinear coupled differential equations for D³He fusion fuel

$$\frac{dn_\alpha}{dt} = -\frac{n_\alpha}{\tau_\alpha} + n_D n_{^3\text{He}} \langle \sigma v \rangle, \quad (1)$$

$$\frac{dn_D}{dt} = -\frac{n_D}{\tau_D} - n_D n_{^3\text{He}} \langle \sigma v \rangle + S_D, \quad (2)$$

$$\frac{dn_{^3\text{He}}}{dt} = -\frac{n_{^3\text{He}}}{\tau_{^3\text{He}}} - n_D n_{^3\text{He}} \langle \sigma v \rangle + S_{^3\text{He}}, \quad (3)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = -\frac{n_p}{\tau_p} + n_D n_{^3\text{He}} \langle \sigma v \rangle, \quad (4)$$

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{E}{\tau_E} + Q_{D^3\text{He}} n_D n_{^3\text{He}} \langle \sigma v \rangle - P_{\text{rad}} + P_{\text{aux}} + P_{\text{ohmic}} - P_{\text{syn}} \quad (5)$$

where n_α , n_D , $n_{^3\text{He}}$ and n_p are the density of alpha, deuterium, helium3 and proton particles, respectively. Control inputs include fueling rates for deuterium (S_D), helium3 ($S_{^3\text{He}}$), as well as auxiliary power P_{aux} and $Q_{D^3\text{He}} = 18.34 \text{ MeV}$.

The $\langle \sigma v \rangle$ parameter of D³He fuel is a function of plasma temperature T , which is expressed by:

$$\langle \sigma v \rangle (D^3\text{He}) = C_1 \zeta^{-5/6} \xi^2 \exp(-3\zeta^{1/3} \xi) + \left(\exp\left(-\frac{148}{T}\right) \times 5.41 \times 10^{-15} T^{-3/2} \right). \quad (6)$$

Here $\zeta = 1 - \frac{C_2 T + C_4 T^2 + C_6 T^3}{1 + C_3 T + C_5 T^2 + C_7 T^3}$ and $\xi = C_0 / T^{1/3}$. In this equation, the parameters a_i , C_i and r are determined from Ref [19]. E is the energy density and parameters τ_α , τ_D , $\tau_{^3\text{He}}$, τ_p and τ_E are the confinement time of alpha, deuteron, helium3, proton, and energy particles, respectively. The net heat power of plasma is $P = P_{\text{fusion}} - P_{\text{rad}}$ and fusion power is defined by the following relation:

$$P_{\text{fusion}} = Q_{DT} n_D n_T \langle \sigma v \rangle. \quad (7)$$

In this work, the dissipation radiation, P_{rad} , is approximately expressed as follows:

$$A_{b(D^3\text{He})} = 4.85 \times 10^{-37} \frac{W m^3}{\sqrt{K e V}}, \quad (8)$$

$$Z_{\text{eff}}(D^3\text{He}) = \frac{\sum_i \frac{n_i Z_i^2}{n_e}}{n_e} = \frac{n_D + 4n_{^3\text{He}} + 4n_\alpha + n_p}{n_e}, \quad (9)$$

$$n_e(D^3\text{He}) = n_D + 2n_{^3\text{He}} + 2n_\alpha, \quad (10)$$

$$n(D^3\text{He}) = 2n_D + 3n_{^3\text{He}} + 3n_\alpha + n_p \quad (11)$$

here, $A_{b(D^3\text{He})}$, Z_{eff} , n_e , n , and T are the bremsstrahlung coefficient, the effective atomic number, the electron density, the plasma density, and the plasma temperature, respectively. The produced NF energy gain is determined by: $G = E_{\text{fusion}} / E_d$, where E_d is the energy of the laser driven pulses and E_{fusion} is the released fusion energy related to the desired fusion reaction.

Results and Discussion

In Figure 2, using equation (6), we have shown the variations of $\langle \sigma v \rangle$ in terms of temperature for D-³He fuel. It can be seen that $\langle \sigma v \rangle$ increases non-linearly with increasing temperature.

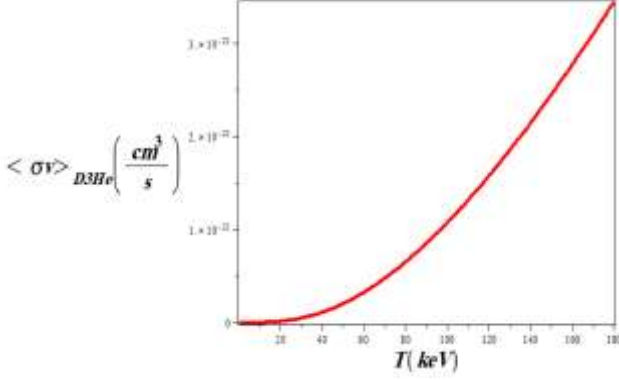


Figure 2 – Two-dimensional diagram of $\langle \sigma v \rangle$ variations in terms of temperature for D-³He fuel using equation (6)

In the next step, with the help of MAPLE programming we solve the point kinetic nonlinear coupled differential equations (Equations 1 to 5) numerically for determining the different parameters such as the density of fusion particles (n_D and $n_{^3He}$), the density of produced particles (n_p and $n_{^4He}$), fusion energy density (E), fusion gain (G), fusion power density (p_{fusion}), bremsstrahlung power density (p_{rad}) and synchrotron power density (p_{syn}) have been determined as a function of time and temperature and we have given their graphs in Figures 3 to 6, respectively.

It can be seen from Figure 3 that at the initial time $t = 0$, the densities of fusion nuclei D and ³He are $N_D = 16 \times 10^{17} cm^{-3}$ and $N_{^3He} = 8.5 \times 10^{16} cm^{-3}$, respectively. These densities gradually decrease with the increase of time because they perform the fusion reaction of D-³He and are consumed until in the time range of 7.2-10 ns the density of ³He nuclei is equal to $N_{^3He} = 0.09 \times 10^{16} cm^{-3}$ which is reached to characteristic of the steady state, while in the time range of 10-7.2 ns, the density of D nuclei reaches the value $N_D = 0.07 \times 10^{16} cm^{-3}$ belong to characteristic of the steady state. Also, increasing the temperature does not have much effect on the numerical values of these densities.

Figure 4 shows the time and temperature variations of the D-³He fusion reaction products. It can be seen from this figure that the densities of N_p and $N_{^4He}$ gradually increase with increasing time due to the increasing of the number of D-³He fusion reactions until reach the maximum value, then due to

the fact that the number of fusion fuels is reduced, the density of the fusion products decreases gradually until its value reaches the characteristic amount of steady state. Also, since the $\langle \sigma v \rangle$ of the D-³He increases with temperature increasing, the amount of the D-³He NF reaction products increases. It should be noted that the D-³He NF reaction has the highest reactivity at the resonance temperature of 190 keV. At this temperature, we have the highest production of reaction products.

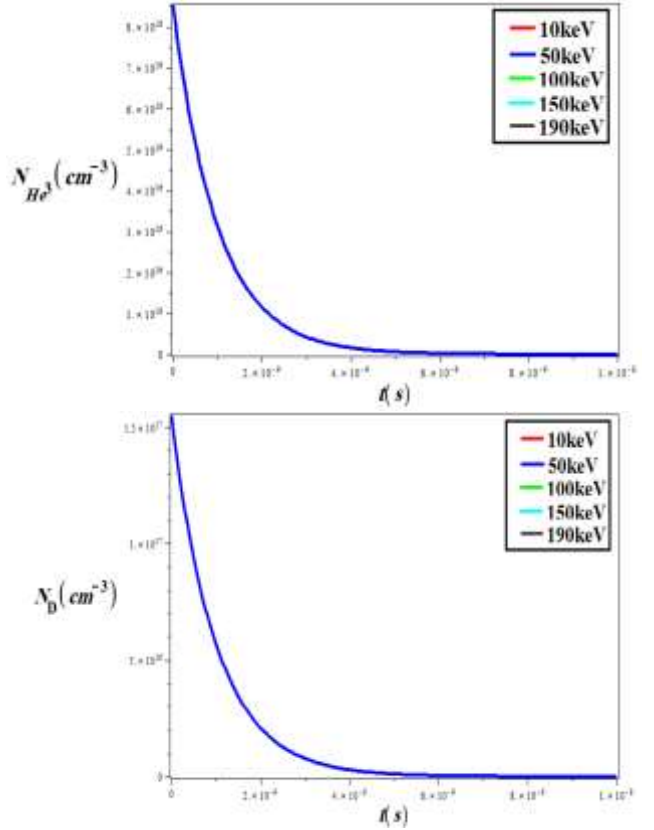


Figure 3 – Two-dimensional variations of fused particles densities versus time at various $T(keV)$, taking into account the production of whistler waves (For $N_{^3He}$ is top and N_D is bottom figures)

According to Figure 5, it can be concluded that the time and temperature variations of the NF energy density and the energy resulting from the D-³He NF reaction gradually increase with the increase of time due to the increase of NF reactions. After that, due to the reduction of the initial amount of fuel, it is gradually reduced until its value reaches the steady state characteristic value. Also, for this selected fusion fuel, the amount of E and G increases with increasing temperature due to its reactivity increasing, although it should be noted that at the resonance temperature of $T = 190$ keV, D-³He fuel has the highest amount of E and G , so that in this temperature $G = 69$ and $E = 6.9 \times 10^6 J/cm^3$.

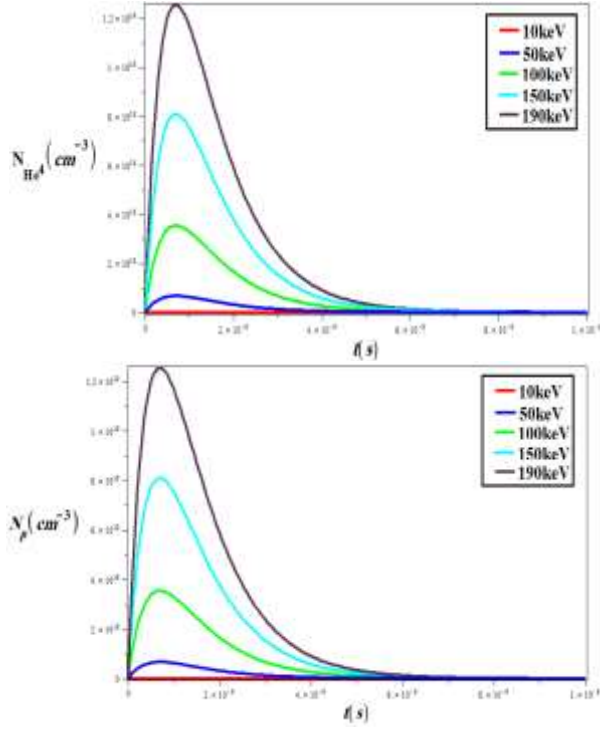


Figure 4 – Two-dimensional variations of fusion products densities obtained from D-³He target versus time at varies(keV), taking into account the production of whistler waves.
(For $N_{4\text{He}}$ is top and N_p is bottom figures)

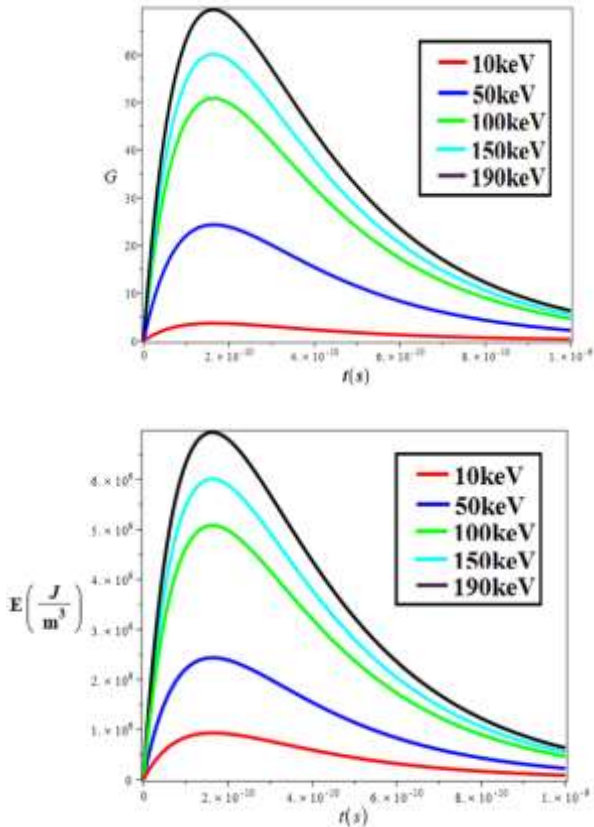


Figure 5 – Two-dimensional diagram of changes in fusion energy and fusion energy gain from D-³He

target versus at various $T(\text{keV})$, taking into account the production of whistler waves.

It should be noted that the flux of protons and alpha particles produced from the D-³He fusion reaction are determined by the relations: $\phi_p = v_p \times n_p$ and $\phi_\alpha = v_\alpha \times n_\alpha$, respectively, where v_p and v_α represent the speed of protons and alpha particles, which are given by $v_p = \sqrt{\frac{2E_p}{m_p}}$ and $v_\alpha = \sqrt{\frac{2E_\alpha}{m_\alpha}}$, respectively, where m_p and m_α are the mass of proton and alpha, as well as E_p and E_α are the energies of protons and alpha particles resulting from D-³He fusion reaction.

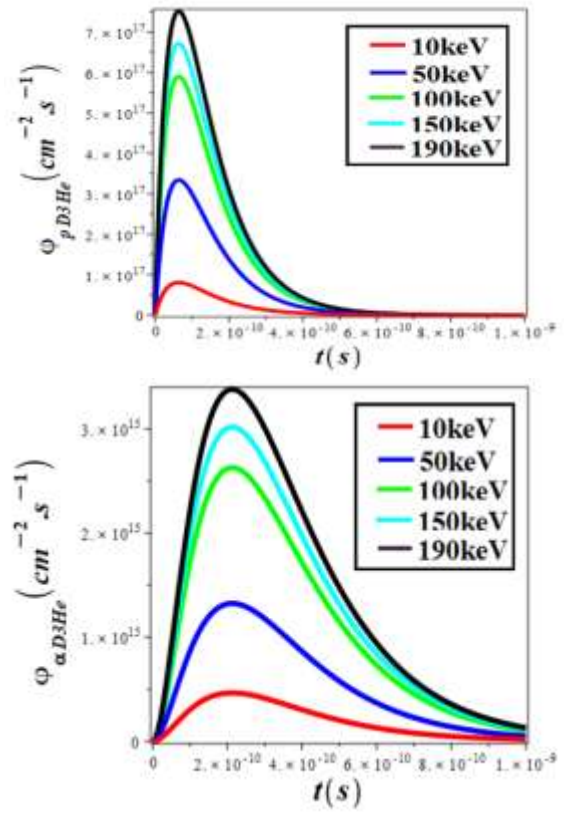


Figure 6 – Two-dimensional variations of particles flux produced from D-³He target versus various $T(\text{keV})$, taking into account the production of whistling waves.

In Figure 6, we see that the 2D variations of particles flux produced from D-³He fusion fuel versus time at various $T(\text{keV})$, taking into account the production of whistler waves. According to this Figure 6, it can be concluded that the time and temperature variations of the particles flux produced from the D-³He fusion reaction gradually increase with the increasing of time due to the increasing of the number of NF reactions, and then it tends to its maximum value, after that, due to the reduction of the initial amount of fuel, it gradually decreases from its amount until it reaches its steady state characteristic

value. Also, for the desired fusion fuel, with increasing temperature, due to its reactivity increasing, the amount of particles flux produced increases, although it should be noted that at the resonance temperature $T = 190\text{keV}$ of $\text{D-}^3\text{He}$ fuel, we have the highest amount of produced particles flux. It is worth mentioning that this flux of produced particles can be used as a source of protons and alpha particles in the treatment of cancer tumors.

From the observation of Figure 7, it can be concluded that with time increasing, the numerical values of the fusion, synchrotron and radiation power densities (P_{fusion} , P_{syn} and P_{rad}) gradually decrease until they reach the characteristics values of the steady state. Because gradually with time increasing the desired fusion fuel is consumed and decrease. Of course, with temperature increasing, the numerical values of P_{fusion} , P_{syn} and P_{rad} densities increase and reach their maximum value at the resonance temperature $T = 190\text{keV}$. This is due to the fact that at this temperature, the largest number of $\text{D-}^3\text{He}$ NF reactions occur and we have the highest reactivity ($\langle \sigma v \rangle$).

The laser-created D-beam is a interest design for receiving the required energy for igniting a pre-compressed target in the FI approach in the ICF. D-beam creates reward energy via beam-fusion reactions during the HS creation in the pre-compressed target. In fact, D-beams are also considered for FI. Xiaoling Yang et al investigated an accelerated D-beam with very high energy deuterons of about 8 MeV to form the desired HS. Not only deuterons provide proven ballistic focusing, but also as they decelerate, they combine with the target fuel D and ^3He , and increase the produced fusion energy known as "reward " energy. Depending on the plasma conditions, the additional reward fusion energy can cause a significant contribution to the amount of final fusion energy gain of $\text{D-}^3\text{He}$ fuel. Therefore, if a high flux of deuterons can be gained, D-beam FI could be very attractive. The energetic D-beam is known as a fast igniter (see Fig.8)

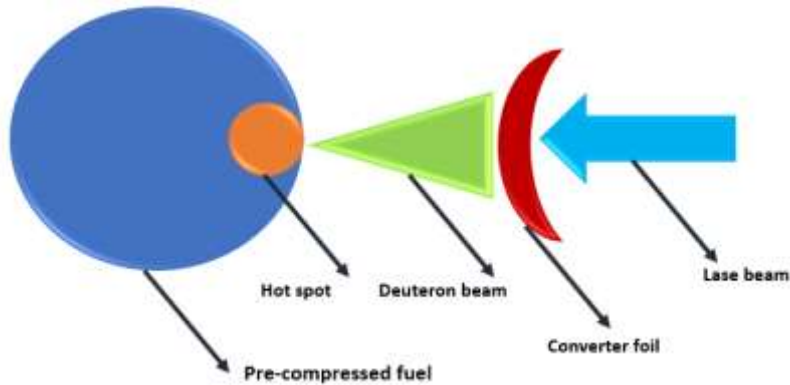


Figure 8 – The pre-compressed target during the HS creation for D-beam driven FI by converter foil method; L is the diameter of HS for the deuteron stopping distance.

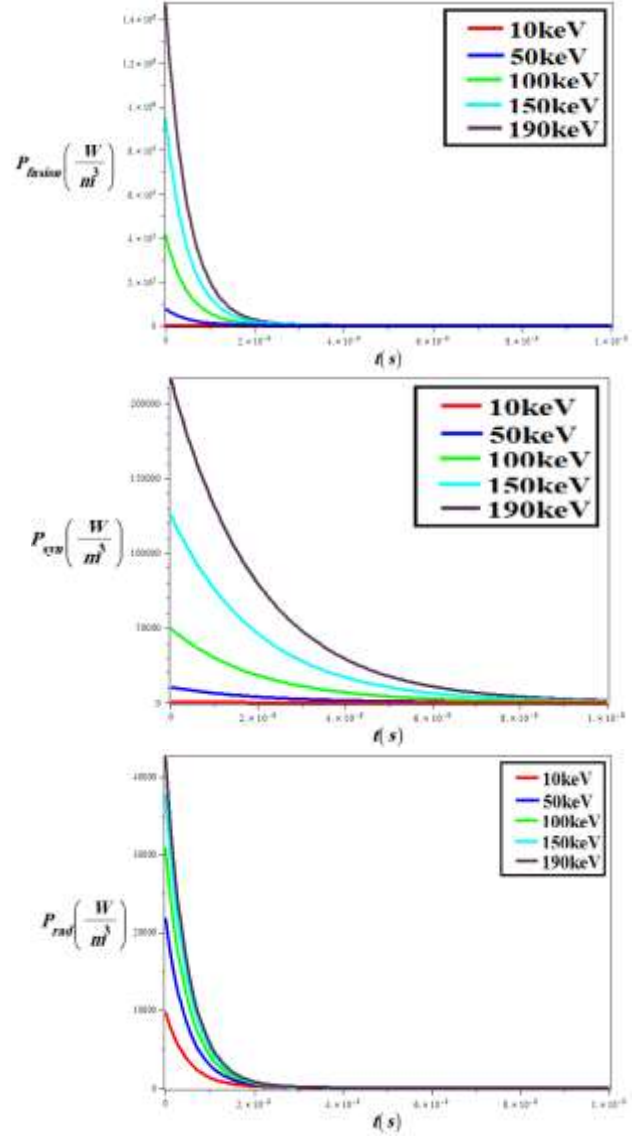


Figure 7 – Two-dimensional variations of fusion power, synchrotron power and Bramsstrahlung power density resulting from $\text{D-}^3\text{He}$ fusion fuel versus at various $T(\text{keV})$, taking into account the production of whistler waves

In this section we will determine the deposited energy of D-beam along laser beams based on selected geometrical fuel pellet (Fig.9) via MCNPX simulation. In this simulation, we use D- beam (8MeV) driven FI which provides not only the HS ignition spark, but also extra “reward” NF energy via reactions in the fuel pellet. Deuterons would not only provide proven ballistic focusing, but also fuse with the target both D and ³He as they slow down, providing a “reward” gain of fusion energy. Therefore, if we can produce a high flux of deuterons, FI driven by D- beam can be very attractive. To produce a deuteron ion beam, we can use the laser (petawatt) collision mechanism with a converter foil. Indeed, the additional beam-target-fusion gain with deuterons is a unique feature that can be used to relax the required total deuteron flux or intermittently decrease the required input laser energy [13].

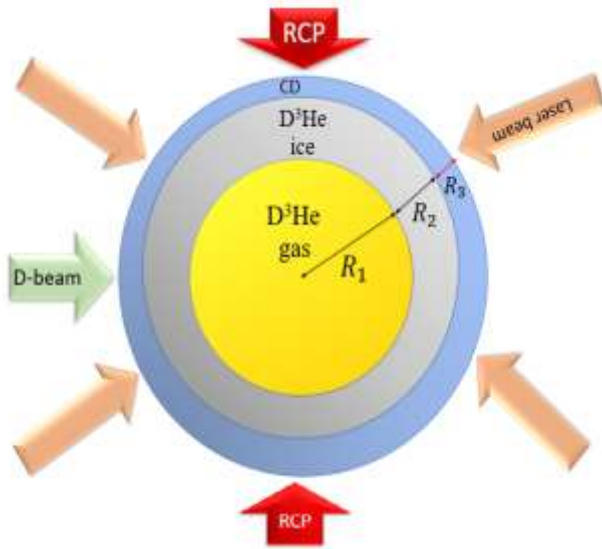


Figure 9 – Two-dimensional generic cross-section of a selected ignited pellet. The shell dimensions $R_1 = 1416\mu\text{m}$, $R_2 = 407\mu\text{m}$, and $R_3 = 177\mu\text{m}$ with right-circular polarization (RCP), KrF-laser energy range 0.2 MJ, and deuteron beam with 8 MeV.

In the Figure 10, we have given the logarithm of the deposited energy in the desired fuel pellet as a result of our simulation without (Figure 10-a) and with (Figure 10-b) considering SWW.

From looking at Figures 10a and 10b, it can be concluded that the maximum value of deposited energy by the D-beam in the desired fuel pellet with and without considering the formation of SWW is equal to 283002.32 and 57.67 erg/mm³ respectively, which shows a significant increase due to formation of whistling waves along with D-beam radiation. Therefore, the findings of our simulations represent that the use of D-beam along to the collapse of SWW

in the desired fuel pellet gives a maximum reward energy gain of 3.8.

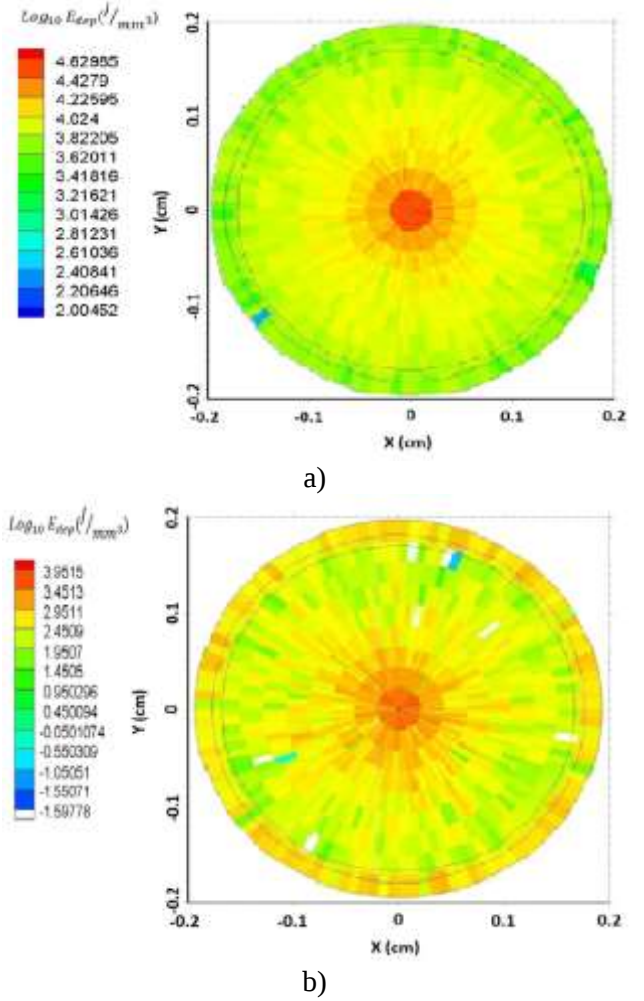


Figure10 – The two dimensional deposited energy in the desired fuel pellet in terms of x and y and z=0 in the desired fuel pellet by direct drive fusion a) under the irradiation of 190 identical laser beams with intensity $10^{16} \text{W} \cdot \text{cm}^{-2}$ and two laser beams (RCP) symmetric and opposite with intensity $10^{21} \text{W} \cdot \text{cm}^{-2}$ and applying a strong external magnetic field) considering whistler waves b) under the irradiation of 192 identical laser beams centered from all directions symmetrically with the intensity $10^{16} \text{W} \cdot \text{cm}^{-2}$, without two laser beams (RCP) and an external magnetic field using MCNPX code.

Conclusions

In this research, we presented another new method for the first time to achieve higher fusion energy gain. In this method, the main purpose of nuclear fusion is to heat the ions to the appropriate temperature to enhance the NF reactions. In the ICF mechanism using a laser, as much as possible, the

laser energy should be converted into the energy of fuel ions through different types of laser-plasma interactions. However, one of the main problems is that the electrons often gain laser energy in the first phase of the interaction. The mechanism of energy transfer from electron to ion occurs slowly through collisional processes and is generally not very efficient. Therefore, to overcome this problem, the development of direct energy transfer from electromagnetic waves to ions has a valuable meaning. The aim of this work is to analyze the efficient mechanism of laser energy transfer to ultra-dense ions. The newly proposed ion heating process is caused by the collapse of SWW. Due to the problems that exist in the neutron-producing deuterium-tritium fusion reaction, in this work we use aneutronic D-³He fuel. We used it to overcome the problem of producing unwanted neutrons. Finally, by numerically solving the coupled point nonlinear

kinetic equations, related to aneutronic D-³He fusion fuel, taking into account the effect of the collapse of the whistler waves, we determined the energy gain of the desired fuel. And finally, we found that when we consider the effect of the collapse of the whistler waves, the gain increases significantly compared to the case when we do not consider the mechanism of the whistler waves, and the D-³He fuel has the highest gain at the resonance temperature of 190keV, which is almost equal to 70, while T Ohmura et al reported a maximum gain of 60 through FI [34], which indicates that the collapse of whistler waves as a new design almost increases the gain by 10 units. Therefore, taking into account the reward energy gain resulting from the irradiation of D- beam in the target together with the calculated energy gain resulting from D-³He fuel caused by SWW collapse in section 6, we will achieve the maximum energy gain is equal to 74 (at the temperature resonance of 190keV).

References

- 1 Burbidge E.M., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F. Synthesis of the elements in stars // *Reviews of Modern Physics*. – 1957. – Vol.29(4). – P.547. DOI: 10.1103/RevModPhys.29.547
- 2 Bradshaw A.M., Hamacher T., Fischer U. Is nuclear fusion a sustainable energy form? // *Fusion Engineering and Design*. – 2011. – Vol. 86, No. 9-11. – P. 2770-2773. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2011.04.056.
- 3 Ueda Y., Inoue T., Kurihara K. Intelligible seminar on fusion reactors (1) Introduction to fusion reactors // *Journal of the Atomic Energy Society of Japan*. – 2004. – Vol. 46, No. 12. – P. 27-34.
- 4 Armaroli N., Balzani V. The future of energy supply: Challenges and opportunities // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2007. – Vol. 46, No. 1-2. – P. 52-66. DOI: 10.1002/anie.200602373.
- 5 Browne E., Dairiki J.M., Doebler R.E. Table of Isotopes. – Fort Belvoir, VA: National Standard Reference Data System, 1978.
- 6 Oliphant M., Harteck P., Rutherford L. Transmutation effects observed with heavy hydrogen // *Procs of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*. – 1934. – Vol. 144, No. 853. – P. 692-703. DOI: 10.1098/rspa.1934.0076.
- 7 Arnoux R. Who invented fusion? // Saint-Paul-lès-Durance: ITER Organization [Internet]. – 2014. Available from: <https://www.iter.org/newsline/-/1836> [Accessed: 2018-06-01].
- 8 Braams C.M., Stott P.E. Nuclear Fusion: Half a Century of Magnetic Confinement Fusion Research. – Boca Raton, FL: CRC Press, 2002.
- 9 Sano T., Mori K., Matsumoto T., Nishida Y., et al. Broadening of cyclotron resonance conditions in the relativistic interaction of an intense laser with over dense plasmas // *Phys. Rev. E*. – 2017. – Vol. 96. – P. 043209. DOI: 10.1103/PhysRevE.96.043209.
- 10 Sakata S., Nagatomo H., Nakamura T., Fujioka S., et al. Magnetized fast isochoric laser heating for efficient creation of ultra-high-energy-density states // *Phys.Rev.E*. – 2018. – Vol.9. – P.397. DOI: 10.1038/s41598-017-18825-w.
- 11 Sano T., Mori K., Matsumoto T., Nishida Y., et al. Ultrafast Wave-Particle Energy Transfer in the Collapse of Standing Whistler Waves // *Phys. Rev. E*. – 2019. – Vol. 100. – P. 053205. DOI: 10.1103/PhysRevE.100.053205.
- 12 Schwoerer H., Pfotenhauer S., Jackel O., Amthor K.U., Liesfeld B., Ziegler W., Sauerbrey R., Ledingham K.W.D., Esirkepov T. Laser-driven proton beam therapy: Application of ultra-short pulses of protons for tumor **therapy** // *Nature (London)*. – 2006. – Vol. 439. – P. 445. DOI: 10.1038/nature04492.
- 13 Yang X., Miley G.H., Flippo K.A., Hora H. Energy enhancement for deuteron beam FI of a precompressed inertial confinement fusion target // *Physics of Plasmas*. – 2011. – Vol. 18. – P. 032703. DOI: 10.1063/1.3555640.
- 14 Sano T., Mori K., Matsumoto T., Nishida Y., et al. Thermonuclear fusion triggered by collapsing standing whistler waves in magnetized over dense plasmas // *Phys. Rev. E*. – 2020. – Vol. 101. – P.013206. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.013206.
- 15 Kamada Y., Ueda Y., Inoue T., Kurihara K. Intelligible seminar on fusion reactors (2) Introduction of plasma characteristics for fusion reactor design // *Journal of the Atomic Energy Society of Japan*. – 2005. – Vol. 47, No. 1. – P.45-52.
- 16 Lawson J.D. Some criteria for a power producing thermonuclear reactor // *Proceedings of the Physical Society Section B*. – 1957. – Vol. 70, No. 1. – P. 6. DOI: 10.1088/0370-1301/70/1/303.

- 17 Donné A.J.H., Federici G., Litaudon X., McDonald D.C. Scientific and technical challenges on the road towards fusion electricity // *Journal of Instrumentation*. – 2017. – Vol. 12, No. 10. – P. C10008. DOI: 10.1088/1748-0221/12/10/C10008.
- 18 Sykes A., Costley A., Windsor C., Asunta O., Brittles G., Buxton P., et al. Compact fusion energy based on the spherical tokamak // *Nuclear Fusion*. – 2017. – Vol. 58, No. 1. – P. 016039. DOI: 10.1088/1741-4326/aa7f70.
- 19 Brown D.A., Chadwick M., Capote R., Kahler A., Trkov A., Herman M., et al. NDF/B-VIII.0: The 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, new standards, and thermal scattering data // *Nuclear Data Sheets*. – 2018. – Vol. 148. – P. 1–142. DOI: 10.1016/j.nds.2018.02.001.
- 20 Abdou M., Morley N.B., Smolentsev S., Ying A., Malang S., Rowcliffe A., et al. Blanket/first wall challenges and required R&D on the pathway to DEMO // *Fusion Engineering and Design*. – 2015. – Vol. 100. – P. 2–43. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2015.07.021.
- 21 Whyte D., Minervini J., LaBombard B., Marmar E., Bromberg L., Greenwald M. Smaller & sooner: Exploiting high magnetic fields from new superconductors for a more attractive fusion energy development path // *Journal of Fusion Energy*. – 2016. – Vol. 35, No. 1. – P. 41–53. DOI: 10.1007/s10894-015-0050-1.
- 22 Federici G., Kemp R., Ward D., Bachmann C., Franke T., Gonzalez S., et al. Overview of EU DEMO design and R&D activities // *Fusion Engineering and Design*. – 2014. – Vol. 89, No. 7. – P. 882–889. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2014.01.078.
- 23 Wu Y., Team F. Conceptual design activities of FDS series fusion power plants in China // *Fusion Engineering and Design*. – 2006. – Vol. 81, No. 23–24. – P. 2713–2718. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2006.04.053.
- 24 Atzeni S., Meyer-ter-Vehn J. *The Physics of Inertial Fusion* // Oxford University Press. – 2004. – 488 p.
- 25 Tabak M., Hammer J., Glinsky M.E., Kruer W.L., Wilks S.C., Woodward J., et al. Ignition and high gain with ultrapowerful lasers // *Physics of Plasmas*. – 1994. – Vol. 1. – P. 1626. DOI: 10.1063/1.870664.
- 26 Betti R., Zhou C.D., Anderson K.S., Perkins L.J., Theobald W., Solodov A.A. Shock ignition of thermonuclear fuel with high areal density // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 98. – P. 155001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.155001.
- 27 Caruso A., Pais V.A. The ignition of dense DT fuel by injected triggers // *Nuclear Fusion*. – 1996. – Vol. 36. – P. 745–757. DOI: 10.1088/0029-5515/36/6/I05.
- 28 Murakami M., Nagatomo H. A new twist for inertial fusion energy: Impact ignition // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. – 2005. – Vol. 544. – P. 67–75. DOI: 10.1016/j.nima.2005.01.328.
- 29 Kodama M. Strategic community management promoted by innovation communities // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2008. – Vol. 112. – P. 022068. DOI: 10.1088/1742-6596/112/2/022068.
- 30 Craxton R.S., Anderson K.S., Bainbridge-Smith A., et al. Direct-drive inertial confinement fusion // *Physics of Plasmas*. – 2015. – Vol. 22. – P. 110501. DOI: 10.1063/1.4934713.
- 31 Lindl J.D. Development of the indirect-drive approach to inertial confinement fusion and the target physics basis for ignition and gain // *Physics of Plasmas*. – 1995. – Vol. 2. – P. 3933. DOI: 10.1063/1.871025.
- 32 Matsuo K., Fujioka S., Nishimura H., et al. Novel Experimental Station for High Energy Density Science // *Physical Review Letters*. – 2019. – Vol. 23. – P. 09456. DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.09456.
- 33 Santos J.J., Bailly-Grandvaux M., Giuffrida L., et al. Laser-driven strong magnetostatic fields with applications to charged beam transport and magnetized high energy-density physics // *Physics of Plasmas*. – 2018. – Vol. 25. – P. 056705. DOI: 10.1063/1.5020125.
- 34 Stenzel R.L. Whistler waves with angular momentum in space and laboratory plasmas and their counterparts in free space // *Advances in Physics: X*. – 2016. – Vol. 1. – P. 687. DOI: 10.1080/23746149.2016.1230016.
- 35 Ohmura T., Katsube M., Nakao Y., Johzaki T., Mima K., Ohta M. Ignition and Burn Characteristics of D-3He-Fueled FI Targets // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2008. – Vol. 112. – P. 022068. DOI: 10.1088/1742-6596/112/2/022068.

References

- 1 E.M. Burbidge, G.R. Burbidge, W.A. Fowler, and F. Hoyle, *Reviews of Modern Physics* 29, 547 (1957). DOI: 10.1103/RevModPhys.29.547.
- 2 A.M. Bradshaw, T. Hamacher, and U. Fischer, *Fusion Engineering and Design* 86, 2770–2773 (2011). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2011.04.056.
- 3 Y. Ueda, T. Inoue, and K. Kurihara, *Journal of the Atomic Energy Society of Japan* 46, 27–34 (2004).
- 4 N. Armaroli and V. Balzani, *Angewandte Chemie International Edition* 46, 52–66 (2007). DOI: 10.1002/anie.200602373.
- 5 E. Browne, J. M. Dairiki, and R. E. Doebler, *Table of Isotopes* (National Standard Reference Data System, Fort Belvoir, VA, 1978).
- 6 M. Oliphant, P. Harteck, and L. Rutherford, *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 144, 692–703 (1934). DOI: 10.1098/rspa.1934.0076.
- 7 R. Arnoux, ITER Organization (2014). Available: <https://www.iter.org/newsline/-/1836>.

- 8 C.M. Braams and P. E. Stott, *Nuclear Fusion: Half a Century of Magnetic Confinement Fusion Research* (CRC Press, Boca Raton, FL, 2002).
- 9 T. Sano, K. Mori, et al., *Phys. Rev. E* 96, 043209 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevE.96.043209.
- 10 S. Sakata, H. Nagatomo, et al., *Phys. Rev. E* 9, 397 (2018). DOI: 10.1038/s41598-017-18825-w.
- 11 T. Sano, K. Mori, et al., *Phys. Rev. E* 100, 053205 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevE.100.053205.
- 12 H. Schwoerer, S. Pfotenhauer, O. Jackel, K. U. Amthor, et al., *Nature (London)* 439, 445 (2006). DOI: 10.1038/nature04492.
- 13 X. Yang, G.H. Miley, K.A. Flippo, and H. Hora, *Physics of Plasmas* 18, 032703 (2011). DOI: 10.1063/1.3555640.
- 14 T. Sano, K. Mori, T. Matsumoto, and Y. Nishida, *Phys. Rev. E* 101, 013206 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevE.101.013206.
- 15 Y. Kamada, Y. Ueda, T. Inoue, and K. Kurihara, *Journal of the Atomic Energy Society of Japan* 47, 45–52 (2005).
- 16 J.D. Lawson, *Proceedings of the Physical Society Section B* 70, 6 (1957). DOI: 10.1088/0370-1301/70/1/303.
- 17 A.J.H. Donné, G. Federici, X. Litaudon, and D.C. McDonald, *Journal of Instrumentation* 12, C10008 (2017). DOI: 10.1088/1748-0221/12/10/C10008.
- 18 A. Sykes, A. Costley, C. Windsor, O. Asunta, et al., *Nuclear Fusion* 58, 016039 (2017). DOI: 10.1088/1741-4326/aa7f70.
- 19 D.A. Brown, M. Chadwick, R. Capote, A. Kahler, et al., *Nuclear Data Sheets* 148, 1–142 (2018). DOI: 10.1016/j.nds.2018.02.001.
- 20 M. Abdou, N.B. Morley, S. Smolentsev, A. Ying, et al., *Fusion Engineering and Design* 100, 2–43 (2015). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2015.07.021.
- 21 D. Whyte, J. Minervini, et al., *Journal of Fusion Energy* 35, 41–53 (2016). DOI: 10.1007/s10894-015-0050-1.
- 22 G. Federici, R. Kemp, D. Ward, C. Bachmann, et al., *Fusion Engineering and Design* 89, 882–889 (2014). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2014.01.078.
- 23 Y. Wu and Team F, *Fusion Engineering and Design* 81, 2713–2718 (2006). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2006.04.053.
- 24 S. Atzeni and J. Meyer-ter-Vehn, *The Physics of Inertial Fusion* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- 25 M. Tabak, J. Hammer, M. E. Glinsky, W. L. Kruer, et al., *Physics of Plasmas* 1, 1626 (1994). DOI: 10.1063/1.870664.
- 26 R. Betti, C.D. Zhou, et al., *Phys. Rev. Lett.* 98, 155001 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.155001.
- 27 A. Caruso and V. A. Pais, *Nuclear Fusion* 36, 745–757 (1996). DOI: 10.1088/0029-5515/36/6/I05.
- 28 M. Murakami and H. Nagatomo, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 544, 67–75 (2005). DOI: 10.1016/j.nima.2005.01.328.
- 29 M. Kodama, *Journal of Physics: Conference Series* 112, 022068 (2008). DOI: 10.1088/1742-6596/112/2/022068.
- 30 R.S. Craxton, K.S. Anderson, A. Bainbridge-Smith, et al., *Physics of Plasmas* 22, 110501 (2015). DOI: 10.1063/1.4934713.
- 31 J.D. Lindl, *Physics of Plasmas* 2, 3933 (1995). DOI: 10.1063/1.871025.
- 32 K. Matsuo, S. Fujioka, et al., *Phys. Rev. Lett.* 123, 09456 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.09456.
- 33 J.J. Santos, M. Bailly-Grandvaux, L. Giuffrida, et al., *Physics of Plasmas* 25, 056705 (2018). DOI: 10.1063/1.5020125.
- 34 R.L. Stenzel, *Advances in Physics: X* 1, 687 (2016). DOI: 10.1080/23746149.2016.1230016.
- 35 T. Ohmura, M. Katsube, Y. Nakao, T. Johzaki, et al., *Journal of Physics: Conference Series* 112, 022068 (2008). DOI: 10.1088/1742-6596/112/2/022068.

Article history:

Received 26 September 2024

Accepted 10 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 26.09.2024

Қабылданды – 10.12.2024

Information about authors:

Seyedeh Nasrin Hosseinimotlagh – Department of Physics, Shiraz Branch, Islamic Azad University, Shiraz, Iran; e-mail: nasrinhosseinimotlagh@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

Сейеде Насрин Хосейнимотлаг – Физика кафедрасы, Ислам Азад университетінің Шираз филиалы, Шираз қ., Иран; e-mail: nasrinhosseinimotlagh@gmail.com

3-бөлім

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

Section 3

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

Раздел 3

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

FTAMP 29.19.25

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a5>

Т.М. Алдабергенова , С.О. Акаев* , А.С. Диков ,
А.С. Ларионов , Л.А. Дикова 
Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан
*e-mail: s.akayev@inp.kz

12X18H10T СӘУЛЕЛЕНГЕН БОЛАТТЫ «ҚҰРҒАҚ» ПЯО САҚТАУ КЕЗІНДЕГІ ТЕМПЕРАТУРАЛЫҚ АРАЛЫҚТА ПЛАСТИКАЛЫҚ ДЕФОРМАЦИЯ ОРНАТУ ПРОЦЕСТЕРІ

Бұл жұмыста 12X18H10T маркалы тот баспайтын аустенитті болат үлгілерінің 24 °C, 350 °C және 450 °C температураларда қысқа мерзімді механикалық сынақтарға ұшырағаннан кейінгі бұзылу беттерін жан-жақты зерттеу нәтижелері ұсынылған. Зерттеу үшін үлгілер БН-350 реакторының жұмыс істеп болған ядролық отынынан жасалған.

