

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
«МИФИ»

**VI МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ЛАЗЕРНЫЕ, ПЛАЗМЕННЫЕ  
ИССЛЕДОВАНИЯ И ТЕХНОЛОГИИ -  
ЛАПЛАЗ-2020»**

**СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ**

**Часть 1**

Москва

УДК: 001.89 [621.373.8+533.9+539.1+530.1+620.3+519.7](06)

ББК 72+22.383

М 43

VI Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии - ЛаПлаз-2020» Сборник научных трудов. Ч.1. М.: НИЯУ МИФИ, 2020. – 463 с.

Сборник научных трудов содержит тезисы докладов, включенных в программу VI Международной конференции «Лазерные, плазменные исследования и технологии – ЛаПлаз-2020», которая прошла с 11 февраля по 14 февраля 2020 года в НИЯУ МИФИ. Организатором конференции выступает Институт лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ.

Тематика конференции охватывает широкий круг вопросов: лазерная физика и лазерные технологии; физика плазмы и плазменные технологии; сверхсильные лазерные поля; управляемый термоядерный синтез; современные проблемы теоретической физики; прикладная математика и математическое моделирование; современные проблемы физики твердого тела, функциональных материалов и наносистем; ускорители заряженных частиц и радиационные технологии; современные проблемы квантовой метрологии, физика высокой плотности и энергии, электрофизическое и ядерное приборостроение.

Тезисы получены до 30 января 2020 года.

Материалы издаются в авторской редакции.

Ответственный редактор – Крупышева П.О.

ISBN 978-5-7262-2655-2

©Национальный исследовательский  
ядерный университет «МИФИ», 2020

## Программный комитет конференции

- Гаранин Сергей Григорьевич – академик РАН, директор Института лазерно-физических исследований РФЯЦ-ВНИИЭФ -- председатель Программного комитета
- Кузнецов Андрей Петрович – д.ф.-м.н., директор Института ЛаПлаз НИЯУ МИФИ – заместитель председателя Программного комитета
- Батани Дино Димитри – Университет Бордо, Франция
- Бармаков Юрий Николаевич – д.т.н., первый заместитель научного руководителя ФГУП ВНИИА им. Н.Л. Духова, и.о. директора Института физико-технических интеллектуальных систем НИЯУ МИФИ
- Гарнов Сергей Владимирович – член-корр. РАН, директор Института общей физики им. А. М. Прохорова РАН, научный руководитель Института ЛаПлаз НИЯУ МИФИ
- Губин Сергей Александрович – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой «Химическая физика» НИЯУ МИФИ
- Евтихий Николай Николаевич – заместитель генерального директора ООО «НТО «ИРЭ-ПОЛЮС», заведующий кафедрой «Лазерная физика» НИЯУ МИФИ
- Ильяев Радий Иванович – академик РАН, почетный научный руководитель РФЯЦ-ВНИИЭФ
- Колачевский Николай Николаевич – член-корр. РАН, директор Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, заведующий кафедрой «Физико-технические проблемы метрологии»
- Кудряшов Николай Алексеевич – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой «Прикладная математика» НИЯУ МИФИ
- Курнаев Валерий Александрович – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой «Физика плазмы» НИЯУ МИФИ

- Менушенков Алексей Павлович – д.ф.-м.н., профессор, и. о. заведующего кафедрой «Физика твердого тела и наносистем» НИЯУ МИФИ
- Попруженко Сергей Васильевич – д.ф.-м.н., профессор, НИЯУ МИФИ
- Пуранс Юрис – д.ф.-м.н, профессор, член Латвийской Академии Наук, Университет Латвии
- Смирнов Валентин Пантелеймонович – академик РАН, АО «Наука и инновации» ГК Росатом
- Сон Эдуард Евгеньевич – академик РАН, руководитель НИЦ-4 Объединенного института высоких температур РАН
- Фертман Александр Давидович – к.ф.-м.н, директор по науке Кластера ядерных технологий Фонда «Сколково»
- Черковец Владимир Евгеньевич – д.ф.-м.н., профессор, научный руководитель АО ГНЦ «ТРИНИТИ»