Зерттеу көп деңгейлі физикалық мезомеханика тәсілі аясында жүргізіліп, материалда әртүрлі температуралық режимдерде болатын күрделі процестерді тереңірек түсінуге мүмкіндік берді. Атап айтқанда, сынау температурасының жоғарылауымен болаттың пластикалығының өзгеруі мұқият талданды және бұл параметрдің деформацияның локализациялану жағдайларына маңызды тәуелділігі анықталды. Сынау температурасының жоғарылауымен пластиканың төмендеуі деформация локализациялану аймақтарында кернеулердің квазибіркелкі таралуымен байланысты екені көрсетілді. Бұл кернеудің локализацияланған концентрация аймақтары материалдың кеуектілігінің артуына әкелген процестерден туындаған, бұл өз кезегінде айналмалы типтегі бейімделу процестерімен байланысты болды.

Осылайша, зерттеу материал құрылымындағы жергілікті өзгерістерді ескеру маңыздылығын көрсетті, олар пайдалану шарттары өзгерген кезде оның механикалық қасиеттеріне айтарлықтай әсер етуі мүмкін. Алынған нәтижелер экстремалды жағдайларда қолданылатын аустенитті болаттарда болатын процестерді тереңірек түсінуге және ядролық және басқа да жоғары жүктемелі жүйелерде қолдануға арналған сенімдірек материалдарды әзірлеуге ықпал етуі мүмкін.

Түйін сөздер: аустениттік болат, пластикалық, аккомодация, фрактография, микроқұрылым

T. Aldabergenova, S. Akayev*, A. Dikov, A. Larionov, L. Dikova
Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan
*e-mail: s.akayev@inp.kz

Accommodation processes in irradiated steel 12X18H10T during plastic deformation in the temperature range of “dry” SNF storage

This paper presents a detailed study of the fracture surfaces of 12Kh18N10T austenitic stainless-steel specimens subjected to short-term mechanical testing at various temperatures: 24°C, 350°C, and 450°C. The specimens for the study were fabricated from spent nuclear fuel of the BN-350 reactor.

The research was conducted within the framework of a multi-level approach to physical mesomechanics, which allowed for a deeper understanding of the complex processes occurring in the material under different temperature regimes. In particular, a thorough analysis of the changes in the steel's plasticity with increasing test temperature was carried out, revealing a significant dependence of this parameter on the conditions of deformation localization. It was shown that the reduction in plasticity with increasing test temperature is associated with a quasi-uniform distribution of stresses in the zones of deformation localization. These zones of local stress concentration were caused by processes that led to an increase in the material's porosity, which, in turn, was due to accommodation processes of the rotational type.

Thus, the study demonstrated the importance of considering local changes in the material's structure, which can significantly affect its mechanical properties under varying operating conditions. The obtained results may contribute to a deeper understanding of the processes occurring in austenitic steels used in

extreme conditions and aid in the development of more reliable materials for use in nuclear and other high-stress systems.

Keywords: austenitic steel, plasticity, accommodation, fractography, microstructure.

Т.М. Алдабергенова, С.О. Акаев*, А.С. Диков, А.С. Ларионов, Л.А. Дикова

Институт ядерной физики, г.Алматы, Казахстан

*e-mail: s.akayev@inp.kz

Аккомодационные процессы в облученной стали 12X18H10T при пластической деформации в температурном интервале «сухого» хранения ОЯТ

В данной работе представлено подробное исследование поверхности разрушения образцов нержавеющей аустенитной стали 12X18H10T, подвергнутых кратковременным механическим испытаниям при различных температурах: 24 °C, 350 °C и 450 °C. Образцы для исследования были изготовлены из отработавшего ядерного топлива реактора БН-350.

Исследование выполнено в рамках многоуровневого подхода физической мезомеханики, что позволило глубже понять сложные процессы, происходящие в материале при различных температурных режимах. В частности, проведен тщательный анализ изменения пластичности стали при повышении температуры испытаний, и выявлена важная зависимость этого параметра от условий локализации деформаций. Показано, что снижение пластичности с увеличением температуры испытаний связано с квазиоднородным распределением напряжений в зонах локализации деформаций. Эти зоны локальной концентрации напряжений были вызваны процессами, которые привели к увеличению пористости материала, что, в свою очередь, было обусловлено аккомодационными процессами поворотного типа.

Таким образом, исследование продемонстрировало важность учета локальных изменений в структуре материала, которые могут существенно влиять на его механические свойства при изменении условий эксплуатации. Полученные результаты могут способствовать более глубокому пониманию процессов, происходящих в аустенитных сталях, используемых в экстремальных условиях, и помочь в разработке более надежных материалов для использования в ядерных и других высоконагруженных системах.

Ключевые слова: аустенитная сталь, пластичность, аккомодация, фратография, микроструктура.

Кіріспе

Пайдаланылған ядролық отынынды сақтау (ПЯО) жоғары радиоактивтілігіне, ұзақ жартылай ыдырау кезеңіне және қауіпсіз сақтау қажеттілігіне байланысты атом энергетикасы саласындағы негізгі зерттеу объектілерінің бірі болып табылады. Мысалы, осы уақытқа дейін 12X18H10T сәулеленген болаттан пластикалық ағынның дамуы негізінен қарастырылды [1-3]. Осылайша, механикалық сынақтардың нәтижелері деңгейінде және микроқұрылымдық зерттеулермен салыстырмалы түрде нашар ұсынылған [4].

Пайдаланылған отынды сақтауды (ПЯО) дұрыс ұйымдастыру қоршаған ортаның қауіпсіздігін қамтамасыз етуде және адамдарға радиациялық әсер ету қаупін азайтуда шешуші рөл атқарады. Заманауи сақтау әдістері материалдарға радиация, жоғары температура және коррозиялық орта сияқты әртүрлі факторлардың әсеріне ұшырайтын уақытша және

ұзақ мерзімді сақтау орындарын пайдалануды қамтиды [5,6].

Аустенитті болаттар, мысалы, 12X18H10T, жоғары коррозияға қарсы және механикалық қасиеттеріне байланысты пайдаланылған отынды сақтау элементтерін жасау үшін кеңінен қолданылады. Дегенмен, ұзақ уақыт бойы агрессивті сақтау шарттарына, соның ішінде температура мен радиациялық факторларға әсер ету берілген металдың механикалық сипаттамаларын айтарлықтай өзгертуі мүмкін. Бұл өзгерістер иілгіштіктің нашарлауына, сынғыштықтың жоғарылауына және микрожарықтар мен кеуектер сияқты ақаулардың дамуына әкелуі мүмкін, бұл өз кезегінде материалдардың сенімділігін және олардың пайдалану қасиеттерін төмендетеді.

Бұл жұмыс пайдаланылған ядролық отынды (ПЯО) ұзақ сақтауды модельдейтін жағдайларға ұшыраған аустенитті болаттардың механикалық қасиеттерін зерттейді. Температуралық жағдай-

лар мен радиациялық әсердің металдың икемділігі мен беріктік сипаттамаларына әсеріне басты назар аударылады. Алынған нәтижелер (ПЯО) пайдаланылған отынды сақтау жағдайында аустениттік болаттарда болатын процестерді жақсы түсінуге және атом энергетикасында пайдалану үшін сенімді және тұрақты материалдарды жасауға мүмкіндік береді. Осыған байланысты материалдардың пайдаланылған отынның барлық сақтау мерзімі ішінде көрсетілген сипаттамаларды сақтау және уақыт өте келе бұзылмау мүмкіндігі туралы сұрақ туындайды. Сәулеленуі жоғары болаттардың беріктік сипаттамаларының өзгеруі негізінен радиациялық ісінуден және ядролық отынның газ тәріздес ыдырау өнімдерінің жиналуынан болса, аз сәулеленген болатта морттану әртүрлі сипаттағы ақаулардың пайда болуынан туындайды [7].

Аустениттік болаттар бір мезгілде жеткілікті жоғары беріктік, пластик және пластикті біріктіретін құрылымдық материал. коррозияға төзімділігі бар тұтқыр қасиеттері және осындай арнайы ыстыққа төзімділігі және магниттік еместігі. Бұл класс болаттарын тиімді пайдалану үшін легирлеуші элементтердің құрамына, термиялық және термиялық деформацияны өңдеу режимдеріне байланысты олардың құрылымдық-фазалық күйінің қалыптасу ерекшеліктерін білу қажет [8].

Жұмыстың мақсаты – «кұрғақ» ПЯО сақтаудың температуралық диапазонында шағын зақымдаушы дозаларға дейін сәулеленген аустениттік болаттың икемділігінің төмендеуіне және салыстырмалы ұзаруына әкелетін процестерді анықтау.

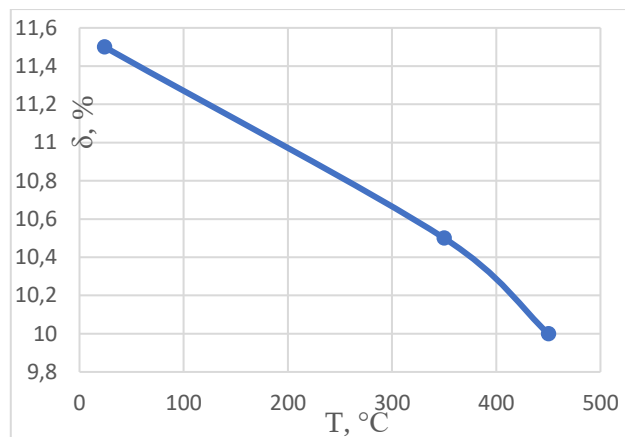
Материалдар және тәсілдер

Зерттеу материалы ретінде аустениттік класты 12X18H10T маркалы тоттанбайтын болат таңдалды. Зерттеуге арналған үлгілер БН-350 реакторының пайдаланылған отын жинақтарының беттерінен (2-3 сна) реактор өзегі ортасынан жоғары аумақтардан кесіліп алынды. Үлгінің өлшемдері $20 \times 2 \times 0,3$ мм болды және ұзақ мерзімді «кұрғақ» ПЯО сақтаудың қалыпты және критикалық жағдайында механикалық қасиеттерді бағалау үшін сәйкесінше 350 және 450 °C температурада бір осьті созылу және баяу тұрақты сырғу сынақтары жүргізілді.

Болат сыну бетін зерттеу сканерлеуші электрондық микроскоп Hitachi TM4000 жабдығы арқылы жүргізілді. Сынық бетінің параметрлерін талдау үшін фрактографиялық талдау әдістері қолданылды [9-11].

Нәтижелер және талқылаулар

Механикалық созылу сынақтары әртүрлі температураларда жүргізілді: (24 °C), 350 °C и 450 °C бөлме температурасында. Сынақ температурасының жоғарылауымен 12X18H10T болаттың созылғыштығының төмендеуі байқалады, ол бұзылуға қатысты салыстырмалы ұзарудың төмендеуімен көрінеді. 1-ші суретте болаттың созылғыштығының өзгеру графигі берілген.



1-сурет – Әртүрлі температураларда кернеуде сыналған 12X18H10T сәулеленген болаттың икемділігінің өзгеруі [9]

Иілгіштіктің төмендеуінің себептерін анықтау үшін сыналған үлгілердің сыну беттері зерттелді (2-сурет). Сынық бетінің жойылу 2в, 3в, 4в суреттерде берілген. Әртүрлі температурада сыналған үлгілердің сыну макрорельефі күңгірттік пен беттің кедір-бұдырлығы сияқты созылғыш сыну белгілерімен сипатталады. Негізгі сыну жазықтығы созылу осіне перпендикуляр бағытталған. Сынақ температурасының жоғарылауы күрделірек макрорельефке әкеледі, нәтижесінде материалдың шөгу аймақтары пайда болады. Бұл аймақтар созылу осіне шамамен 45° бұрышқа бағытталған қосымша сыну жазықтықтарын құрайды. Бұл аймақтардың ауданы көрінетін сыну аймағының шамамен 20% құрайды. Бөлме температурасында сыналған үлгілердің сыну бетінде микроқуыстардың (үлкен шұңқырлардың) сызықты қосылуы нәтижесінде пайда болатын үзілістердің айтарлықтай саны байқалады. Сынақ температурасы жоғарылаған сайын үзілістердің мөлшері мен саны айтарлықтай азаяды. Сынықтардың макрорельефіндегі анықталған айырмашылықтар сынақ температурасының жоғарылауымен сыну механизмінің өзгеруін көрсетеді.

Эртүрлі температурада сынаудан кейінгі болат сынуларының микроқұрылымы шұңқырлы микрорельефтің болуымен сипатталады. Негізгі сыну жазықтығындағы шұңқырлардың пішіні даму дәрежесі эртүрлі пішінге ие. Тепе-тең шұңқырлардан басқа, 350 және 450 °С температурада сыналған болат сынықтарында материалдың шөгу аймақтарында орналасқан кесу шұңқырлары да бар. Шұңқырлардың өлшемдері эртүрлі, 13 мкр жетеді. Шұңқырлардың қабырғаларында жылжымалы механизм арқылы шұңқырлардың өсуін көрсететін толқынды сызықтар көрінеді, бұл материалдың жоғары жергілікті пластикасын көрсетеді. Ірі шұңқырлардың түбінде олардың ядролану орны болып табылатын және пластикалық деформация ізі жоқ қалыпты пішінді болатын екінші фазалардың бөлшектері болады. Кішігірім шұңқырларда, мүмкін, олардың шығу тегінің басқа сипатын, мысалы, дислокацияның жинақталуын көрсетуі мүмкін негіздегі қосындылар жоқ. Шұңқырлар өсіп келе жатқанда, олар біріктіріліп, сыну бетінде өлшемі 20-дан 80 мкм-ге дейін болатын үзілістерді құрайды.

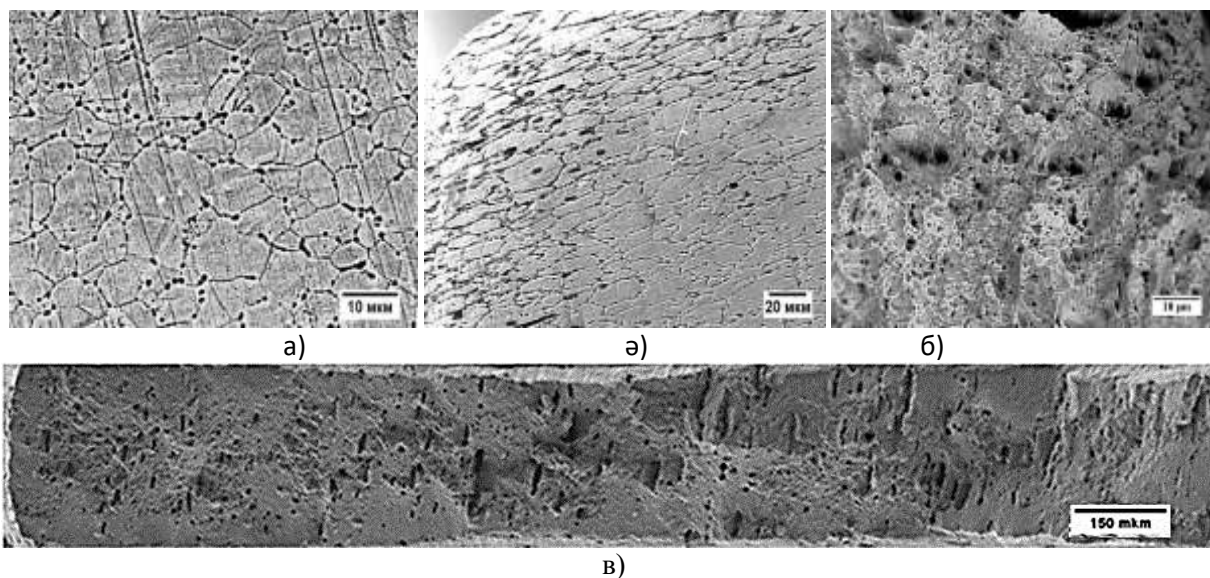
350 және 450 °С температурада сынаудан кейін үзілістер таяз болады және шұңқырлар арасында қалқалар болады. Кейбір үзілістердің ішкі қабырғаларында сырғанау сызықтары бар және олардың негізінде олардың пайда болу орны болып табылатын екіншілік фазалық түзілістер байқалады. Үзілістер мен үлкен шұңқырлар микроскопиялық тең осьті шұңқырлардың бөлу жоталарынан тұратын желімен қоршалған. Көптеген микроскопиялық шұңқырлардың пайда болуы сынақ температурасының жоғарылауымен олардың өсу орындарының ұлғаюын көрсетеді. Сынақ температурасы жоғарылаған сайын микроқуыстылардың пайда болуына кішірек бөлшектер немесе басқа құрылымдық ақаулар қатысуы мүмкін. 450 °С температурада сыну микроқұрылымының айрықша ерекшелігі үлкен микроқуыстылардың бөліну жоталарын қорғайтын шағын шұңқырлар тізбектері пайда болуы.

24 °С температурада болаттың бұзылуы «бөлу» механизмі бойынша жүреді, онда «материал-бөлшек» шекара бөліміндегі микроқуыстың туындауы және өсуі жүреді. Бұл шұңқырлардың түбінде қайталама фаза бөлшектерінің болуымен және микроқуыстардың қабырғаларында дислокацияның сырғуын көрсететін толқынды сызықтармен расталады. Бұл температурадағы деструкция процесін микромеханизм бойынша біртекті деп сипаттауға болады [12-14].

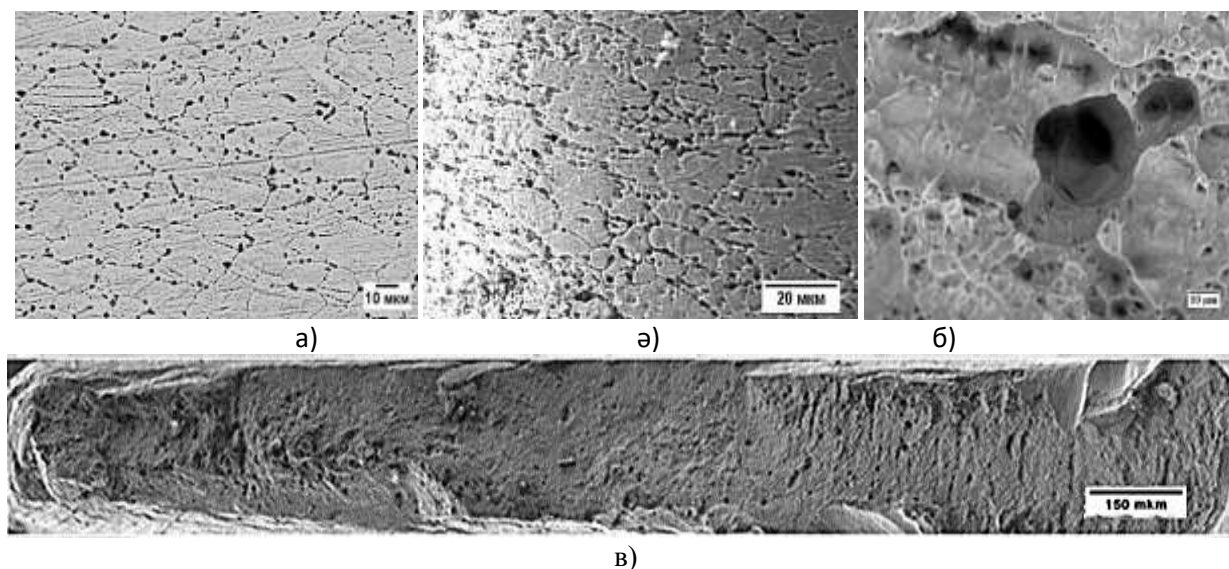
Сынақ температурасы 350-450 °С-қа дейін көтерілгенде, сыну беріктігі сақталады, бірақ сыну микромеханизмінің өзгеруі байқалады. Бұл шұңқырлар арасындағы қалқалары бар үзілістердің толық қалыптаспауынан және созылу осіне ~ 45° бұрышқа бағытталған қосымша сыну жазықтықтарының пайда болуынан көрінеді. Бұл жазықтықтар тангенциалды кернеулердің әсерінен қалыптасады және ығысудың бұзылу механизмін көрсетеді. Дислокациялардың одан әрі сырғуы ең жоғары ығысу кернеулер жазықтықтары бойымен жүреді. Ірі микроқуыстар бетіндегі микроскопиялық шұңқырлар мен шұңқырлардың бөліну жоталарының желісінің пайда болуы температураның жоғарылауымен материалдың жергілікті кеуектілігінің жоғарылауын көрсетеді [15]. Бұл механикалық өрістің біркелкі болмауына және жергілікті кернеу градиенттерінің пайда болуына әкелуі мүмкін, бұл өз кезегінде материалдың беріктік сипаттамаларын нашарлатады.

[16,17] жұмыстардың деректерінен жүргізілгендей үлкен микроқуыстардың бетінде микроскопиялық шұңқырлардың пайда болуы олардың түзілу процесіне кішірек бөлшектердің қосылуымен байланысты екенін растайды. Болат үлгілерінің беткі құрылымын зерттеу бұл гипотезаны растады. [18-20] жұмысында келтірілгендей 2а, 3а, 4а суреттерде температураның жоғарылауымен екінші фазалардың бөлшектерінің саны артады, олардың мөлшері 0,2-ден 3 мкм-ге дейін жетеді. Олар негізінен түйіршік шекараларында және олардың түйіскен жерлерінде таралған. 2а, 3а, 4а - суреттерде көрсетілген сыну орнына жақын аймақта екінші фазалардың бөлшектері де табылды, бірақ олардың өлшемдері шамамен 1-3 мкм². Дегенмен сыну аймағында өлшемі 1 мкм-ден аз ұсақ бөлшектердің іздері табылмады. Бұл бақылау екінші фазалық бөлшектер 450 °С температурада алынған сынықтарда байқалатын микрокеуектіліктің пайда болуына жанама түрде байланысты екенін көрсетеді.

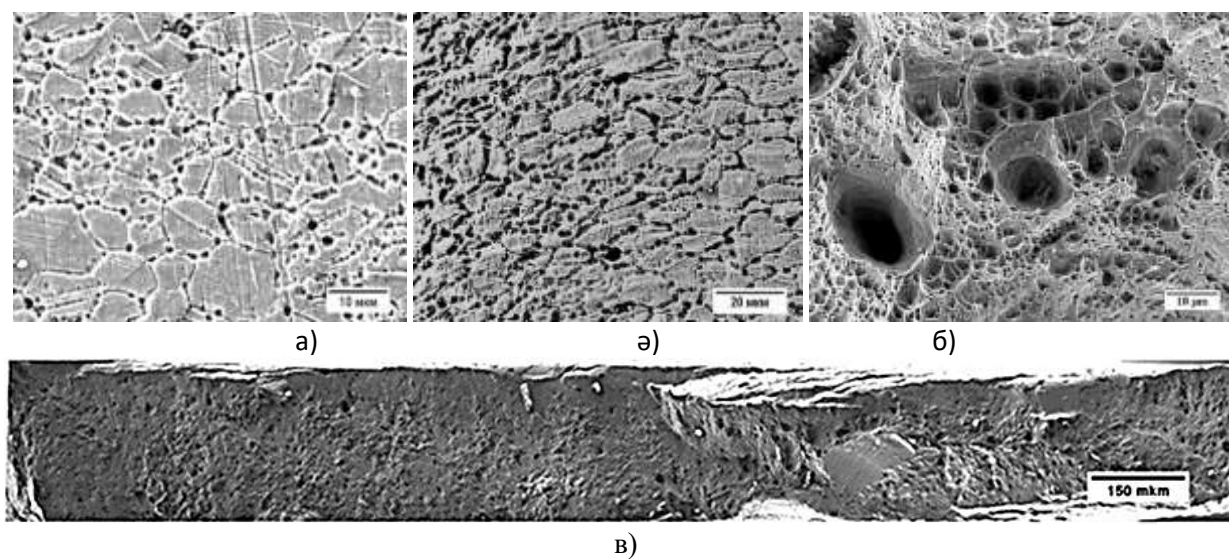
Деформациялардың локализациясы аймағында байқалатын аустенит түйірлерінің ұзаруы (4-суретте) айналмалы түрдегі белсенді аккомодация процестерін көрсетеді. [21,22] сәйкес, деформацияланатын денелердің бөліктерінің айналмалы қозғалысы, мысалы, түйірдің көршілес түйіршіктерге немесе матрицаға қатысты өз осінің айналасында айналуы мезольдеңгейдегі пластикалық деформацияның негізгі механизмдерінің бірі болып табылады.



2-сурет –12X18H10T болат үлгілерінің 24°C температурада сынаудан кейінгі сыну беті

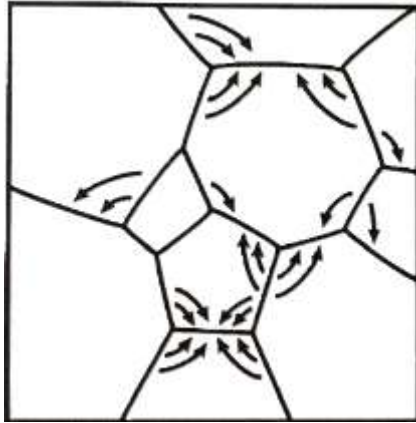


3-сурет –12X18H10T болат үлгілерінің 350°C температурада сынаудан кейінгі сыну беті



4-сурет –12X18H10T болат үлгілерінің 450°C температурада сынаудан кейінгі сыну беті

5-суретте тізбек бойынша түйіршіктердің айналдыру кезінде материалдың кеуектілігін арттыру мүмкіндігін түсіндіретін диаграмма көрсетілген. Қолданылатын кернеулердің әсерінен материалда түйіршік айналымының басталуына ықпал ететін түйіршік шекарасының сырғанау процестері индукцияланады [23-25].



5-сурет –Түйіршіктің бүкіл көлемі бойынша айналу схемасы.

Түйіршікке айналуына ықпал ететін қозғаушы күш дислокациялар арасындағы әсерлесудің серпімділік энергиясының төмендеуі болуы мүмкін [22,26], бұл түйіршіктің біртіндеп айналуына әкеледі. Бұл процесс түйіршіктің пішінін өзгерту және түсірілген кернеу бағытында ұзару арқылы өзгермелі жағдайларға бейімделуі үшін жүреді. Сыну орнының жанында түсірілген микроқұрылымдық фотосуреттерде (2б, 3б, 4б) келтірілген кернеулер бағытында аустенит түйірлерінің мұндай «созылуы» байқалады. Микроқуыстар түйіршіктер шекарасында да көрінеді, олар да ұзартылған пішінге ие.

Сыртқы өрістің серпімділік энергиясы төмендеген кезде [27-30], түйіршік қоршаған матрицаға қатысты тұтастай айнала алады. Бұл микроқуыстар сияқты түйіршік шекарасының ақауларының өсуіне және микроскопиялық кеуектердің пайда болуына әкеледі. Сынықта байқалатын микроскопиялық шұңқырлар негізінде екінші фазалық тұнба бөлшектерінің болмауы түйіршікке тұтастай айналдыру кезінде микроскопиялық шұңқырлардың пайда болуының жанама растауы бола алады. Осылайша, алынған нәтижелердің жиынтығы сынақ температурасының жоғарылауымен болатын иілгіштігінің төмендеуі материалдың кеуектілігінің жергілікті өсуіне ықпал еткен тангенциалды кернеулер әсерінен сыну механизмінің өзгеруіне байланысты болуы мүмкін екенін көрсетеді. айналу типті аккомодациялық процестердің нәтижесінде.

Қорытынды

Сәулеленген болаттың 12X18H10T сыну бетінің құрылымын фрактографиялық зерттеу нәтижелерін талдаудан 350 және 450 °C температурада сыну механизмі ығысуға өзгереді. Бұл өзгеріс айналмалы аккомодациялық процестердің ұлғаюынан туындаған материалдың жергілікті кеуектілігінің артуына байланысты. Нәтижесінде матери алда жергілікті кернеу градиенттері қалыптасады, бұл механикалық өрістің біркелкі болмауына және болаттың созылғыштығының төмендеуіне әкеледі.

Алғыс

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті (грант №BR21881930) қаржыландырды.

Әдебиеттер

- 1 Ибрагимов Ш.Ш., Максимкин О.П., Садвакасов Д.Х. Мартенситное $\gamma \rightarrow \alpha'$ превращение и механические свойства стали 12X18H10T, облученной нейтронами // ФММ.- 1990.- Вып.7.- С.199-201.
- 2 Максимкин О.П., Гусев М.Н. Изменение напряжений течения и латентной энергии при деформации нержавеющей стали 12X18H10T, облученной нейтронами // Письма в ЖТФ. -2003.-Т.29, вып.3. – С.1-7.
- 3 Неустроев В.С., Дворецкий В.Г., Островский З.Е. и др. Исследование микроструктуры и механических свойств стали 08X18H10T после облучения в активной зоне реактора ВВЭР-1000 // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика рад.повр. и рад. материаловед. - 2003.-Т.83, вып.3. - С.15-23.
- 4 Щербак В.И., Дмитриев В.Д. Структурные особенности при деформации облученных нейтронами аустенитных сталей // ФММ.-1987.-Т.64.-Вып.3.-С.591-595.
- 5 Konarski P., Cozzo C., Khvostov G., Ferroukhi H. Spent nuclear fuel in dry storage conditions – current trends in fuel performance modeling // Journal of Nuclear Materials. – 2021. – Vol. 555. – Art.No. 153138. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2021.153138
- 6 Poinssot C., Toulhoat P., Gras J.-M., Vitorge P. Long term evolution of spent nuclear fuel in long term storage or geological disposal. New findings from the French PRECCI R&D program and implications for the definition of the RN source term in geological repository // Journal of Nuclear Science and Technology. – 2014. – Vol. 39. – P. 473-476. DOI: 10.1080/00223131.2002.10875509

- 7 Was G.S. Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys. Second Edition. – Springer New York, 2017.
- 8 Банных И.О. Особенности формирования структурнофазового состояния современных высокопрочных аустенитных сталей. – Перспективные технологии получения материалов и методы их исследования. 21-я Международная школа-конференция имени Б.А. Калина, Москва, 17 – 19 октября 2023.
- 9 Metals Handbook: Fractography and Atlas of Fractographs. Volume 9 (8th Edition). – American Society for Metals, 1974.
- 10 Балтер М.А., Любченко А.П., Аксенова С.И. Фрактография - средство диагностики разрушенных деталей. – М.: Машиностроение, 1987.
- 11 Metals Handbook: Fractography. Volume 12 (9th edition). – ASM International, 1987.
- 12 Dikov A.S., Chernov I.I., Kislitsin S.B. Influence of the Test Temperature on the Creep Rate of 0.12C18Cr10NiTi Structural Steel Irradiated in the BN-350 Reactor // Inorganic Materials: Applied Research. – 2018. – Vol. 9(3). – P.357–360.
- 13 Матвиенко Ю.Г., Модели и критерии механики разрушения. – М.: Физматлит, 2006.
- 14 Merezko M.S., Maksimkin O.P., Merezko D.A., Shaimerdenov A.A., Short M.P. Parameters of Necking Onset during Deformation of Chromium–Nickel Steel Irradiated by Neutrons // The Physics of Metals and Metallography. – 2019. – Vol. 120(7). – P.716-721.
- 15 Jia Xi., Hao K., Luo Zh., Fan Zh. Plastic Deformation Behavior of Metal Materials: A Review of Constitutive Models //Metals. – 2022. – Vol.12. – P. 2077.
- 16 Macek W., Robak G., Żak K., Branco R. Fracture surface topography investigation and fatigue life assessment of notched austenitic steel specimens // Engineering Failure Analysis. – 2022. – Vol.135. – Art.No.106121.
- 17 Sun Y.T., Kong X., Wang Z.B. Superior mechanical properties and deformation mechanisms of a 304 stainless steel plate with gradient nanostructure // International Journal of Plasticity. – 2022. – Vol.155. – Art.No.103336. DOI: 10.1016/j.ijplas.2022.103336
- 18 Panin V.E., Polyakov V.V., Syrov G.V. Evolution of mechanisms of plastic deformation in porous metals // Russ Phys J. – 1996. – No.39. – P. 92–96. DOI: 10.1007/BF02069250
- 19 Liu F., Fa T., Chen P.H., Wang J.T. Steady-state characteristics of fcc pure metals processed by severe plastic deformation: experiments and modelling // Philosophical Magazine A. – 2020. – Vol.100. – P.62-83. DOI: 10.1080/14786435.2019.1671621.
- 20 Liu H., Hu R., Xia X., Yu S. Texture Evolution and Plastic Deformation Mechanism of Cold-Drawn Co-Cr-Ni-Mo Alloy // Metals. – 2024. – Vol.14(6). – P.642. DOI: 10.3390/met14060642
- 21 Панин Е.В., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. – М: Наука, 1985.
- 22 Рыбин В.В., Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986.
- 23 Ask A., Forest S., Appolaire B., Ammar K. A Cosserat-phase-field theory of crystal plasticity and grain boundary migration at finite deformation // Continuum Mech. Thermodyn. – 2019. – Vol.31. – P. 1109-1141.
- 24 Fressengeas C., Upadhyay M.V. A continuum model for slip transfer at grain boundaries // Adv. Model. and Simul. in Eng. Sci. – 2020. – Vol.7. – Art. No.12. DOI: 10.1186/s40323-020-00145-6
- 25 He J., Admal N.Ch. Polycrystal plasticity with grain boundary evolution: a numerically efficient dislocation-based diffuse-interface model // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.– 2022. – Vol.30. – Art.No. 025006. DOI: 10.1088/1361-651X/ac2f84
- 26 Cappola J., Wang J., Li L. A dislocation-density-based crystal plasticity model for FCC nanocrystalline metals incorporating thermally-activated depinning from grain boundaries // International Journal of Plasticity. – 2024. – Vol.172. – Art.No. 103863. DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103863
- 27 Останина Т.В., Швейкин А.И., Трусов П.В. Измельчение зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: экспериментальные данные и анализ механизмов // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2020. – No.2. – P. 85-111. DOI: 10.15593/perm.mech/2020.2.08
- 28 Neverov V.V., Zhitnikov P.P. Rotations of material in the shearing plastic deformation of thin layers // Soviet Physics Journal. – 1989. – No.32. – P. 140–143.
- 29 Chen B., Zhu L., Xin Y., Lei J. Grain Rotation in Plastic Deformation // Quantum Beam Science. – 2019. – Vol.3(3). – P.17. DOI: 10.3390/qubs3030017
- 30 Zhou Y., Wu W., Li J. Heterostructures impacting deformation strengthening processes in QP steels: Investigating the interplay of grain rotation, slip transfer, and back stress strengthening // Journal of Materials Research and Technology. – 2024. – Vol.29. – P. 5340-5353. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.02.225

References

- 1 Sh.Sh. Ibragimov, O.P. Maksimkin, and D.Kh. Sadvakasov, Fizika Metallov i Metallovedenie 70, 199-201 (1990) (In Russ).
- 2 O.P. Maksimkin and M.N. Gusev, Pis'ma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki 29, 1-7 (2003) (In Russ).
- 3 V.S. Neustroev, V.G. Dvoretzky, and Z.E. Ostrovsky, Voprosy Atomnoi Nauki i Tekhniki, Ser.: Fizika Radiatsionnykh Povrezhdenii i Radiatsionnogo Materialovedeniya 83, 15-23 (2003) (In Russ).

- 4 V.I. Shcherbak and V.D. Dmitriev, *Fizika Metallov i Metallovedenie* 64, 591-595 (1987) (In Russ).
- 5 P. Konarski, C. Cozzo, G. Khvostov, and H. Ferroukhi, *Journal of Nuclear Materials* 555, 153138 (2021). DOI: 10.1016/j.jnucmat.2021.153138.
- 6 C. Poinssot, P. Toulhoat, J.-M. Gras, and P. Vitorge, *Journal of Nuclear Science and Technology* 39, 473-476 (2014). DOI: 10.1080/00223131.2002.10875509.
- 7 G.S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys*, 2nd ed. (Springer New York, 2017).
- 8 I.O. Bannykh, B.A. Kalin 21st International Conference, Moscow, 2023 (In Russ).
- 9 *Metals Handbook: Fractography and Atlas of Fractographs*, Vol. 9, 8th ed. (American Society for Metals, 1974).
- 10 M.A. Balter, A.P. Liubchenko, and S.I. Aksenova, *Fraktografiya—Sredstvo Diagnostiki Razrushennykh Detalei* (Mashinostroenie, Moscow, 1987) (In Russ).
- 11 *Metals Handbook: Fractography*, Vol. 12, 9th ed. (ASM International, 1987).
- 12 A.S. Dikov, I.I. Chernov, and S.B. Kisilitsin, *Inorganic Materials: Applied Research* 9, 357-360 (2018).
- 13 Yu. G. Matvienko, *Modeli i Kriterii Mekhaniki Razrusheniya* (Fizmatlit, Moscow, 2006) (In Russ).
- 14 M.S. Merezhko, O.P. Maksimkin, et al, *The Physics of Metals and Metallography* 120, 716-721 (2019).
- 15 X. Jia, K. Hao, Z. Luo, and Z. Fan, *Metals* 12, 2077 (2022).
- 16 W. Macek, G. Robak, K. Żak, and R. Branco, *Engineering Failure Analysis* 135, 106121 (2022).
- 17 Y.T. Sun, X. Kong, and Z.B. Wang, *Int. J. Plast.* 155, 103336 (2022). DOI: 10.1016/j.ijplas.2022.103336.
- 18 V.E. Panin, V.V. Polyakov, G.V. Syrov, *Russian Physics Journal* 39, 92-96 (1996). DOI: 10.1007/BF02069250.
- 19 F. Liu, T. Fa, P. H. Chen, J.T. Wang, *Philosophical Magazine A* 100, 62-83 (2020). DOI: 10.1080/14786435.2019.1671621.
- 20 H. Liu, R. Hu, X. Xia, and S. Yu, *Metals* 14, 642 (2024). DOI: 10.3390/met14060642.
- 21 E.V. Panin, V.A. Likhachev, and Yu.V. Grinyaev, *Strukturnye Urovni Deformatsii Tverdykh Tel* (Nauka, Moscow, 1985) (In Russ).
- 22 V.V. Rybin, *Bol'shie Plasticheskie Deformatsii i Razrushenie Metallov* (Metallurgiya, Moscow, 1986) (In Russ).
- 23 A. Ask, S. Forest, B. Appolaire, and K. Ammar, *Contin. Mech. Thermodyn.* 31, 1109-1141 (2019).
- 24 C. Fressengeas and M.V. Upadhyay, *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences* 7, 12 (2020). DOI: 10.1186/s40323-020-00145-6.
- 25 J. He and N. Ch. Admal, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 30, 025006 (2022). DOI: 10.1088/1361-651X/ac2f84.
- 26 J. Cappola, J. Wang, and L. Li, *International Journal of Plasticity* 172, 103863 (2024). DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103863.
- 27 T.V. Ostanina, A.I. Shveykin, and P.V. Trusov, *Vestnik PNIPU. Mekhanika* 2, 85-111 (2020). DOI: 10.15593/perm.mech/2020.2.08 (In Russ).
- 28 V.V. Neverov and P.P. Zhitnikov, *Soviet Physics Journal* 32, 140-143 (1989).
- 29 B. Chen, L. Zhu, Y. Xin, and J. Lei, *Quantum Beam Science* 3, 17 (2019). DOI: 10.3390/qubs3030017.
- 30 Y. Zhou, W. Wu, and J. Li, *Journal of Materials Research and Technology* 29, 5340-5353 (2024). DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.02.225.

Article history:

Received 13 August 2024

Received in revised form 18 September 2024

Received in revised form 9 December 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 13.08.2024

Түзетілген түрде түсті – 18.09.2024

Түзетілген түрде түсті – 09.12.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Tamara Aldabergenova** – PhD, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: tamaramus@inp.kz

2. **Serik Akayev** (corresponding author) – Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: s.akayev@inp.kz

3. **Alexey Dikov** – Candidate of Technical Sciences, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: dikov@inp.kz

4. **Alexandr Larionov** – Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: larionov@inp.kz

5. **Lyubov Dikova** – Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan; e-mail: l.dikova@inp.kz

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Тамара Алдабергенова** – PhD, Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: tamaramus@inp.kz

2. **Серик Акаев** (автор корреспондент) – Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: s.akayev@inp.kz

3. **Алексей Диков** – Техника ғылымдарының кандидаты, Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: dikov@inp.kz

4. **Александр Ларионов** – Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: larionov@inp.kz

5. **Любовь Дикова** – Ядролық физика институты, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: l.dikova@inp.kz

Y.Sh. Bozorov¹ , Kh.Kh.Turaev¹ , A.T. Djalilov² , R.V. Aliqulov¹ ,
I.A. Umbarov¹ , B.T. Haitov^{1*} , J.K. Akhatov¹ , N.B. Uralov¹ 

¹Termez State University, Termez, Uzbekistan

²Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan

*e-mail: haitovbozor@gmail.com

SYNTHESIS OF A NEW ION EXCHANGE MEMBRANE AND ITS SURFACE MORPHOLOGY

Dinitrocellulose (DNS) with a nitrogen content of 10.7 % – 12.2 % was synthesized by nitration cotton cellulose in this research work. After that, an ion exchange membrane was obtained by modifying the resulting DNS with aniline (AN). The resulting dinitrocellulose polyaniline (DNSPA) copolymer was dissolved in various solvents and converted into a porous ion exchange membrane by a special molding method. The produced substances were synthesized based on different applications of mole ratios of starting materials, reaction temperature, and reaction time, and the optimal conditions of the process were determined. Based on the physicochemical results of DNSPA, its application as new ion exchange membranes was studied. In addition, the composition of the synthesized DNSPA was determined based on the infrared spectrum (IR-spectrum), and the element composition and surface morphology were determined based on scanning electron microscopy (SEM) and their data were presented. Nano- and microporous membranes were also obtained using various solvents and porogens.

Keywords: ion exchange membrane, dinitrocellulose polyaniline, cellulose, aniline, dinitrocellulose.

Ю.Ш. Бозоров¹, Х.Х. Тураев¹, А.Т. Джалилов², Р.В. Аликулов¹,
И.А. Умбаров¹, Б.Т. Хаитов^{1*}, Ж.К. Ахатов¹, Н.Б. Оралов¹

¹Термез мемлекеттік университети, Термез қ., Өзбекстан

²Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институты, Ташкент қ., Өзбекстан

*e-mail: haitovbozor@gmail.com

Жаңа ион алмасу мембранасының синтезі және оның беткі морфологиясы

Бұл ұсынылған зерттеу жұмысында мақта целлюлозасын нитрлеу арқылы азоты 10,7 % – 12,2 % болатын динитроцеллюлоза (DNS) синтезделді. Осыдан кейін алынған DNS-ті анилинмен (AN) өзгерту арқылы ион алмасу мембранасы дайындалды. Алынған заттар бастапқы заттардың әртүрлі молярлық қатынасын, температура мен реакция уақытын пайдаланып синтезделді және процестің оңтайлы шарттары анықталды. Алынған заттар бастапқы заттардың молярлық қатынасын, температура мен реакция уақытын әртүрлі қолдануды ескере отырып синтезделді және процестің оңтайлы шарттары анықталды. DNSPA физика-химиялық нәтижелеріне сүйене отырып, оның жаңа ион алмасу мембранасы ретінде қолданылуы зерттелді. Сонымен қатар, инфрақызыл спектр (IR спектрі) негізінде синтезделген DNSPA құрамы анықталды және сканерлеуші электрондық микроскопия (SEM) негізінде элементтік құрамы мен беткі морфологиясы анықталды және олардың деректері ұсынылды. Сканерлеуші электрондық микроскопия арқылы алынған суреттері нано- және микрокеуектері бар синтезделген мембрананың беткі морфологиясы ион алмасу процесінде қолдануға жарамды екенін көрсетеді. Сондай-ақ, әртүрлі еріткіштер мен кеуекті түзгіштер көмегімен нано- және микрокеуекті мембраналар дайындалды.

Түйін сөздер: ион алмасу мембранасы, динитроцеллюлозаполианилин, целлюлоза, анилин, динитроцеллюлоза.

Ю.Ш. Бозоров¹, Х.Х. Тураев¹, А.Т. Джалилов², Р.В. Аликулов¹,
И.А. Умбаров¹, Б.Т. Хаитов^{1*}, Ж.К. Ахатов¹, Н.Б. Уралов¹

¹Термезский государственный университет, г. Термез, Узбекистан

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

*e-mail: haitovbozor@gmail.com

Синтез новой ионообменной мембраны и морфология её поверхности

В данной исследовательской работе методом нитрования хлопковой целлюлозы была синтезирована динитроцеллюлоза (DNS) с содержанием азота 10,7 % – 12,2 %. После этого получена ионообменная мембрана путём модификации полученного DNS анилином (AN). Полученный сополимер динитроцеллюлозы и полианилина (DNSPA) был растворен в различных растворителях и специальным методом формования был превращён в пористую ионообменную мембрану. Таким образом, полученные вещества синтезированы с использованием различных мольных соотношений исходных веществ, температуры и времени реакции и определены оптимальные условия проведения процесса. На основании физико-химических результатов DNSPA изучено их применение в качестве новых ионообменных мембран. Кроме того, на основе инфракрасного спектра (ИК-спектра) определен состав синтезированных в работе DNSPA, а на основе сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) определён элементный состав и морфология поверхности и представлены их данные. Представленные изображения, полученные с помощью СЭМ, показывают, что морфология поверхности синтезированной мембраны с нано- и микропорами пригодна для использования в процессе ионного обмена. Также были получены нано- и микропористые мембраны с использованием различных растворителей и порообразователей.

Ключевые слова: ионообменная мембрана, динитроцеллюлозаполианилин, целлюлоза, анилин, динитроцеллюлоза.

Introduction

Membrane treatment is a crucial technique for maintaining and wisely using water resources, improving water quality, and enabling the reuse of water in technological processes using physico-chemical wastewater detoxification methods [1-2]. Because it is simple to use and quite inexpensive, membrane technology is one of the many methods for extracting different cations and anions from solutions [3]. Ion exchange membranes are the most popular and very effective kind of membranes. Ion exchange membranes (IEM) offer a lot of promise, particularly in the industrial sector where they are employed for high-efficiency material purification, synthesis of novel materials, energy production, and mixture separation [4-5].

Ion exchange membranes are also frequently made using cellulose and its esters as a starting point for fabrication. Cellulose acetate, ethyl cellulose, and cellulose nitrate have all been used to generate a variety of nano and microporous membranes [6]. Nitrocellulose, for instance, is a crucial substrate in the manufacturing of anion exchange membranes, which are used to detect and separate proteins from solutions with low concentrations [7]. Porous thin films with a kerosene size are formed from ethyl cellulose, and materials that serve as separators and

conductors are produced by adding the required ingredients to it [8-9].

Furthermore, an ion-exchange nanocomposite was created by using an in situ chemical oxidation polymerization technique to join microcrystalline cellulose and polyaniline. When it came to the operations of removing heavy metals and different dyes from wastewater, this nanocomposite performed well [10]. Recycled polyaniline-based high ion exchange membranes with improved electrical conductivity and ion exchange are used [11-12]. We modified dinitrocellulose with polyaniline to create a novel nano- and microporous ion exchange membrane, taking into consideration the characteristics of the aforementioned materials.

Experimental part

Materials and Methods

The following materials and equipment are needed to prepare the ion exchange membrane and its raw materials. Cotton cellulose (CS), nitric acid 68%, sulfuric acid 98%, aniline (AN) 99%, ethyl ether (EET) 99%, diethyl ether (DET) 98%, acetone (AT) 96%, ammonium persulfate (AP) 96 %, Glycerin(GL) 96%, N-methyl-2-pyrrolidone (NMP) 98%, Isobutyl alcohol (IBA) 99%, Ethylene glycol (ETG) 98%, Hydrochloric acid 24%, and distilled water. Refractory flasks, a thermometer and a magnetic stirrer were used to carry out the reaction processes.

DNS synthesis based on cellulose and nitric acid

Dinitrocellulose was initially synthesized by attaching nitric acid to cotton cellulose under the catalysis of sulfuric acid [13]. According to this method, nitrocellulose belonging to the colloxylin family with a nitrogen content of 10.7-12.2% was produced. First, a 2 L flask was placed in an ice bath, and then 400 g of 62% HNO_3 was slowly added. In the next step, 34 ml of concentrated H_2SO_4 was added to the flask dropwise over 30 minutes with continuous stirring. The temperature was raised to 20-23 °C under ice water until the solutions were mixed and kept in this state. After mixing all the ingredients, the substance turned light yellow and the container was closed and kept at room temperature for a day,

periodically shaking every 6 hours. At the next stage, 45 grams of cotton cellulose, washed three times in distilled water and dried, was placed in a raw material container cooled by bringing the solution temperature to 15-20 °C and mixed for another 30 minutes. The obtained raw material was washed in distilled water until it became neutral. After that, the resulting DNA was placed in a 5-7% nitric acid solution and heated at 100 °C for 1.5 hours at a pressure of 4 atmospheres in an autoclave, and the ready-to-use dinitrocellulose fiber was obtained by washing it again in distilled water until it became neutral. The synthesis of dinitrocellulose was carried out under several conditions and excipients. Its synthesis reaction equation is shown in Figure 1.

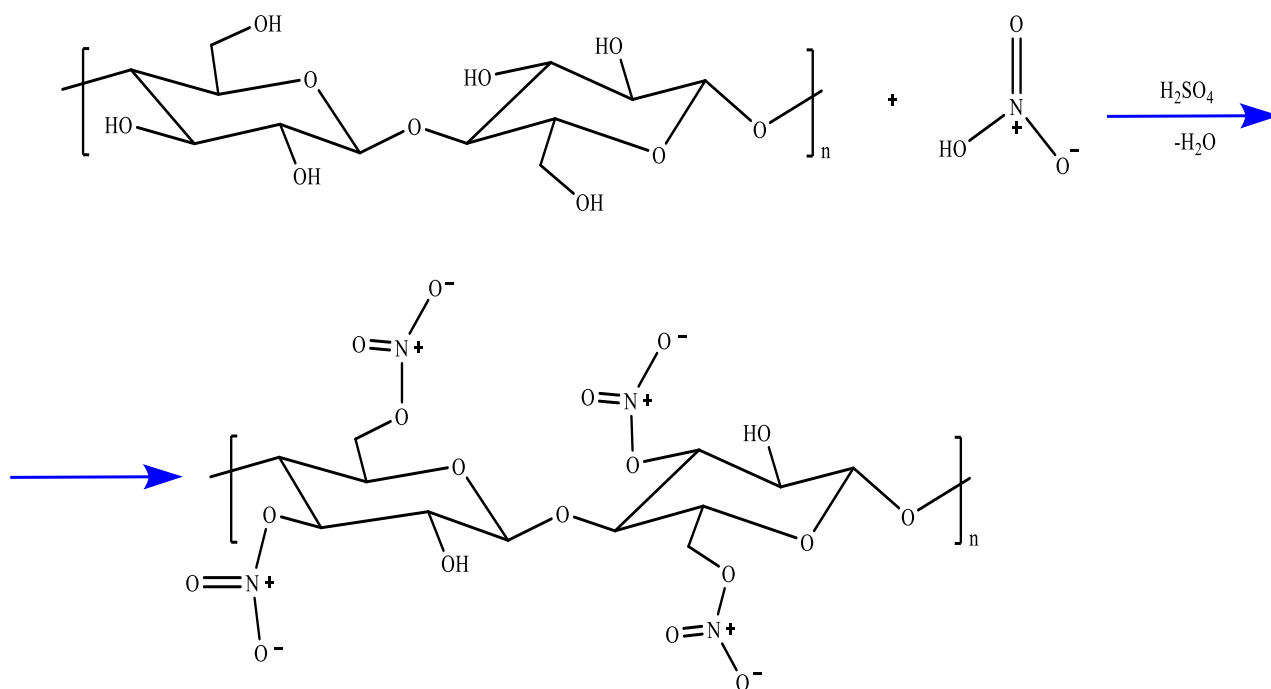


Figure 1 – Reaction equation of DNS synthesis based on nitration of cotton cellulose.

Synthesis of dinitrocellulose polyaniline (DNSPA) based on the binding of dinitrocellulose and aniline

DNPA was copolymerized by in situ chemical oxidation polymerization of dinitrocellulose and aniline in the presence of ammonium persulfate and hydrochloric acid as catalysts. First, 5 g of dinitracellulose was taken and dried at 40-45 °C for 12 hours and placed in a refractory flask. Then 5 g of aniline was added to the reactor and mixed with dinitrocellulose at low temperature. At first, a solution of hydrochloric acid and ammonium persulfate was slowly added dropwise as a catalyst.

During the reaction, the substances were continuously stirred. After the catalysts were completely incorporated, they were stirred for another 4 hours, and blue-colored DNSPA was obtained and neutralized by washing with distilled water. Then the product was dried in an oven at a temperature of 45-50 °C for 12 hours. During the experiment, reactions were carried out by introducing aniline and dinitracellulose raw materials in different proportions. The synthesis reaction scheme of the synthesized DNSPA copolymer is shown in Figure 2. In the reaction of dinitracellulose and aniline with a mass ratio of 1:1 the yield of the process was 84% (Fig. 3).



Figure 2 – The reaction equation for the synthesis of dinitrocellulosepolyaniline (DNSPA) based on dinarcellulose and aniline.

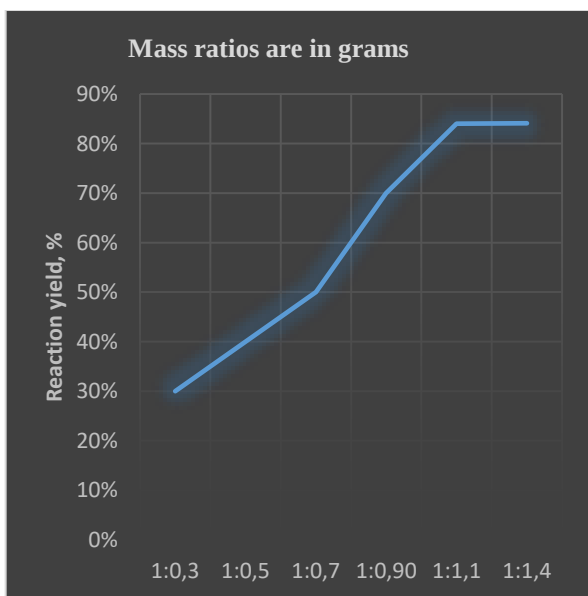


Figure 3 – Effect of the mass ratio of the initial DNS and AN substances on the reaction product during the synthesis of DNSPA raw materials.

Membrane preparation

The following procedures were used in the fabrication of the DNSPA membrane. After setting

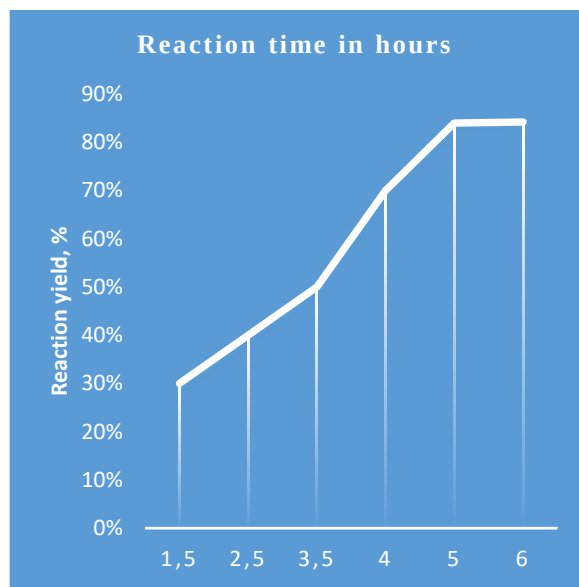


Figure 4 – Effect of time on the reaction yield during the synthesis of DNSPA raw material.

the reaction flask on a magnetic stirrer, 30 g of NMP and 6 g of DF were added, and the mixture was agitated for 35 minutes at 20–24 °C. The following

stage involved adding 3 g of IBS and 2.5 g of PANS to the mixture and mixing it for an hour at 35–37 °C to dissolve it evenly. The bulk solution's color transitioned from white-yellow to light brown at this point. Next, 0.2 g of the GLT solution was constantly stirred at this temperature. Next, 10g of AT was added to the entire mixture. The product was next agitated for two hours at 40 to 45 degrees Celsius. A polyvinyl chloride mold created using a casting solution was filled with the resultant DNSPA membrane solution. The amount of solution that is injected into the mold can be adjusted to control the thickness of the membrane. The resultant sample was then dried in a special oven at 45 °C and 30–55% air humidity in order to evaporate the solvent. When the DNSPA membrane had lost 45–55% of its weight, it was cleaned by submerging it in DI water. It was then dried once more for six hours at 45 to 50 °C in the oven. Additionally, DNSPA membrane production was carried out using various complements and circumstances.

Characterization

Infrared spectrum (IR) of synthesized DNSPA membrane and raw materials

Based on the relevant literature, the study of a substance's infrared spectrum was first investigated. The SHIMADZU IR-Fure spectrophotometer, made in Japan, was used to investigate the infrared spectra

of the synthesized DNSPA membrane as well as the raw materials DNS and PA at 400 and 4500 cm^{-1} . The analysis based on the IR spectrum is presented in Figures 5-6.

Scanning Electron Microscope (SEM)

A TouchScope electron microscopy (SEM) campaign from China JEOL Ltd. used JSM scanning to examine the morphological structure of the membrane. Using SEM, the porosity and elemental analysis of thin membranes were ascertained. The analysis of results obtained based on SEM is presented in Figures 7-8.

Results and Discussion

IR spectroscopic analysis of substances

DNSPA membrane and IR spectrometer of dinitracelluloses were obtained. The results obtained are analyzed and illustrated in Figures 5-6.

Valence vibrations of the O-NO₂ bonds in the area interval of 1647.21 cm^{-1} , the C-O-C-bonds in the area interval of 1271.09 cm^{-1} , and 1116.78 cm^{-1} are found in the values in Figure 5. Valence vibrations of the -C-OH bond in the cm^{-1} region, the >CH-bond in the 1101.35 cm^{-1} region, and the >CH₂ bond in the 731.02 cm^{-1} region are all clearly visible. This suggests that the dinitrocellulose polymer is responsible for all valence fluctuations in the data.

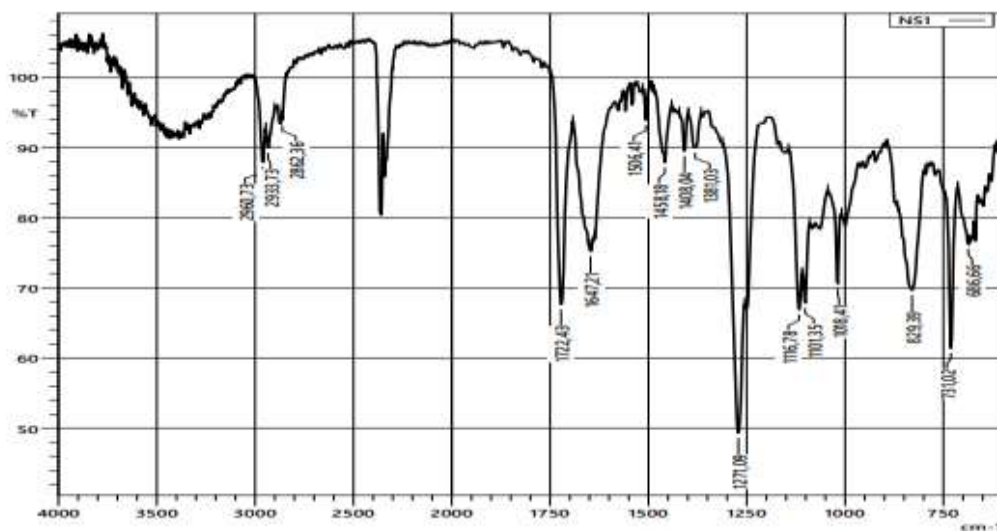


Figure 5 – The IR spectrum of synthesized DNS.

In Figure 6's values, the valence vibrations of the -CH= bonds are located in the area of 2929.87 cm^{-1} , the valence vibrations of the -O-NO₂ bonds are located in the area of 1722.43 cm^{-1} , the valence vibrations of the Ar-NH-bonds are located in the range of 1247.94 cm^{-1} , the valence vibrations of the

-C-O-C-bonds are located in the range of 1247.94 cm^{-1} , and the >CH-bond is located in the range of 1205.51 cm^{-1} . Valence vibrations of >CH₂ bonds are visible in the region of 731.02 cm^{-1} . It is evident that the valence vibrations listed below match the compounds' chemical formulas.

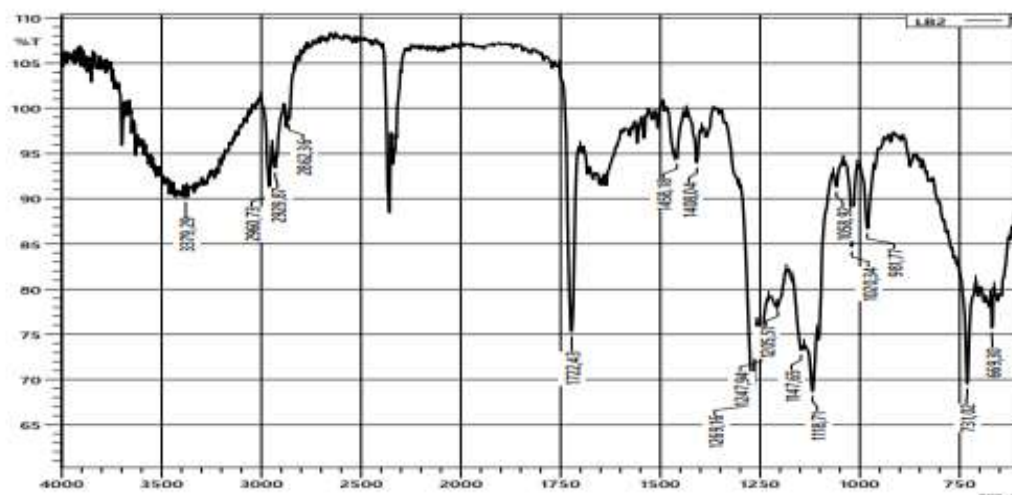


Figure 6 – IR-spectrum of DNSPA synthesized on the basis of modification of dinitrocellulose with aniline.

Scanning electron microscopic (SEM) analysis of DNSPA ion exchange membranes

The surface morphology, pore structure, and elemental analysis of the ion exchange membrane were studied on the basis of the scanning electron microscope (SEM) device - showed porous structures

on the surface and cross-sections of the membrane synthesized on the basis of DNSPA. If we look at the results, we can notice that small irregular pores of different sizes were formed in the membrane with the help of pore formers during the synthesis of this membrane.

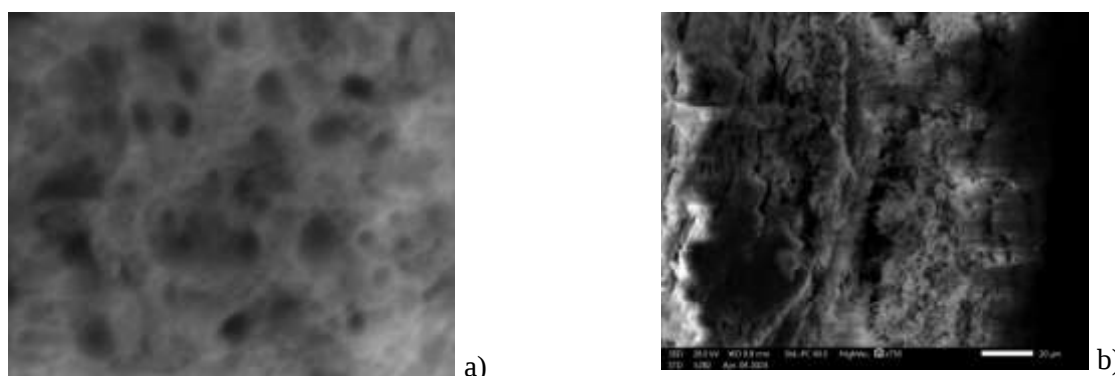


Figure 7 – In the SEM photo of the prepared DNSPA membrane: a) a photo taken from the upper part of the membrane, b) a photo taken from the cross-sectional part of the membrane.

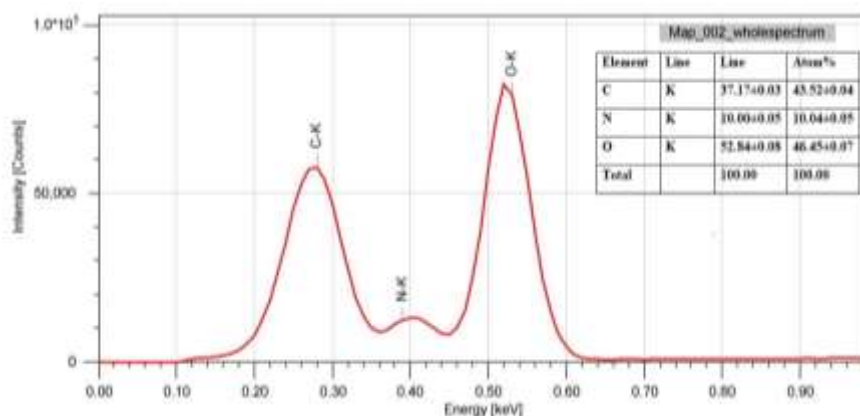


Figure 8 – Energy dispersive spectrum and compositional element ratios of the ion exchange membrane synthesized on the basis of polyanilinennitracellulose.

The SEM images show that the surface morphology of the synthesized membrane with nano- and

micropores is suitable for use in the ion exchange process.

Conclusion

DNSPA membrane was synthesized based on dinitrocellulose and polyaniline in different mass ratios and conditions. The bonding nature of its atoms

was studied by Infrared Spectroscopy (IR) and its pores characteristic of ion exchange membranes were determined by Scanning Electron Microscope (SEM). Using various solvents and pore formers, nano and microporous membranes were obtained.

References

- 1 Ran J., He Y., Zhang X., et al. Ion exchange membranes: New developments and applications // J. Membr. Sci. – 2017. – Vol. 522. – P. 267–291. DOI: 10.1016/j.memsci.2016.09.033.
- 2 Alabi A., AlHajaj A., Cseri L., Szekely G., et al. Review of nanomaterials-assisted ion exchange membranes for electromembrane desalination // npj Clean Water. – 2018. – Vol.1. – Art.No 10. DOI: 10.1038/s41545-018-0009-7.
- 3 Li L., Baig M. I., De Vos W. M., Lindhoud S. Preparation of Sodium Carboxymethyl Cellulose – Chitosan Complex Membranes through Sustainable Aqueous Phase Separation // ACS Appl. Polym. Mater. – 2023. – Vol.5, Iss.3. DOI: 10.1021/acsapm.2c01901.
- 4 Nie G., Li X., Tao J., Wu W., et al. Alkali resistant cross-linked poly(arylene ether sulfone)s membranes containing aromatic side-chain quaternary ammonium groups // J. Membr. Sci. – 2015. – Vol.474. – P.187–195. DOI: 10.1016/j.memsci.2014.09.053.
- 5 Shukurov D.K., Turaev K.K., Kasimov S.A., Jumaeva Z.E., and Muqumova G.J. The Current State of Research in the Field of Obtaining Semiconductor Materials and Prospects for Development // E3S Web of Conf. – 2024. – Vol.529. – Art.No 01044. DOI: 10.1051/e3sconf/202452901044
- 6 Sh B.Y., Turaev X.X., Aliqulov R.V., Jalilov A.T., et al. Synthesis and analysis of nitrocellulose membrane based on local raw materials // Gospodarka i Innowacje. – 2023. – Vol.39. – P.50–54.
- 7 Tang Y., Xing L., Wang P. Preparation of a Hydrophilic Nitrocellulose Membrane // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. – 2019. – Vol. 677. – No. 2. – Art.No 022035. DOI: 10.1088/1757-899X/677/2/022035.
- 8 Sridhar S., Khan A. A. Simulation studies for the separation of propylene and propane by ethylcellulose membrane // J. Membr. Sci. – 1999. – Vol. 159. – P.209–219. DOI: 10.1016/S0376-7388(99)00061-7
- 9 Turaev H., et al. Obtaining Stone Paper Based on Limestone of Shargunsky and baysunsky deposits // UniChem. – 2021. – Vol. 83. – P.5–11. DOI: 10.32743/UniChem.2021.83.5.11620. (In Russ)
- 10 Abbasian M., Niroomand P., Jaymand M. Cellulose/polyaniline derivatives nanocomposites: Synthesis and their performance in removal of anionic dyes from simulated industrial effluents // J. Appl. Polym. Sci. – 2017. – Vol. 45352. – P.1–11. DOI: 10.1002/app.45352
- 11 Farrokhzad H., Van Gerven T., Van Der Bruggen B. Preparation and characterization of a conductive polyaniline/polysulfone film and evaluation of the effect of co-solvent // Eur. Polym. J. – 2013. – Vol.49. – No.10. – P. 3234–3243. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2013.06.027.
- 12 Omonov M., Djiyanbaev S., and Umbarov I. Technology of production of environmentally safe road pavements with new content by recycling tires // E3S Web Conf. – 2023. – Vol. 371. – Art.No 03018. DOI: 10.1051/e3sconf/202337103018.
- 13 Mattar H., Baz Z., Saleh A., Shalaby A.S.A., Azzazy A.E., and Salah H. Nitrocellulose: Structure, Synthesis, Characterization, and Applications // World Eng. Forum J. – 2020. – Vol. 1. – Article 301. DOI: 10.18576/wefej/010301.

References

- 1 J. Ran, Y. He, X. Zhang, et al., Journal of Membrane Science 522, 267–291 (2017). DOI: 10.1016/j.memsci.2016.09.033.
- 2 A. Alabi, A. AlHajaj, L. Cseri, G. Szekely, P. Budd, and L. Zou, npj Clean Water 1, 9 (2018). DOI: 10.1038/s41545-018-0009-7.
- 3 L. Li, M. I. Baig, W.M. De Vos, and S. Lindhoud, ACS Applied Polymer Materials (2023). DOI: 10.1021/acsapm.2c01901.
- 4 G. Nie, X. Li, J. Tao, W. Wu, and S. Liao, Journal of Membrane Science 474, 187–195 (2015). DOI: 10.1016/j.memsci.2014.09.053.
- 5 D.K. Shukurov, K.K. Turaev, S.A. Kasimov, Z.E. Jumaeva, and G.J. Muqumova, E3S Web of Conf. 529, 01044 (2024). DOI: 10.1051/e3sconf/202452901044
- 6 B.Y. Sh., X.X. Turaev, R.V. Aliqulov, A.T. Jalilov, and O.M.B., Gospodarka i Innowacje 39, 50–54 (2023).
- 7 Y. Tang, L. Xing, and P. Wang, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 677, 022035 (2019). DOI: 10.1088/1757-899X/677/2/022035.
- 8 S. Sridhar and A. A. Khan, Journal of Membrane Science 159, 209–219 (1999).
- 9 H. Turaev, UniChem 83, 5–11 (2021). DOI: 10.32743/UniChem.2021.83.5.11620 (In Russ)

- 10 M. Abbasian, P. Niroomand, and M. Jaymand, Journal of Applied Polymer Science 45352, 1–11 (2017). DOI: 10.1002/app.45352.
- 11 H. Farrokhzad, T. Van Gerven, and B. Van Der Bruggen, European Polymer Journal 49, 3234–3243 (2013). DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2013.06.027.
- 12 M. Omonov, S. Djiyanbaev, and I. Umbarov, E3S Web of Conferences 371, 03018 (2023). DOI: 10.1051/e3sconf/202337103018.
- 13 H. Mattar, Z. Baz, A. Saleh, A. S. A. Shalaby, A. E. Azzazy, and H. Salah, World Engineering Forum Journal 1, 301 (2020). DOI: 10.18576/wefej/010301.

Article history:

Received 07 October 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 07.10.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Yoqubjon Bozorov** – Doctoral student of the Faculty of Chemistry of Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: byoqubjon77@gmail.com

2. **Khayit Turaev** – Doctor of Chemical Sciences, Prof., Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: hhturayev@rambler.ru

3. **Abdulakhat Djalilov** – Doctor of Chemical Sciences, Prof., Academician of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Director of Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan; e-mail: gup_tniixt@mail.ru

4. **Rustam Alikulov** – Doctor of Chemical Sciences, Prof., Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: aliqulov@tersu.uz

5. **Ibragim Umbarov** – Doctor of technical sciences, Prof., Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: umbarov@mail.ru

6. **Bozar Khaitov** (corresponding author) – Teacher of the Faculty of Chemistry of Termez State University. Termez, Uzbekistan; e-mail: haitovbozor@gmail.com

7. **Javokhirkhon Akhatov** – Doctoral student of the Faculty of Chemistry of Termez State University. Termez, Uzbekistan; e-mail: javohirxon@tersu.uz

8. **Nuriddin Uralov** – Doctoral student of the Faculty of Chemistry of Termez State University, Termez, Uzbekistan; uralovnuriddin1991@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Ёоқубжон Бозоров** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің докторанты, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: byoqubjon77@gmail.com

2. **Хайит Тураев** – химия ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: hhturayev@rambler.ru

3. **Абдулахат Джалилов** – химия ғылымдарының докторы, профессор, Өзбекстан Республикасы Ғылым академиясының академигі, Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институтының директоры, Ташкент қ., Өзбекстан; e-mail: gup_tniixt@mail.ru

4. **Рустам Аликулов** – химия ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: aliqulov@tersu.uz

4. **Ибрагим Умбаров** – техника ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: umbarov@mail.ru

6. **Бозар Хайтов** (автор-корреспондент) – Термез мемлекеттік университеті химия факультетінің оқытушысы, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: haitovbozor@gmail.com

5. **Джавохирхон Ахатов** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің докторанты, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: javohirxon@tersu.uz

8. **Нуриддин Оралов** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің докторанты, Термез қ., Өзбекстан; uralovnuriddin1991@gmail.com

А.А. Кенбай^{1,2} , Д.Е. Ережеп^{1,2*} , Ә.У. Алдияров¹ 

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

²Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: darhan_13@physics.kz

ТӨМЕН ТЕМПЕРАТУРАЛЫ ҰЯШЫҒЫ БАР ҚҰРЫЛҒАН КРИОГЕНДІ-КАПИЛЛЯРЛЫҚ ЖҮЙЕНІ ПАЙДАЛАНА ОТЫРЫП, КЕРОСИННІҢ FTIR-СПЕКТРЛЕРІН ТАЛДАУ ЖӘНЕ АЛУ

Бұл жұмыста көмірсутекті материалдардың төмен температура мен атмосфералық қысымдағы FTIR спектроскопиясының технологиясы берілген. Бұл құрылғы әртүрлі заттардың оптикалық қасиеттерін 77–300 K температура диапазонында вакуумды қолданбай және жаңа іргелі деректер алуды қажет етпей зерттеуге мүмкіндік береді, өйткені бұл саладағы зерттеулер жеткіліксіз. Мақсаты осы жағдайларда көмірсутекті отынның әрекеттері мен қасиеттері туралы жаңа іргелі білім алу болып табылады, өйткені бұл технологияны қолданатын зерттеулер салыстырмалы түрде сирек болып қала береді. Бұл тәсіл әртүрлі заттардың оптикалық қасиеттерін атмосфералық қысымда 77-ден 300 K-ге дейінгі температура диапазонында вакуумдық ортаны қолданбай-ақ зерттеуге мүмкіндік береді. Зерттеуде Фурье түрлендіру инфрақызыл (ИҚ) спектрометрі, диффузиялық шағылысу тіркемесі және екі Дьюар ыдысы көмегімен көмірсутекті талдау әдісі көрсетілген. Бір ыдыс үлгілерді криогендік капиллярлық жүйенің ішіндегі сұйық азотпен салқындату үшін пайдаланылады, ал екіншісі үлгілер орналастырылатын ИҚ-белсенді емес ортаны жасайды. Керосиндегі C-H функционалдық топтарының белгілі бір толқындық диапазондағы тербелістерінің түрлері мен жиіліктерін көрсететін FTIR спектрлері алынды. Бұл нәтижелер атмосфералық қысымда және төмен температурада әртүрлі заттардың әрекеттері мен қасиеттері туралы жаңа іргелі деректерді алу үшін ұқсас технологияларды әзірлеуді қолдайтын осындай зерттеулердің орындылығының дәлелі ретінде бүкіл әлем бойынша криофизика және криотехнология зертханаларында пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: көмірсутекті материалдар, төмен температуралар, криогенді капиллярлық жүйе, FTIR спектроскопиясы, төмен температуралы ұяшық.

A. Kenbay^{1,2}, D. Yerezhep^{1,2*}, A. Aldiyarov¹

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: darhan_13@physics.kz

Analysis and comparison of kerosene FTIR spectra using the developed cryogenic-capillary system with low-temperature cell

This work introduces a technology for FTIR spectroscopy of hydrocarbon materials at low temperatures and atmospheric pressure. This device allows to study optical properties of various substances at temperature range of 77 – 300 K without need of a vacuum and to obtain new fundamental data since there is insufficient research in this area. The purpose is to obtain new fundamental insights into the behavior and properties of hydrocarbon fuels under these conditions, as research utilizing this technology remains relatively uncommon. This approach allows for the examination of the optical properties of various substances under atmospheric pressure in the temperature range of 77 to 300 K, without the need for a vacuum environment. The study outlines a method for analyzing hydrocarbons using an infrared (IR) Fourier spectrometer, a diffuse reflection attachment, and two Dewar vessels. One vessel is used for cooling samples with liquid nitrogen inside the cryogenic capillary system, while the second creates an IR-inactive environment where the samples are placed. FTIR spectra of the characteristic C-H functional group peaks in kerosene were obtained, reflecting the types and frequencies of their vibrations in specific wavenumber ranges. These findings can be utilized in cryophysics and cryotechnology laboratories worldwide as proof of the feasibility of such research, supporting the

development of similar technologies to acquire new fundamental data on the behavior and properties of various substances at atmospheric pressure and low temperatures.

Keywords: hydrocarbon materials, low temperatures, cryogenic capillary system, FTIR-spectroscopy, low temperature cell.

А.А. Кенбай^{1,2}, Д.Е. Ережеп^{1,2*}, А.У. Алдияров¹

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

²Satbayev University, г.Алматы, Казахстан

*e-mail: darhan_13@physics.kz

Анализ и получение FTIR-спектров керосина с помощью разработанной криогенно-капиллярной системы с низкотемпературной ячейкой

В данной работе представлена технология ИК Фурье-спектроскопии углеводородных материалов при низких температурах и атмосферном давлении. Это устройство позволяет изучать оптические свойства различных веществ в диапазоне температур 77–300 К без необходимости использования вакуума и получать новые фундаментальные данные, поскольку исследований в этой области недостаточно. Цель состоит в том, чтобы получить новые фундаментальные знания о поведении и свойствах углеводородных топлив в этих условиях, поскольку исследования, использующие эту технологию, остаются относительно редкими. Этот подход позволяет изучать оптические свойства различных веществ при атмосферном давлении в диапазоне температур от 77 до 300 К без необходимости использования вакуумной среды. В исследовании излагается метод анализа углеводородов с использованием инфракрасного (ИК) Фурье-спектрометра, приставки диффузного отражения и двух сосудов Дьюара. Один сосуд используется для охлаждения образцов жидким азотом внутри криогенно-капиллярной системы, а второй создает ИК-неактивную среду, в которой размещаются образцы. Получены FTIR-спектры характерных пиков функциональных групп C-H в керосине, отражающие типы и частоты их колебаний в определенных диапазонах волновых чисел. Эти результаты могут быть использованы в лабораториях криофизики и криотехнологии по всему миру в качестве доказательства осуществимости таких исследований, поддерживая разработку аналогичных технологий для получения новых фундаментальных данных о поведении и свойствах различных веществ при атмосферном давлении и низких температурах.

Ключевые слова: углеводородные материалы, низкие температуры, криогенная капиллярная система, ИК Фурье-спектроскопия, низкотемпературная ячейка.

Кіріспе

Спектрометрия пайда болған кезде және көмірсутекті қосылыстарды төмен температурада спектроскопиялық әдістермен зерттеуге мүмкіндік беретін технологиялар пайда болғаннан бері процесс вакуумның пайда болуымен қатар жүрді, онсыз заттың наноқұрылымын [1-2], молекулалық құрамын [3-4], физикалық-химиялық, жылу және оптикалық қасиеттерін [5-9] ауада ылғалдың және басқа қоспалардың болуына байланысты сапалы зерттеуге және талдауға кедергі келтіретін кез келген спектроскопиялық әдістер арқылы, соның ішінде ИҚ-Фурье арқылы зерттеу қиын болды [10-13].

Заттарды, атап айтқанда, көмірсутекті қосылыстарын ИҚ-спектроскопияны қолдануды көздейтін төмен температуралық зерттеулер [14] ультра төмен қысымның, яғни вакуумның,

болуын болжайды [15-18], соның нәтижесінде атмосфералық қысымдағы көмірсутекті заттардың оптикалық қасиеттерін жоғары сапалы іргелі зерттеулердің нәтижелері әлі де өте сирек кездеседі, өйткені бұл жағдай бірқатар мәселемен байланысты, мысалы, атмосфералық жағдайларда төмен температураға қол жеткізуге мүмкіндік беретін спектроскопиялық зерттеу технологияларын әзірлеудің, техникалық қызмет көрсетудің және кейіннен жаңғыртудың күрделілігі, спектрлердің шу деңгейі төмендігі мен сәулелену қарқындылығы жоғары болуына байланысты дәлдікке қол жеткізуге мүмкіндік беретін инертті және ИҚ-белсенді емес немесе ИҚ-мөлдір ортаны құрудың күрделілігі [19-20], сонымен қатар қадамдық зерттеу әдістемесінің болмауы.

Жалпы, көмірсутекті заттарды төмен температурада және атмосфералық қысымда зерттейтін технологиялар әлемде өте аз. Кейбір

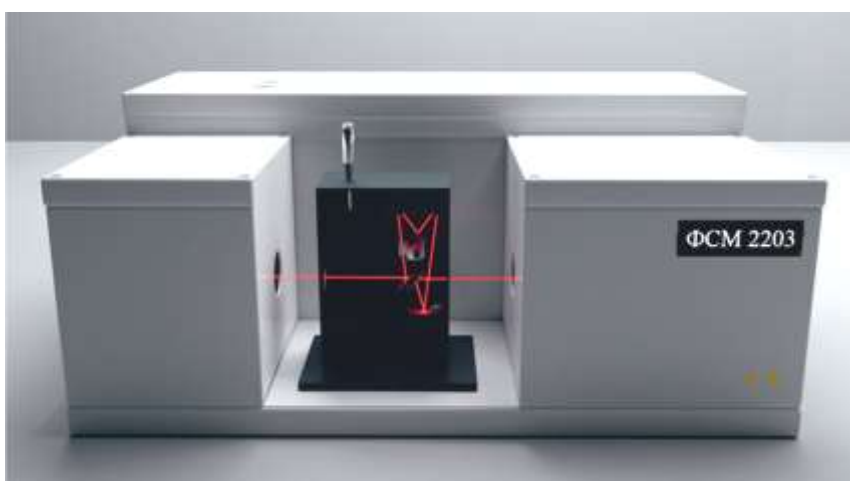
зерттеулерде [21-24] атмосфералық қысымда және төмен температурада спектроскопиялық тәжірибелер енгізілгенімен, жоғарыда сипатталған мәселелерге байланысты бұл бағыттағы ғылыми зерттеулер шектеулі. Көмірсутекті отындарды атмосфералық қысымда, бірақ төмен (77 К-ге дейін) температурада FTIR (Fourier transform infrared) спектроскопиялық зерттеу технологиясын [25] ұсынып отырмыз, ол вакуумнан тыс зерттеу кезінде жоғарыда аталған мәселелердің шешімін береді.

Осы мақаланың мақсаты көмірсутекті материалдардың атмосфералық қысымдағы төмен температуралық қасиеттері туралы іргелі деректерді беру болып табылады, бұл осы бағыттағы жоғары сапалы зерттеулердің кейінгі дамуына, оған қоса осы жағдайларда молекулалардың әрекетіне байланысты көбірек дәлелдемелердің болуына байланысты одан әрі дәлірек өңдеу жабдықтарын дамытуға ықпал бола алатын жағдайды ұсынатын аса құнды ақпарат. Осылайша, бұл зерттеу Біріккен Ұлттар Ұйымы қабылдаған Тұрақты Даму Мақсаттарына [26]

ТДМ 4 – Сапалы білім және ТДМ 9 – Индустрия, инновация және инфрақұрылымға сәйкес міндеттерге сәйкес келеді. Бұл жаңа деректерді STEM бағыты бар техникалық университеттердің жоғары оқу орындарының студенттеріне арналған оқулықтарды, сондай-ақ инновациялық энергетика саласына арналған теориялық деректерді жазу кезінде пайдалануға болады.

Зерттеу материалдары мен әдістері

Атмосфералық қысымда көмірсутекті материалдарды төмен температуралы спектроскопиялық зерттеудің жоғары сапалы нәтижелерін алу үшін төмен температураны өлшейтін ұяшықпен криогенді-капиллярлық жүйені қолданып тәжірибелер жүргіземіз. Көмірсутек спектроскопиялық деректері туралы нақты ақпаратты қамтамасыз ету үшін біз Infracap-тен $370\text{--}7800\text{ см}^{-1}$ диапазонында $0,125\text{ см}^{-1}$ спектрлік ажыратымдылығы бар жоғары дәлдіктегі орта инфрақызыл Фурье түрлендіру спектрометрін қолданамыз (1-сурет).