#### **Организационный комитет конференции**

- Кузнецов А.П. – директор Института ЛаПлаз, НИЯУ МИФИ, председатель Организационного комитета
- Генисаретская С.В. – заместитель директора Института ЛаПлаз, НИЯУ МИФИ, заместитель председателя Организационного комитета
- Борисюк П.В. – доцент отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ, член Организационного комитета
- Гаспарян Ю.М. — доцент отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Городничев Е.Е. – профессор отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Губский К.Л. – доцент отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета

- Гусарова М.А. – доцент отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Казиева Т.В. – старший преподаватель отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Кузнецов А.В. – доцент отделения лазерных и плазменных технологий офиса образовательных программ НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Маклашова И.В. — старший преподаватель кафедры «Химическая физика» НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета
- Масленников С.П. – профессор кафедры «Прикладная ядерная физика» НИЯУ МИФИ, член Организационного комитета

**Адрес в Интернет:** <http://conf.laplas.mephi.ru/>

## Содержание:

<b>Секция СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ И КВАНТОВОЙ МЕТРОЛОГИИ</b> .....	29
<b>А.Я. ДЗЮБЛИК, Б.Е. ГРИНЮК РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЯХ</b> .....	30
<b>Е.В. ТКАЛЯ ВНУТРЕННЯЯ ЭЛЕКТРОННАЯ КОНВЕРСИЯ ИЗОМЕРА <math>^{229}\text{M}\text{T}\text{H}</math> В РИДБЕРГОВСКОМ ИОНЕ <math>\text{T}\text{H}^{3+}</math> И АНИОНЕ <math>\text{T}\text{H}^-</math></b> .....	32
<b>П.В. БОРИСЮК, О.С. ВАСИЛЬЕВ, С.П. ДЕРЕВЯШКИН, Н.Н. КОЛАЧЕВСКИЙ, Ю.Ю. ЛЕБЕДИНСКИЙ, С.С. ПОТЕШИН, А.А. СЫСОЕВ, Е.В. ТКАЛЯ, Д.О. ТРЕГУБОВ, К.Ю. ХАБАРОВА, В.П. ЯКОВЛЕВ ИОНЫ ТОРИЯ В ЛИНЕЙНОЙ КВАДРУПОЛЬНОЙ ЛОВУШКЕ</b> .....	34
<b>Е.Ф. СТЕЛЬМАШЕНКО, О.А. КЛЕЗОВИЧ, В.Н. БАРЫШЕВ, В.А. ТИЩЕНКО, И.Ю. БЛИНОВ, В.Г.ПАЛЬЧИКОВ, В.Д. ОВСЯННИКОВ ИЗМЕРЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СВЧ ПОЛЯ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ С ПОМОЩЬЮ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ</b> .....	36
<b>Д.И. ПРОВОРЧЕНКО, Д.А.МИШИН, Е.С.ФЕДОРОВА, Д.О.ТРЕГУБОВ, А.А.ГОЛОВИЗИН, В.Н.СОРОКИН, К.Ю.ХАБАРОВА, Н.Н.КОЛАЧЕВСКИЙ ИССЛЕДОВАНИЕ ШТАРКОВСКОГО СДВИГА ЧАСТОТЫ ЧАСОВОГО ПЕРЕХОДА В АТОМАХ ТУЛИЯ В ОПТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 1064 НМ</b> .....	38
<b>М.И. ВАСЬКОВСКАЯ, Е.А. ЦЫГАНКОВ, Д.С. ЧУЧЕЛОВ, С.А. ЗИБРОВ, В.В. ВАСИЛЬЕВ, В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ БУФЕРНЫХ ГАЗОВ НА СВЕТОВОЙ СДВИГ В АТОМНЫХ ЯЧЕЙКАХ ДЛЯ КПН-СТАНДАРТА ЧАСТОТЫ</b> .....	40
<b>Д.С. ЧУЧЕЛОВ, М.И. ВАСЬКОВСКАЯ, С.А. ЗИБРОВ, В.В. ВАСИЛЬЕВ, В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ М.Ю. БАСАЛАЕВ, В.И. ЮДИН, А.В. ТАЙЧЕНАЧЕВ. ДИНАМИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РЕЗОНАНСА КОГРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В</b>	

<b>НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ФАЗОВОЙ МОДУЛЯЦИИ.....</b>	<b>42</b>
<b>О.Б. АНАНЬИН, Р.Ш. РАМАКОТИ, А.П. МЕЛЕХОВ, В.Г. СРЕДИН, В.В. КРАВЧЕНКО, И.А. ГЕРАСИМОВ, Г.С. БОГДАНОВ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОЛУПРОВОДНИК СDНГТЕ.....</b>	<b>44</b>
<b>Г.А. АГЕЕВ, П.В. БОРИСЮК ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ АНАЛОГО-ЦИФРОВОЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ НА ОСНОВЕ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР.....</b>	<b>46</b>
<b>А.А. ТАВЛЕЕВ, Ю.Д. АРАПОВ, П.В. КУБАСОВ, П.Н. ЯРОЩУК ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ЗВУКА В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ВЫНУЖДЕННОГО РАССЕЯНИЯ МАНДЕЛЬШТАМА-БРИЛЛЮЭНА .....</b>	<b>48</b>
<b>А.В. ФРОЛОВ, А.П. ОРЛОВ, А.А. СИНЧЕНКО, П. МОНСО КОЛЛЕКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ, ИНИЦИИРОВАННЫЙ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ ..</b>	<b>50</b>
<b>П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПОСТРОЕНИИ ЭТАЛОНА ВОЛЬТА .....</b>	<b>52</b>
<b>П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ ЕМКОСТНЫЕ ЭФФЕКТЫ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДАТЧИКОВ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭП.....</b>	<b>54</b>
<b>П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ, К.Н. ЭРГАШЕВА РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ КОТРОЛЯ ОПТИЧЕСКОГО КАЧЕСТВА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ КОНОСКОПИИ.....</b>	<b>56</b>
<b>Д. Г. ФИСЕНКО, В. С. МОЗГОВОЙ ФОРМИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО ПОРТФЕЛЯ ПРОЕКТОВ ГЕОЛОГОРАЗВЕДОЧНЫХ РАБОТ НА СРЕДНЕСРОЧНУЮ ПЕРСПЕКТИВУ .....</b>	<b>58</b>

**А.Ю. ГРИБОВ, О.И. БЕРДАСОВ, Д.В. СУТЫРИН, С.Н. СЛЮСАРЕВ  
ПРИНЦИП ФОРМИРОВАНИЯ ШКАЛЫ ВРЕМЕНИ НА ОСНОВЕ  
ОПТИЧЕСКОГО РЕПЕРА ЧАСТОТЫ..... 60**

**С.М. ИГНАТОВИЧ, М.Н. СКВОРЦОВ, В.И. ВИШНЯКОВ,  
Н.Л. КВАШНИН, В.А. ВАСИЛЬЕВ, Д.В. БРАЖНИКОВ В.И. ЮДИН,  
А.В. ТАЙЧЕНАЧЕВ, С.Н. БАГАЕВ, И.Ю. БЛИНОВ, В.Г. ПАЛЬЧИКОВ,  
Ю.С. САМОХВАЛОВ, Д.А. ПАРЁХИН, Е.А. ЗОТОВ, М.П. МАЛАХ,  
С.М. КОБЦЕВ, В.А. ГАЙСЛЕР **МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ  
ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕРХМИНИАТЮРНОГО КВАНТОВОГО  
СТАНДАРТА ЧАСТОТЫ..... 64****

**Секция ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И  
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ..... 66**

**В.В. НАЗАРОВ АНАЛИЗ ДВУХ МОДЕЛЕЙ ОПИСАНИЯ  
ПРОЦЕССА ДЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЧНОСТИ ПРИ СОВМЕСТНОМ  
РАСТЯЖЕНИИ И КРУЧЕНИИ ТРУБЧАТЫХ ОБРАЗЦОВ 67**