1-сурет – Диффузды шағылысу тіркемесі бар «FSM 2203» инфрақызыл Фурье спектрометрі

Атмосфералық қысымда төмен температуралы диффузды шағылысу спектроскопиясы бойынша эксперимент жүргізу үшін бізге осы жағдайларда көмірсутекті заттарды зерттеуге мүмкіндік беретін қондырғыны әзірлеу қажет болды. FSM 2203 спектрометрiнiң кюветтiк бөлiгiнде орналасқан диффузиялық шағылысу тіркемесінде (2-сурет) зерттелетін үлгінің температурасын реттеу мүмкіндігіне басты назар аударылады. Температураны 77 К дейін төмендету мүмкіндігі ерекше маңызды. Диффузиялық шағылысу әдісін қолдану үлгіні дайындауға ең аз талаптарды талап етеді және тегіс емес беттер мен әртүрлі жабындарды, соның ішінде полимерлерді

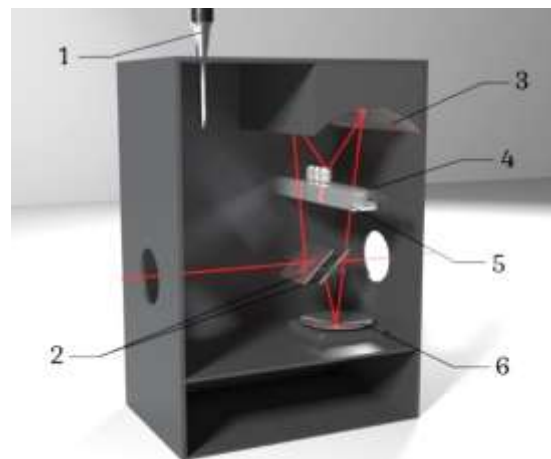
зерттеуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, бұл әдіс кең ауқымда спектрлік талдауға мүмкіндік береді, мұның дәстүрлі өткізу өлшеу әдістеріне қарағанда артықшылығы бар.

Бұл тіркemeniң орталық құрамдас бөлiктерi айна жүйесiнен және сынама үлгiлерi орналастырылатын тартылатын үлгi ұстағыштан тұрады (2-сурет, 4-зат). Микрометрлiк бұранда (2-сурет, 1-зат) үлгi ұстағыштың тiк орнын өзгерту үшiн пайдаланылады, бағыттағышты (2-сурет, 5-зат) оның сызығы бойымен жылжыту арқылы бiз көлденең күйдi өзгерте аламыз. Тiркемеге түсетiн сәуле оның кiрiс тесiгiнен өтiп, екi жақты жалпақ айнаға түседi (2-сурет, 2-зат). Содан кейiн бұл сәуле эллиптикалық айнаға қарай шағылысады (2-

сурет, 3-зат), ол оны тартылатын ұстағыштың ішіндегі сынақ үлгісінің бетіне бағыттайды. Үлгінің бетінен диффузиялық шағылысқан сәуле оны сфералық айнаға (2-сурет, 6-зат) бағыттайтын эллиптикалық айнаға қарай қайта бағытталады. Содан кейін шағылысқан сәуле FSM 2203 спектрометрінің детекторлық камерасына кірер алдында екі жақты жазық айнаның қарама-қарсы жағымен соқтығысады.

Алынған ИҚ-спектрлердің алғашқы өңдеуі FSpec бағдарламалық құралының көмегімен жүзеге асырылады, кейінгі талдау Origin бағдарламалық құралының көмегімен жүзеге асырылады.

Тіркеменің тартылатын ұстағышының ұяшығының ішіндегі сынақ үлгісінің температурасын төмендетуге қол жеткізу үшін стандартты үлгі ұстағыштың негізінде арнайы әзірленген модификация жүзеге асырылды (3-сурет).



1 – микрометрлік бұранда; 2 – екі жақты тегіс айна; 3 – эллиптикалық айна; 4 — тартылатын үлгі ұстағыш; 5 – бағыттаушы; 6 – сфералық айна

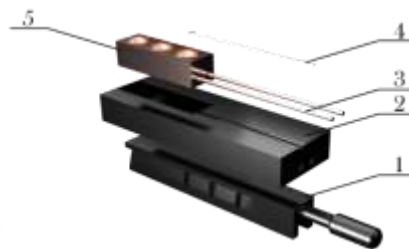
2-сурет – Диффузиялық шағылысу тіркемесінің схемалық көрінісі



а)



ә)



б)

а) стандартты тартылатын үлгі ұстағышы, ә) жинақталған нысандағы жаңартылған мамандандырылған тартылатын үлгі ұстағышы, б) бөлшектелген нысандағы жаңартылған мамандандырылған тартылатын үлгі ұстағышы. 1 – ұстағыш тұтқасы, 2 – жылу оқшаулағыш ұстағыш қақпағы, 3 – криогенді-капиллярлық жүйе, 4 – температура сенсоры (термопара), 5 – контейнер

3-сурет – Тартылатын ұстағыштың үш өлшемді моделі

Ұстағыштың жетілдірілген дизайны екі негізгі материалды қамтиды: полилактид және мыс. Нақты ұстағыш компоненттері үшін бұл материалдарды таңдау олардың сәйкес жылу өткізгіштік қасиеттеріне негізделген. Жылуөткізгіштігі шамамен 0,11-ден 0,19 Вт/м*К-ге дейін болатын полилактид мыс өзекшеге де, өлшем ұяшықтарына орналастырылған үлгілерге де сыртқы температураның жағымсыз әсеріне қарсы тұру үшін таңдалды.

Үлгілерді орналастыруға арналған цилиндрлік тесіктері (ұяшықтары) бар өзекше (3-сурет, 5-зат) криогендік капиллярлық жүйемен қамтамасыз етілген температураның жылдам және біркелкі таралуына қол жеткізу үшін жоғары жылу өткізгіштігі бар материалдан жасалған.

Криогендік капиллярлық жүйенің өзі де (3-сурет, 3-зат) сол себептермен мыстан жасалған.

Зерттелетін үлгілерді 77 К температураға дейін салқындату криогенді капиллярлық жүйенің мыс түтігі арқылы сұйық және газ тәрізді азоттың үздіксіз ағыны арқылы жүзеге асырылады. Мыс түтік, мыс өзек пен ұяшықтар арасындағы тығыз байланыс, мыстың жоғары жылу өткізгіштігімен бірге материалдың қажетті температураға дейін тез салқындатылуын қамтамасыз етеді. Мыс өзекшенің температурасы LakeShore PID (Proportional–integral–derivative) контроллері арқылы сырықтың бетіне бекітілген термопара арқылы бақыланады (3-сурет, 4-зат). Сынақ үлгілері криогендік капиллярлық жүйе арқылы азот айналымын тоқтату арқылы қызады,

осылайша үлгі мен қоршаған орта арасындағы термодинамикалық тепе-теңдікті қалпына келтіреді. Криогендік капиллярлық жүйенің мыс түтіктері арқылы азотты айналдыру үшін арнайы Дьюар ыдысында қыздыру арқылы жоғары қысым жасалады. Бұл процесс азотты ыдыстан криогенді капиллярлық жүйеге шығарып, үлгілерді салқындатуға мүмкіндік береді.

Криогенді капиллярлық жүйе жоғарыда аталған Дьюар ыдысына тығыздалған бекіту жүйесі арқылы қосылады (4-сурет). Бұл қондырғы сұйық және газ тәрізді азоттың (77 К) мыс капиллярлары арқылы тұрақты айналымы бар төмен температуралы ұяшықта атмосфералық қысымда үлгілерді салқындату үшін арналған. Қондырғы Дьюар ыдысынан (термос) (4-сурет, 1-зат), бекіту жүйесінен (4-сурет, 3-зат), жылу оқшаулағыш жабынмен жабылған мыс түтіктен (4-сурет, 4-зат), манометрден (4-сурет, 2-зат), электр қосылымын және қыздырғыштан кернеу келу үшін электрлік қысқышқа арналған

контактілерден (4-сурет, 6-зат), термостың ішінде артық қысымды болдырмауына арналған кері клапаннан (4-сурет, 5-зат) тұрады.

Экспериментті бастау үшін қондырғының пайдалануға дайын екеніне көз жеткізу керек:

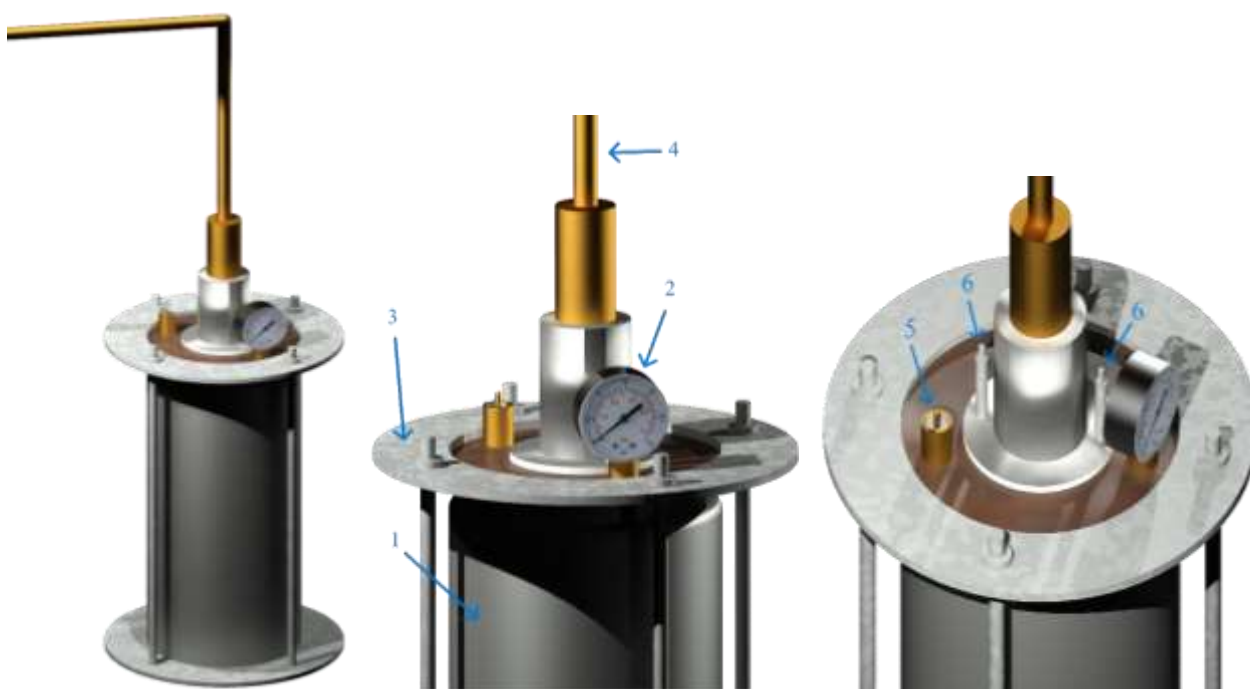
1) Криогендік капиллярлық жүйеге қосылған Дьюар ыдысы мықтап жабылған, кері клапаны кептелмеген және манометр (қысым сенсоры) кемінде 6 psi (0,4 атм.) қысымды көрсетеді.

2) Қыздырғыштан берілетін кернеу ыдыстың ішіндегі байланыс элементіне беріледі және жылу кеңеюіне байланысты капиллярлық жүйенің ішінде айналатын сұйық азотты қыздырады.

3) Қысқа тұйықталуды болдырмау үшін қондырғының басқа металл бөліктерімен электрлік байланыс жоқ

4) Термопара LakeShore PID контроллерімен дұрыс жұмыс істейді

5) Түтіктер азот айналымы кезінде қоршаған ортамен жылу өткізгіштікке жол бермеу үшін жылу оқшаулағыш жабынмен мұқият жабылған.



4-сурет – Криогенді капиллярлық жүйе және Дьюар ыдысы (термос)

Эксперименттің тазалығын қамтамасыз ету үшін диффузды шағылысу тіркемесіне үрлету жүйесі салынды. Тіркемеге азот газын енгізу арқылы үлгілер мен мыс өзекті аяз түзілуден қорғап қана қоймай, ИҚ-белсенді емес ортаны құру арқылы тәжірибенің тұтастығын сақтайтын инертті орта жасалады. Тәжірибелік әдістемеміздің келесі қадамы жоғарыда аталған үрлету жүйесін, газдандырғышты дайындау – газдандырғыштың герметикалығын қамтамасыз ету,

газдандырғыш ыдысына азотты құю, салқындату кезінде үлгілерде су буының тұнбасын болдырмау үшін және ішінде ИҚ-сәуле өтетін диффузды шағылысу тіркемесін инертті ИҚ-белсенді емес ортамен қамтамасыз ету үшін оны спектрометрдің кюветтік бөлігіне резеңке құбыршегімен қосу. Газдандырғышты дайындау төменде егжей-тегжейлі сипатталған:

1. Манометрдегі ине нөлді көрсетіп тұрғанына және газдандырғыштың Дьюар ыдысының

бос екеніне, және азотпен толтыруға дайын екеніне көз жеткізу, содан кейін ғана ыдыстың қақпағын ашу.

2. Құбыршек екі тесікке де мықтап бекітіліп, азот ағып кетпес үшін саңылаулары болмауы керек.

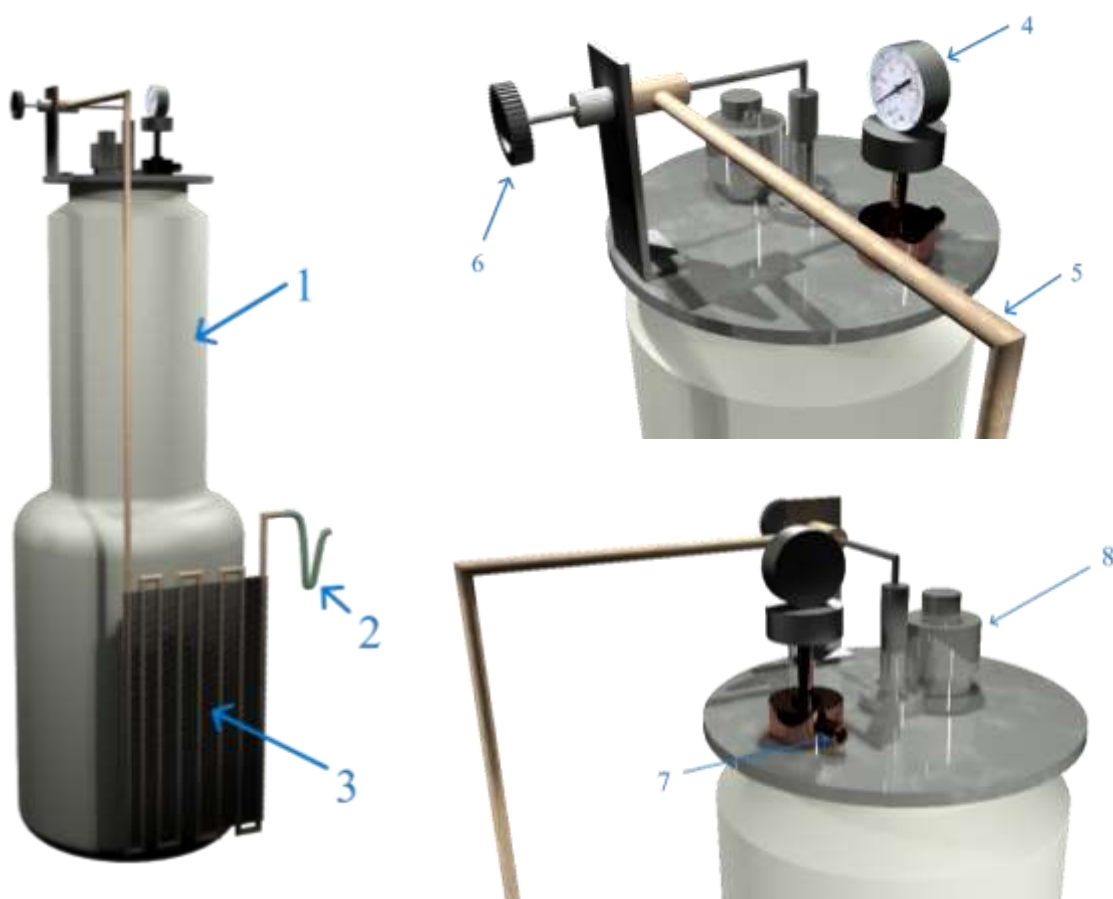
3. Азот газының жақсы ағынын қамтамасыз ету үшін барлық радиаторларда аяз жоғын тексеру.

4. Газдандырғыш толтыруға дайын болғанда, басқа Дьюар ыдысынан азотты оның ыдысына абайлап құюды бастау.

5. Ыдыстың қақпағын мықтап жабу және оның манометрі қосымша қысым көрсететініне көз жеткізу.

6. Құбыршек ұшын азоттың кедергісіз ағуына тексеру.

Газдандырғыштың құрылымы 5-суретте көрсетілген – ыдыс (5-сурет, 1-зат) азот сақтауға арналған, өйткені ол да Дьюар ыдысы, манометр (5-сурет, 4-зат) ыдыстың ішінде артық қысымды көрсетеді және азоттың шамамен сарқылу уақытын есептеуге көмектеседі, спектрометрге қосылған резеңке құбыршек (5-сурет, 2-зат) диффузиялық шағылысу тіркемесін ИҚ сәулеленуге инертті азотпен қамтамасыз етеді, азотты тасымалдауға арналған капиллярлық түтік (5-сурет, 5-зат), жылуды өткізуге арналған және тек азот газын беруге көмектесетін радиаторлар (5-сурет, 3-зат), азоттың ағып кетуін болдырмайтын қақпақ (5-сурет, 8-зат), азот ағынын реттеуге арналған шүмек (5-сурет, 6-зат), артық қысымның алдын алуға арналған кері клапан (5-сурет, 7-зат).



5-сурет – Инертті ИҚ-белсенді емес орта үшін азот шығаратын газдандырғыш

Контейнер ұяшықтарындағы үлгілердің температурасы оларды азот ағынымен салқындату немесе азот айналымын тоқтату арқылы қыздыру кезінде өзгереді. Спектрді алу кезінде үлгілердің нақты температурасын білуіміз керек. Үлгі температурасын өлшеу үшін біз LakeShore Model 325 криогенді PID температура реттегішіне қосылған Е-типті (хромель және

константан) термопараны пайдаланамыз. Контроллер интерфейсінен біз бастапқы температураны, бөлме температурасын, термопара түрін, термопараның түйреуішінің шығысын (А немесе В) және т.б. таңдай аламыз.

Контроллер екі бөлек пропорционалды-интегралдық-туынды (PID) басқару циклін қамтамасыз етеді. PID алгоритмі температураның

орнатылған мәні мен басқару сенсорынан кері байланыс негізінде басқару шығысын анықтайды. Кең көлемді теңшеу опцияларының арқасында ол криогенді салқындату жүйелерінің көпшілігімен және көптеген шағын жоғары температуралы пештермен үйлесімді. Жоғары ажыратымдылықтағы цифрлық-аналогтық түрлендіргіш біркелкі басқару шығысын қамтамасыз етеді. Пайдаланушылар PID мәндерін қолмен орната алады немесе реттеу процесін автоматты түрде реттеу үшін автоматты реттеу функциясын пайдалана алады.

Криогенді капиллярлық жүйені ұяшыққа қосып, оны FSM 2203 ИҚ Фурье-спектрометрінің ішіндегі диффузды шағылысу тіркемесіне орналастырып, біз тәжірибемізді бастаймыз. Көмірсутекті заттың кристалдану нүктесіне жеткеннен кейін температура төмендегендіктен, біз әрбір бірнеше белгілі температурада спектрлерді аламыз. Біздің мақсаттарымыздың бірі – атмосфералық қысымдағы және азоттың қайнау температурасындағы (77 K) көмірсутектердің физика-химиялық қасиеттерін зерттеу және осы жағдайларда үлгілердің спектрлерін алу. Үлгі температурасы өзінің минималды нүктесіне жеткенде және PID контроллері 77 K мәнін көрсеткенде, біз FTIR спектрлерін аламыз және азот ағынын тоқтату және термодинамикалық тепе-теңдіктің пайда болуына мүмкіндік беру арқылы қыздыру процесін бастаймыз және дәл осылай әр белгілі бірнеше температурада спектрлерді аламыз.

Бізге қажетті барлық қондырғылар мен аспаптардың дайын екеніне көз жеткізіп, төмен температурада (77 K) және атмосфералық қысымда зерттелетін заттардың (көмірсутекті қосылыстардың) оптикалық қасиеттерін зерттеуге арналған тәжірибемізді бастаймыз. Эксперимент жүргізу үшін келесі қадамдарды орындаймыз:

1 - кезең: Газдандырғыш пен криогенді капиллярлық жүйені азотпен толтыру және оларды дұрыс жабу. Оларды келесі құрылғыларға қосу: 1) инертті ортаны жасауға арналған резеңке құбыршегі бар газдандырғышты спектрометрдің кюветалық бөлігінің кірісіне қосу, 2) криогенді капиллярлық жүйені E типті (хромель – константан) термопарасы бар LakeShore 325 PID температура реттегішіне және түтік ішінде азоттың айналымын жақсартатын қыздыру мен қосымша қысым жасауға арналған қысқыштар арқылы сымдармен қыздырғышқа қосу.

2 - кезең: Тек микрометр бұрандасы мен тартылатын ұстағыш үшін шағын орын қалдырып сапасы жоғары ИҚ спектрін алу үшін кюветаның ішінде ИҚ-белсенді емес инертті азот ортасын

сақтау үшін кюветалық бөлігін полипропилен және полиэтилен пленкасымен жабу. Ауа мен N₂ молекулалық салмақтары салыстырмалы ұқсас болғандықтан, мұндай ортаны сақтау қиын жұмыс емес.

3 - кезең: Қоршаған ортадан ылғалды сіңіретін калий бромидінің алдын ала ұнтақталған үлгісін тартпа контейнерінің таяқшасының бірінші ұяшығына салу, осылайша біз оның спектрін аламыз және оны негіз ретінде пайдалана отырып кейін оған сынақ зат спектрін бөлеміз. Сынақ үлгісін екінші және үшінші ұяшықтарға салу және ұстағышты диффузиялық шағылысу тіркемесіне салу.

4 - кезең: Тік микрометрлік бұранданы әрбір ұяшық үшін бөлек реттеу арқылы ИҚ сәулесінің ең жоғары қарқындылығы бар ұстағыштың орнын анықтау. Ол табылғаннан кейін біз реттеуді тоқтатамыз, содан кейін «FSpec» көмегімен үлгілердің спектрлерін жазып, оларды «Origin» бағдарламалық құралында талдау үшін осы позицияны пайдаланамыз.

5 - кезең: Үлгілерді салқындату кезінде бөлме температурасынан (290-300 K) бастап азоттың қайнау температурасына дейін (77 K) үлгі температурасын шынайы уақыт режимінде анықтау үшін температура реттегішін және ыдыстың ішіндегі азотты түтік арқылы қарқындырақ жүргізу үшін қыздырғышты қолдану арқылы спектрлерді алу. Айырмашылықтарды әрі қарай сипаттау үшін зерттелетін заттың фазалық ауысуын жіберіп алмау және әр фазада оның спектрлерін жазу маңызды. Фазалық ауысу температурасынан өткеннен кейін әрбір нақты температурада ең төменгі нүкте – 77 K жеткенше бірнеше спектрлерді аламыз және осы нүктедегі үлгілердің спектрлерін жазамыз. Осыдан кейін біз қыздырғышты тоқтатамыз, осылайша азоттың айналымын бәсеңдетеміз және жылулық тепе-теңдіктің пайда болуына мүмкіндік береміз. Бұл спектрлерді алған кезде үлгі қызып, оның температурасы жоғарылатады. Осыдан кейін үлгінің салқындату және қыздыру спектрлерін салыстырып, олардың айырмашылықтарын сипаттаймыз.

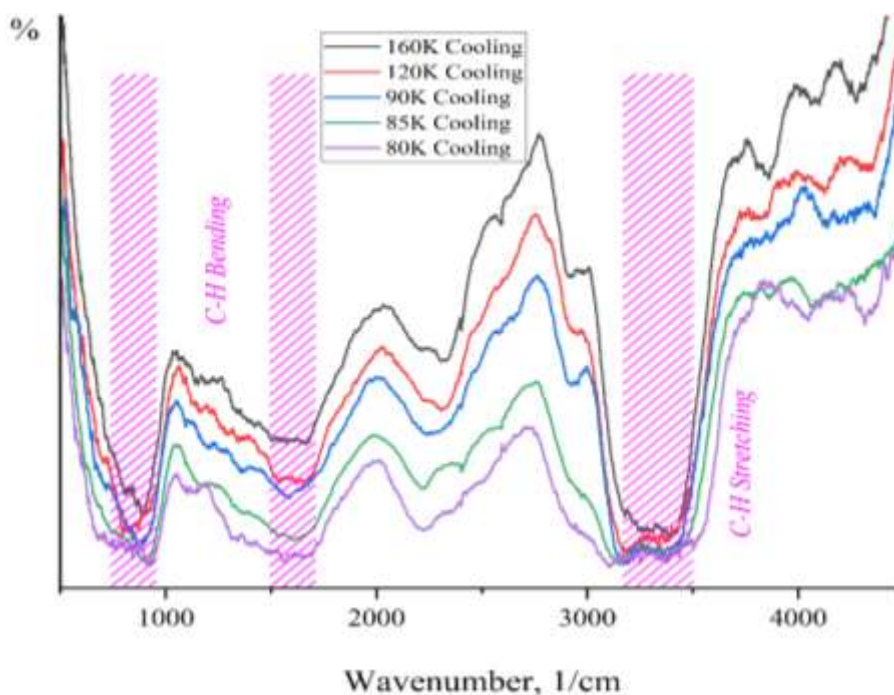
6 - кезең: Бізге қажетті спектрлерді алғаннан кейін ұстағышты тіркемеден, термостағы электрлік контактілерді және PID реттегіштің термопараларын алу арқылы тәжірибені тоқтатамыз. Ықтимал қалдық көмірсутек буларынан құтылу үшін спектрометр бөлімін азот газымен тазалаймыз және сол арқылы диффузиялық шағылысу тіркемесінің және FSM 2203 спектрометрінің ішін тазалаймыз.

Осыдан кейін біз осы эксперимент кезінде алынған спектрлерді талдап, нәтижелерді

ресімдеуіміз керек. Бұл зерттеулер мен тәжірибелер көмірсутекті материалдардың көптеген спектроскопиялық зерттеулері үшін іргелі ақпарат ретінде пайдаланылуы мүмкін, өйткені нәтижелер төмен температурада, бірақ атмосфералық қысымда алынады. Бірақ бұған дейін біздің нәтижелерімізді төмен температуралы қондырғыларды пайдаланып көмірсутек спектрлерін сипаттаған басқа деректермен салыстыру маңызды.

Зерттеу нәтижелері және талқылау

Тәжірибе нәтижелері 6-суретте келтірілген. Зерттелетін зат керосин, энергетикалық, технологиялық және басқа салаларда отын немесе еріткіш ретінде қолданылатын көмірсутек болып табылады. Суретте керосиннің функционалдық топтардың тән шыңдары, атап айтқанда, C-H байланыстарының созылуы және иілуі көрсетілген.



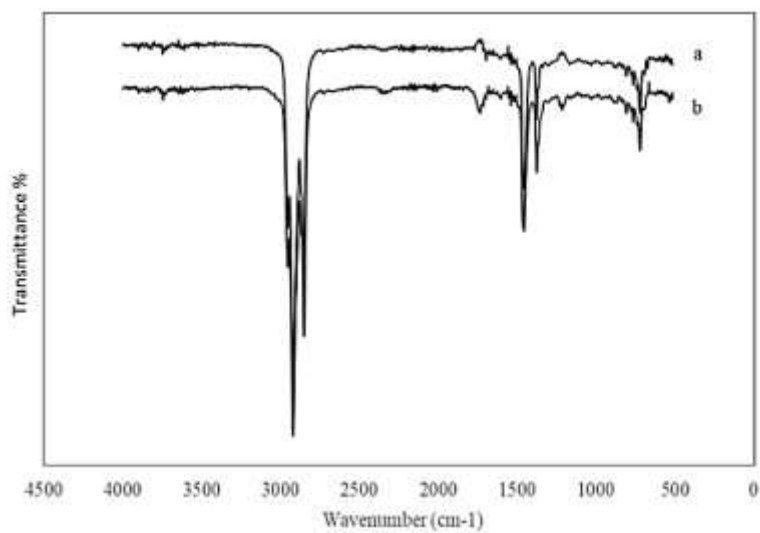
6-сурет – Бөлме температурасынан салқындатылған керосиннің спектрлері (тек бірнеше температура көрсетілген)

Төменде басқа авторлардың нәтижелері (7-сурет) және біздің экспериментпен салыстырмалы талдау берілген. Көріп отырғанымыздай, 3200-3500 cm^{-1} толқындар диапазонында C-H созылуы үшін айқын гипсохромдық ығысу бар, C-H иілісі (қайшы) үшін 1500-1700 cm^{-1} диапазонында әлсіз ығысу және 600-900 cm^{-1} диапазонында C-H иілу (айналмалы және жазықтықтан тыс) үшін дерлік жылжу жоқ. Қалыпты жағдайда толқын ұзындығына сәйкес келетін басқа авторлардың нәтижелеріне қатысты үшін: 2800-3000 cm^{-1} -де C-H созылу, 1300-1500 cm^{-1} C-H иілу (қайшы) және 800 cm^{-1} нүктеде C-H иілісі (айналмалы және жазықтықтан) [27].

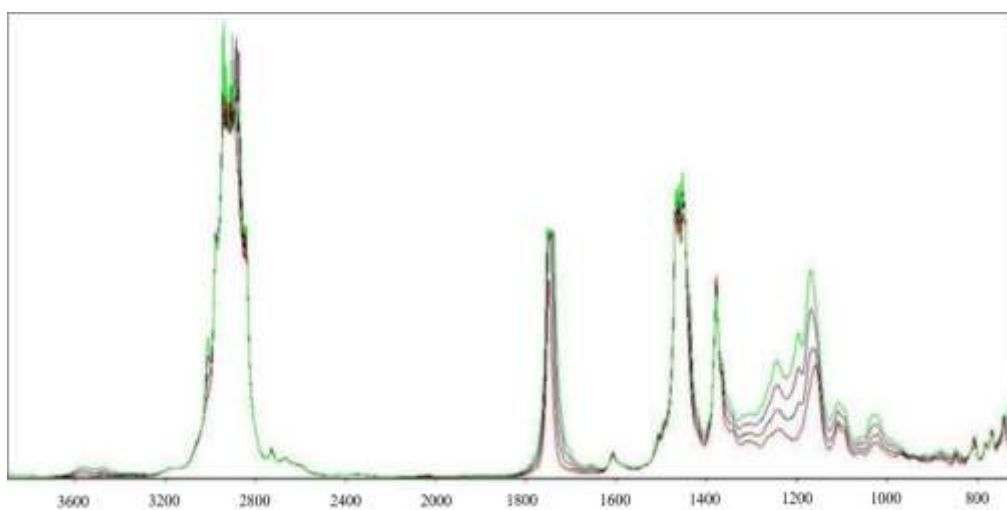
Басқа нәтижелер 8-суретте көрсетілген – бұл зерттеудегі керосин қалдық күнбағыс майынан алынған биодизельмен араласқанымен [28], біздің зерттеуіміздегі керосиннің FTIR спектрлеріне сәйкес келетін барлық сипаттамалық шыңдар, атап айтқанда, C-H тербелісі, бар, бұл біздің

зерттеуімізде қолданылған өлшеу әдісінің өнімділігі мен тиімділігін одан әрі растайды. 8-суреттегі 1750 cm^{-1} толқын ұзындығына сәйкес келетін қосымша шыңы C-O созылуына жатады, себебі биодизельде оттегі бар.

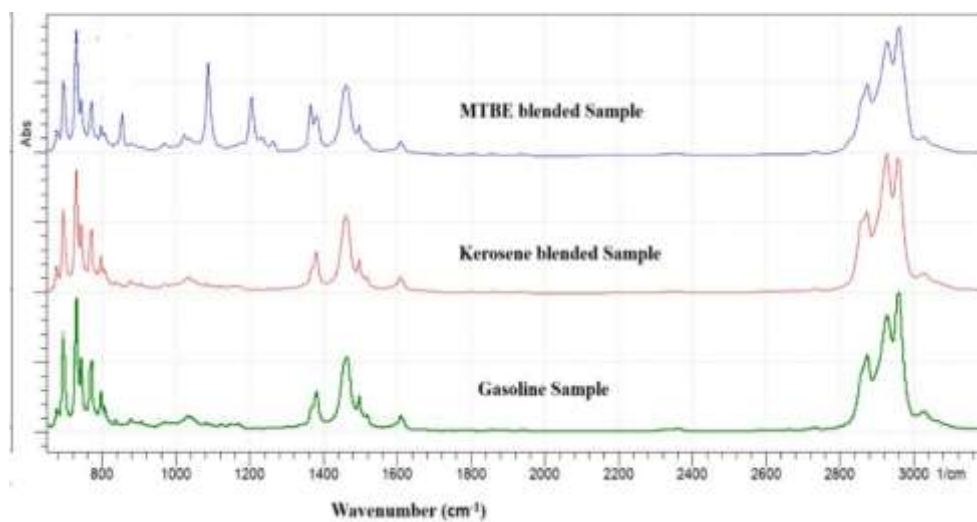
Осы саладағы басқа авторлардың [29] FTIR спектрлері 9-суретте көрсетілген. Бұл суретте басты назар осы жұмыста біздің нәтижелерімізбен салыстырылып отырған керосин қоспасының үлгісіне (керосин+бензин) берілген. Біз алдыңғы салыстыруларда байқалған сипаттамалық шыңдарды, атап айтқанда C-H созылуын 2800-3000 cm^{-1} , C-H иілісі (қайшы) 1500 cm^{-1} және C-H иілісі (тербеліс және жазықтықтан тыс) 800 cm^{-1} -ді көре аламыз. Керосин бензинмен араласқанымен, бұл заттардың барлығы C (көміртек) және H (сутегі) компоненттерінен тұрады, олардың тербелісі біздің зерттеуімізде қарастырылады.



7-сурет – Керосиннің ИҚ спектрлері (а) ультрадыбыстық сәулеленуге дейін және (b) кейін



8-сурет – Керосин + биодизельдің ИҚ спектрлері



9-сурет – 650–3200 cm^{-1} диапазонында МТВЕ, керосин және бензинмен араласқан үлгілердің FTIR спектрлері

Басқа авторлардың спектрлеріне қатысты біздің спектрлерімізде байқалған гипсохромдық ығысу үлгілерімізді салқындату жолының нәтижесінде байланысты. Бүкіл тәжірибе атмосфералық қысымда жүргізілгендіктен, спектрлердің вакуумда алынған басқа авторлардың нәтижелерінен ерекшеленетіні анық. Біздің экспериментімізде үлгілер орналасқан орта азотпен толтырылды, ал басқа авторларда үлгілер іс жүзінде ортасы жоқ вакуумда болды. Ығысу зерттелетін үлгінің (керосин) сұйық фазадан 300 К температурадан 77 К-ге дейін салқындатылуына, фазалық ауысудан өтуіне байланысты FTIR спектрінің соңғы нәтижесіне әсер етпеуі мүмкін емес.

Жоғарыда келтірілген салыстырмалы талдау төмен температурада (300 К-ден 80 К-ге дейін) және атмосфералық қысымда (101 325 Па, 1 атм) тәжірибелерімізде қолданылған төмен температуралы ұяшығы мен криогенді-капиллярлық жүйесі бар қондырғымыздың өнімділігі мен тиімділігін дәлелдейді.

Қорытынды

Бұл мақалада көмірсутек қосылыстарын, әсіресе керосинді, азоттық үрлету жүйесі,

газдандырғыш және жоғары ажыратымдылықтағы FTIR спектрометрі бар криогенді капиллярлық жүйені пайдаланып, төмен температурада және атмосфералық қысымда зерттеуге арналған тәжірибелік қондырғы және өлшеу әдістемесі сипатталған. Біздің қондырғы арқылы алынған керосиннің FTIR спектрлерін басқа зерттеушілер хабарлаған FTIR спектрлерінің нәтижелерімен салыстыру арқылы жүргізілген тексеру жақсы корреляция бар деген қорытындыға әкеледі.

Ұсынылған қондырғының атмосфералық қысымда төмен температуралы үлгілерді зерттеу мүмкіндігі, әдеттен тыс жағдайларда көмірсутекті заттардың қасиеттері мен құрылымы туралы түбегейлі жаңа іргелі деректер алу және оны атмосфералық қысымда криогендік зерттеулерге арналған жаңа жұмыс істейтін құрылғы ретінде ғылыми қоғамдастыққа ұсыну мүмкіндігі сияқты бірқатар артықшылықтары бар.

Алғыс сөз

Зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті (грант № AP19678245) қаржыландырды.

Әдебиеттер

- 1 Shaalan N.M. An approach to fabricate nanomaterials using a closed low-temperature growth system // *Materials Chemistry and Physics*. – 2024. – Vol. 328. – Art. 129930. DOI: [10.1016/j.matchemphys.2024.129930](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129930)
- 2 Sorokin N.I., Arkharova N.A., & Karimov D.N. Synthesis of nano-sized solid electrolyte $\text{Pr}_{1-y}\text{Sr}_y\text{F}_{3-y}$ and the effect of heat treatment on the ionic conductivity of fluoride nanoceramics. // *Crystallography Reports*. – 2024. – Vol. 69(4). – P.561–568. DOI: [10.1134/S106377452460145X](https://doi.org/10.1134/S106377452460145X)
- 3 Carrascosa H., Muñoz Caro G.M., Martín-Doménech R., Cazaux S., Chen Y.-J., & Fuente A. Formation and desorption of sulphur chains (H_2S x and S x) in cometary ice: Effects of ice composition and temperature. // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2024. – Vol. 533(1). – P.967–978. DOI: [10.1093/mnras/stae1768](https://doi.org/10.1093/mnras/stae1768)
- 4 Kakkenpara Suresh S., Dulieu F., Vitorino J., & Caselli P. Experimental study of the binding energy of NH_3 on different types of ice and its impact on the snow line of NH_3 and H_2O . // *Astronomy & Astrophysics*. – 2024. – Vol. 682. – Art. A163. DOI: [10.1051/0004-6361/202245775](https://doi.org/10.1051/0004-6361/202245775)
- 5 Sokolov D.Y., Yerezhep D., Vorobyova O., Ramos M.A., & Shinbayeva A. Optical studies of thin films of cryocondensed mixtures of water and admixture of nitrogen and argon. // *Materials*. – 2022. – Vol.15(21). – P.7441. DOI: [10.3390/ma15217441](https://doi.org/10.3390/ma15217441)
- 6 Sokolov D.Y., Yerezhep D., Vorobyova O., Golikov O., & Aldiyarov A.U. Infrared analysis and effect of nitrogen and nitrous oxide on the glass transition of methanol cryofilms. // *ACS Omega*. – 2022. – Vol.7(50). – P.46402–46410. DOI: [10.1021/acsomega.2c05090](https://doi.org/10.1021/acsomega.2c05090)
- 7 Yerezhep D., Akylbayeva A., Golikov O., Sokolov D.Y., Shinbayeva A., & Aldiyarov A.U. Analysis of vibrational spectra of tetrafluoroethane glasses deposited by physical vapor deposition. // *ACS Omega*. – 2023. – Vol.8(22). – P.19567–19574. DOI: [10.1021/acsomega.3c00985](https://doi.org/10.1021/acsomega.3c00985)
- 8 Golikov O.Yu., Yerezhep D.E., & Sokolov D.Yu. Researching carbon dioxide hydrates in thin films via FTIR spectroscopy at temperatures of 11-180 K. // *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*. – 2023. – Vol.23(3). – P.483–492. DOI: [10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492)
- 9 Bhavani G., Durga Rao T., Niranjana M.K., Kumar K.R., Sattibabu B., Petkov V., Kannan E.S., & Reddy B.H. Structural, magnetic, optical and electronic properties of $\text{Gd}_2\text{NiIrO}_6$. // *Physica B: Condensed Matter*. – 2024. – Vol.695. – Art.No 416477. DOI: [10.1016/j.physb.2024.416477](https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416477)
- 10 Xu J., Liu Q., Zheng T., Xie M., Shen H., Li Y., Guo F., Zhang Q., Duan M., & Wu, K.-H. Comparing low-temperature NH_3 -SCR activity, operating temperature window and kinetic properties of the Mn-Fe-Nb/TiO₂ catalysts

prepared by different methods. // Separation and Purification Technology. – 2025. – Vol.356. – Art.No 129906. DOI: [10.1016/j.seppur.2024.129906](https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.129906)

11 Nishikino T., Sugimoto T., & Kandori H. Low-temperature FTIR spectroscopy of the L/Q switch of proteorhodopsin. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2024. – Vol.26(35). – P.22959–22967. DOI: [10.1039/D4CP02248C](https://doi.org/10.1039/D4CP02248C)

12 Yang Z., Su B., Ding H., Qiu Y., & Zhong D. Prediction of asphalt low-temperature performance by FTIR spectra using comparative modelling strategy. // Road Materials and Pavement Design – 2024. – P.1–16. DOI: [10.1080/14680629.2024.2383915](https://doi.org/10.1080/14680629.2024.2383915)

13 Moszczyńska J., Liu X., & Wiśniewski M. Non-thermal ammonia decomposition for hydrogen production over carbon films under low-temperature plasma—In-situ ftir studies. // International Journal of Molecular Sciences. – 2022. – Vol.23(17). – P.9638. DOI: [10.3390/ijms23179638](https://doi.org/10.3390/ijms23179638)

14 Moody G., Kavir Dass C., Hao K., Chen C.-H., Li L.-J., Singh A., Tran K., Clark G., Xu X., Berghäuser G., Malic E., Knorr, A., & Li X. Intrinsic homogeneous linewidth and broadening mechanisms of excitons in monolayer transition metal dichalcogenides. // Nature Communications. – 2015. – Vol.6(1). – P.8315. DOI: [10.1038/ncomms9315](https://doi.org/10.1038/ncomms9315)

15 Goliko, O.Yu., Yerezhep D.E., & Sokolov D.Yu. Researching carbon dioxide hydrates in thin films via FTIR spectroscopy at temperatures of 11-180 K. // Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. – 2023. – Vol.23(3). – P.483–492. DOI: [10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492)

16 Golikov O.Yu., Yerezhep D., & Sokolov D.Yu. Improvement of the automatic temperature stabilisation process in the cryovacuum unit. // Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. – 2023. – Vol. 23(1). – P.62–67. DOI: [10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67)

17 Sokolov D.Y., Yerezhep D., Vorobyova O., Ramos M.A., & Shinbayeva A. Optical studies of thin films of cryocondensed mixtures of water and admixture of nitrogen and argon. // Materials. 2022. – Vol.15(21). – P.7441. DOI: [10.3390/ma15217441](https://doi.org/10.3390/ma15217441)

18 Golikov O.Yu., Yerezhep D., & Sokolov D.Yu. Improvement of the automatic temperature stabilisation process in the cryovacuum unit. // Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. – 2023. – Vol.23(1). – P.62–67. DOI: [10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67)

19 Dillinger S., Mohrbach J., Hewer J., Gaffga M., & Niedner-Schatteburg G. Infrared spectroscopy of N₂ adsorption on size selected cobalt cluster cations in isolation. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2015. – Vol.17(16). – P.10358–10362. DOI: [10.1039/C5CP00047E](https://doi.org/10.1039/C5CP00047E)

20 Fortes P.R., Da Silveira Petrucci J.F., Wilk A., Cardoso A.A., Raimundo Jr I.M., & Mizaikoff B. Optimized design of substrate-integrated hollow waveguides for mid-infrared gas analyzers. // Journal of Optics. – 2014. – Vol.16(9). – Art.No 094006. DOI: [10.1088/2040-8978/16/9/094006](https://doi.org/10.1088/2040-8978/16/9/094006)