**А.А. КУТУКОВ, Н.А. КУДРЯШОВ АВТОМАТИЗАЦИЯ  
ПОСТРОЕНИЯ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ  
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ R-ФУНКЦИИ  
69**

**В.В. ЦЕГЕЛЬНИК АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЕШЕНИЙ  
ТРЕХМЕРНЫХ НЕХАОТИЧЕСКИХ КОНСЕРВАТИВНЫХ  
СИСТЕМ 71**

**Н.А. КУДРЯШОВ, Т.Д. ШАРОВА АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ  
ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ФЕРМИ-ПАСТА-УЛАМА 75**

**Н.И. СИДНЯЕВ, Н.С. КЛИМОВА ВЕРОЯТНОСТНЫЙ МЕТОД  
ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТОЛКНОВЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦ В  
КОСМИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ 78**

**А.А. САРИН, Г.В. ДОЛГОЛЕВА ВЛИЯНИЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ  
СЛОЕВ МИШЕНИ НА ЕЕ ГОРЕНИЕ..... 78**

**И.А. МОЛОШНИКОВ, А.В. ГРЯЗНОВ, Д.С. ВЛАСОВ, А.Г. СБОЕВ  
ВЫБОР ЭФФЕКТИВНОГО НЕЙРОСЕТЕВОГО МЕТОДА  
ФОРМИРОВАНИЯ ЗАГОЛОВКОВ..... 80**

<b>В.С. ДРЮМА ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ.....</b>	<b>82</b>
<b>Н.Н. ФИМИН, В.М. ЧЕЧЕТКИН ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ КОГЕРЕНТНЫЕ ВИХРЕВЫЕ СИСТЕМЫ И ГЕОМЕТРИЯ НА МНОГООБРАЗИЯХ МОНЖА-КЛЕБША .....</b>	<b>84</b>
<b>А.В. АКСЕНОВ, К.П. ДРУЖКОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ .....</b>	<b>86</b>
<b>А.А. КОЖУРИН ДВУМЕРНАЯ ТРАНСПОРТНАЯ МОДЕЛЬ НЕЙТРАЛОВ НА ОСНОВЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПРОХОЖДЕНИЯ ПОТОКОВ ЧЕРЕЗ ЯЧЕЙКИ.....</b>	<b>88</b>
<b>М.В.ДОЛГОПОЛОВ, И.Н.РОДИОНОВА ДЕЛЬТА-ЗАДАЧИ ДЛЯ ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА–ДАРБУ С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ДЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ.....</b>	<b>90</b>
<b>Л.В. ВЛАДИМИРОВА, А.Ю. ЖДАНОВА, И.Д. РУБЦОВА ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА В ЗАДАЧЕ ОПТИМИЗАЦИИ ДИНАМИКИ ПУЧКА .....</b>	<b>91</b>
<b>С.З. АДЖИЕВ, В.В. ВЕДЕНЯПИН, И.В. МЕЛИХОВ КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ВЛАСОВА И ФОККЕРА–ПЛАНКА И МОДЕЛЬ АГРЕГИРОВАНИЯ ДИСПЕРСНОГО ТВЁРДОГО ВЕЩЕСТВА....</b>	<b>93</b>
<b>Ю.М. СУВОРОВА, А.М. КАМИОНСКАЯ, Е.В. КОРОТКОВ МЕТОД ПОИСКА НОВЫХ КОПИЙ SINE ПОВТОРОВ .....</b>	<b>95</b>
<b>М.Б. ИСКАКОВ, Г.Б. АБИЛДАЕВА, Ю.К. ШАКИРОВА, Н.К. САВЧЕНКО, С.К. ЖУМАГУЛОВА МЕТОДИКА СОЗДАНИЯ 3-D МОДЕЛИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ НА ОСНОВЕ МАТЕРИАЛОВ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ РАЗВЕДКИ .....</b>	<b>97</b>
<b>А.С. ЕГОРОВ, А.А. БРЕХОВА МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ИСКАЖЕНИЙ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ .....</b>	<b>99</b>
<b>Д.С. БОГАЧЁВ, А.А. СЕЛИВАНОВ, Р.Б. РЫБКА, И.А. МОЛОШНИКОВ, А.Г. СБОЕВ МОДЕЛЬ НА ОСНОВЕ ГРАФОВОЙ СВЁРТОЧНОЙ СЕТИ ДЛЯ ВКЛЮЧЕНИЯ ДЕРЕВЬЕВ СИНТАКСИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ В ЗАДАЧУ КЛАССИФИКАЦИИ ПОЛА АВТОРА ТЕКСТА .....</b>	<b>101</b>

<b>А. Г. СБОЕВ, А. В. СЕРЕНКО, Р. Б. РЫБКА МОДЕЛЬ СПАЙКОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ С STDP-ОБУЧЕНИЕМ И ТОРМОЗЯЩИМИ МЕЖНЕЙРОННЫМИ СВЯЗЯМИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КЛАССИФИКАЦИИ .....</b>	<b>103</b>
<b>С. Г. СБОЕВА, А. Г. СБОЕВ, А. В. ГРЯЗНОВ, А. В. ЕВТЕЕВА НЕЙРОСЕТЕВОЙ АЛГОРИТМ ВЫДЕЛЕНИЯ ЗНАЧИМОЙ ИНФОРМАЦИИ ИЗ ТЕКСТОВ РУССКОЯЗЫЧНЫХ ОТЗЫВОВ О ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВАХ .....</b>	<b>105</b>
<b>А. Г. СБОЕВ, А. В. НАУМОВ, А. А. СЕЛИВАНОВ, Д. В. ГУДОВСКИХ НЕЙРОСЕТЕВОЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТОНАЛЬНОСТИ ТЕКСТА ПО ОТНОШЕНИЮ К ЗАДАННОЙ ИМЕНОВАННОЙ СУЩНОСТИ.....</b>	<b>107</b>
<b>А. Р. КАРИМОВ, В. К. БОГДАНОВ, В. В. ДМИТРИЕВА, О. А. НАГОВИЦЫНА, Е. А. АНАНЬЕВА НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ СЛАБОСТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПЛАЗМОПОДОБНЫХ СРЕД.....</b>	<b>109</b>
<b>С. Ф. ЛАВРОВА, Н. А. КУДРЯШОВ НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ КУРАМОТО-СИВАШИНСКОГО В ПЕРЕМЕННЫХ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ.....</b>	<b>111</b>
<b>А. В. ПОРУБОВ НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ В ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНОЙ РЕШЕТКЕ ГРАФЕНА.....</b>	<b>113</b>
<b>В. К. КОЗЛОВ, М. А. ЧМЫХОВ О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ НА ОСНОВЕ РЕШАТЕЛЯ OPENFOAM.....</b>	<b>115</b>
<b>А. В. КРЯНЕВ, Н. А. КУДРЯШОВ, Д. Е. СЛИВА ОПТИМИЗАЦИЯ ЗАТРАТ НА СИСТЕМУ ЗАЩИТЫ ИНФОРМАЦИИ ОТ УГРОЗ</b>	<b>117</b>
<b>Л. С. ЭСЕТОВА, Б. М. НУРЛАНОВА, А. А. АСЕТОВ РАСЧЕТ НА ИЗГИБ УПРУГО – ПЛАСТИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЫ, ЗАКРЕПЛЕННОЙ ШАРНИРОМ.....</b>	<b>119</b>
<b>Н. А. КУДРЯШОВ РАЦИОНАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, СВЯЗАННЫХ СО ВТОРЫМ УРАВНЕНИЕМ ПЕНЛЕВЕ .....</b>	<b>121</b>
<b>В. В. БОЧКАРЕВ, Б. Д. БРИЛЛИАНТОВ, А. В. КРЯНЕВ, Д. Т. ХАНБИКОВА СТРУКТУРА СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ</b>	