21 Serdyukov V.I., Sinita L.N., Lugovskoi A.A., & Emel'yanov N.M. Liquid-nitrogen-cooled optical cell for the study of absorption spectra in a fourier spectrometer. // Atmospheric and Oceanic Optics. – 2020. – Vol.33(4). – P.393–399. DOI: [10.1134/S1024856020040144](https://doi.org/10.1134/S1024856020040144)

22 Serdyukov V.I., Sinita L.N., Lugovskoi A.A., & Emelyanov N.M. Low-temperature cell for studying absorption spectra of greenhouse gases. // Atmospheric and Oceanic Optics. – 2019. – Vol.32(2). – P.220–226. DOI: [10.1134/S1024856019020106](https://doi.org/10.1134/S1024856019020106)

23 Sung K., Mantz A.W., Smith M.A. H., Brown L.R., Crawford T.J., Devi V.M., & Benner D.C. Cryogenic absorption cells operating inside a Bruker IFS-125HR: First results for 13CH₄ at 7µm. // Journal of Molecular Spectroscopy. –2010. – Vol.262(2). – P.122–134. DOI: [10.1016/j.jms.2010.05.004](https://doi.org/10.1016/j.jms.2010.05.004)

24 Mantz A.W., Sung K., Brown L. R., Crawford T.J., Smith M.A.H., Malathy Devi V., & Chris Benner D. A cryogenic Herriott cell vacuum-coupled to a Bruker IFS-125HR. // Journal of Molecular Spectroscopy. – 2014. – Vol.304. – P.12–24. DOI: [10.1016/j.jms.2014.07.006](https://doi.org/10.1016/j.jms.2014.07.006)

25 Kenbay A.A., Golikov O.Yu., Aldiyarov A.U., & Yerezhep D.E. Low-temperature cell for IR Fourier spectrometric investigation of hydrocarbon substances. // Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. – 2023. – Vol.23(4). – P.696–702. DOI: [10.17586/2226-1494-2023-23-4-696-702](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-696-702)

26 Nguyen T.-D., & Ngo T.Q. The role of technological advancement, supply chain, environmental, social, and governance responsibilities on the sustainable development goals of SMEs in Vietnam. // Economic Research-Ekonomska Istraživanja. – 2022. – Vol.35(1). – P.4557–4579. DOI: [10.1080/1331677X.2021.2015611](https://doi.org/10.1080/1331677X.2021.2015611)

27 Dollah A., Zainol Rashid Z., Hidayati Othman N., Nurliyana Che Mohamed Hussein S., Mat Yusuf S., & Shuhadah Japperi N. Effects of ultrasonic waves during waterflooding for enhanced oil recovery. // International Journal of Engineering & Technology. – 2018. – Vol.7(3.11). – P.232. DOI: [10.14419/ijet.v7i3.11.16015](https://doi.org/10.14419/ijet.v7i3.11.16015)

28 Mirea R., & Cican G. Theoretical assessment of different aviation fuel blends based on their physical-chemical properties. // Engineering, Technology & Applied Science Research. – 2024. – Vol.14(3). – P.14134–14140. DOI: [10.48084/etasr.6524](https://doi.org/10.48084/etasr.6524)

29 Biaktluanga L., Lalhrualtuanga J., Lalramnghaka J., & Thanga H.H. Analysis of gasoline quality by ATR-FTIR spectroscopy with multivariate techniques. // Results in Chemistry. – 2024. – Vol.8. – Art.No 101575. DOI: [10.1016/j.rechem.2024.101575](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2024.101575)

References

- 1 N.M. Shaalan, Materials Chemistry and Physics 328, 129930 (2024). [DOI: 10.1016/j.matchemphys.2024.129930](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129930)
- 2 N.I. Sorokin, N.A. Arkharova, and D. N. Karimov, Crystallography Reports 69, 561–568 (2024). [DOI: 10.1134/S106377452460145X](https://doi.org/10.1134/S106377452460145X)
- 3 H. Carrascosa, G.M. Muñoz Caro, R. Martín-Doménech, S. Cazaux, Y.-J. Chen, and A. Fuente, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 533, 967–978 (2024). [DOI: 10.1051/0004-6361/202245775](https://doi.org/10.1051/0004-6361/202245775)
- 4 S.K. Suresh, F. Dulieu, J. Vitorino, and P. Caselli, Astronomy & Astrophysics 682, A163 (2024). [DOI: 10.1051/0004-6361/202245775](https://doi.org/10.1051/0004-6361/202245775)
- 5 D.Y. Sokolov, D. Yerezhep, O. Vorobyova, M. A. Ramos, and A. Shinbayeva, Materials 15, 7441 (2022). [DOI: 10.3390/ma15217441](https://doi.org/10.3390/ma15217441)
- 6 D.Y. Sokolov, D. Yerezhep, O. Vorobyova, O. Golikov, and A.U. Aldiyarov, ACS Omega 7, 46402–46410 (2022). [DOI: 10.1021/acsomega.2c05090](https://doi.org/10.1021/acsomega.2c05090)
- 7 D. Yerezhep, A. Akylbayeva, O. Golikov, D.Y. Sokolov, A. Shinbayeva, and A.U. Aldiyarov, ACS Omega 8, 19567–19574 (2023). [DOI: 10.1021/acsomega.3c00985](https://doi.org/10.1021/acsomega.3c00985)
- 8 O.Yu. Golikov, D.E. Yerezhep, and D.Yu. Sokolov, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics 23, 483–492 (2023). [DOI: 10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492)
- 9 G. Bhavani, T. Durga Rao, M.K. Niranjana, K.R. Kumar, B. Sattibabu, V. Petkov, E. S. Kannan, and B. H. Reddy, Physica B: Condensed Matter 695, 416477 (2024). [DOI: 10.1016/j.physb.2024.416477](https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416477)
- 10 J. Xu, Q. Liu, T. Zheng, M. Xie, H. Shen, Y. Li, F. Guo, Q. Zhang, M. Duan, and K.-H. Wu, Separation and Purification Technology 356, 129906 (2025). [DOI: 10.1016/j.seppur.2024.129906](https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.129906)
- 11 T. Nishikino, T. Sugimoto, and H. Kandori, Physical Chemistry Chemical Physics 26, 22959–22967 (2024). [DOI: 10.1039/D4CP02248C](https://doi.org/10.1039/D4CP02248C)
- 12 Z. Yang, B. Su, H. Ding, Y. Qiu, and D. Zhong, Road Materials and Pavement Design 1, 1–16 (2024). [DOI: 10.1080/14680629.2024.2383915](https://doi.org/10.1080/14680629.2024.2383915)
- 13 J. Moszczyńska, X. Liu, and M. Wiśniewski, International Journal of Molecular Sciences 23, 9638 (2022). [DOI: 10.3390/ijms23179638](https://doi.org/10.3390/ijms23179638)
- 14 G. Moody, C. Kavir Dass, K. Hao, C.-H. Chen, L.-J. Li, A. Singh, K. Tran, G. Clark, X. Xu, G. Berghäuser, E. Malic, A. Knorr, and X. Li, Nature Communications 6, 8315 (2015). [DOI: 10.1038/ncomms9315](https://doi.org/10.1038/ncomms9315)
- 15 O.Yu. Golikov, D. E. Yerezhep, and D. Yu. Sokolov, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics 23, 483–492 (2023). [DOI: 10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-483-492)
- 16 O.Yu. Golikov, D. Yerezhep, and D. Yu. Sokolov, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics 23, 62–67 (2023). [DOI: 10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67)
- 17 D.Y. Sokolov, D. Yerezhep, O. Vorobyova, M. A. Ramos, and A. Shinbayeva, Materials 15, 7441 (2022). [DOI: 10.3390/ma15217441](https://doi.org/10.3390/ma15217441)
- 18 O.Yu. Golikov, D. Yerezhep, and D. Yu. Sokolov, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics 23, 62–67 (2023). [DOI: 10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-62-67)
- 19 S. Dillinger, J. Mohrbach, J. Hewer, M. Gaffga, and G. Niedner-Schatteburg, Physical Chemistry Chemical Physics 17, 10358–10362 (2015). [DOI: 10.1039/C5CP00047E](https://doi.org/10.1039/C5CP00047E)
- 20 P.R. Fortes, J. F. Da Silveira Petrucci, A. Wilk, A. A. Cardoso, I. M. Raimundo Jr., and B. Mizaikoff, Journal of Optics 16, 094006 (2014). [DOI: 10.1088/2040-8978/16/9/094006](https://doi.org/10.1088/2040-8978/16/9/094006)
- 21 V.I. Serdyukov, L. N. Sinitsa, A. A. Lugovskoi, and N. M. Emel'yanov, Atmospheric and Oceanic Optics 33, 393–399 (2020). [DOI: 10.1134/S1024856020040144](https://doi.org/10.1134/S1024856020040144)
- 22 V.I. Serdyukov, L. N. Sinitsa, A. A. Lugovskoi, and N. M. Emelyanov, Atmospheric and Oceanic Optics 32, 220–226 (2019). [DOI: 10.1134/S1024856019020106](https://doi.org/10.1134/S1024856019020106)
- 23 K. Sung, A. W. Mantz, M. A. H. Smith, L. R. Brown, T. J. Crawford, V. M. Devi, and D. C. Benner, Journal of Molecular Spectroscopy 262, 122–134 (2010). [DOI: 10.1016/j.jms.2010.05.004](https://doi.org/10.1016/j.jms.2010.05.004)
- 24 A.W. Mantz, K. Sung, L. R. Brown, T. J. Crawford, M. A. H. Smith, V. M. Malathy Devi, and D. C. Benner, Journal of Molecular Spectroscopy 304, 12–24 (2014). [DOI: 10.1016/j.jms.2014.07.006](https://doi.org/10.1016/j.jms.2014.07.006)
- 25 A.A. Kenbay, O. Yu. Golikov, A. U. Aldiyarov, and D. E. Yerezhep, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics 23, 696–702 (2023). [DOI: 10.17586/2226-1494-2023-23-4-696-702](https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-696-702)
- 26 T.D. Nguyen and T. Q. Ngo, Economic Research-Ekonomiska Istraživanja 35, 4557–4579 (2022). [DOI: 10.1080/1331677X.2021.2015611](https://doi.org/10.1080/1331677X.2021.2015611)
- 27 A. Dollah, Z. Zainol Rashid, N. H. Othman, S. N. Che Mohamed Hussein, S. Mat Yusuf, and N. S. Japperi, International Journal of Engineering & Technology 7, 232 (2018). [DOI: 10.14419/ijet.v7i3.11.16015](https://doi.org/10.14419/ijet.v7i3.11.16015)
- 28 R. Mirea and G. Cican, Engineering, Technology & Applied Science Research 14, 14134–14140 (2024). [DOI: 10.48084/etasr.6524](https://doi.org/10.48084/etasr.6524)
- 29 L. Biakluanga, J. Lalhruaitluanga, J. Lalramnghaka, & H.H. Thanga, Results in Chemistry, 8, 101575 (2024). [DOI: 10.1016/j.rechem.2024.101575](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2024.101575)

Article history:

Received 18 October 2024

Accepted 8 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 18.10.2024

Қабылданды – 8.12.2024

Information about authors:

1. **Alisher Kenbay** – Engineer, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan; Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: mr.kenbay@gmail.com

2. **Darkhan Yerezhep** (corresponding author) – PhD, Ass. Prof., Head of the Department of Standardization, Certification and Metrology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: darhan_13@physics.kz

3. **Abdrakhman Aldiyarov** – Cand.Phys.-Math.Sci, Prof., Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan. e-mail: abdurakhman.aldiyarov@kaznu.kz

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Алишер Кенбай** – инженер, Өл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан; Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: mr.kenbay@gmail.com

2. **Дархан Ережеп** (автор корреспондент) – PhD, Асс.проф., Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университетінің стандарттау, сертификаттау және метрология кафедрасының меңгерушісі, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: darhan_13@physics.kz

3. **Әддрахман Алдияров** – физ.-мат.ғыл.канд., проф., Өл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан e-mail: abdurakhman.aldiyarov@kaznu.kz

IRSTI 29.19.22

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a8>

A.A. Akhatov^{1*}, Kh.Kh. Turaev¹, J.M. Ashurov², I.A. Umbarov¹,
X.R. Tillaev¹, A.K. Nomozov³, N.B. Uralov¹, E.A. Eshdavlatov¹

¹ Termez State University, Termez, Uzbekistan

² Institute of Bioorganic Chemistry, Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan

³ Termez State University of Engineering and Agrotechnologies, Termez, Uzbekistan

*e-mail: aaahatov@mail.ru

SYNTHESIS, STRUCTURE AND HIRSHFELD SURFACE ANALYSIS OF THE COMPLEX COMPOUND BASED ON Cd(II) SALT AND O-PHENYLENEDIAMINE

In this paper studying the synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of a new complex compound containing $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ obtained based on o-phenylenediamine (OPD) are given. The molecular and crystal structure of this complex compound was determined using the RTT method. In the inner sphere of the complex, two molecules of OPD in the chelate state and one molecule of OPD in the monodentate state are attached to the central atom. The complex compound forms a distorted octahedral shape in space. $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex compound syngonia is monoclinic, space group P21/c and crystal parameters are $a = 22.5631(5) \text{ \AA}$, $b = 8.1292(2) \text{ \AA}$, $c = 11.6094(4) \text{ \AA}$. In the crystal structure of the complex, 5 Cd–N (2.350(5) Å – 2.448(5) Å) and 1 Cd–O (2.355(5) Å) bonds form an inner sphere. The crystal structure of the molecule is formed by intra- and intermolecular hydrogen bonds of the type N---H...O and O---C...O. In the Hirshfeld surface analysis of $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex compound, the main interactions are H...H (54.4%), O...H/H...O (26.7%) and H...C/C...H (16.7%) organizes.

Keywords: o-phenylenediamine, complex compound, hydrogen bond, Hirshfeld surface analysis, crystal parameter.

A.A. Ахатов^{1*}, Х.Х. Тўраев¹, Ж.М. Ашуров², И.А. Умбаров¹,
Х.Р. Тиллаев¹, А.К. Номозов³, Н.Б. Оралов¹, Е.А. Ешдавлатов¹

¹ Термез мемлекеттік университети, Термез қ., Өзбекстан

² Өзбекстан Республикасы Ғылым академиясының Биоорганикалық химия институты, Ташкент қ., Өзбекстан

³ Термез мемлекеттік инженерлік және ауылшаруашылық технологиялар университети, Термез қ., Өзбекстан

*e-mail: aaahatov@mail.ru

Cd(II) тұзы мен о-фенилендиамин негізіндегі күрделі қосылыстардың бетін Гиршфельд бойынша синтезі, құрылымы және талдауы

Бұл ұсынылған жұмыста о-фенилендиаминнен (OPD) алынған $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ бар жаңа күрделі қосылыс синтезі, кристалдық құрылымы және Хиршфельд беттік талдауының нәтижелері берілген. Бұл күрделі қосылыстың молекулалық және кристалдық құрылымы RTT әдісі арқылы анықталды. Кешеннің ішкі сферасында орталық атомға хелат күйіндегі екі OPD молекуласы және моноденттік күйдегі бір OPD молекуласы бекітілген. Кешенді қосылыс кеңістікте бұрмаланған октаэдрлік пішінді құрайды. $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ комплексті қосылыс жүйесі моноклиникалық, кеңістіктік тобы P21/c, ал кристалдық параметрлері $a = 22,5631(5) \text{ \AA}$, $b = 8,1292(2) \text{ \AA}$ және $c = 11,6094(4) \text{ \AA}$ болып табылады. Кешеннің кристалдық құрылымында 5 Cd–N байланысы 5 Cd – N (2,350(5) Å – 2,448(5) Å) және 1 Cd – O (2,355(5) Å) байланысы ішкі сфераны құрайды. Молекуланың кристалдық құрылымы N---H...O және O---C...O типті ішкі және молекулааралық сутектік байланыстар арқылы түзіледі. $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ күрделі қосылыстың беттік Хиршфельд талдауында негізгі өзара әрекеттесулер H...H (54,4%), O...H/H...O (26,7%) және H...C/C...H (16,7%) болып табылады.

Түйін сөздер: о-фенилендиамин, комплексті қосылыс, сутектік байланыс, Хиршфельд бетінің анализі, кристалдық параметр.

А.А. Ахатов^{1*}, Х.Х. Тураев¹, Ж.М. Ашуров², И.А. Умбаров¹,
 Х.Р. Тиллаев¹, А.К. Номозов³, Н.Б. Уралов¹, Е.А. Эшдавлатов¹

¹Термезский государственный университет, г. Термез, Узбекистан

²Институт биоорганической химии АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан

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

*e-mail: aaahatov@mail.ru

Синтез, структура и анализ поверхности по Хиршфельду комплексного соединения на основе соли Cd(II) и о-фенилендиамина

В данной работе приведены результаты синтеза, кристаллической структуры и анализа поверхности по Хиршфельду нового комплексного соединения, содержащего $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$, полученного на основе о-фенилендиамина (OPD). Молекулярная и кристаллическая структура этого комплексного соединения была определена с использованием метода RTT. Во внутренней сфере комплекса к центральному атому присоединены две молекулы OPD в хелатном состоянии и одна молекула OPD в монодентатном состоянии. Комплексное соединение образует в пространстве искаженную октаэдрическую форму. Сингония комплексного соединения $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ является моноклинной, пространственная группа P21/c и параметры кристалла составляют $a = 22,5631(5) \text{ \AA}$, $b = 8,1292(2) \text{ \AA}$ и $c = 11,6094(4) \text{ \AA}$. В кристаллической структуре связей 5 Cd–N (2,350(5) $\text{\AA}$ – 2,448(5) $\text{\AA}$) и связь 1 Cd–O (2,355(5) $\text{\AA}$) образуют внутреннюю сферу. Кристаллическая структура молекулы образована внутри- и межмолекулярными водородными связями типа N---H...O и O---C...O. При поверхностном Хиршфельд анализе комплексного соединения $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ основными взаимодействиями являются H...H (54,4%), O...H/N...O (26,7%) и H...C/C...H (16,7%).

Ключевые слова: о-фенилендиамин, комплексное соединение, водородная связь, поверхностный анализ Хиршфельда, параметр кристалла.

Introduction

The OPD molecule is important in the chemistry of organic and complex compounds due to its easy oxidation and reduction properties [1]. Complex compounds obtained on the basis of O-phenylenediamine are used in medicine to obtain drugs against cancer cells and against malaria [2,3]. In addition, OPD is used as sorbents in industrial wastewater treatment [4]. It is known that OPD and its complex compounds have been used as fungicides and herbicides in agriculture for many years [5,6]. It has been proven that the amino group in OPD participates in an active oxidation-reduction reaction due to easy protonation or deprotonation [7]. Also, due to the adjacent arrangement of amino groups in OPD, it increases the possibility of forming chelate complexes with its metal atoms [8]. Jan-Teller effect is observed in the $[\text{Cu}(\text{SO}_4)(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex formed by OPD with Cu(II) ion. When studying single crystals of this complex compound by RTT method, it was found that the length of N—H bonds is 0.92 $\text{\AA}$, Cu1—N2 2.014 $\text{\AA}$, Cu1—N4 2.020 $\text{\AA}$, Cu1—N1 2.022 $\text{\AA}$, Cu1—N3 2.023 $\text{\AA}$, and Cu1—O1 2.2433 $\text{\AA}$ [9]. A conformation phenomenon is observed in some complex compounds of OPD. For example, the complex compound $[\text{Ni}(\text{opda})_2(\text{NCS})_2]$ forms yellow and purple complexes. Both monocrystals have spatial group P21/c and the

presence of N—H...S hydrogen bonds in the crystal structure. Yellow single crystals are heated in the temperature range of 110–120°C and quickly turn into purple crystals [10]. Thermal and solution stability of $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{C}_{10}\text{H}_6\text{O}_6\text{S}_2)$ complex formed by OPD of Ni(II) ion was proved. In the structure of this complex, 2 OPD and 2 water molecules are located in the inner sphere. The disodium salt of naphthalene 1,5-disulfoacid is located in the outer sphere [11]. Chelate complexes are more stable than monodentate complexes [12].

$[\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_4](\text{C}_{10}\text{H}_6\text{O}_6\text{S}_2)$ complex obtained on the basis of Cd(II) ion and OPD also forms a chelate complex. The central atom is surrounded by 4 OPD molecules. 2 OPD molecules are connected to the central atom in bidentate and 2 OPD molecules in monodentate state [13].

The aim of study the crystal structure of substances by X-ray diffraction is to determine the position of its atoms in space [14,15]. If the exact position of the atoms in the substance is determined, it will be possible to determine the distance between atoms, bond angles, bond energies and other parameters. X-rays are generated through an X-ray tube [16]. The free electrons coming from the heated cathode in the X-ray tube have a high potential between the cathode and the anode and fall to the Cu or Mo electrode anode. In this process, X-rays are generated with high voltage. The anode is always

cooled by a cooling device. Generated X-rays are processed automatically [17,18].

We used an automatic Xcalibur® Oxford Diffraction diffractometer (graphite monochromator, Cu-K α -radiation $\lambda = 1.54184$ Å) to determine the structure and composition of the single crystal obtained in this research work.

Experimental part

This complex compound, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$, was synthesized by reacting o-phenylenediamine with cadmium sulfate crystalline hydrate in a 1:3 molar ratio (M:L) (Fig.1).

First, 0.176 g (0.5 mmol) of cadmium sulfate crystalline hydrate salt ($\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$) was taken and a 0.1 M aqueous solution was prepared. 0.054 g (0.5 mmol) of OPD ligand was taken and its solution in 0.1 M ethanol (96%) was prepared. The reaction mixture was first stirred at room temperature and then at 60°C on a magnetic stirrer for 80 minutes. At the end of the process, the reaction mixture was brought

to room temperature and left for 10 days in a thermostat with constant temperature ($28 \pm 1^\circ\text{C}$). Dark-yellow single crystals obtained by slow evaporation method were obtained with 80% yield and the crystal structure was studied using the RTT method (Fig.2). The elemental analysis of the obtained $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex is as follows: determined (%) Cd 20.36, C 39.27, H 4.72, N 15.27, O 14.56, S 5.82; found (%) Cd 20.34, C 39.19, H 4.71, N 15.21, O 14.45, S 5.79.

Asymmetric and symmetric valence vibrations of NH_2 -groups in o-phenylenediamine are in the doublet state at 3385 cm^{-1} , 3361 cm^{-1} , 3282 cm^{-1} and 3180 cm^{-1} , and the deformation vibrations of this group are at 1631 cm^{-1} and 1591 cm^{-1} observed. The frequencies of valence vibration of the C-N bond are observed in the region of 1273 cm^{-1} . In the $3063\text{--}3057\text{ cm}^{-1}$ region of the spectrum, there are bands caused by the valence vibrations of the C-H bonds of the aromatic ring. We can observe the valence vibration of the aromatic ring along the plane of the ring in the range of $1776\text{--}1919\text{ cm}^{-1}$ (Fig.3).

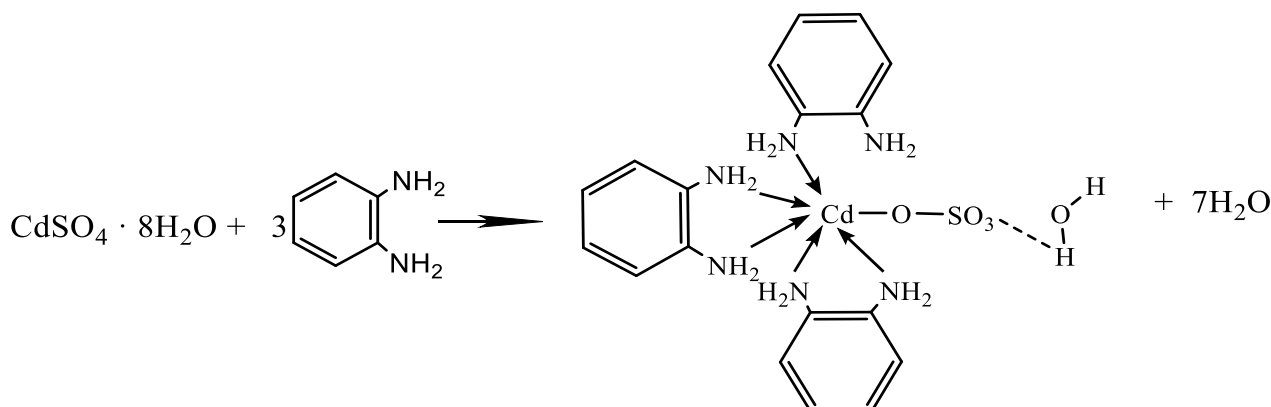


Figure 1 – Schem.1. Synthesis reaction of complex compound $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$

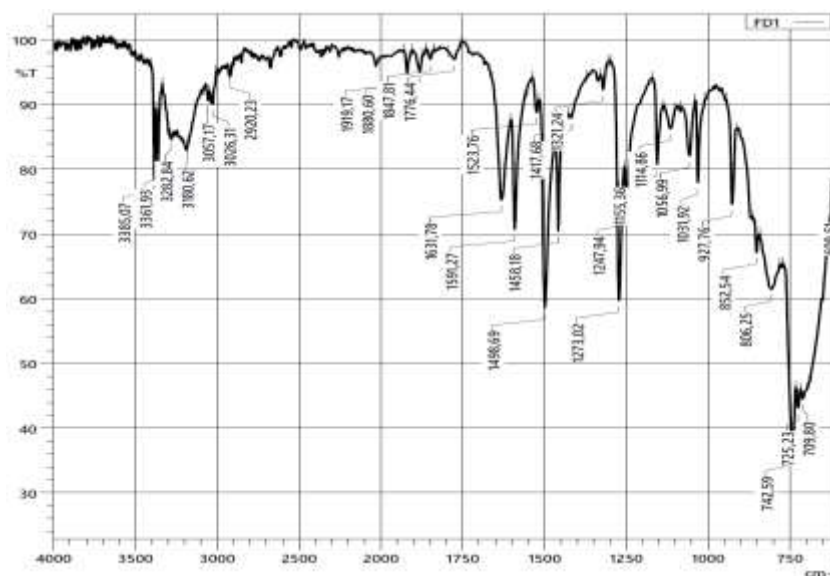


Figure 2 – IR spectrum of OPD

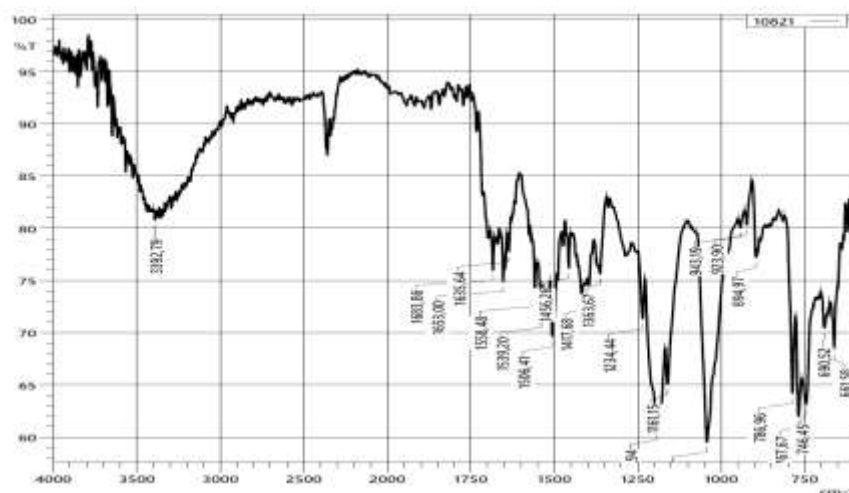


Figure 3 – IR spectrum of $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex compound

In the analysis of the IR spectrum depicted in the picture above, we can conclude that there are OH groups located in the outer sphere of the molecule in the high-frequency 3392 cm^{-1} short region of the spectrum. In the part of the spectrum in the doublet area of 1456 cm^{-1} and 1506 cm^{-1} , we see the deformation vibration of the NH_2 group. Aromatic rings vibrate due to overtone frequencies in the absorption regions of 1653 cm^{-1} and 1683 cm^{-1} along the ring plane. We can see the valence vibration of S-O groups between the absorption areas of 1363 cm^{-1} and 1417 cm^{-1} .

Crystal structure

In the crystal structure of the $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex compound (Fig.4), there are three OPD molecules a sulfate anion in the

inner sphere, and one water molecule in the outer sphere. Two of the OPD molecules are in the chelate state and one is in the monodentate state attached to the central atom. The coordination number of the central atom is 6. Nitrogen atoms are connected to the central atom with the help of donor-acceptor bonds, and the oxygen atom forms a covalent bond. In the supramolecular structure of the molecule, the distance between atoms attached to the central atom is Cd–O1 $2.355(5) \text{ \AA}$, Cd1–N1 $2.373(5) \text{ \AA}$, Cd1–N2 $2.403(6) \text{ \AA}$, Cd1–N3 $2.448(5) \text{ \AA}$, Cd1–N4 is $2.375(5) \text{ \AA}$, Cd1–N5 is $2.350(5) \text{ \AA}$. Also, O1–Cd1–N1 $98.96(15)^\circ$, O1–Cd1–N2 $166.88(16)^\circ$, O1–Cd1–N3 $103.79(17)^\circ$, O1–Cd1–N4 $77.97(17)^\circ$ form in the molecule. In the crystal structure of the molecule, there are internal and intermolecular hydrogen bonds of the type $\text{N} \cdots \text{H} \cdots \text{O}$ and $\text{O} \cdots \text{C} \cdots \text{O}$ (Tab. 2).

Table 1 – Crystal parameters of the $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex

Parameters	Values	Parameters	Values
$[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$			
Formula	$[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$	Crystal Size, mm	0.00 x 0.00 x 0.00
Molecular Weight	551.46	Temperature T, °K	293
Syngonia	monoclinic	Theta Min-Max [Deg] 0, °	4.0, 76.1
Space group	P21/c	Dataset h,k,l	-27: 24 ; -10: 8 ; -13: 14
a, Å	22.5631(5)	Total reflexes	8493
b, Å	8.1292(2)	The number of independent	4265
c, Å	11.6094(4)	R_{int}	0.063
α°	90	$F^2 \geq 2\sigma(F^2)$	3349
β°	99.340(3)	No. of reflections	4265
γ°	90	No. of parameters	284
V, Å ³	2101.17(10)	R1, wR2(1>2σ(I))	0.0538, 0.1395, 1.03
Z	9	$\Delta_{\text{pmin/max}} \text{e \AA}^{-3}$	-1.67, 1.84
$D_x/\text{g/cm}^3$	1.742		
$\mu(\text{CuK}\alpha)$, mm ⁻¹	9.645		

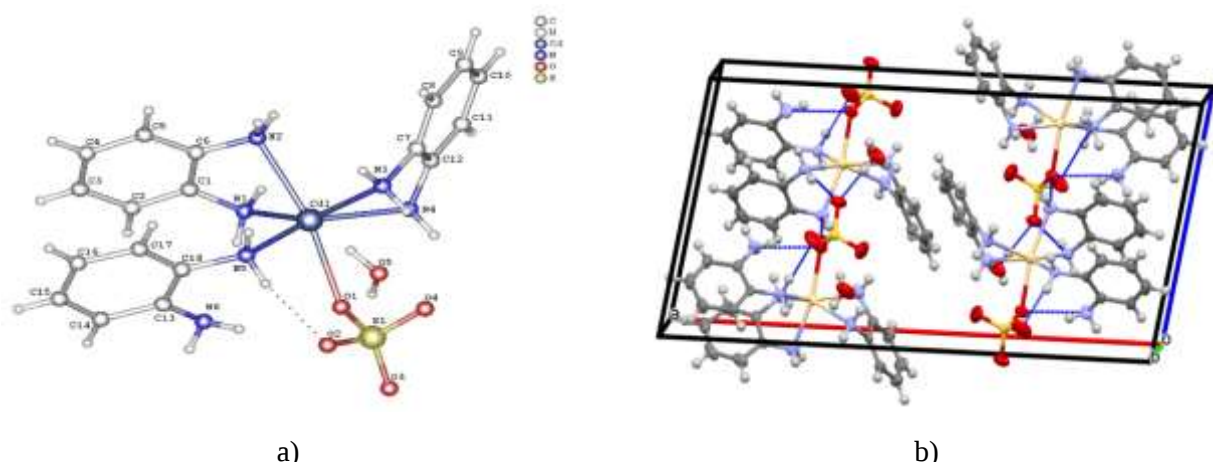


Figure 4 – (a) Molecular structure of the complex $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ and (b) Plotting of the complex compound $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ along the c axis (blue lines depict hydrogen bonds)

Table 2 – Geometry of hydrogen bonds of complex compound $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$

$D-H \cdots A$	$D-H, \text{\AA}$	$H \cdots A, \text{\AA}$	$D \cdots A, \text{\AA}$	$DHA, \text{burchak}$
N1---H1A...O3	0.8900	2.1200	2.986(8)	164.00
N2---H2A...O2	0.8900	2.3100	3.085(8)	145.00
N2---H2B...O1	0.8900	2.2200	3.024(6)	150.00
N4---H4B...O5	0.8900	2.0600	2.947(9)	174.00
N5---H5A...O2	0.8900	2.0800	2.915(8)	156.00
N5---H5B...O2	0.8900	2.5700	3.345(8)	146.00
N5---H5B...O3	0.8900	2.3100	3.137(7)	154.00
O5---H5C...O3	0.8500	1.8800	2.713(9)	167.00
O5---H5D...O2	0.8500	2.2900	3.118(9)	165.00
O5---H5D...O4	0.8500	2.4900	3.139(10)	134.00
N6---H6A...O1	0.8700	2.3200	3.019(6)	137.00

Symmetry codes: $x, 3/2-y, -1/2+z \# x, 1/2-y, -1/2+z \# 1-x, 1-y, 2-z \# x, 3/2-y, 1/2+z \# x, 1/2-y, 1/2+z \# x, 1+y, z \# 1-x, -1/2+y, 5/2-z \# -x, 1/2+y, 3/2-z \# 1-x, 1/2+y, 5/2-z \# -x, -1/2+y, 3/2-z \# x, -1+y, z$

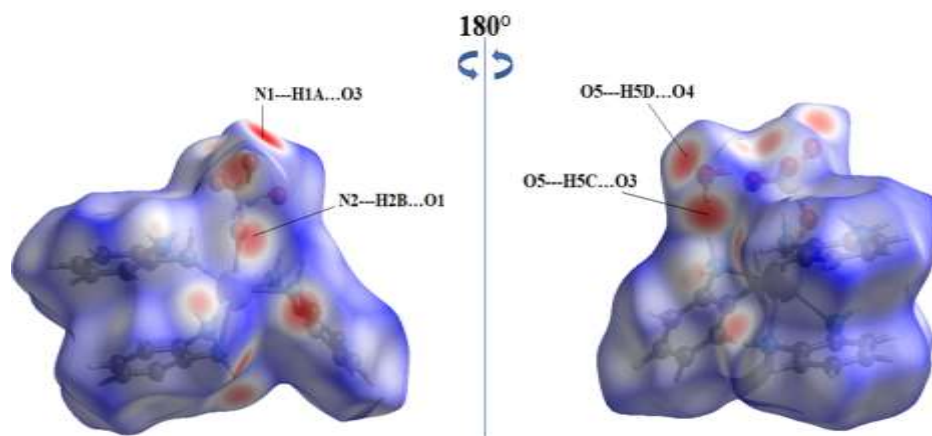


Figure 5 – 3D Hirshfeld surface of the complex compound $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ by dnorm

Hirschfeld surface analysis allows visualization of weak interactions within a molecule. It also represents the share of the particles in the molecule in the total structure of the molecule through electron densities [19,20]. Hirschfeld surface analysis of this complex compound was performed using Crystal Explorer 21.5 software. The red spots on the

Hirschfeld surface represent interactions close to the surface of the molecule. Also, these spots represent hydrogen bonds in the crystal structure of the molecule. In the complex compound $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$, there are N1---H1A...O3 hydrogen bonds between the third oxygen atom located in the inner sphere and the NH2- group of the

molecule. Also, between the water molecule located in the outer sphere of the complex and the inner sphere of the molecule, there are intermolecular hydrogen bonds of the type O5---H5D...O4. In the inner sphere of the complex compound, there are internal hydrogen bonds of the N2---H2B...O1 type between the sulfate anion and the NH₂ group. On the Hirshfeld surface of the complex compound, the standard sizes of red and blue spots according to d_{norm} are -0.6676 and 1.2204, respectively. On the Hirshfeld surface, the van der Waals radii of the red colour molecule indicate close interactions. The blue spots show interactions far from van der Waals radii [16]. In this complex compound, hydrogen bonds

form the main part of the red spots located on the surface of Hirshfeld. The Hirshfeld surface area of the complex is $S = 414.80 \text{ \AA}^2$ and the volume $V = 517.63 \text{ \AA}^3$ (Fig.5). Also, the interaction of internal particles in the structure of the molecule was determined using the two-dimensional functions d_i and the interactions on the crystal surface. The main interactions in the molecule are H...H (54.4%), O...H/H...O (26.7%) and H...C/C...H (16.7%). These interactions create spikes with tip and side growth in the two-dimensional fingerprint image (Fig. 6). Usually, the percentage of hydrogen bonds is higher on the sides of the fingerprint image [21, 22].

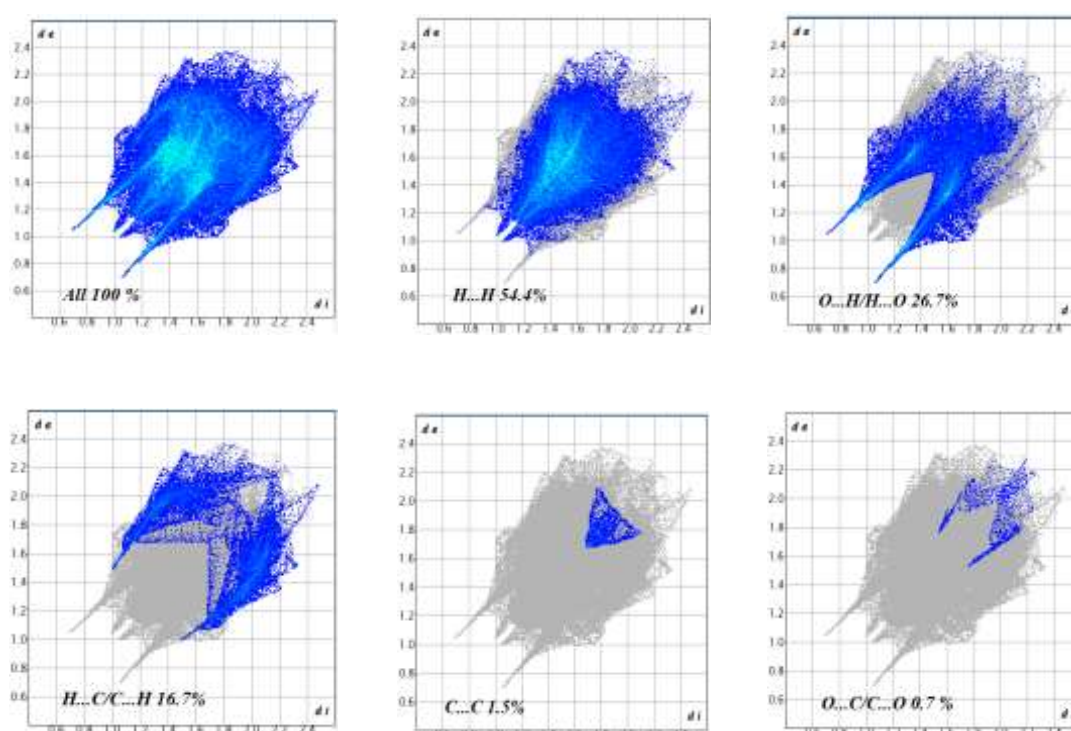


Figure 6 – 2D fingerprint diagram of the $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex

Conclusion

In short, for the first time, a complex compound with the composition $[\text{Cd}(\text{OPD})_3\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ was synthesized based on OPD and its single crystals were obtained. The molecular and crystal structure of the obtained single crystals was studied using the RTT method. The bond angles, the distance between bonds, spatial shape and other crystal parameters of this complex compound were determined. Hirshfeld surface analysis of the obtained complex compound was performed in the Crystal Explorer 21.5 program. In the crystal structure of the complex, hydrogen bonds are represented by red

spots in the Hirshfeld surface analysis. The interaction of the particles in the molecule and the van der Waals radii were determined. Also, in the IR-spectrum analysis of the formed complex compound, the deformation vibration of the OH group in the 3392 cm^{-1} region and the doublet state deformation vibration of the NH₂ group in the lower frequency 1456 cm^{-1} and 1506 cm^{-1} regions of the spectrum is observed.

Acknowledgment

Authors thanks to Termez State University the for support this research work.