<b>ОПТИМАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ПРИ ВЫВОДЕ ИЗ ЭКСПЛУАТАЦИИ ОБЪЕКТОВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ .....</b>	<b>123</b>
<b>Н.А. КУДРЯШОВ, Д.В. САФОНОВА ТЕСТ ПЕНЛЕВЕ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ</b>	<b>125</b>
<b>К.В. КАН, Н.А. КУДРЯШОВ УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ ОБОБЩЕННОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НЕЛИНЕЙНОСТЬ 3-ЕЙ, 5-ОЙ И 7-ОЙ СТЕПЕНИ .....</b>	<b>127</b>
<b>Н.А. КУДРЯШОВ, С.С. ЯНКОВСКИЙ УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ ОДНОГО ИЗ ОБОБЩЕНИЙ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА .....</b>	<b>130</b>
<b>А.Д. ПОЛЯНИН, А.И. ЖУРОВ ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЯХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ .....</b>	<b>132</b>
<b>Т.И. САВЁЛОВА, Н.С. ТОЛМАЧЁВА ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ФРО И ПФ .....</b>	<b>134</b>
<b>И.В. ПОНОМАРЕВ, Г.В. ДОЛГОЛЕВА ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МИШЕНЕЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМАХ БЕЗУДАРНОГО СЖАТИЯ И СОСТАВА РАБОЧЕЙ ОБЛАСТИ .....</b>	<b>137</b>
<b>Р.В. МУРАТОВ, Н.А. КУДРЯШОВ, П.Н. РЯБОВ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛОС АДИАБАТИЧЕСКОГО СДВИГА НА ДВУМЕРНЫХ ЭЙЛЕРОВЫХ СЕТКАХ .....</b>	<b>139</b>
<b>Н.А. КУДРЯШОВ, А.С. САЛИН ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТЕПЛО ВЫДЕЛЯЮЩЕМ ЭЛЕМЕНТЕ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА .....</b>	<b>141</b>
<b>К.Е. ШИЛЬНИКОВ, М.Б. КОЧАНОВ ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ НЕЛИНЕЙНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ПОДВИЖНЫХ СЕТКАХ .....</b>	<b>143</b>
<b>Г.В.ДОЛГОЛЕВА ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ФОКЕРА-ПЛАНКА .....</b>	<b>145</b>

<b>К.В. БРУШЛИНСКИЙ, Е.В. СТЕПИН МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ РАВНОВЕСИЯ ПЛАЗМЫ, ОКРУЖАЮЩЕЙ ПРОВОДНИК С ТОКОМ .....</b>	<b>147</b>
<b>М.А.КОРОТКОВА, А.М.КАМИОНСКАЯ И Е.В. КОРОТКОВ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ МЕТОД КЛАССИФИКАЦИИ ПРОМОТОРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ИЗ ГЕНОМА <i>A.THALIANA</i> .....</b>	<b>149</b>
<b>Секция СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА, ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАНОСИСТЕМ .....</b>	<b>151</b>
<b>Б.М. АБДУРАХМАНОВ, М.М. АДИЛОВ, М.Ш. КУРБАНОВ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ НА ОСНОВЕ ГРАНУЛИРОВАННОГО КРЕМНИЯ .....</b>	<b>152</b>
<b>Г. АБДУРАХМОНОВ, Г. ВАХИДОВА, Д.А. ТАШМУХАМЕДОВА, М.Б. ЮСУПЖОНОВА, Б.Е. УМИРЗАКОВ ПРОБЛЕМЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВТОРИЧНЫХ ЭНЕРГОРЕСУРСОВ .....</b>	<b>154</b>
<b>Ю.В. АГРАФОНОВ, И.С. ПЕТРУШИН ОБОБЩЕНИЕ СИНГЛЕТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ СФЕР В КОНТАКТЕ С ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ.....</b>	<b>156</b>
<b>Е.С. АЗАРОВА, Г.М. МАКСИМОВА, В.А. БУРДОВ 1D НЕОДНОРОДНЫЕ НАНОКОЛЬЦА ИЗ ЦЕЛЕВЫХ ДИРАКОВСКИХ МАТЕРИАЛОВ: ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА И ПЕРСИСТЕНТНЫЕ ТОКИ .....</b>	<b>158</b>
<b>Л.Э. АЛИМОВ, А.В. АНУФРИЕВ, А.В. ГУРСКАЯ, В.И. ЧЕПУРНОВ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КАРБИДОКРЕМНИЕВОЙ ФАЗЫ 3C-SiC В РАЗЛИЧНЫХ РЕАЛИЗАЦИЯХ DFT.....</b>	<b>160</b>
<b>Д.В. АМАСЕВ, К.А. САВИН, П.А. ФОРШ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ P3NT:Si162</b>	
<b>О.Б. АНАНЬИН, Р.Ш. РАМАКОТИ, А.П. МЕЛЕХОВ, В.Г. СРЕДИН, В.В. КРАВЧЕНКО, И.А. ГЕРАСИМОВ, Г.С. БОГДАНОВ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО МЯГКОГО</b>	