References

- 1 Khan I.M., Ahmad A. Synthesis, spectroscopic characterization and structural studies of a new proton transfer (H-bonded) complex of o-phenylenediamine with L-tartaric acid //Journal of Molecular structure. – 2013. – Vol.1050. – P.122-127. DOI: [10.1016/j.molstruc.2013.07.015](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2013.07.015)
- 2 Alajrawy O. I. et al. In-vitro cytotoxic activity and theoretical investigations for new mononuclear Pt (IV) and dinuclear Ru (III) with o-phenylenediamine ligand complexes against L20B cell line //Results in Chemistry. – 2023. – Vol. 5. – Art.No 100712. DOI: [10.1016/j.rechem.2022.100712](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2022.100712)
- 3 Gaballa A. S. et al. Synthesis, characterization and biological activity of some platinum (II) complexes with Schiff bases derived from salicylaldehyde, 2-furaldehyde and phenylenediamine //Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2007. – Vol.67. – №. 1. – P.114-121. DOI: [10.1016/j.saa.2006.06.031](https://doi.org/10.1016/j.saa.2006.06.031)
- 4 Li X. G. et al. Powerful reactive sorption of silver (I) and mercury (II) onto poly (o-phenylenediamine) microparticles //Langmuir. – 2009. – Vol.25. – №. 3. – P.1675-1684. DOI: [10.1021/la802410p](https://doi.org/10.1021/la802410p)
- 5 Wang Z., Liao F. Synthesis of poly (ortho-phenylenediamine) fluffy microspheres and application for the removal of Cr (VI) //Journal of Nanomaterials. – 2012. – Vol.2012. – P.1-7. DOI: [10.1155/2012/682802](https://doi.org/10.1155/2012/682802)
- 6 Molhi A. et al. Contribution to the corrosion inhibition of C38 steel in 1 M hydrochloric acid medium by a new epoxy resin PGEPPP //International Journal of Corrosion and Scale Inhibition. – 2021. – Vol.10. – №. 1. – P.399-418. <https://dx.doi.org/10.17675/2305-6894-2021-10-1-23>
- 7 Supriya S., Das S. K. A simple Cu (II) complex, [CuII {C₆H₄(NH₂)₂}₂(NO₃)₂] with an unprecedented hydrogen bonding supramolecular network in the solid state and its solution emission at room temperature in the visible region //Inorganic Chemistry Communications. – 2003. – Vol.6. – №. 1. – P.10-14. DOI: [10.1016/S1387-7003\(02\)00672-X](https://doi.org/10.1016/S1387-7003(02)00672-X)
- 8 Sabbani S., Das S. K. Reversible nitro–nitrito inter-conversion in a simple mono-nuclear nickel (II) complex [NiII{C₆H₄(NH₂)₂}₂(NO₂)₂] in the solid state //Inorganic Chemistry Communications. – 2009. – Vol. 12. – №. 5. – P.364-367. DOI: [10.1016/j.inoche.2009.02.011](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2009.02.011)
- 9 Djebli Y. et al. Bis (benzene-1, 2-diamine-κ₂N, N')(sulfato-κO) copper (II) monohydrate //Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online. – 2012. – Vol.68. – №. 11. – P.m1411-m1412. DOI: [10.1107/s1600536812041967](https://doi.org/10.1107/s1600536812041967)
- 10 Eliboev I. et al. Supramolecular corrosion protection: Eco-friendly synthesis and efficacy of a β-cyclodextrin/o-phenylenediamine complex //Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. – 2023. – Vol.147. – P.104944. DOI: [10.1016/j.jtice.2023.104944](https://doi.org/10.1016/j.jtice.2023.104944)
- 11 Suyunov J. R. et al. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of diaquabis (o-phenylenediamine-κ₂N, N') nickel (II) naphthalene-1, 5-disulfonate //Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications. – 2023. – Vol.79. DOI: [10.1107/S2056989023009350](https://doi.org/10.1107/S2056989023009350)
- 12 Willett R. D. et al. Exchange coupling mediated by N–H··· Cl hydrogen bonds: Experimental and theoretical study of the frustrated magnetic system in bis (o-phenylenediamine) nickel (II) chloride //Inorganic Chemistry. – 2012. – Vol.51. – №. 9. – P.5487-5493. DOI: [10.1021/ic3007124](https://doi.org/10.1021/ic3007124)
- 13 Suyunov J. et al. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of a cadmium complex of naphthalene-1, 5-disulfonate and o-phenylenediamine //Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications. – 2023. – Vol.79. – №. 12. – P.1190-1193. DOI: [10.1107/S2056989023010125](https://doi.org/10.1107/S2056989023010125)
- 14 Seth S. K. Structural characterization and Hirshfeld surface analysis of a CoII complex with imidazo [1, 2-a] pyridine //Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications. – 2018. – Vol.74. – №. 5. – P.600-606. DOI: [10.1107/S2056989018003857](https://doi.org/10.1107/S2056989018003857)
- 15 Zhang K. et al. Rolling circle amplification as an efficient analytical tool for rapid detection of contaminants in aqueous environments //Biosensors. – 2021. – Vol.11. – №. 10. – P.352. DOI: [10.3390/bios11100352](https://doi.org/10.3390/bios11100352)
- 16 Nomozov A K., Salsola Oppositifolia acid extract as a green corrosion inhibitor for carbon steel. Indian J Chem Tech. – 2023. – Vol.30(6). – P.872-877. DOI: [10.56042/ijct.v30i6.6553](https://doi.org/10.56042/ijct.v30i6.6553).
- 17 Dydykin A. S. et al. Risk assessment in production of functional food products by means of RCA method //Food systems. – 2024. – Vol.7. – №. 2. – P.288-297. DOI: [10.21323/2618-9771-2024-7-2-288-297](https://doi.org/10.21323/2618-9771-2024-7-2-288-297)
- 18 Beyki M. H., Alijani H., Fazli Y. Poly o-phenylenediamine–MgAl@ CaFe₂O₄ nanohybrid for effective removing of lead (II), chromium (III) and anionic azo dye //Process Safety and Environmental Protection. – 2016. – Vol.102. – P.687-699. DOI: [10.1016/j.psep.2016.04.027](https://doi.org/10.1016/j.psep.2016.04.027)
- 19 Turaev Kh.Kh et al. Studying synthesis of a chelate-forming sorbent based on urea-formaldehyde and diphenylcarbazone. Indian J of Chem. – 2024. – Vol. 63. – P.579-585. DOI: [10.56042/ijc.v63i6.9006](https://doi.org/10.56042/ijc.v63i6.9006).
- 20 Bi S. et al. Metal ions triggered ligase activity for rolling circle amplification and its application in molecular logic gate operations //Chemical Science. – 2013. – Vol. 4. – №. 4. – P.1858-1863 DOI: [10.1039/C3SC00043E](https://doi.org/10.1039/C3SC00043E)
- 21 Turaev Kh.Kh. et al. Spectrophotometric determination of copper(II) ion with 7-bromo-2-nitroso-1-oxinaphthalene-3,6-disulphocid. Indian J of Chem. – 2024. – Vol.63, №5. – P.500-505. DOI: [10.56042/ijc.v63i5.9289](https://doi.org/10.56042/ijc.v63i5.9289)
- 22 Masoudiasl A. et al. Structural investigation of a new cadmium coordination compound prepared by sonochemical process: Crystal structure, Hirshfeld surface, thermal, TD-DFT and NBO analyses //Ultrasonics Sonochemistry. – 2019. – Vol.52. – P.244-256. DOI: [10.1016/j.ultsonch.2018.11.024](https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2018.11.024)
- 23 Nomozov A. Studying of The Process of Obtaining Monocalcium Phosphate based on Extraction Phosphoric Acid from Phosphorites of Central Kyzylkum. Baghdad Sci.J 2024. - Vol.22(1). DOI: [10.21123/bsj.2024.9836](https://doi.org/10.21123/bsj.2024.9836).

References

- 1 I.M. Khan, A. Ahmad, J. Mol. Struct. 1050, 122–127 (2013). DOI: 10.1016/j.molstruc.2013.07.015
- 2 O.I. Alajrawy, S.A. Abbas, A.A. Al-Kurdi, M.J. Al-Majedy, A.M. Al-Amiry, Results Chem. 5, Art.No 100712 (2023). DOI: 10.1016/j.rechem.2022.100712
- 3 A.S. Gaballa, A.A. Mohamed, N.M.T. Abdou, M. Gaber, Spectrochim. Acta A 67, 114–121 (2007). DOI: 10.1016/j.saa.2006.06.031
- 4 X.G. Li, M. Jing, X.Y. Xue, Langmuir 25, 1675–1684 (2009). DOI: 10.1021/la802410p
- 5 Z. Wang, F. S. Liao, J. Nanomater. 2012, 1–7 (2012). DOI: 10.1155/2012/682802
- 6 A. Molhi, R. Touri, N. E. Labjar, S. Sfaira, R. Benzakour, M. Ebn Touhami, Int. J. Corros. Scale Inhib. 10, 399–418 (2021). DOI: 10.17675/2305-6894-2021-10-1-23
- 7 S. Supriya, S. K. Das, Inorg. Chem. Commun. 6, 10–14 (2003). DOI: 10.1016/S1387-7003(02)00672-X
- 8 S. Sabbani, S. K. Das, Inorg. Chem. Commun. 12, 364–367 (2009). DOI: 10.1016/j.inoche.2009.02.011
- 9 Y. Djebli, F. Hama, A. Chaabane, Acta Crystallogr. E 68, m1411–m1412 (2012). DOI: 10.1107/s1600536812041967
- 10 I. Eliboev, A. Fazylov, I. Tursunov, S. Aminov, J. Taiwan Inst. Chem. Eng. 147, 104944 (2023). DOI: 10.1016/j.jtice.2023.104944
- 11 J.R. Suyunov, I. Tursunov, K. Ismailov, Acta Crystallogr. E 79, (2023). DOI: 10.1107/S2056989023009350
- 12 R. D. Willett, C. J. Doerrer, J. McKeon, S. R. Novak, Inorg. Chem. 51, 5487–5493 (2012). DOI: 10.1021/ic3007124
- 13 J. Suyunov, A. Tursunov, A. Umarov, Acta Crystallogr. E 79, 1190–1193 (2023). DOI: 10.1107/S2056989023010125
- 14 S.K. Seth, Acta Crystallogr. E 74, 600–606 (2018). DOI: 10.1107/S2056989018003857
- 15 K. Zhang, W. Chen, J. Wu, Biosensors 11, 352 (2021). DOI: 10.3390/bios11100352
- 16 A.K. Nomozov, Indian J. Chem. Tech. 30, 872–877 (2023). DOI: 10.56042/ijct.v30i6.6553
- 17 A.S. Dydykin, V. P. Ivanova, A. M. Nikolaev, Food Syst. 7, 288–297 (2024). DOI: 10.21323/2618-9771-2024-7-2-288-297
- 18 M.H. Beyki, H. Alijani, Y. Fazli, Process Saf. Environ. Prot. 102, 687–699 (2016). DOI: 10.1016/j.psep.2016.04.027
- 19 Kh.Kh. Turaev, Sh.A. Khakimov, F.N. Tukhtashev, Indian J. Chem. 63, 579–585 (2024). DOI: 10.56042/ijc.v63i6.9006
- 20 S. Bi, S. Zhang, Y. Q. Wu, Chem. Sci. 4, 1858–1863 (2013). DOI: 10.1039/C3SC00043E
- 21 Kh.Kh. Turaev, Sh.A. Khakimov, T.A. Iskandarov, Indian J. Chem. 63, 500–505 (2024). DOI: 10.56042/ijc.v63i5.9289
- 22 A. Masoudiasl, H. Pourghazi, H.R. Khavasi, Ultrason. Sonochem. 52, 244–256 (2019). DOI: 10.1016/j.ultsonch.2018.11.024
- 23 A. Nomozov, Baghdad Sci. J. 22, (2024). DOI: 10.21123/bsj.2024.9836

Article history:

Received 08 October 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихи:

Түсті – 08.10.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Ashur Akhatov** (corresponding author) – PhD doctorate, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: aaahatov@mail.ru

2. **Khayit Turaev** – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: hhturayev@rambler.ru

3. **Jamshid Ashurov** – Doctor of Chemical Sciences, Prof., Institute of Bioorganic Chemistry, Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan; e-mail: ashurovjamshid1@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Ашур Ахатов** (корреспондент автор) – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің докторанты, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: aaahatov@mail.ru

2. **Хайит Тураев** – химия ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез қ. Өзбекстан; e-mail: hhturayev@rambler.ru

3. **Жамшид Ашуров** – химия ғылымдарының докторы, Өзбекстан ҒА биоорганикалық химия институтының профессоры, Ташкент қ., Өзбекстан; e-mail: ashurovjamshid1@gmail.com

4. **Ibragim Umbarov** – Doctor of technical sciences, Prof., Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: umbarov@mail.ru

5. **Xurshidjon Tillaev** – PhD, associate professor, Faculty of Chemistry, Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: umbarov@mail.ru

6. **Abror Nomozov** – PhD, associate professor, Head Department of Chemical Engineering, Termez State University of Engineering and Agrotechnologies. Termez, Uzbekistan; e-mail: abornomozov055@gmail.com

7. **Nuriddin Uralov** – Doctoral student of the Faculty of Chemistry of Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: uralovnuriddin1991@gmail.com

8. **Erkin Eshdavlatov** – Teacher of the Faculty of Chemistry of Termez State University, Termez, Uzbekistan; e-mail: eshdavlatoverkinjon18@gmail.com

4. **Ибрагим Умбаров** – техника ғылымдарының докторы, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің профессоры, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: umbarov@mail.ru

5. **Хуршиджон Тиллаев** – PhD, Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің доценті, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: umbarov@mail.ru

6. **Аброр Номозов** – PhD, доцент, Термез мемлекеттік инженерлік және агротехнологиялар университеті «Химиялық инженерия» кафедрасының меңгерушісі, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: abornomozov055@gmail.com

4. **Нуриддин Уралов** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің докторанты, Термез қ., Өзбекстан; uralovnuriddin1991@gmail.com

8. **Еркін Ешдавлатов** – Термез мемлекеттік университетінің химия факультетінің оқытушысы, Термез қ., Өзбекстан; e-mail: eshdavlatoverkinjon18@gmail.com

IRSTI 29.19.22; 31.21.25

<https://doi.org/10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a9>B.S. Muminov^{1*} , M.U. Karimov¹ , A.T. Djalilov¹ , B.T. Khaitov² ¹Tashkent Chemical Technology Scientific Research Institute, Tashkent, Uzbekistan²Termez State University, Termez, Uzbekistan*e-mail: baxriddin-muminov@mail.ru

PRODUCTION OF MELAMINE USING THE ELECTROLYSIS METHOD

Melamine is the most important raw material in the paint industry and in the production of plastics. Melamine is also widely used in electrical engineering and textiles. Such widespread use has led to rapid growth in melamine production worldwide. The products of the organic synthesis industry are used in many fields and differ from other industrial products due to their different structure. Currently, the synthesis of melamine is carried out at high pressures and high temperatures or in the presence of catalysts, which complicates the technology.

In this article, the technology of obtaining melamine using the electrolysis method is studied. The characteristics and schematic structure of the experimental device are presented. The synthesized melamine was analyzed using IR spectroscopy and NMR spectroscopy to confirm its chemical composition and structural properties. The IR spectra revealed characteristic peaks corresponding to primary amine groups and the triazine ring, confirming successful melamine synthesis. The study demonstrates the feasibility and advantages of using electrolysis for melamine synthesis, including reduced environmental impact and simplified technological processes. This innovative method holds significant potential for industrial application, offering a more economical and eco-friendly solution for the production of melamine and other organic compounds.

Key words: melamine, electrolysis, urea, ammonium chloride, IR spectrum, power source.

Б.С. Муминов^{1*}, М.У. Каримов¹, А.Т. Джалилов¹, Б.Т. Хаитов²¹Ташкент химия-технологиялық ғылыми-зерттеу институты, Ташкент қ., Өзбекстан²Термез мемлекеттік университеті, Термез қ., Өзбекстан*e-mail: baxriddin-muminov@mail.ru

Электролиз әдісімен меламина өндіру

Меламин бояу өнеркәсібіндегі және пластмасса өндірісіндегі ең маңызды шикізат болып табылады. Меламин электротехника мен тоқыма өнеркәсібінде де кеңінен қолданылады. Мұндай кеңінен қолдану бүкіл әлемде меламин өндірісінің жылдам өсуіне әкелді. Органикалық синтез өнеркәсібінің өнімдері көптеген салаларда қолданылады және құрылымы әртүрлі болғандықтан басқа өнеркәсіптік өнімдерден ерекшеленеді. Қазіргі уақытта меламин синтезі жоғары қысымда және жоғары температурада немесе катализаторлардың қатысуымен жүзеге асырылады, бұл технологияны қиындатады.

Бұл мақалада электролиз әдісімен меламин алу технологиясы зерттеледі. Эксперименттік құрылғының сипаттамалары мен схемалық құрылымы берілген. Синтезделген меламин химиялық құрамы мен құрылымдық қасиеттерін растау үшін ИҚ-спектроскопия және ЯМР спектроскопиясы арқылы талданды. ИҚ спектрлері меламиннің сәтті синтезін растайтын бастапқы амин топтары мен триазин сақинасына сәйкес келетін сипаттамалық шыңдарды анықтады. Зерттеу меламинді синтездеу үшін электролизді пайдаланудың орындылығы мен артықшылықтарын көрсетеді, соның ішінде қоршаған ортаға әсерді азайту және оңайлатылған технологиялық технологиялар. Бұл инновациялық әдіс меламин және басқа да органикалық қосылыстарды өндіру үшін үнемді және экологиялық таза шешім ұсына отырып, өнеркәсіптік қолдану үшін айтарлықтай әлеуетке ие.

Түйін сөздер: меламин, электролиз, мочеви́на, аммоний хлориді, ИҚ спектрі, қуат көзі.

Б.С. Муминов^{1*}, М.У. Каримов¹, А.Т. Джалилов¹, Б.Т. Хаитов²¹Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, г. Ташкент, Узбекистан²Термезский государственный университет, г. Термез, Узбекистан*e-mail: baxriddin-muminov@mail.ru

Производство меламина методом электролиза

Меламин является важнейшим сырьем в лакокрасочной промышленности и производстве пластмасс. Меламин также широко используется в электротехнике и текстильной промышленности. Такое широкое применение привело к быстрому росту производства меламина во всем мире. Продукция промышленности органического синтеза используется во многих областях и отличается от других промышленных продуктов своей иной структурой. В настоящее время синтез меламина осуществляется при высоких давлениях и высоких температурах или в присутствии катализаторов, что усложняет технологию.

В данной статье изучается технология получения меламина методом электролиза. Представлены характеристики и схематическая структура экспериментального устройства. Синтезированный меламин был проанализирован с помощью ИК-спектроскопии и ЯМР-спектроскопии для подтверждения его химического состава и структурных свойств. ИК-спектры выявили характерные пики, соответствующие первичным аминогруппам и триазиновому кольцу, что подтверждает успешный синтез меламина. Исследование демонстрирует осуществимость и преимущества использования электролиза для синтеза меламина, включая снижение воздействия на окружающую среду и упрощение технологических процессов. Этот инновационный метод имеет значительный потенциал для промышленного применения, предлагая более экономичное и экологичное решение для производства меламина и других органических соединений.

Ключевые слова: меламин, электролиз, мочевины, хлорид аммония, ИК-спектр, источник питания.

Introduction

Melamine is a key organic chemical intermediate with a wide range of uses. Melamine is the most important raw material in the paint industry and plastic production [1,2]. Products based on melamine-formaldehyde are used for paper production and furniture. The main use of melamine in the wood industry is more than 70% of the total consumption (Fig.1) [3]. The development of this

industry is determined by the availability of domestic market capacity and the ever-increasing demand for this product. Melamine is also widely used in electrical engineering and textiles. Such widespread use has led to rapid growth in melamine production worldwide [4-8]. The chemical formula of melamine (2,4,6-triamino,1,3,5-triazine) shows its structure and shows some similarity with the benzene nucleus. Both the benzene and triazine rings are characterized by their stability [9].



Figure 1 – Furniture made on the basis of melamine

Melamine was first synthesized in 1834 by Lee Bishi. Initially, the dicyandiamide method was used. In this case, calcium cyanamide (CaCN_2) is prepared from calcium carbide (CaC_2), calcium cyanamide is hydrolyzed and dimerized into dicyandiamide, then heated and decomposed. Due to the high cost of calcium carbide, this method is not currently used. At present, industrial synthesis mainly uses urea as a raw material [10,11].



According to different reaction conditions, synthesis processes can be divided into high-pressure, low-pressure and atmospheric-pressure methods.

1. In the production of melamine by the high-pressure method, dissolved urea is usually sent to the compression breaker under a pressure of 8-9 MPa and then enters the synthesis reactor: in addition, liquid ammonia is under a pressure of 8-9.5 MPa [12]. The temperature is heated up to 400 °C. A catalyst is not involved in this.

2. In the production of melamine through a low-pressure process, the reaction takes place under a pressure of 0.1-1.0 MPa. The temperature will be up to 170-200 °C. Catalysts are used in this.

3. In the production of melamine by the atmospheric pressure method, ammonia gas from the synthetic ammonia section, pressure 0.10-0.15 MPa, is sent directly to the melamine section. After preheating to 350-400 °C with steam and molten salt, ammonia is used as gas fluid layer carrier. A catalyst is also used in this method [13,14].

Materials and Methods

These methods complicate the technology because they are carried out at high pressures and high temperatures or in the presence of catalysts. In addition, secondary products released after the reaction, toxic gases and dirty water cause environmental pollution.

The method we recommend involves the use of electrolysis in the synthesis of melamine. The structure of the device is shown in Fig. 2.

Graphite, a material with good electrical conductivity and easy processing, was used as the cathode and anode electrodes. Urea and ammonium chloride are poured into the electrolyzer and the process of obtaining melamine at different current densities is studied.

Results and discussion

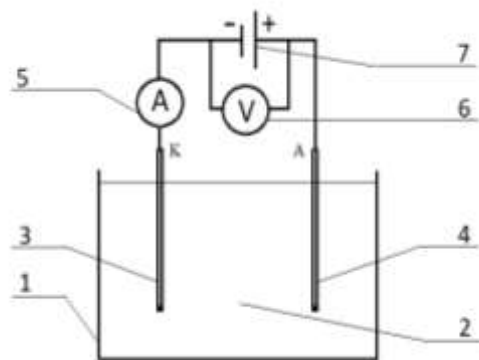
In the experiment, the composition and structure of the synthesized substance was studied using IR-spectroscopy and NMR-spectroscopy method.

IR-spectroscopy analysis

IR-spectroscopic analyzes were carried out on a Shimadzu IR Tracer-100 instrument manufactured in Japan. The presence of various functional groups in the samples was studied in the frequency range of 400-4000 cm^{-1} [15,16]. IR spectroscopic analysis is widely used to determine the presence of appropriate functional groups in substances. The greater the amount of these functional groups, the higher their intensity.

NMR spectra were determined on a JNM-ECZ600R spectrometer made in Japan at 600 MHz in $\text{DMSO-d}_6 + \text{CCl}_4$ solutions for ^1H . TMC (0 ppm) was used as standard in ^1H NMR spectra. For ^{13}C , it was determined at a frequency of 150 MHz. In NMR spectra, the chemical shift of the solvent was taken into account as a standard. ^1H NMR and ^{13}C NMR spectral analysis are two important analytical techniques used to study the structure of organic compounds. The melamine peak was seen at 5.47; 3.4; and 2.5 ppm because of rapid proton exchange with the solvent proton on the NH_2 groups. The high signals at 149.8 and 159.9 ppm in the ^{13}C NMR spectrum may belong to the triazine moiety of melamine. The results of this analysis confirm the formation of melamine.

The IR-spectrum of the substance obtained by the electrolysis method is presented in Fig. 3. It can be seen that the valence vibrations of the primary amine groups of melamine are located in the region of 3468 cm^{-1} and 3417 cm^{-1} . The valence vibrations of the NH bonds located in this interval are intense and have a narrow band in the independent state. Vibrations of the 1,3,5 triazine ring are observed in the region of 1622; 1525; 1463 and 1431 cm^{-1} . The results of this analysis confirm the formation of melamine.



1 is electrolyzer, 2 is reactive substances, 3 is cathode, 4 is anode, 5 is ammeter, 6 is voltmeter, 7 is power source.

Figure 2 –Schematic structure of the device

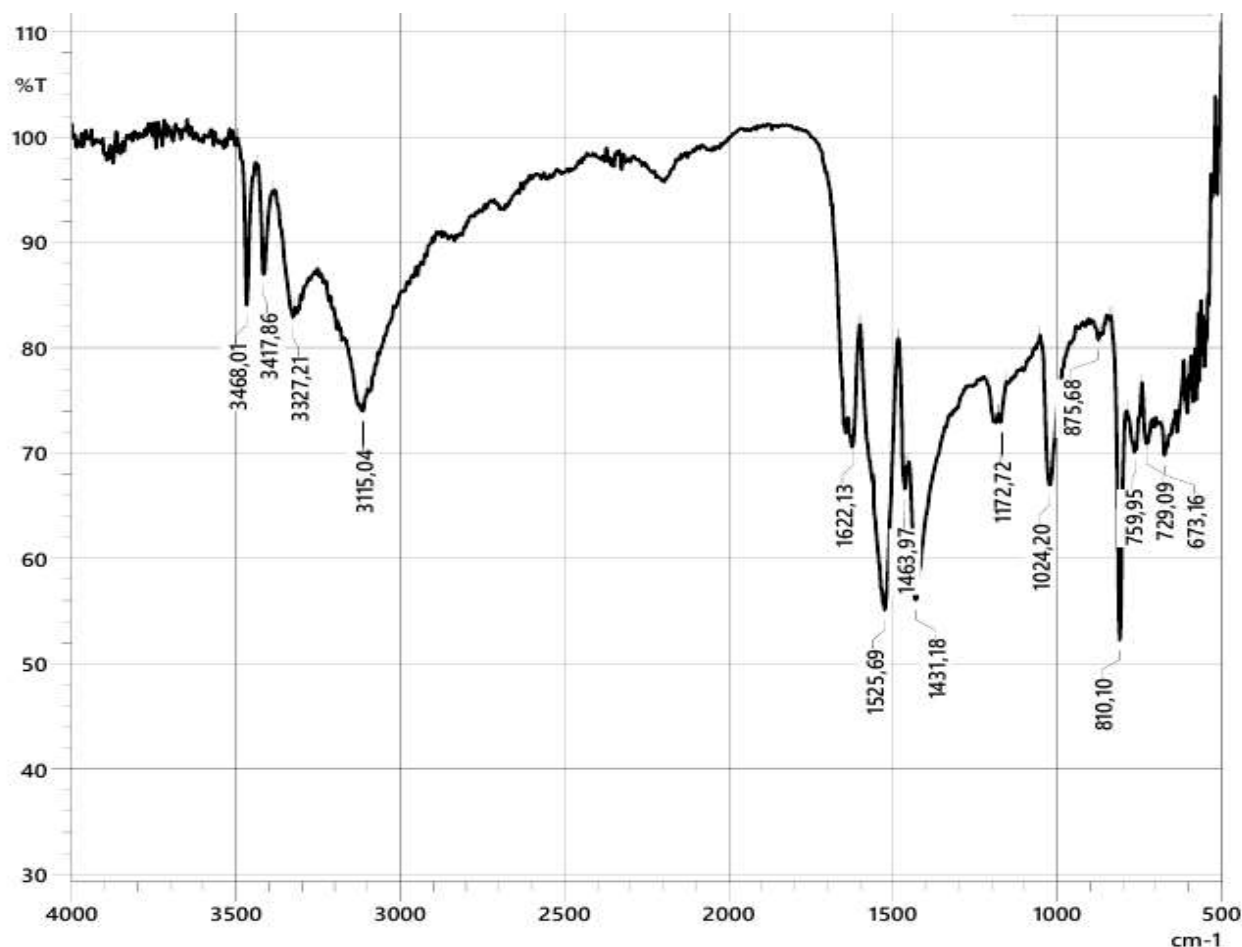


Figure 3 – IR spectrum of melamine synthesized by electrolysis method

NMR-spectroscopy method

This method is a radiospectroscopic method that studies the interaction of matter with radiofrequency radiation. This method is based on the phenomenon of magnetic resonance, the phenomenon of resonant transitions between the magnetic energy levels of atomic nuclei in an external magnet [16,17]. The PMR method is used to study the molecular structure, dynamics of intermolecular interactions, chemical reaction mechanism and quantitative analysis of substances. The substance to be studied by the NMR method must have diamagnetic properties. The nucleus of the atoms of matter must have magnetic properties, that is, the nuclear spin must be different from zero.

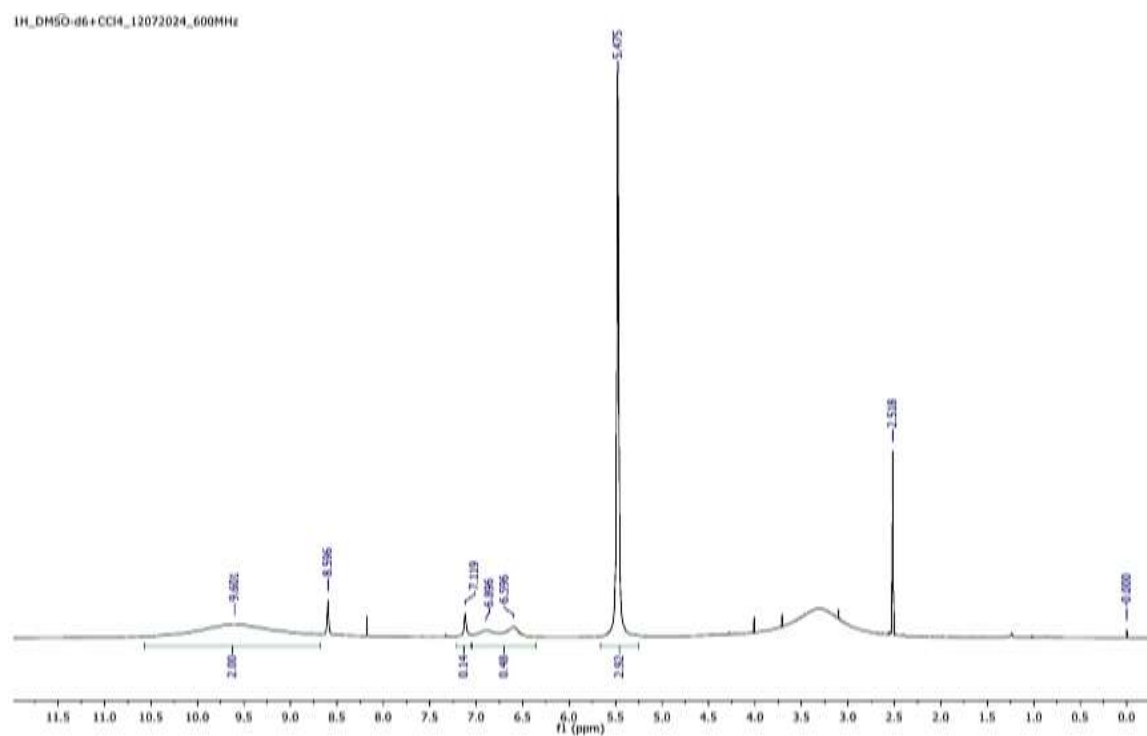
NMR spectra were determined on a JNM-ECZ600R spectrometer made in Japan at 600 MHz in DMSO-d₆+CCl₄ solutions for ¹H. TMC (0 ppm) was used as standard in ¹H NMR spectra. For ¹³C, it was determined at a frequency of 150 MHz. In NMR spectra, the chemical shift of the solvent was taken

into account as a standard. ¹H NMR and ¹³C NMR spectral analysis are two important analytical techniques used to study the structure of organic compounds. The melamine peak was seen at 5.47; 3.4; and 2.5 ppm because of rapid proton exchange with the solvent proton on the NH₂ groups (Fig.4). The high signals at 149.8 and 159.9 ppm in the ¹³C NMR spectrum may belong to the triazine moiety of melamine. The results of this analysis confirm the formation of melamine.

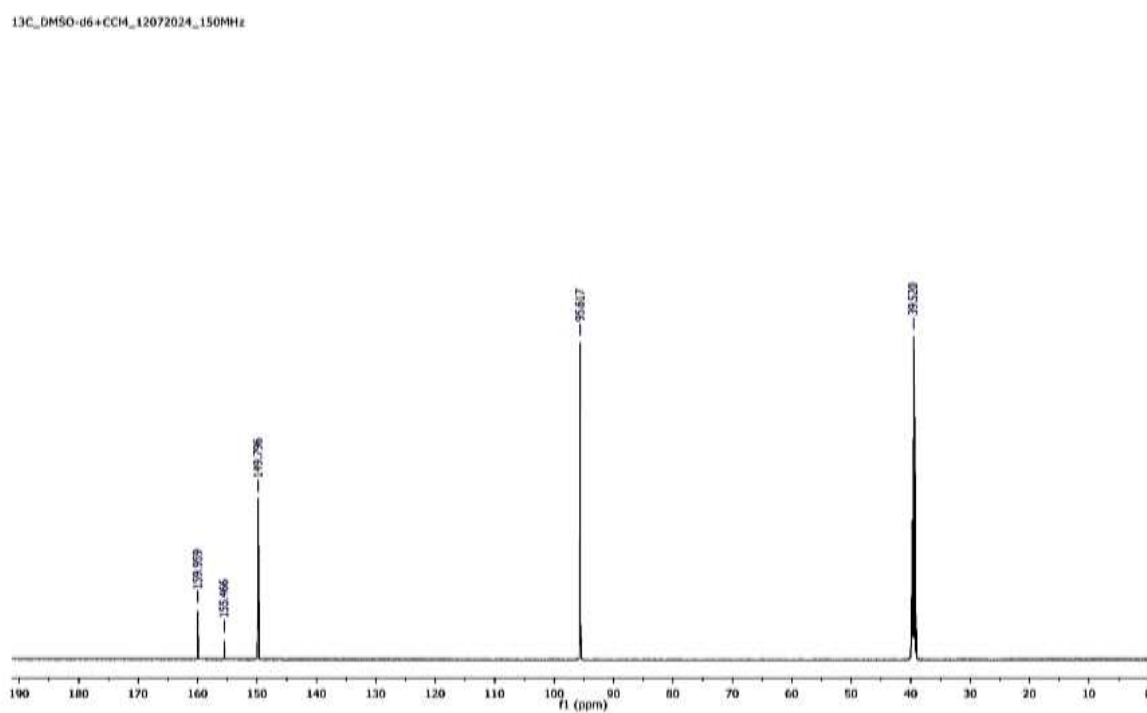
Conclusion

Synthesis of melamine using the electrolysis method has several advantages over traditional methods used in industry. We don't need high pressure or high temperature. We do not use complex multi-step technology.

Therefore, in the future, it is necessary to introduce the use of the electrolysis method in the synthesis of melamine and other organic substances on an industrial scale.



a)



b)

Figure 4 – NMR spectrum of synthesized melamine

References

- 1 Pravdin A.I. Melamine synthesis. Basic methods of hardware design of production. //Uspekhi v Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2018. – Vol.XXII. – No (82). – P.28-31. (In Russ.)
- 2 Moiseeva I.D. Development of a catalyst and technology for the synthesis of melamine. Dissertation. – Novomoskovsk, 2002. – P.5-16. (In Russ.)

- 3 Kurilev A.Yu., Moiseeva I.D., Pomeransev V.M. Catalytic production of melamine from urea // Kazan. KSTU. – 2001. – P.138-139. (In Russ.)
- 4 Muminov B.S., Karimov M.U., Djalilov A.T. The main methods of obtaining melamine from urea. Chemistry and Technology of Rare and Rare Metals: Current Status, Problems, and Prospects. // Proceedings of the republican scientific practical conference. April 28-29, 2023. Termiz. – 2023. – Vol.2. – P.118-119.
- 5 Damaskin B.B., Petriy O.A., Tsirlina G.A. Electrochemistry: textbook. – 2nd ed., rev. and processed – St. Petersburg: Lan, 2015. – 672 p. (In Russ.)
- 6 Omonov M., Djiyanbaev S., Umbarov I. Technology of production of environmentally safe road pavements with new content by recycling tires //E3S Web of Conferences. – EDP Sciences, 2023. – Vol.371. – Art.03018. DOI: [10.1051/e3sconf/202337103018](https://doi.org/10.1051/e3sconf/202337103018)
- 7 Muratov B.A., Turaev Kh.Kh., Umbarov I.A., Kasimov Sh.A., Nomozov A.K. Studying of Complexes of Zn (II) and Co (II) with Acyclovir (2-amino-9-((2-hydroxyethoxy) methyl)-1, 9-dihydro-6H-purine-6-OH) //International Journal of Engineering Trends and Technology. – 2024. – Vol.72. – №. 1. – P.202-208. DOI: [10.14445/22315381/IJETT-V72I1P120](https://doi.org/10.14445/22315381/IJETT-V72I1P120)
- 8 Umbarov I. et al. Gravity grain cleaning machine and its importance in grain logistics and sustainable agriculture //BIO Web of Conferences. – EDP Sciences, 2024. – Vol.105. – Art.06016. DOI: [10.1051/bioconf/202410506016](https://doi.org/10.1051/bioconf/202410506016)
- 9 Puchkova L.N., Shayakhmetova A.I. Development of technology for the production of polyamines using a chlorine-free method // Bulatov readings. Collection. articles – 2018. – 259 p. (In Russ.)
- 10 Muminov B.S., Karimov M.U., Dzhililov A.T. Using the electrolysis method in the synthesis of organic substances (using the example of the synthesis of ethylenediamine // Universum: Technical Sciences. – 2024. – Vol.8 (125). DOI: [10.32743/UniTech.2024.125.8.18037](https://doi.org/10.32743/UniTech.2024.125.8.18037) (In Russ.)
- 11 Ismoilov F.S., Karimov M.U., Djalilov A.T., Ismailova X.Dj. The influence of a superplasticizer obtained from condensation products of melamine-sulfonate-formaldehyde on the physical and mechanical properties of cement compositions // Universum: Technical sciences. – 2023. – Vol. 4 (109). DOI: [10.32743/UniTech.2023.109.4.15204](https://doi.org/10.32743/UniTech.2023.109.4.15204) (In Russ.)
- 12 Muminov B.S., Karimov M.U., Djalilov A.T. Advantage of melamine synthesis by electrolysis method // International conference on interdisciplinary science. – 2024. – Vol.01, Issue 06. – P.244-245.
- 13 Suyunov J.R., Turaev Kh.Kh., Alimnazarov B.Kh., Ibragimov A.B., Mengnorov I.J., Rasulov A.A., Ashurov J.M. Synthesis and crystal structure of tetra-aqua-(ethylenediamine-N,N')-nickel(II) naphthalene-1,5-disulfonate dihydrat // IUCrData. – 2023. – Vol.8. – Art.231032 DOI: [10.1107/S2414314623010325](https://doi.org/10.1107/S2414314623010325).
- 14 Muminov B.S., Karimov M.U., Djalilov A.T. Use of electrolysis in the synthesis of ethylenediamine // Journal of Universal Science Research. – 2023. – Vol.1 (9). – P.317-323. (In Uzb.)
- 15 Turayev Kh.Kh., Eshankulov Kh.N., Umbarov I.A., Kasimov Sh.A., Nomozov A.K., Nabiev D.A. Studying of Properties of Bitumen Modified based on Secondary Polymer Wastes Containing Zinc // International Journal of Engineering Trends and Technology. – 2023. – Vol.71(9). – P.248-255. DOI: [10.14445/22315381/IJETT-V71I9P222](https://doi.org/10.14445/22315381/IJETT-V71I9P222)
- 16 Kanagathara N., Sivakumar N., Gayathri K., Krishnan P., Renganathan N.G., Gunasekaran S., Anbalagan G. Growth and Characterization of 2, 4, 6 Triamino-1, 3, 5 Triazine – An Organic Single Crystal. // Proc Indian Natn Sci Acad. – 2013. – Vol.79 (3). – P.467-472.
- 17 Umbarov I., Turayev Kh., Uralov N., Abduraxmonov S., Musayev C., Tursunov Kh., Eshonqulov Kh., Kadirova N. Investigating the processes and rate of iodide ion and compound oxidation in subterranean hydrothermal waters // BIO Web of Conferences. – 2024. – Vol.105. – Art.05019. DOI: [10.1051/bioconf/202410505019](https://doi.org/10.1051/bioconf/202410505019)

References

- 1 A.I. Pravdin, Uspekhi v Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii 22, 28-31 (2018). (In Russ.)
- 2 I.D. Moiseeva, Development of a catalyst and technology for the synthesis of melamine, Dissertation, (Novomoskovsk, 2002), pp. 5-16. (In Russ.)
- 3 A. Yu. Kurilev, I.D. Moiseeva, and V.M. Pomeransev, Kazan. KSTU, 138-139 (2001) (In Russ.)
- 4 B.S. Muminov, M.U. Karimov, and A.T. Djalilov, Proceedings of the Republican Scientific Practical Conference, Termiz, 2, 118-119 (2023).
- 5 B.B. Damaskin, O.A. Petriy, and G.A. Tsirlina, Electrochemistry: Textbook (St. Petersburg: Lan, 2015), 2nd ed., 672 p. (In Russ.)
- 6 M. Omonov, S. Djiyanbaev, and I. Umbarov, E3S Web of Conferences 371, 03018 (2023). DOI: [10.1051/e3sconf/202337103018](https://doi.org/10.1051/e3sconf/202337103018).
- 7 B.A. Muratov, Kh.Kh. Turaev, I.A. Umbarov, Sh.A. Kasimov, and A.K. Nomozov, International Journal of Engineering Trends and Technology 72, 202-208 (2024). DOI: [10.14445/22315381/IJETT-V72I1P120](https://doi.org/10.14445/22315381/IJETT-V72I1P120).
- 8 I. Umbarov et al., BIO Web of Conferences 105, Art. 06016 (2024). DOI: [10.1051/bioconf/202410506016](https://doi.org/10.1051/bioconf/202410506016).
- 9 L.N. Puchkova and A.I. Shayakhmetova, Bulatov readings. Collection. articles, 259 p. (2018). (In Russ.)
- 10 B.S. Muminov, M.U. Karimov, and A.T. Dzhililov, Universum: Technical Sciences 8 (125), (2024). DOI: [10.32743/UniTech.2024.125.8.18037](https://doi.org/10.32743/UniTech.2024.125.8.18037). (In Russ.)

- 11 F.S. Ismoilov, M.U. Karimov, A.T. Djalilov, and X.Dj. Ismailova, *Universum: Technical Sciences* 4 (109), (2023). DOI: 10.32743/UniTech.2023.109.4.15204. (In Russ.)
- 12 B.S. Muminov, M.U. Karimov, and A.T. Djalilov, *Advantage of melamine synthesis by electrolysis metho*, *International Conference on Interdisciplinary Science* 1 (6), 244-245 (2024).
- 13 J.R. Suyunov, Kh.Kh. Turaev, B.Kh. Alimnazarov, A.B. Ibragimov, I.J. Mengnorov, A.A. Rasulov, and J.M. Ashurov, *IUCrData* 8, 231032 (2023). DOI: 10.1107/S2414314623010325.
- 14 B.S. Muminov, M.U. Karimov, and A.T. Djalilov, *Journal of Universal Science Research* 1 (9), 317-323 (2023).
- 15 Kh.Kh. Turayev, Kh.N. Eshankulov, I.A. Umbarov, Sh.A. Kasimov, A.K. Nomozov, and D.A. Nabiev, *International Journal of Engineering Trends and Technology* 71 (9), 248-255 (2023). DOI: 10.14445/22315381/IJETT-V71I9P222.
- 16 N. Kanagathara, N. Sivakumar, K. Gayathri, P. Krishnan, N. G. Renganathan, S. Gunasekaran, and G. Anbalagan, *Proc Indian Natn Sci Acad* 79 (3), 467-472 (2013).
- 17 I. Umbarov, Kh. Turayev, N. Uralov, S. Abduraxmonov, C. Musayev, Kh. Tursunov, Kh. Eshonqulov, and N. Kadirova, *BIO Web of Conferences* 105, 05019 (2024). DOI: 10.1051/bioconf/202410505019.

Article history:

Received 23 October 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 13.10.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Baxriddin Muminov** (corresponding author) – Tashkent Chemical Technology Scientific Research Institute, Tashkent, Uzbekistan; e-mail: baxriddin-muminov@mail.ru

2. **Masud Karimov** – Tashkent Chemical Technology Scientific Research Institute, Tashkent, Uzbekistan; e-mail: baxriddin-muminov@mail.ru

3. **Abdulakhat Djalilov** – Doctor of Chemical Sciences, Prof., Academician of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Director of Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan; e-mail: gup_tniixt@mail.ru

4. **Bozar Khaitov** – Teacher of the Faculty of Chemistry of Termez State University. Termez, Uzbekistan; e-mail: haitovbozor@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Бакридин Муминов** (автор-корреспондент) – Ташкент химия-технологиялық ғылыми-зерттеу институты, Ташкент қ., Өзбекстан; e-mail: byoqubjon77@gmail.com

2. **Масуд Каримов** – Ташкент химия-технологиялық ғылыми-зерттеу институты, Ташкент қ., Өзбекстан; e-mail: hhturayev@rambler.ru

3. **Абдулахат Джалилов** – химия ғылымдарының докторы, профессор, Өзбекстан Республикасы Ғылым академиясының академигі, Ташкент химия-технология ғылыми-зерттеу институтының директоры, Ташкент қ., Өзбекстан; e-mail: gup_tniixt@mail.ru

4. **Бозар Хайтов** – Термез мемлекеттік университеті химия факультетінің оқытушысы, Термез, Өзбекстан; e-mail: haitovbozor@gmail.com

4-бөлім

**ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ
ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ**

Section 4

**THERMOPHYSICS
AND THEORETICAL HEAT ENGINEERING**

Раздел 4

**ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
ТЕПЛОТЕХНИКА**

A.H. Cacan*  , B.A. Mamedov 

Tokat Gaziosmanpasa University, Tokat, Turkey

*e-mail: aslihan.cacan@gop.edu.tr

AN ACCURATE AND EFFICIENT THEORETICAL ASSESSMENT OF THE THERMODYNAMIC PROPERTIES OF NON-POLAR GASES

Investigation of the intermolecular interactions and thermodynamic properties of real nonpolar gases is of high importance and can be evaluated through virial equation of state. A new, practical and general analytical method is obtained for the evaluation of the second virial coefficient (SVC) with Morse potential, which is significant for the investigation of all thermodynamic properties of gases. The first derivative of SVC with Morse potential analytical formulae is also established since it appears in the thermodynamic expressions. One of the significances of obtained formulae is their validity of all ranges of parameters providing accurate and precise results quickly. The accuracy of the applied method is tested by the calculations of SVC of *Ne* gas for a wide temperature range with both experimental and analytical data for comparison and Boyle temperature (T_B) of *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂*, and *O₂* gases with included highly accurate corresponding literature data for the comparison and proved to be consistent. In this study, we also used the acquired analytical formulae to obtain the changes in entropy, enthalpy, internal energy and free energy per pressure for the gases of *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂*, and *O₂*. The results of $(\Delta S)/P$, $\Delta H/P$, $\Delta E/P$ and $\Delta F/P$ are compared with literature data that utilizes most commonly used potential Lennard-Jones (12-6) to acquire thermodynamic properties of gases for SVC calculations. The results proved that including previously ignored higher order term in the $(\Delta S)/P$ formula improved accuracy but still can be disregarded due to small contributions.

Keywords: Morse potential, second virial coefficient, thermodynamic properties.

A.X. Чачан*, Б.А. Мамедов

Токат Газиосманпаша университети, Токат қ., Түркия

*e-mail: aslihan.cacan@gop.edu.tr

Полярлы емес газдардың термодинамикалық қасиеттерін дәл және тиімді теориялық бағалау

Нақты полярлы емес газдардың молекулааралық әрекеттесулері мен термодинамикалық қасиеттерін зерттеудің маңызы зор және оны күйдің вириалдық теңдеуімен бағалауға болады. Морзе потенциалы бар екінші вирустық коэффициентті (ВКК) бағалаудың жаңа, практикалық және жалпы аналитикалық әдісі алынды, бұл газдардың барлық термодинамикалық қасиеттерін зерттеу үшін маңызды. Морзе потенциалының аналитикалық формулалары бар SVC бірінші туындысы да анықталған, өйткені ол термодинамикалық өрнектерде кездеседі. Алынған формулалардың мәндерінің бірі олардың параметрлердің барлық диапозондарына қолдану мүмкіндігі болып табылады, бұл дәл және нақты нәтижелерді жылдам қамтамасыз етеді. Қолданған әдістің дәлдігін салыстыру үшін тәжірибелік және аналитикалық деректермен кең диапазоны үшін *Ne* газының SVC есептеулерімен тексеріледі және *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂* және *O₂* газдардың Бойль температурасы (T_B) жоғары дәлдіктегі сәйкес әдебиет деректері бармен салыстырылады және өзінің құндылығын дәлелденді. Бұл зерттеуде біз сондай-ақ *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂* және *O₂* газдары үшін қысымға байланысты энтропияның, энтальпияның, ішкі энергияның және бос энергияның өзгерістерін алу үшін алынған аналитикалық формулаларын қолдандық. SVC есептеулері үшін газдардың термодинамикалық қасиеттерін алу үшін $(\Delta S)/P$, $\Delta H/P$, $\Delta E/P$ және $\Delta F/P$ нәтижелері ең жиі қолданылатын Ленард-Джонс (12-6) потенциалын пайдаланатын әдебиет деректерімен салыстырылды. Нәтижелер $(\Delta S)/P$ формуласына бұрын еленбеген жоғары ретті терминді қосу дәлдікті жақсартқанын, бірақ шағын үлестерге байланысты әлі де еленбеуге болатынын көрсетті.

Түйін сөздер: Морзе потенциалы, екінші вириалды коэффициент, термодинамикалық қасиеттер.

А.Х. Чачан*, Б.А. Мамедов
Университет Токат Газиосманпаша, г. Токат, Турция
*e-mail: aslihan.cacan@gop.edu.tr

Точная и эффективная теоретическая оценка термодинамических свойств неполярных газов

Исследование межмолекулярных взаимодействий и термодинамических свойств реальных неполярных газов имеет большое значение и может быть оценено с помощью вириального уравнения состояния. В статье получен новый, практичный и общий аналитический метод для оценки второго вириального коэффициента (SVC) с потенциалом Морзе, который важен для исследования всех термодинамических свойств газов. Первая производная SVC с аналитическими формулами потенциала Морзе также установлена, поскольку она появляется в термодинамических выражениях. Одним из значений полученных формул является их применимость для всех диапазонов параметров, что обеспечивает точные результаты быстро. Точность применяемого метода проверена расчетами SVC газа *Ne* для широкого диапазона температур с экспериментальными и аналитическими данными для сравнения и температурой Бойля (T_B) газов *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, H_2 , N_2 , и O_2 с включенными высокоточными соответствующими литературными данными для сравнения и доказала свою состоятельность. В этом исследовании также использованы полученные аналитические формулы для получения изменений энтропии, энтальпии, внутренней энергии и свободной энергии в зависимости от давления для газов *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, H_2 , N_2 , и O_2 . Результаты $\Delta S/P$, $\Delta H/P$, $\Delta E/P$, и $\Delta F/P$ сравниваются с литературными данными, которые используют наиболее часто используемый потенциал Леннарда-Джонса (12-6) для получения термодинамических свойств газов для расчетов SVC. Результаты доказали, что включение ранее игнорированного члена более высокого порядка в формулу $\Delta S/P$ повысило точность, но все еще может быть проигнорировано из-за малых вкладов.

Ключевые слова: потенциал Морзе; второй вириальный коэффициент, термодинамические свойства.

Introduction

Investigation of the interatomic interactions and thermodynamic properties of interacting atoms and molecules depends heavily on the right choice of interaction potential used for virial equation of states via virial coefficients to achieve accurate thermodynamic properties of substances [1-7]. Both Morse and Rydberg potentials provide reliable data for thermodynamic properties, particularly at high temperatures, as their exponential representation of repulsive forces makes them well-suited for generalized chemical models in plasma studies [8]. Although Morse potential displays slightly more attraction than the Rydberg, its relative ease of analytical calculation and good representation of anharmonic oscillator made it commonly used potential in the literature for various fields of research such as DNA denaturation [9], drug design [10], liquid transport properties via molecular dynamics simulation [11], crystal properties of cubic metals [12].

The most reliable Morse potential parameters used in this study were obtained by Matsumoto through analytical calculations with an

approximation [13]. Mamedov et al. also established an exact analytical formula for SVC with Morse potential without any approximation but taking its first derivative is a difficult task producing more complicated mathematical formulae to establish related thermodynamic properties [14].

The limitations of applying the Morse potential at low temperatures and the quantum corrections resulting from the high density of materials are discussed in the literature. Although analytical quantum corrections using the Morse potential have been calculated [15], they were not applied in this study because low-temperature conditions were not considered. Analytical solutions, being mathematically expressed, provide a transparent insight into how individual variables and their interplay influence the outcome. Backed with strong statistical theory background by including molecular interactions [16], the analytical solution of Virial Equation of State truncated at the second virial coefficient using Morse potential is used for this study to provide accurate and efficient thermodynamic properties of non-polar gases.

In this study, a simple and practical analytical formula of SVC with Morse potential and its first derivative are established, which is very significant to

obtain thermodynamic properties accurately. To our knowledge, this study is the first one in the literature to obtain the simplest analytical solution of SVC with Morse potential and its first derivative and apply them to calculate thermodynamic properties of real systems accurately by comparing the results with the literature using Lennard-Jones (12-6). While Lennard-Jones (12-6) is defined as widely used, two parameter potential for describing van der Waals interactions, Morse potential was designed to represent two body interactions with three parameters making it more convenient for real systems [17].

Methods

Definitions and analytical expressions

The virial equation of state as a power series expansion of number density (ρ) can be expressed as [18]:

$$\frac{P}{RT\rho} = Z = 1 + B(T)\rho + C(T)\rho^2 + \dots, \quad (1)$$

where Z is the compressibility factor, R is the universal gas constant, $B(T)$ and $C(T)$ are the temperature dependent second and third virial coefficients, respectively.

The second virial coefficient is very important to establish thermodynamic properties and can be given as [19]:

$$B(T) = -2\pi N_A \int_0^\infty (e^{-U(r)/k_B T} - 1) r^2 dr \quad (2)$$

where N_A is the Avogadro's number, k_B is the Boltzmann constant and $U(r)$ is the intermolecular interaction potential which is chosen to be Morse potential in this study in the following form as [20]:

$$U(r) = D_e \left(\left(1 - \exp(-\beta(r - r_e)) \right)^2 - 1 \right) \quad (3)$$

where D_e is the potential well depth which is used in calculations as $D_e/k_B = D_1$ in Kelvins, r_e is the equilibrium distance and β is a parameter determining potentials' curvature at r_e . Eq.(2) becomes Eq.(4) by applying integration by parts to Eq.(2), using Eq.(3) as intermolecular potential:

$$B(T) = -\frac{4\pi N_A D_1}{3T} \left(-\frac{e^{\beta r_e}}{\beta^3} \int_0^1 e^{\frac{2D_1 e^{\beta r_e} u}{T}} e^{-\frac{D_1 e^{2\beta r_e} u^2}{T}} (\ln u)^3 du + \frac{e^{2\beta r_e}}{\beta^3} \int_0^1 e^{\frac{2D_1 e^{\beta r_e} u}{T}} e^{-\frac{D_1 e^{2\beta r_e} u^2}{T}} u (\ln u)^3 du \right) \quad (4)$$

where $u = e^{-\beta r}$. Eq.(4) becomes Eq.(6) after solving the integrations in Eq.(4) and utilizing following series expansion given as [21]:

$$e^{\pm x} = \sum_{i=0}^{\infty} (\pm 1)^i \frac{x^i}{i!} \quad (5)$$

$$B(T) = -\frac{4\pi N_A D_1}{3T} \sum_{m=0}^n \frac{1}{m!} \left(\frac{2D_1 e^{\beta r_e}}{T} \right)^m * \left(\frac{3e^{\beta r_e}}{8\beta^3} \Gamma\left(\frac{1+m}{2}\right)^4 {}_4\tilde{F}_4\left(\frac{1+m}{2}; \frac{3+m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) - \frac{6e^{2\beta r_e}}{\beta^3 (2+m)^4} {}_4F_4\left(1+\frac{m}{2}; 2+\frac{m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) \right) \quad (6)$$

The first derivative of the SVC with Morse potential (Eq.(6)) is defined as $B_1(T) = T \frac{dB(T)}{dT}$ and displayed in Eq.(7)

$$B_1(T) = \frac{\pi N_A T}{\beta^3} \left(\sum_{m=0}^n \frac{2^{3+m} D_1^{1+m} (e^{\beta r_e})^{2+m}}{(2+m)^4 m!} \left(-\left(1+\frac{m}{2}\right) T^{-2-m} {}_3F_3\left(1+\frac{m}{2}; 2+\frac{m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) - {}_4F_4\left(1+\frac{m}{2}; 2+\frac{m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) - (1+m) T^{-2-m} {}_4F_4\left(1+\frac{m}{2}; 2+\frac{m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) \right) - \sum_{m=0}^n \frac{2^{-1+m} (D_1 e^{\beta r_e})^{1+m}}{m!} \Gamma\left(\frac{1+m}{2}\right)^4 \left(\frac{(-1-m)}{2} T^{-2-m} \left(\frac{1}{\Gamma(\frac{3+m}{2})} {}_3\tilde{F}_3\left(\frac{1+m}{2}; \frac{3+m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) - {}_4\tilde{F}_4\left(\frac{1+m}{2}; \frac{3+m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) - (1+m) T^{-2-m} {}_4\tilde{F}_4\left(\frac{1+m}{2}; \frac{3+m}{2}; -\frac{D_1 e^{2\beta r_e}}{T}\right) \right) \right) \right) \quad (7)$$

where the generalized hypergeometric and regularized generalized hypergeometric functions appearing in Eq.(7) can be defined as, respectively [22]:

$${}_pF_q(a_1, a_2, \dots, a_p; b_1, b_2, \dots, b_q; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1)_k (a_2)_k \dots (a_p)_k}{(b_1)_k (b_2)_k \dots (b_q)_k} \frac{x^k}{k!}, \quad (8)$$

$${}_p\tilde{F}_q(a_1, a_2, \dots, a_p; b_1, b_2, \dots, b_q; x) = \frac{{}_pF_q(a_1, a_2, \dots, a_p; b_1, b_2, \dots, b_q; x)}{\Gamma(b_1) \dots \Gamma(b_q)} \quad (9)$$

where $\Gamma(z)$ is the gamma function. A simplification of representation demonstrated in Eqs.(10)-(11) is made in Eqs.(6,7) for the generalized hypergeometric and regularized generalized hypergeometric functions since $a_1 = a_2 = \dots = a_p = a$ and $b_1 = b_2 = \dots = b_q = b$.

$${}_pF_q(a; b; x) \equiv {}_pF_q(a_1, a_2, \dots, a_p; b_1, b_2, \dots, b_q; x) \quad (10)$$

$${}_p\tilde{F}_q(a; b; x) \equiv \frac{{}_pF_q(a; b; x)}{(\Gamma(b))^q} \quad (11)$$

Before introducing related thermodynamic functions, a unit conversion of $B(T)$ and $B_1(T)$ is necessary to convert units from cm^3/mol to $\text{cal}/\text{mol} \cdot \text{atm}$ considering that $1 \text{ cal} = 41.293 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm}$. The changes in entropy, enthalpy, internal energy, free energy per pressure in terms of $B(T)$ and $B_1(T)$ can be given as following, respectively [23]:

$$\frac{\Delta S}{P} = \frac{S - S^0}{P} = -\frac{R \ln P}{P} - \frac{B_1(T)}{T} - \frac{(B(T))^2 P}{2RT^2} + \dots \quad (12)$$

$$\frac{\Delta H}{P} = \frac{H - H^0}{P} = B(T) - B_1(T) + \dots \quad (13)$$

$$\frac{\Delta E}{P} = \frac{E - E^0}{P} = -B_1(T) + \dots \quad (14)$$

$$\frac{\Delta F}{P} = \frac{F - F^0}{P} = \frac{RT \ln P}{P} + B(T) + \dots \quad (15)$$

Eqs.(12-15) represents the deviations of real gases from their ideal state (the superscript small zero) per pressure at temperature T . The last term in Eq.(12) is neglected in Ref.[17] but included in this study to improve accuracy. Our last calculations include the Boyle temperature at which the SVC value is zero meaning that intermolecular attractions and repulsions are equal and the gas behaves like an ideal one and this temperature value is specific to each gas [24].

Results and Discussion

Table 1 – Morse potential parameters obtained from Ref.[13]

The accuracy of calculated $B(T)$ results of Eq.(6) are compared with the bot experimental and numerical SVC data using Morse potential for Ne at Ref. [25] and confirmed to provide good consistency for the low temperature range of 50-2400 °K as presented at Fig.1(a). For an accurate comparison, Ne potential parameters are considered as $D_1 = 44.6 \text{ °K}$, $r_e = 3.0446 \text{ Å}$ and $\beta = 1.85 \text{ Å}^{-1}$ for the Eq.(6) data for the Figure 1(a) as used in Ref.[25]. Another successful data verification of Eq. (6) is displayed in Fig.1(b) for the Ne, by comparing calculated Eq.(6) data with another analytical $B(T)$ data using Morse potential from Ref.[13] which is already calculated in Ref.[14] for the high temperature range of 8000-25000 °K that neutral Ne gas atoms still exist at some proportion depending on temperature value [26]. Morse potential parameters of Ne gas and other gases for the Fig.1(b) is displayed in Table 1.

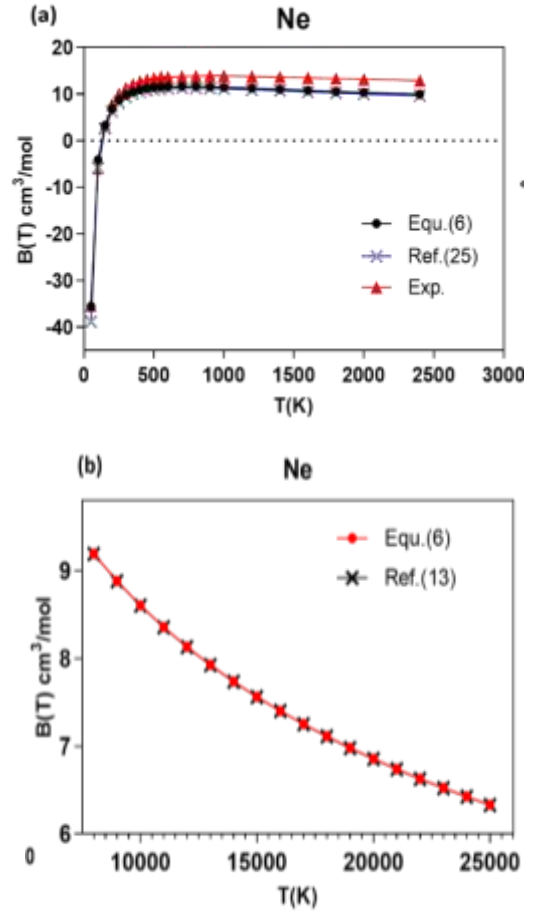


Figure 1 – (a): $B(T)$ values of Ne gas for the low temperature range of 50-2400 °K using Eq.(6), experimental and numerical values from Ref.[25]. (b): $B(T)$ values of Ne gas for the high temperature range of 8000-25000 °K using Eq.(6) and another analytical method using Morse potential at Ref.[13].

	D_1, K	$r_e, \text{\AA}$	$\beta, \text{\AA}^{-1}$
<i>He</i>	12.6	2.92	2.197
<i>Ne</i>	51.3	3.09	2.036
<i>Ar</i>	118.1	4.13	1.253
<i>Kr</i>	149.0	4.49	1.105
<i>Xe</i>	226.9	4.73	1.099
<i>H₂</i>	49.4	3.29	1.923
<i>N₂</i>	93.4	4.43	1.166
<i>O₂</i>	152.4	3.75	1.542

The calculated thermodynamic property values of *He, Ne, Ar, Kr, H₂, N₂, O₂* and *Xe* displayed in Figs. (2-5) are compared with another analytical study using Lennard-Jones (12-6) potential [27] which neglected the higher order term in Eq.(12) for $\Delta S/P$. In general, the calculated values using Morse potential demonstrated good agreement with available literature data using Lennard-Jones (12-6) potential and including the higher order term in Eq.(12) in to the calculations lowered the $\Delta S/P$ values and provided slightly more consistent data with Ref.[27]. It is another fact that, the presence of the higher order term $\left(-\left(B(T)\right)^2 P / 2RT^2\right)$ in calculations slightly improved data reliability but can be neglected since its minor contributions to $\Delta S/P$ for both lower and higher temperature ranges and each graph in Fig.2 includes data without the higher order term in Eq. (12) for the comparison. For instance, the value of $\Delta S/P$ for *H₂* at 500 K is $\Delta S/P = -0.0000974842$ without the higher order term in Eq.(12), however, when the term is included the value is $\Delta S/P = -0.000104203$.

The same calculation for *H₂* is repeated at 5000 K without including the higher order term is $\Delta S/P = 0.0000155641$, however, when the term is included $\Delta S/P = 0.0000155255$, both not showing a significant change.

The most noticeable graphs in all figures belongs to Helium since the data of $\Delta S/P$ (Fig. 2), $\Delta H/P$ (Fig.3), and $\Delta E/P$ (Fig. 4) don't display any maximum. A quick analytical evaluation of this work indicated that thermodynamic properties of $\Delta S/P$ and $\Delta H/P$ have a maximum around 400 °K and $\Delta F/P$ has a maximum around 200 °K for the He which is less than our temperature investigation region due to lack of comparable literature data.

Another notable data differences at Fig. 5 become apparent for the $\Delta F/P$ data of *He, Ne, H₂, N₂* and *O₂* at high temperature region. At the high temperature region, the $\Delta F/P$ values diverges more from each other for the Morse and Lennard-Jones (12-6) potentials. The reason for this fact arises from Eq.(15) which displays direct dependency of SVC value (without the unit conversion factor) at the given temperature for a constant pressure value of one atmosphere which is used in this study.

Keeping in mind that the lower SVC data is interpreted as more intermolecular attraction between atom and molecules. Thus, the closer $\Delta F/P$ using Morse potential data to negative values as seen in Fig.5 at high temperature region means more dominant intermolecular attraction comparing to data using Lennard-Jones (12-6) potential, which is appropriate for atoms and molecules having tendency for the chemical bonding [1].

Therefore, the obtained thermodynamic properties of gases of *H₂, N₂* and *O₂* results of this work at high temperature region are more suitable rather than results of noble gases especially for *He* and *Ne*. Similarly Fig.5 also displays more positive values for *H₂, Ne, Kr* and *Xe* gases at lower temperature region since the closer $\Delta F/P$ using Morse potential data to positive values means that intermolecular repulsion is more dominant. This is due to the Morse potential's exponential representation structure of both for the description of intermolecular repulsion and attraction.

Fig. 6 represents the temperature dependence of the changes in entropy, enthalpy, internal energy and free energy per pressure for the Ar gas. The data are calculated by using the Eqs. (12-15) obtained in this work and all of the calculations are completed by using Mathematica 10 programming software.

Table 2 includes the calculated T_B values of different atoms-molecules and compares them with corresponding data of T_B values using artificial neural network (ANN) with hundreds of available experimental SVC data [24, 28] and another data arising from the fitting the equations from National Institute of Standards and Technology (NIST) [29] with low average root-mean-square errors of SVC being 2.94, 3.36 and 3.12 respectively (calculated data only for the relevant gases in table 2 obtained from Ref (24)).

Another analytical results of T_B using SVC with Lennard-Jones (12-6) potential is also included in Table 2 [30]. Our results indicated good consistency with highly accurate literature data.

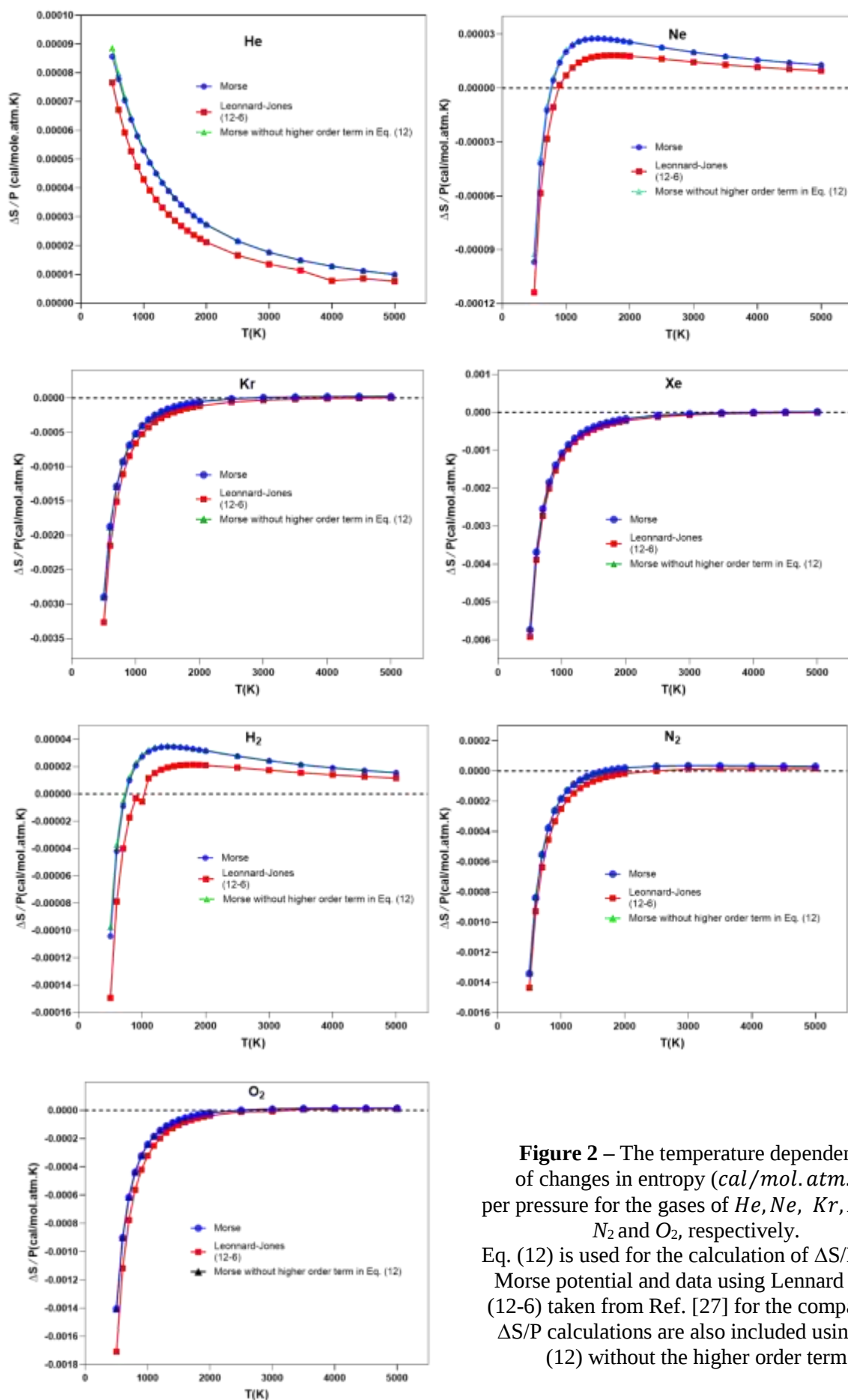


Figure 2 – The temperature dependence of changes in entropy (*cal/mol.atm.K*) per pressure for the gases of *He*, *Ne*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂* and *O₂*, respectively. Eq. (12) is used for the calculation of $\Delta S/P$ using Morse potential and data using Lennard Jones (12-6) taken from Ref. [27] for the comparison. $\Delta S/P$ calculations are also included using Eq. (12) without the higher order term

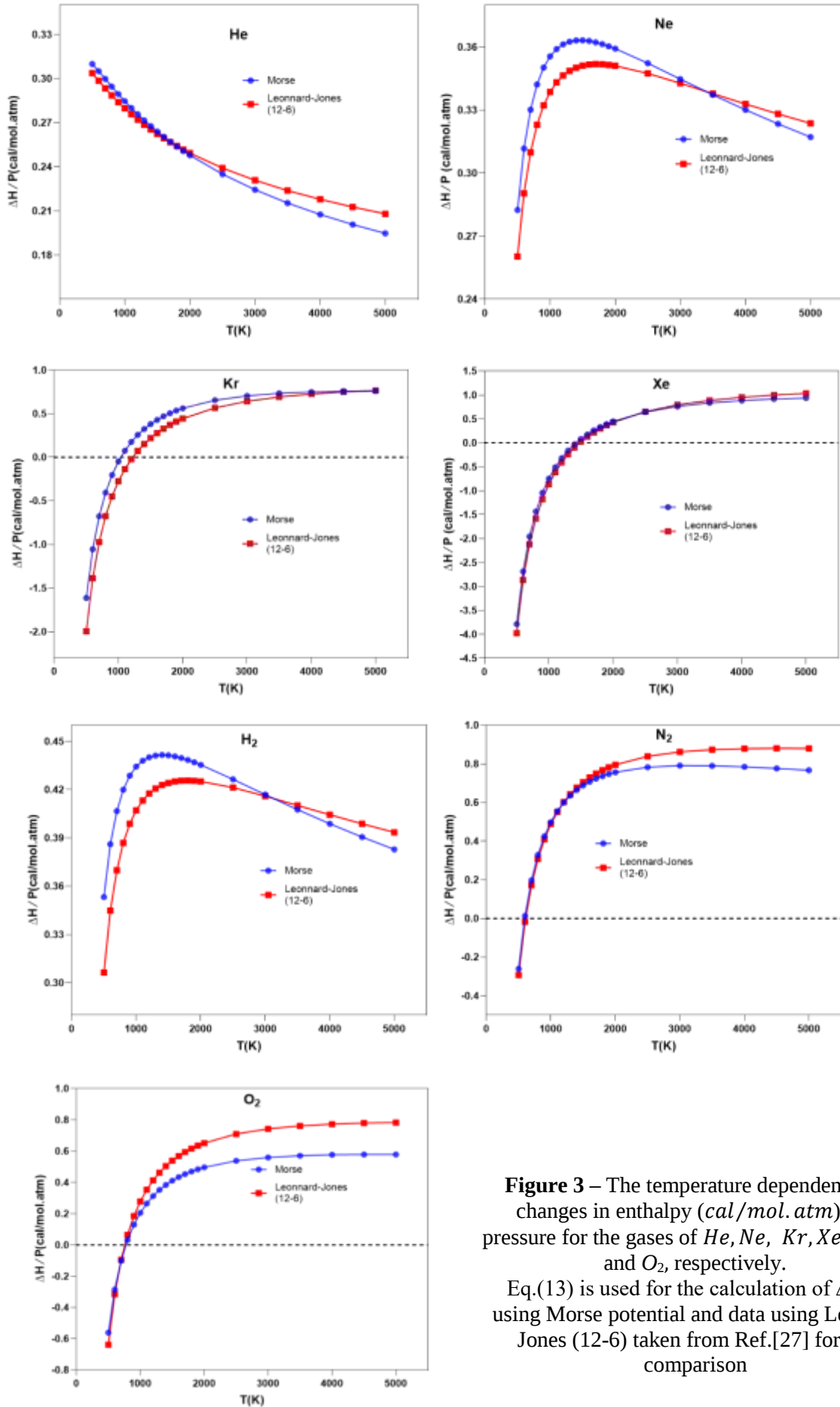


Figure 3 – The temperature dependence of changes in enthalpy (cal/mol.atm) per pressure for the gases of He, Ne, Kr, Xe, H_2, N_2 and O_2 , respectively.

Eq.(13) is used for the calculation of $\Delta H/P$ using Morse potential and data using Lennard Jones (12-6) taken from Ref.[27] for the comparison

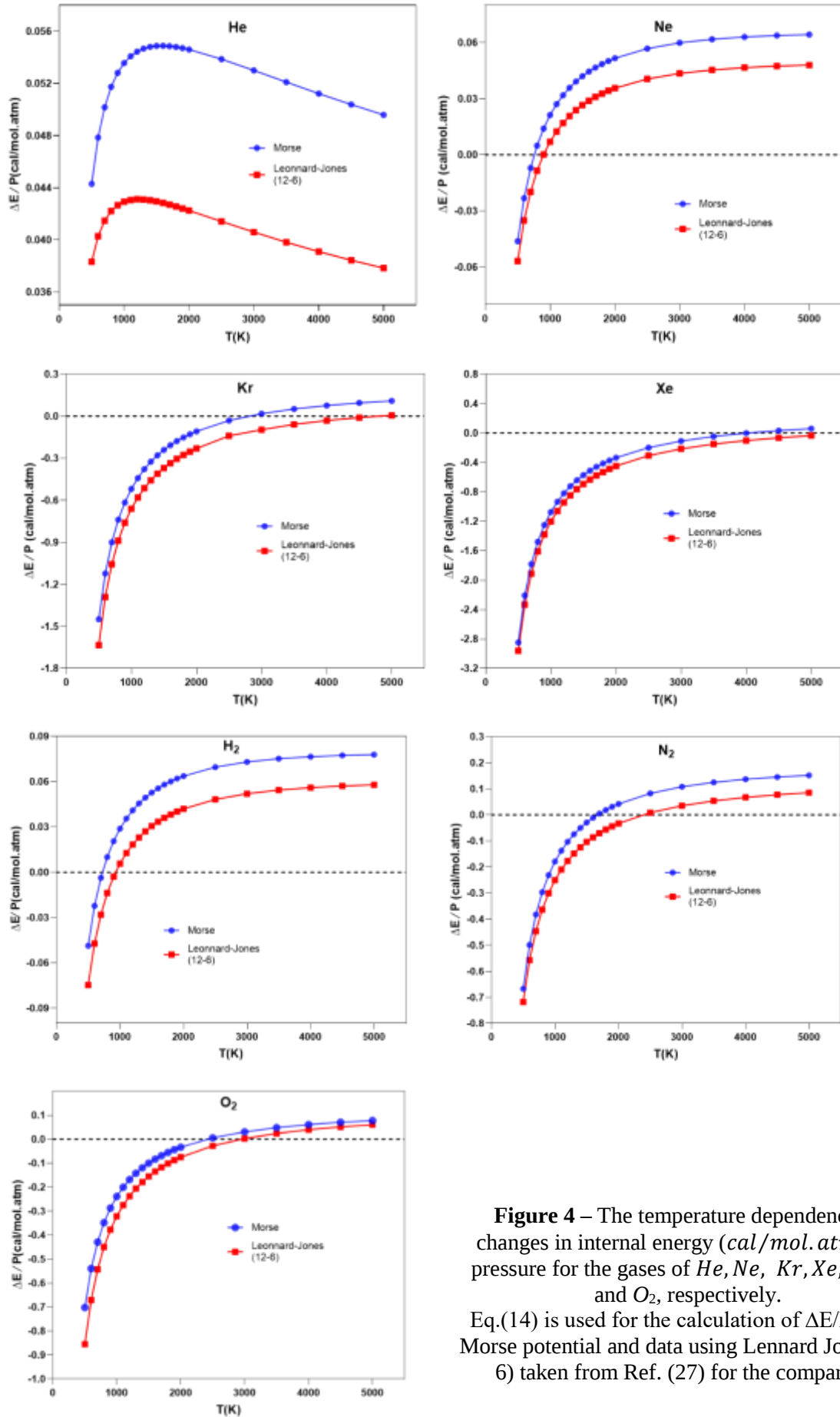


Figure 4 – The temperature dependence of changes in internal energy ($cal/mol.atm$) per pressure for the gases of *He*, *Ne*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂* and *O₂*, respectively. Eq.(14) is used for the calculation of $\Delta E/P$ using Morse potential and data using Lennard Jones (12-6) taken from Ref. (27) for the comparison

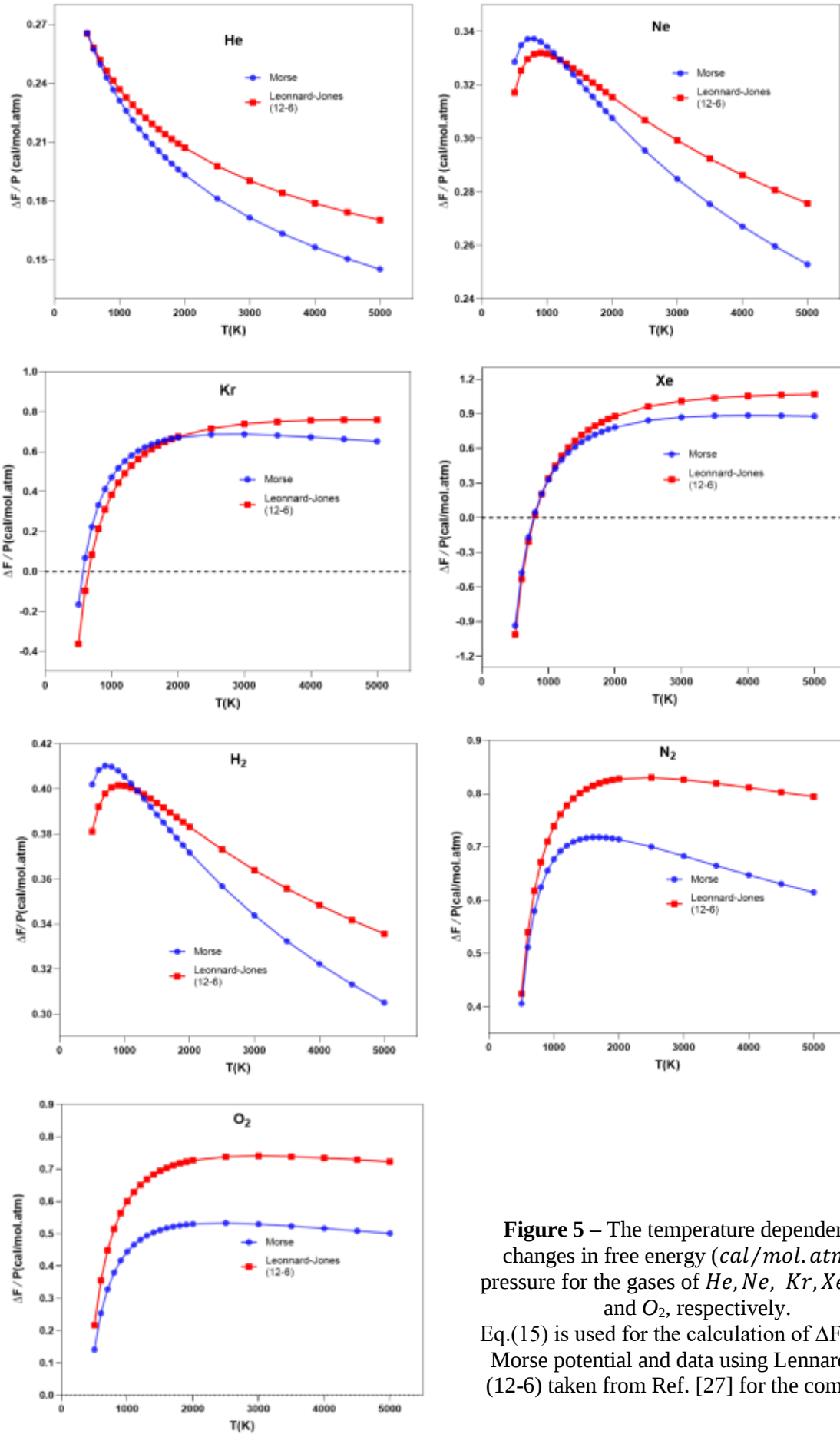


Figure 5 – The temperature dependence of changes in free energy (*cal/mol.atm*) per pressure for the gases of *He, Ne, Kr, Xe, H₂, N₂* and *O₂*, respectively.

Eq.(15) is used for the calculation of $\Delta F/P$ using Morse potential and data using Lennard Jones (12-6) taken from Ref. [27] for the comparison

Table 2- The Calculation of Boyle Temperature of some non-polar atoms and molecules using SVC with Morse potential and corresponding literature data from Refs.[24, 28] being the result of ANN, T_B from NIST (Ref.(29)) and Ref.(30) is the analytical one using Lennard-Jones (12-6) potential for the comparison

	T_B this work	Ref. [24]	Ref. [28]	Ref. [29]	T_B from L-J (12-6) Ref [30]
<i>He</i>	28.704	22.86	18.89	23.10	34.93
<i>Ne</i>	120.867	121.97	119.67	119.20	121.678
<i>Ar</i>	407.749	409.06	410.69	411.73	410.151
<i>Kr</i>	566.076	581.92	559.7	600.04	584.466
<i>Xe</i>	775.663	774.97	705.9	773.79	751.944
<i>H₂</i>	115.262	109.73	116.93	109.9	126.463
<i>N₂</i>	323.783	325.6	345.5	327.01	N/A
<i>O₂</i>	418.875	401.19	413.57	404.47	403.316

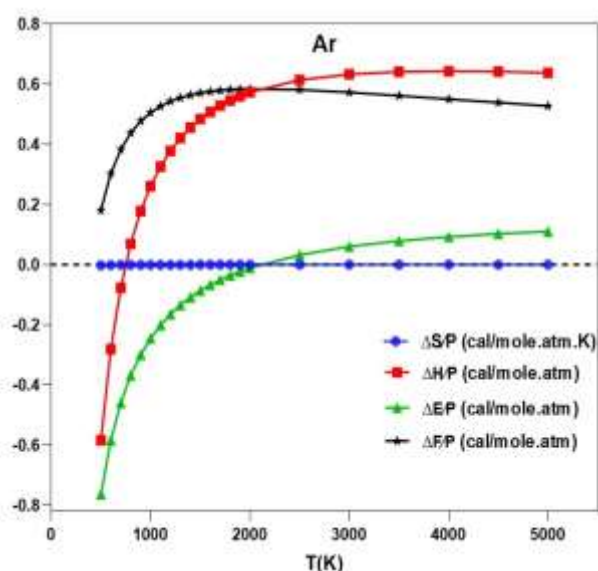


Figure 6 – The temperature dependence of changes in entropy, enthalpy, internal energy and free energy per pressure for the Ar gas. The calculations were made based on the Eqs. (12-15).

Conclusion

Analytical $B(T)$ calculations are proved to be consistent with literature both for high and low temperature ranges. The accuracy is also proved by the calculations of T_B with this analytical method using SVC with Morse potential and the results are compared with the highly accurate T_B calculations using ANN with numerous available experimental data of SVC from literature. The thermodynamic results of $\Delta S/P$, $\Delta H/P$, $\Delta E/P$, and $\Delta F/P$ for the *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, *H₂*, *N₂* and *O₂* gases are also compared with the literature data using Lennard-Jones (12-6) potential for SVC calculations [27] and found to be slightly improved for the entropy values. In this study, this term is included in calculations leading to slightly more accurate and precise data with simple analytical formulae. The calculated results indicated good consistency with both for experimental and analytical literature data and provided reliable thermodynamic properties without any parameter restrictions and experimental data limitations by using Morse potential for the SVC and its first derivative in analytical thermodynamic calculations for the first time in literature. Further investigations will be made to achieve second derivative of SVC to obtain more thermodynamic properties.

References

- 1 Kaplan I.G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. – Jonh Wiley & Sons, 2006. – P.146-150.
- 2 Sadus R. J. Two-body Intermolecular Potentials from Second Virial Coefficient Properties // J.Chem.Phys. – 2019. – Vol.150. – Art. 024503.

- 3 González-Calderón A., Rocha-Ichante, A. Second Virial Coefficient of a Generalized Lennard-Jones Potential. // *J.Chem.Phys.* – 2015. – Vol.142. – Art. 034305.
- 4 Bai J., Zhang P., Zhou, C-W., Zhao H. Theoretical studies of real-fluid oxidation of hydrogen under supercritical conditions by using the virial equation of state // *Combust. Flame.* – 2022. – Vol. 241. – Art.112060
- 5 Kwon T, Song H.W., Woo S.Y., Kim J.-H., Sung,Bull B.J. The accurate estimation of the third virial coefficients for helium using three-body neural network potentials. // *Korean Chem. Soc.* – 2022. – Vol.43(5). – P.612.
- 6 Zeng X.L., Ju X.H., Xu S.Y. Interatomic Potential and Thermodynamic Property of Diatomic Uranium. // *Adv. Mat. Res.* – 2012. – Vol.550-553. – P.2810-2813.
- 7 Mamedov B.A., Somuncu E., Askerov I.M., Evaluation of Speed of Sound and Specific Heat Capacities of Real Gases. // *J. Thermophys. Heat. Tr.* – 2018. – Vol.32. – P.984-998.
- 8 Apfelbaum E.M. Calculation of Thermophysical Properties of Titanium and Zinc Plasmas // *High. Temp.* – 2017. – Vol.55. – P.1-11.
- 9 Kinani R., Kaidi H., Benhamou M. Investigation of DNA Denaturation from Generalized Morse Potential. // *Mater. Devices.* – 2018. – Vol. 3. – P.0207.
- 10 Monajjemi M., Naderi F., Mollaamin F., Khaleghian M. Drug Design Outlook by Calculation of Second Virial Coefficient as a Nano Study. // *J. Mex. Chem. Soc.* – 2012. – Vol.56. – P.207-211.
- 11 Galicia-Pimentel U.F., Osorio-González D., López-Lemus J. On the Morse Potential in Liquid Phase and at Liquid-Vapor Interface. // *Rev. Mex. Fis.* – 2006. – Vol.52. – P.422-428.
- 12 Pirog I.V., Nedoseikina T.I. Study of Effective Pair Potentials in Cubic Metals // *Physica B Condens. Matter.* – 2003. – Vol.334. – P.123-129.
- 13 Matsumoto A. Parameters of the Morse Potential from Second Virial Coefficients of Gases. // *Zeitschrift für Naturforschung A.* – 1987. – Vol.42a. – P.447-450.
- 14 Mamedov B.A., Cacan H. A general analytical method for evaluation of the thermodynamic properties of matters using virial coefficients with Morse potential at high temperature. // *Contrib. Plasm. Phys.* – 2019. – Vol. 59. – Art.e201900021.
- 15 Cacan H., Mamedov B. A. The Comparative Analytical Evaluation of Quantum Corrections to the Second Virial Coefficient with Morse Potential and its Applications to Real Systems. // *J. Chem. Thermodyn.* 2019,138, 147-150.
- 16 Hall K.R., and Iglesias-Silva G.A. Generalized Derivations for Mixtures Using The Virial Equation: Application to Fugacity. // *Chem. Eng. Commun.* – 1995. – Vol.137(1). – P.211-214. DOI: [10.1080/00986449508936377](https://doi.org/10.1080/00986449508936377)
- 17 Lim T. The Relationship between Lennard-Jones (12-6) and Morse Potential Functions. // *Z. Naturforsch A.* – 2003. – Vol.58(11). – P.615-617. DOI: 10.1515/zna-2003-1104
- 18 Harvey A.H., Lemmon E.W. Correlation for the Second Virial Coefficient of Water. // *Journal of Physical and Chemical Reference Data.* – 2004. – Vol.33(1). – P.369-376.
- 19 Sadus R.J. Second Virial Coefficient Properties of the n-m Lennard-Jones/Mie Potential. // *J.Chem.Phys.* – 2018. – Vol.149. – Art. 074504.
- 20 Nickabadi S., Ansari R., Rouhi S. Evaluation of the Morse Potential Function Coefficients for Germanene by the First Principles Approach. // *J Mol Graph Model.* – 2020. – Vol.98. – Art. 107589.
- 21 Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M. Table of Integrals, Series and Products. – Academic Press, London Academic Press, 2014. – P.25-62.
- 22 Abramowitz M., Stegun I. Handbook of Mathematical Functions. – Dover Publications, Inc., 1974. – P.555-567.
- 23 O'Connell J.P., Haile J.M. Thermodynamics: Fundamentals for Applications. – Cambridge University Press, 2005. – P.155-180.
- 24 Coccia G., Di Nicola G. Determination of the Boyle temperature of pure gases using artificial neural network. // *Fluid Phase Equilibria.* – 2019. – Vol.493. – P.36-42.
- 25 Al-Maaitah A.F. A Microscopic Study of Ne-Ne Interactions with Phenomenological Potentials Using Second Virial Coefficients. // *Sci.Int. (Lahore).* – 2020. – Vol.32(1). – P.1-6.
- 26 Ebeling W., Fortov V.E., Filinov V. Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas. – Springer, Cham 2017.
- 27 Mamedov B.A., Somuncu E. Accurate Evaluation of the Internal Energy, Free Energy, Entropy and Enthalpy of Non-Polar Molecules by using Virial Coefficients. // *Chin. J. Phys.* – 2017. – Vol.55. – P.1473-1488.
- 28 Di Nicola G., Coccia G., Pierantozzi M., Tomassetti S., Grifoni R.C. Artificial neural network for the second virial coefficient of organic and inorganic compounds: An ANN for B of organic and inorganic compounds // *Chemical Engineering Communications.* – 2018. – Vol.205(8). – P.1077-1095.
- 29 Dymond J., Marsh K., Wilhoit R., Wong K. Virial Coefficients of Pure Gases, Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. –Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, 2005.
- 30 Somuncu E. Accurate assessment of the Boyle temperature of nonpolar molecular gases using second virial coefficient with Lennard-Jones (12-6) potential // *Indian J Phys.* – 2019. – Vol.93. – P.565-569.

References

- 1 I. G. Kaplan, *Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials* (John Wiley & Sons, 2006), pp. 146–150.
- 2 R.J. Sadus, *J. Chem. Phys.* 150, Art. 024503 (2019). DOI: 10.1063/1.5067267.
- 3 A. González-Calderón and A. Rocha-Ichante, *J. Chem. Phys.* 142, 034305 (2015). DOI: 10.1063/1.4905548.
- 4 J. Bai, P. Zhang, C.-W. Zhou, and H. Zhao, *Combust. Flame* 241, 112060 (2022). DOI: 10.1016/j.combustflame.2022.112060.
- 5 T. Kwon, H.W. Song, S.Y. Woo, and J.-H. Kim, *Bull. Korean Chem. Soc.* 43, 612 (2022). DOI: 10.1002/bkcs.12358.
- 6 X.L. Zeng, X.H. Ju, and S.Y. Xu, *Adv. Mater. Res.* 550–553, 2810–2813 (2012). DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.550-553.2810.
- 7 B.A. Mamedov, E. Somuncu, and I.M. Askerov, *J. Thermophys. Heat Transf.* 32, 984–998 (2018). DOI: 10.2514/1.T5417.
- 8 E.M. Apfelbaum, *High Temp.* 55, 1–11 (2017). DOI: 10.1134/S0018151X17010013.
- 9 R. Kinani, H. Kaidi, and M. Benhamou, *Mater. Devices* 3, 0207 (2018).
- 10 M. Monajjemi, F. Naderi, F. Mollaamin, and M. Khaleghian, *J. Mex. Chem. Soc.* 56, 207–211 (2012). DOI: недоступен.
- 11 U.F. Galicia-Pimentel, D. Osorio-González, and J. López-Lemus, *Rev. Mex. Fis.* 52, 422–428 (2006). DOI: недоступен.
- 12 I.V. Pirog and T.I. Nedoseikina, *Physica B Condens. Matter* 334, 123–129 (2003). DOI: недоступен.
- 13 A. Matsumoto, *Z. Naturforsch. A* 42a, 447–450 (1987). DOI: недоступен.
- 14 B.A. Mamedov and H. Cacan, *Contrib. Plasma Phys.* 59, e201900021 (2019). DOI: 10.1002/ctpp.201900021.
- 15 H. Cacan and B.A. Mamedov, *J. Chem. Thermodyn.* 138, 147–150 (2019). DOI: 10.1016/j.jct.2019.07.015.
- 16 K.R. Hall and G.A. Iglesias-Silva, *Chem. Eng. Commun.* 137, 211–214 (1995). DOI: 10.1080/00986449508936377.
- 17 T. Lim, *Z. Naturforsch. A* 58, 615–617 (2003). DOI: 10.1515/zna-2003-1104.
- 18 A.H. Harvey and E.W. Lemmon, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 33, 369–376 (2004). DOI: 10.1063/1.1649348.
- 19 R.J. Sadus, *J. Chem. Phys.* 149, 074504 (2018). DOI: 10.1063/1.5044669.
- 20 S. Nickabadi, R. Ansari, and S. Rouhi, *J. Mol. Graph. Model.* 98, 107589 (2020). DOI: 10.1016/j.jmgm.2020.107589.
- 21 I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, 2014), pp. 25–62.
- 22 M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, Inc., 1974), pp. 555–567.
- 23 J. P. O’Connell and J. M. Haile, *Thermodynamics: Fundamentals for Applications* (Cambridge University Press, 2005), pp. 155–180.
- 24 G. Coccia and G. Di Nicola, *Fluid Phase Equilib.* 493, 36–42 (2019). DOI: 10.1016/j.fluid.2019.03.017.
- 25 A.F. Al-Maaiah, *Sci. Int. (Lahore)* 32, 1–6 (2020).
- 26 W. Ebeling, V. E. Fortov, and V. Filinov, *Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas* (Springer, Cham, 2017).
- 27 B.A. Mamedov and E. Somuncu, *Chin. J. Phys.* 55, 1473–1488 (2017). DOI: 10.1016/j.cjph.2017.07.011.
- 28 G. Di Nicola, G. Coccia, M. Pierantozzi, S. Tomassetti, and R. C. Grifoni, *Chem. Eng. Commun.* 205, 1077–1095 (2018). DOI: 10.1080/00986445.2018.1432051.
- 29 J. Dymond, K. Marsh, R. Wilhoit, and K. Wong, *Virial Coefficients of Pure Gases* (Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, 2005).
- 30 E. Somuncu, *Indian J. Phys.* 93, 565–569 (2019). DOI: 10.1007/s12648-018-01356-6.

Article history:

Received 30 October 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 30.10.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **Aslihan Hatun Cacan** (corresponding author) – Tokat Gaziosmanpasa University, Faculty of Engineering and Natural Sciences, Tokat, Turkey; e-mail: aslihan.cacan@gop.edu.tr

2. **Bahtiyar Mamedov** – Tokat Gaziosmanpasa University, Department of Physics, Tasliciftlik Campus, Tokat, Turkey; e-mail: bamamedov@yahoo.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Аслыхан Хатун Чачан** (автор-корреспондент) – Токат Газиосманпаша университеті, инженерлік және ғылым факультеті, Токат қ., Түркия; e-mail: aslihan.cacan@gop.edu.tr

2. **Бақтияр Мамедов** – Токат Газиосманпаша университеті, физика факультеті, Тасличифтлик кампусы, Токат қ., Түркия; e-mail: bamamedov@yahoo.com

5-бөлім

**БЕЙСЫЗЫҚ ФИЗИКА.
РАДИОФИЗИКА**

Section 5

**NONLINEAR PHYSICS.
RADIOPHYSICS**

Раздел 5

**НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА.
РАДИОФИЗИКА**

Б.А. Карибаев^{1,2*} , Н. Мейрамбекулы¹ , Н.Ш. Узбекиев² 

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

²Алматинский университет энергетики и связи им. Г.Дукеева, г. Алматы, Казахстан

*e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

АРХИТЕКТУРНАЯ И СХЕМОТЕХНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГНСС+ИНС НАВИГАЦИОННОГО УСТРОЙСТВА

Работа посвящена созданию макетного образца навигационного модуля, предназначенного для научной ракеты гражданского назначения. Исследование охватывает процесс проектирования, начиная от выбора аппаратных компонентов и заканчивая разработкой электрических схем и модульной архитектуры устройства. В основе проекта лежит интеграция глобальной навигационной спутниковой системы (ГНСС) и инерциальной навигационной системы (ИНС), что позволяет достигать высокой точности в определении координат и параметров движения ракеты в реальном времени. Архитектура модуля базируется на использовании микроконтроллера STM32F777VI, обеспечивающего обработку данных, управление периферийными устройствами и интеграцию с ГНСС-модулем UM980 и инерциальным датчиком LSM6DSV32X. Система дополнена радиомодулем E22-400T33S для передачи телеметрии, светодиодной индикацией и интерфейсами связи, такими как UART и SPI. Для стабильной работы обеспечено использование понижающих преобразователей питания, кварцевого генератора и защитных элементов от электростатических разрядов. Разработанный макет позволяет изучать функциональность системы, тестировать инновационные подходы в ракетостроении и проводить научные эксперименты на высотах до 50 км. Представленная работа является основой для дальнейших этапов — калибровки, полевых испытаний и адаптации под конкретные условия эксплуатации.

Ключевые слова: ГНСС, ИНС, макетный образец, архитектурная модель, схема подключения.

Б.А. Карибаев^{1,2*}, Н. Мейрамбекулы¹, Н.Ш. Узбекиев²

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

²Г. Дукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті, Алматы қ., Қазақстан

*e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

GNSS+INS навигациялық құрылғысының архитектуралық және сұлбалық моделі

Жұмыс азаматтық мақсаттағы ғылыми зымыранға арналған навигациялық модульдің макеттік үлгісін жасауға бағытталған. Зерттеу жобалау процесінің барлық кезеңдерін қамтиды: аппараттық құрамдас бөліктерді таңдаудан бастап құрылғының электр схемалары мен модульдік архитектурасын әзірлеуге дейін. Жоба ғаламдық навигациялық спутниктік жүйені (GNSS) және инерциялық навигациялық жүйені (INS) біріктіруге негізделген, бұл нақты уақытта зымыран қозғалысының координаттары мен параметрлерін жоғары дәлдікпен анықтауға мүмкіндік береді. Модульдің архитектурасы STM32F777VI микроконтроллерін пайдалануға негізделген, ол деректерді өңдеуді, перифериялық құрылғыларды басқаруды, сондай-ақ UM980 GNSS модулімен және LSM6DSV32X инерциялық сенсорымен интеграцияны қамтамасыз етеді. Жүйе телеметрияны таратуға, жарықдиодты индикацияға және UART пен SPI сияқты байланыс интерфейстеріне арналған E22-400T33S радиомодулімен жабдықталған. Тұрақты жұмыс істеу үшін төмендетуші қуат түрлендіргіштері, кварц осцилляторы және электростатикалық разрядтардан қорғайтын элементтер қолданылған. Әзірленген прототип жүйенің функционалдығын зерттеуге, зымырантану саласындағы инновациялық тәсілдерді сынауға және 50 км-ге дейінгі биіктікте ғылыми тәжірибелер жүргізуге мүмкіндік береді. Ұсынылған жұмыс келесі кезеңдерге — калибрлеуге, далалық сынақтарға және нақты жұмыс жағдайларына бейімделуге негіз болады.

Түйін сөздер: GNSS, INS, макеттік үлгі, архитектуралық үлгісі, қосылу сұлбасы.

B.A. Karibayev^{1,2*}, N. Meirambekuly¹, N.Sh. Uzbekov²¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan²G. Daukeev Energy University, Almaty, Kazakhstan*e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

Architectural and circuit model of GNSS+INS navigation device

The work is devoted to the creation of a prototype of a navigation module intended for a civil scientific rocket. The study covers the design process, from the selection of hardware components to the development of electrical circuits and modular architecture of the device. The project is based on the integration of the global navigation satellite system (GNSS) and the inertial navigation system (INS), which allows achieving high accuracy in determining the coordinates and parameters of the rocket's motion in real time. The module architecture is based on the use of the STM32F777VI microcontroller, which provides data processing, control of peripheral devices and integration with the UM980 GNSS module and the LSM6DSV32X inertial sensor. The system is supplemented with an E22-400T33S radio module for telemetry transmission, LED indication and communication interfaces such as UART and SPI. For stable operation, the use of step-down power converters, a quartz generator and protective elements against electrostatic discharges are provided. The developed model allows studying the functionality of the system, testing innovative approaches in rocket engineering and conducting scientific experiments at altitudes of up to 50 km. The presented work is the basis for further stages – calibration, field testing and adaptation to specific operating conditions.

Keywords: GNSS, INS, prototype, architectural model, connection diagram.

Введение

Современное развитие технологий в области ракетостроения и спутниковой навигации открывает широкие возможности для создания компактных и эффективных ракет гражданского назначения [1-3]. Такие ракеты, использующиеся для научных и образовательных целей, занимают важное место в исследованиях верхних слоев атмосферы, тестировании новых технологий, а также в обучении будущих инженеров и специалистов. Особый интерес представляют ракеты, оснащенные интегрированными навигационными системами, которые обеспечивают высокую точность измерений и управление полетом в условиях реального времени [4,5].

Одной из ключевых задач при проектировании таких ракет является разработка навигационных модулей, сочетающих в себе технологии глобальной навигационной спутниковой системы (ГНСС) и инерциальной навигационной системы (ИНС) [6]. Эти модули позволяют не только определять точные координаты и параметры движения ракеты, но и служат основой для проведения научных экспериментов, связанных с измерением атмосферных условий, проверкой работоспособности телеметрических систем и тестированием экспериментальных технологий.

Научные ракеты гражданского назначения обладают характеристиками, которые делают их важными объектами для исследований [7,8]. Они

отличаются компактными размерами и легким весом, что обеспечивает их мобильность и доступность для запуска из специализированных площадок. Модульная конструкция таких ракет позволяет оснащать их специализированными отсеками для размещения научных приборов, систем телеметрии и полезной нагрузки. Интеграция высокоточных навигационных систем, основанных на технологиях ГНСС и ИНС, обеспечивает минимальные погрешности при отслеживании траектории полета.

В данной статье рассматриваются этапы проектирования макетного образца навигационного модуля для научной ракеты, а также его архитектура и схема расположения основных компонентов. Особое внимание уделено результатам схемотехнического проектирования, включая выбор компонентов, их интеграцию и разработку функциональной структуры системы.

Материалы и методы

Блок-схема навигационного модуля

На блок-схеме, представленной на рисунке 1, показана архитектура разрабатываемого макетного образца навигационного модуля, предназначенного для научных ракет гражданского назначения. Данная схема иллюстрирует взаимодействие ключевых компонентов системы, их функциональное назначение и способы подключения.

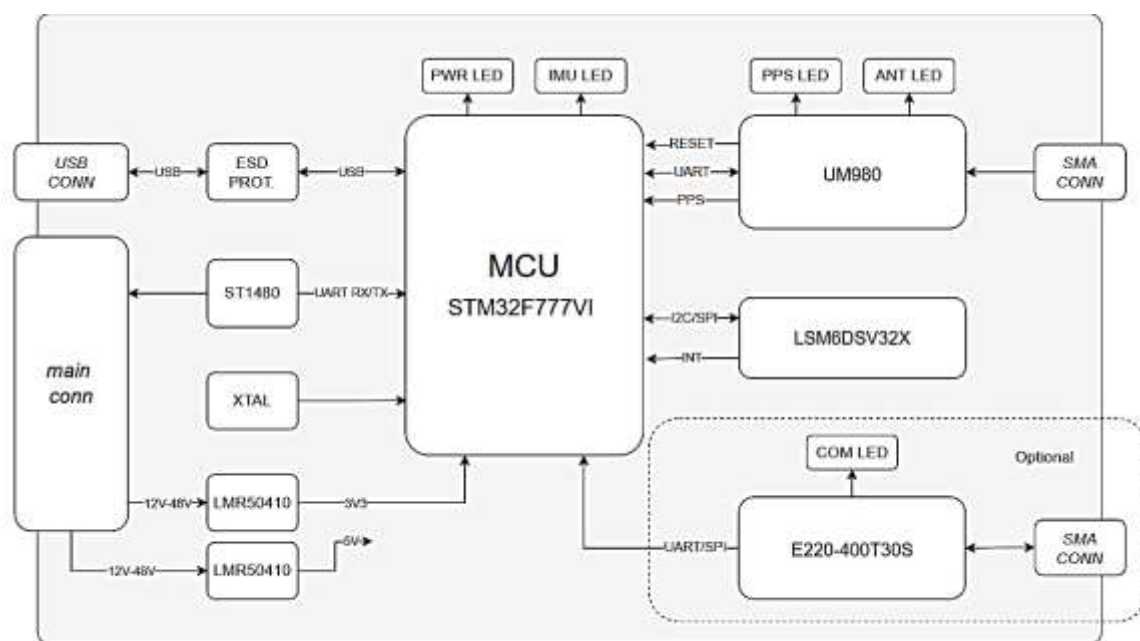


Рисунок 1 – Блок-схема навигационного модуля

Центральным элементом модуля является микроконтроллер STM32F777VI [9], который выполняет функции обработки данных от ГНСС-модуля UM980 и инерциального модуля LSM6DSV32X, управления периферийными устройствами и интерфейсами, а также обеспечения передачи данных через основные и вспомогательные коммуникационные каналы. Микроконтроллер поддерживает интерфейсы UART для обмена данными с модулями UM980 и опциональным передатчиком E220-400T30S, I2C/SPI для связи с инерциальным датчиком LSM6DSV32X и PPS (Pulse Per Second) для синхронизации с ГНСС.

ГНСС-модуль UM980 является основным источником данных о местоположении и времени. Он подключен к микроконтроллеру через интерфейсы UART и PPS, а среди дополнительных особенностей предусмотрено использование SMA-коннектора для подключения внешней антенны и наличие светодиодных индикаторов (PPS LED, ANT LED) для отображения статуса работы.

Инерциальный модуль LSM6DSV32X обеспечивает измерение параметров угловой скорости и линейного ускорения. Связь с MCU осуществляется через интерфейс I2C/SPI.

Модуль E220-400T30S предназначен для передачи данных телеметрии и управления по радиоканалу. Его использование предусмотрено как дополнительная возможность. Связь с MCU осуществляется через интерфейс UART/SPI, подключение антенны осуществляется через

SMA-коннектор. Индикация состояния работы обеспечивается светодиодом COM LED. Модуль поддерживает питание в диапазоне напряжений 12–48 В, которое поступает через разъем Main Conn. Для обеспечения питания компонентов используются понижающие преобразователи: LMR50410 (3.3 В) – питает микроконтроллер и цифровые компоненты, LMR50410 (5 В) – обеспечивает питание вспомогательных модулей.

Система ввода-вывода навигационного модуля обеспечивает подключение к внешним устройствам и передачу данных через несколько интерфейсов. USB-разъем используется для соединения модуля с компьютером или другими устройствами и защищен схемой ESD Protection, предотвращающей повреждения от электростатических разрядов. Основной разъем Main Conn служит для подачи питания и организации обмена данными. Для подключения антенн ГНСС и опционального радиомодуля предусмотрены SMA-разъемы, обеспечивающие надежное соединение и минимизацию потерь сигнала.

Система навигационного модуля оснащена светодиодными индикаторами, обеспечивающими визуальный контроль за его состоянием. Индикаторы отображают подачу питания, состояние инерциального модуля, синхронизацию ГНСС, статус антенны [10, 11] и работу опционального радиомодуля. Для обеспечения стабильной работы микроконтроллера используется кварцевый генератор, который гарантирует точную обработку данных и синхронизацию всех компонентов системы.

Схемотехнические модели компонентов и их подключения разработаны в программной среде Altium Designer. На рисунке 2 представлена структура навигационного модуля с электрической принципиальной схемой, включающей интеграцию ГНСС-приемника с периферийными устройствами и системами питания. Базовым элементом схемы является модуль UM980, отвечающий за обработку навигационных данных и взаимодействующий с системой через интерфейсы UART и SPI, а также линии управления, такие как PPS для синхронизации, EVENT и RESET. Основное питание модуля осуществляется через выводы VCC (+3.3 В), а резервное питание поддерживается линией VBAT для сохранения данных о спутниках при отключении основного

На рисунке 3 представлена электрическая принципиальная схема подключения инерциального датчика (акселерометра) ADXL372BCCZ-RL7 к микроконтроллеру через интерфейсы I2C и SPI, а также интеграция вспомогательных компонентов. Основным элементом схемы является акселерометр (U3), который измеряет ускорения по трем осям и взаимодействует с микроконтроллером через интерфейсы I2C или SPI, что позволяет адаптировать подключение в зависимости от требований системы. Для связи по I2C используются линии SDA и SCL с

108

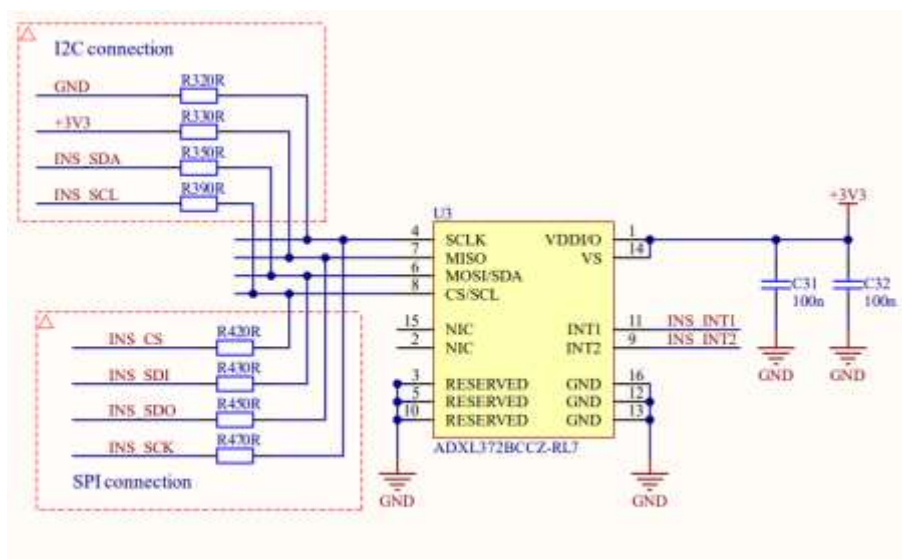


Рисунок 3 – Схема подключения ИИС модуля

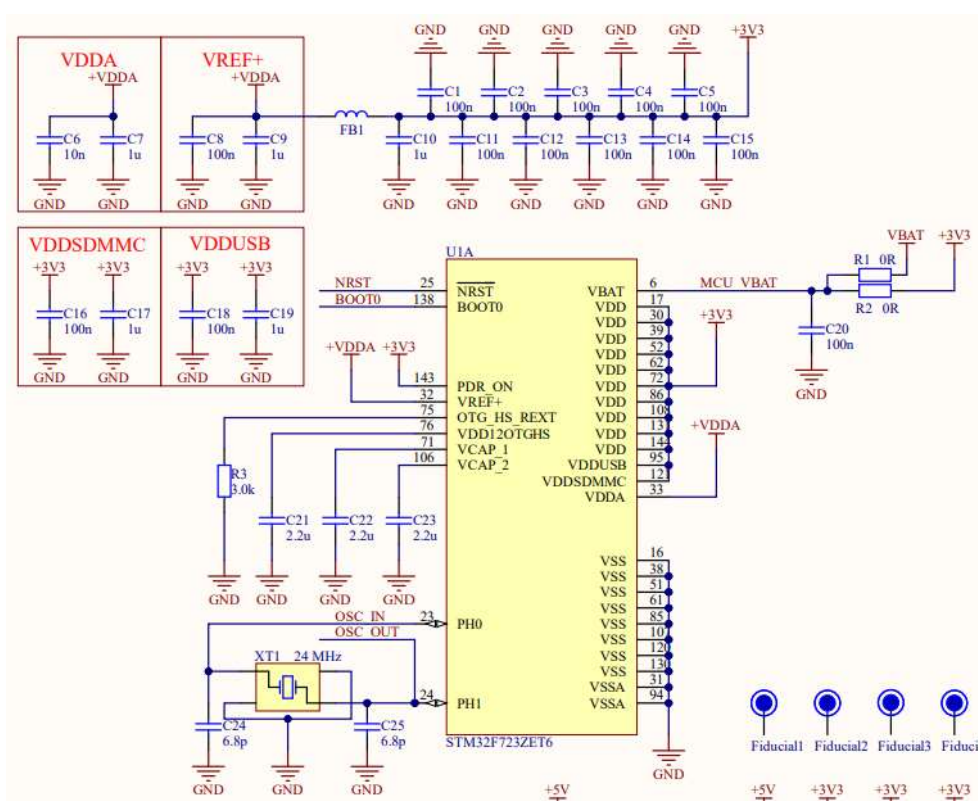


Рисунок 4 – Схема подключения микроконтроллера

На рисунке 4 представлена схема подключения микроконтроллера STM32F723ZET6, обеспечивающего управление всеми процессами системы. Питание микроконтроллера осуществляется через основные линии VDD с напряжением +3.3 В, дополненные конденсаторами для фильтрации и устранения шумов, а резервное питание подключается через линию VBAT, что поддерживает работу при отключении основного источника энергии. Для аналоговых цепей используется линия VDDA,

стабилизированная фильтрующими элементами, а линия VREF+ задает опорное напряжение для аналоговых операций. Тактовая частота микроконтроллера задается внешним кварцевым генератором на 24 МГц, подключенным через конденсаторы для обеспечения стабильной работы осциллятора. Линия NRST обеспечивает функцию сброса микроконтроллера, а контакт BOOT0 позволяет конфигурировать режимы загрузки. Для стабилизации внутренних напряжений используются конденсаторы на

линиях VCAP1 и VCAP2. Система фильтрации, включающая дроссели и конденсаторы, минимизирует помехи и гарантирует стабильное питание всех цепей микроконтроллера. Представленная схема обеспечивает надежную работу и точное управление системой, что делает ее базовой частью встроенных приложений, требующих высокой стабильности и производительности.

На рисунке 5 представлена схема подключения радиомодуля E22-400T33S, обеспечивающего беспроводную передачу данных с максимальной мощностью излучения +33 dBm. Модуль взаимодействует с периферийными цепями через линии управления и обмена данными, такие как M0 и M1 для переключения

режимов работы, AUX для контроля состояния модуля, а также RXD и TXD для передачи и приема данных по UART. Подключение к антенне осуществляется через разъем ANT, соединенный с фильтрующим элементом RF50 для минимизации помех. Линии передачи и приема данных дополнены светодиодами с резисторами, что позволяет визуально отслеживать активность UART-интерфейса. Для повышения надежности работы использованы резисторы в линиях управления и передачи данных, обеспечивающие фильтрацию сигналов и снижение помех. Питание радиомодуля осуществляется от стабильной линии +3.3 В, а заземление через разъем P4 предотвращает возникновение паразитных сигналов.

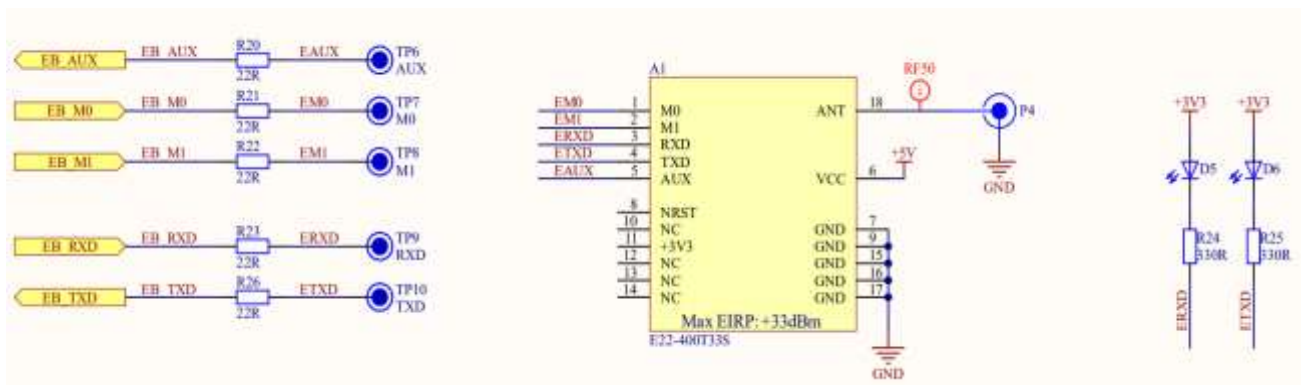


Рисунок 5 – Схема подключения радиомодуля

На рисунке 6 представлен макетный образец навигационного модуля, разработанный для интеграции в системы навигации и беспроводной связи. Плата объединяет ключевые аппаратные компоненты. Она включает микроконтроллер, навигационный модуль, радиомодуль и периферийные интерфейсы, которые позволяют обрабатывать данные в реальном времени, а также обмениваться ими с внешними системами.

Основным элементом платы является микроконтроллер STM32, который выполняет функции центрального управления системой и обработки данных. Он получает данные от навигационного модуля Quectel L80, обеспечивающего работу с GNSS-системами. Этот модуль поддерживает определение координат с высокой точностью и синхронизацию времени благодаря встроенному кварцевому генератору. Резервное питание реализовано с использованием батареи, что позволяет сохранять данные спутниковой информации и эфемерид даже при отключении основного источника питания.

На плате установлен радиомодуль E22-400T33S, предназначенный для беспроводной передачи данных по радиоканалу. Он поддер-

живает гибкие режимы работы, которые переключаются через интерфейсы управления, такие как M0 и M1. Для подключения внешней антенны используются SMA-разъемы. Светодиодные индикаторы, подключенные к линиям передачи и приема данных, предоставляют возможность мониторинга активности беспроводного интерфейса.



Рисунок 6 – Изготовленный макетный образец

Электропитание всех компонентов стабилизируется с использованием конденсаторов, расположенных по линии питания, что позволяет минимизировать помехи. Для работы системы тактирования используется кварцевый генератор на 24 МГц, который обеспечивает стабильную работу микроконтроллера. Разъемы USB и UART позволяют интегрировать модуль с внешними устройствами, включая компьютеры и системы телеметрии.

Таким образом, разработанный макетный образец представляет собой интегрированное решение, предназначенное для тестирования и последующей реализации в проектах, связанных с навигацией, беспроводной связью и сбором телеметрических данных.

Заключение

Разработанный макетный образец навигационного модуля является решением, объединяющим технологии спутниковой навигации ГНСС и ИНС. В рамках работы выполнены проектирование и реализация функциональной структуры модуля, а также разработка схемотехнических решений, обеспе-

чивающих его базовую работоспособность. Рассмотренная блок-схема отражает модульную структуру устройства, где каждая подсистема выполняет определенную задачу. Архитектура обеспечивает интеграцию технологий ГНСС и ИНС для достижения высокой точности навигации и надежности работы системы. Такое решение может быть адаптировано для различных задач, включая научные эксперименты, тестирование прототипов и образовательные проекты. Однако на данном этапе работа ограничивается созданием макетного образца, и функциональные испытания или тестирование в реальных условиях еще не проводились. Представленный макет служит основой для дальнейших исследований, включая калибровку, испытания и оптимизацию под конкретные условия эксплуатации.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP23487878)

Литература

- 1 Drenthe N.T., Zandbergen B.T.C., Curran R., van Pelt M.O. Cost estimating of commercial smallsat launch vehicles // *Acta Astronautica*. – 2019. – Vol.155. – P.236–247.
- 2 Nanditta R.V., Das N.K., Venkatesan A., Rohit R., Gowtham R., Rahul B.N., Stephen J.D.G. Structural Design and Analysis of High-Powered Model Rockets using OpenRocket // *International Journal of Engineering Research in Mechanical and Civil Engineering*. – 2021. – Vol.6, Issue 8. – P.64–68.
- 3 Cieslinski D., Noga T., Pazik A. Polish civil rockets' development overview. In book: *Obronność RP XXI wieku w teorii i praktyce*. – Wydawnictwo Lotniczej Akademii Wojskowej, 2021. – 10 p.
- 4 Swartwout M. Cubesats/Smallsats/Nanosats/Picosats/Rideshare(sats) in 2022: Making sense of it all // *Proceedings of the 36th Annual AIAA/USU Conference on Small Satellites*. – 2022. – P.1–12.
- 5 Berthoud L., Lancaster S.A. Work in Progress: Curriculum review for rocket scientists // *2020 IEEE Global Engineering Education Conference (EDUCON)*. – 2020. – P.1900–1904.
- 6 Renwarin R.B., Prasetyo A.D., Pascawati A., Munir A. Development of Semi-Conformal Antennas for Telemetry and GPS Applications on Experimental Rocket // *2024 9th International Conference on Smart and Sustainable Technologies (SpliTech)*. – Bol and Split, Croatia, 2024. – P. 1–5.
- 7 Niederstrasser C.G. The small launch vehicle survey: A 2021 update (The rockets are flying) // *Journal of Space Safety Engineering*. – 2022. – Vol.9, No.3. – P.341–354.
- 8 Helms C.C. A Survey of Launch Services 2016–2020 // *AIAA Propulsion and Energy 2020 Forum*. – 2020. – P. 1–12.
- 9 Shen Y. Application of STM32 Microcontroller Control System in Automation of Computer Laboratory Equipment // *2024 International Conference on Intelligent Computing and Robotics (ICICR)*. – Dalian, China, 2024. – P. 169–175.
- 10 Karibayev B., Meirambekuly N., Namazbayev T., Kozhakhmetova B., Chizhimbayeva K., Kulakayeva A. The Possibilities of Using Fractal Antennas in Modern Wireless Communication Technologies // *2023 IEEE International Conference on Smart Information Systems and Technologies (SIST)*. – Astana, Kazakhstan, 2023. – P. 184–188.

11 Nasimuddin, Qing X. A Single-feed Compact Wideband Circularly Polarized Antenna for INMARSAT/GNSS Applications // 2020 14th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP). – Copenhagen, Denmark, 2020. – P. 1–4.

References

- 1 N.T. Drenthe, B.T.C. Zandbergen, R. Curran, and M. O. van Pelt, *Acta Astronaut.* 155, 236–247 (2019). DOI: 10.1016/j.actaastro.2018.11.021.
- 2 R.V. Nanditta, N.K. Das, A. Venkatesan, R. Rohit, R. Gowtham, B. N. Rahul, and J. D. G. Stephen, *Int. J. Eng. Res. Mech. Civ. Eng.* 6, 64–68 (2021).
- 3 D. Cieslinski, T. Noga, and A. Pazik, Polish civil rockets' development overview. In book: *Obronność RP XXI wieku w teorii i praktyce*, (Wydawnictwo Lotniczej Akademii Wojskowej, 2021), 10 p.
- 4 M. Swartwout, *Proceedings of the 36th Annual AIAA/USU Conference on Small Satellites*, 1–12 (2022).
- 5 L. Berthoud and S.A. Lancaster, 2020 IEEE Global Engineering Education Conference (EDUCON), 1900–1904 (2020). DOI: 10.1109/EDUCON45650.2020.9125316.
- 6 R.B. Renwarin, A.D. Prasetyo, A. Pascawati, and A. Munir, 2024 9th International Conference on Smart and Sustainable Technologies (SpliTech), Bol and Split, Croatia, 2024, pp. 1–5. DOI: 10.23919/SpliTech58408.2024.10291858.
- 7 C.G. Niederstrasser, *J. Space Saf. Eng.* 9, 341–354 (2022). DOI: 10.1016/j.jsse.2022.07.001.
- 8 C.C. Helms, *AIAA Propulsion and Energy 2020 Forum*, 2020, pp. 1–12. DOI: 10.2514/6.2020-3867.
- 9 Y. Shen, 2024 International Conference on Intelligent Computing and Robotics (ICICR), Dalian, China, 2024, pp. 169–175.
- 10 B. Karibayev, N. Meirambekuly, T. Namazbayev, B. Kozhakhmetova, K. Chizhimbayeva, and A. Kulakayeva, 2023 IEEE International Conference on Smart Information Systems and Technologies (SIST), Astana, Kazakhstan, 2023, pp. 184–188. DOI: 10.1109/SIST58858.2023.10167293.
- 11 Nasimuddin and X. Qing, 2020 14th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP), Copenhagen, Denmark, 2020, pp. 1–4. DOI: 10.23919/EuCAP48036.2020.9135450.

Article history:

Received 30 November 2024

Accepted 18 December 2024

Мақала тарихы:

Түсті – 30.11.2024

Қабылданды – 18.12.2024

Information about authors:

1. **B.A. Karibayev** (corresponding author) – PhD, Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

2. **Nursultan Meirambekuly** – PhD, Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: nurs.kaznu@gmail.com

3. **Nursultan Uzbekov** – PhD, G.Daukeev Energy University, Almaty, Kazakhstan; e-mail: n.uzbekov@gmail.com

Авторлар туралы мәлімет:

1. **Бейбіт Кәрібаев** (автор-корреспондент) – PhD, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, электроника және астрофизика кафедрасының ғылым жөніндегі меңгерушісінің орынбасары, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

2. **Нұрсұлтан Мейрамбекұлы** – PhD, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, электроника және астрофизика кафедрасы, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: beibitkaribaev7@gmail.com

3. **Нұрсұлтан Узбеков** – PhD, Ғ.Даукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті, Алматы қ., Қазақстан; e-mail: n.uzbekov@gmail.com

МАЗМУНЫ – CONTENTS – СОДЕРЖАНИЕ

1-бөлім Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика	Section 1 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics	Раздел 1 Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика
<i>Ильясов М.Н., Исадыков А.Н.</i> Вычисление форм-факторов, брэнчингов и угловых наблюдаемых для перехода $B \rightarrow \omega$ в рамках ковариантной модели кварков 4		
<i>Бактораз А.Е., Мухамеджанов Е.С., Мыктыбеков Д.Е., Данкенова Ф.Г.</i> Моделирование, обработка и анализ потока нейтронов в горизонтальном канале критического стенда реактора ВВР-К..... 12		
<i>Ережеп Н.О., Садуаев Н.О., Каликулов О.А., Банищикова М.А.</i> Сравнение адронных моделей взаимодействия EPOS LHC и QGSJETII-04 при моделировании ШАЛ с использованием Corsika77410 21		
2-бөлім Плазма физикасы	Section 2 Plasma Physics	Раздел 2 Физика плазмы
<i>Seyedeh Nasrin Hosseinimotlagh</i> Irradiation of D- ³ He fuel by d-beam to enhance fusion energy gain via ICF using innovative whistler wave collapse by MCNPX simulation 33		
3-Бөлім Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым	Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience	Раздел 3 Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука
<i>Алдабергенова Т.М., Акаев С.О., Диков А.С., Ларионов А.С., Дикова Л.А.</i> 12X18H10T сәулеленген болатты «құрғақ» ПЯО сақтау кезіндегі температуралық аралықта пластикалық деформация орнату процесстері..... 48		
<i>Bozorov Y.Sh., Turaev Kh.Kh., Djalilov A.T., Aliqulov R.V., Umbarov I.A., Haitov B.T., Akhatov J.K., Uralov N.B.</i> Synthesis of a new ion exchange membrane and its surface morphology 56		
<i>Кенбай А.А., Ережеп Д.Е., Алдияров Ә.У.</i> Төмен температуралы ұяшығы бар құрылған криогенді-капиллярлық жүйені пайдалана отырып, керосиннің FTIR-спектрлерін талдау және алу..... 64		
<i>Akhatov A.A., Turaev Kh.Kh., Ashurov J.M., Umbarov I.A., Tillaev X.R., Nomozov A.K., Uralov N.B., Eshdavlatov E.A.</i> Synthesis, structure and Hirshfeld surface analysis of the complex compound based on Cd(II) salt and O- phenylenediamine 77		
<i>Muminov B.S., Karimov M.U., Djalilov A.T., Haitov B.T.</i> Production of melamine using the electrolysis method 86		

4-бөлім
Жылу физикасы және
теориялық жылу техникасы

Section 4
Thermophysics and Theoretical
Heat Engineering

Раздел 4
Теплофизика и
теоретическая теплотехника

Cacan A.H., Mamedov B.A.

An accurate and efficient theoretical assessment of the thermodynamic properties of non-polar gases 93

5-бөлім
Бейсызық физика.
Радиофизика

Section 5
Nonlinear Physics.
Radiophysics

Раздел 5
Нелинейная физика.
Радиофизика

Карибаев Б.А., Мейрамбекулы Н., Узбеков Н.Ш.

Архитектурная и схмотехническая модель ГНСС+ИНС навигационного устройства 105