<b>РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОЛУПРОВОДНИК CdHgTe</b> .....	164
<b>Н.С. АНИСИМОВ, В.И. ЧЕПУРНОВ, Г.В. ПУЗЫРНАЯ, М.В. ДОЛГОПОЛОВ БАРЬЕР ШОТКИ В ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ БЕТА-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ</b> .....	166
<b>И.В. АНИЩЕНКО, С.В. ПОКРОВСКИЙ, И.А. РУДНЕВ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ВТСП ЛЕНТАХ 2 ПОКОЛЕНИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА</b> .....	168
<b>Н.М. АРИСТОВА, С.В. ОНУФРИЕВ, А.И. САВВАТИМСКИЙ ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЖИДКОГО КАРБИДА ЦИРКОНИЯ <math>ZrC_x</math> ДО 5000 К</b> .....	170
<b>П.И. БЕЗОТОСНЫЙ, К.А. ДМИТРИЕВА, С.Ю. ГАВРИЛКИН, А.Н. ЛЫКОВ, А.Ю. ЦВЕТКОВ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ ПЛЕНОК</b> .....	172
<b>Д. Б. БУЙТКЕНОВ, Б. К. РАХАДИЛОВ, Д. ЕРБОЛАТУЛЫ ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДЕТОНАЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ ДО И ПОСЛЕ ОТЖИГА</b> .....	174
<b>А. С. БУРКАЦКИЙ, Ю. Б. КУДАСОВ, Д. А. МАСЛОВ, О. М. СУРДИН, В. Н. ПАВЛОВ МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ</b> .....	176
<b>Д.А. БУЧНЫЙ, В.С. ЛИТВИН, В.А. УЛЬЯНОВ, В.Г. СЫРОМЯТНИКОВ, А.А. СТОЛЯРОВ, Д.Н. ТРУНОВ, С.Н. АКСЕНОВ, В.Н. МАРИН, Р.А. САДЫКОВ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙАНИЯ НЕЙТРОНОВ НА УСТАНОВКЕ “ГОРИЗОНТ”</b> .....	178
<b>В.В. ВОЛКОВ, А.Е. КРЮКОВА, П.В. КОНАРЕВ ПОИСК РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРАМ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНЫХ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙАНИЯ ОТ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ</b> .....	180
<b>С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, М.Х. ГАДЖИЕВ, Д.К. ПАЛЧАЕВ, Ж.Х. МУРЛИЕВА, Г.Б. РАГИМХАНОВ, Н.А. ДЕМИРОВ МОРФОЛОГИЯ</b>	

<b>НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ УВСО ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПЛАЗМЕННЫМ ПОТОКОМ.....</b>	<b>182</b>
<b>Б.Р. ГАЙНАНОВ, О.В. ЧЕРНЫШЕВА, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ, А.П. МЕНУШЕНКОВ, В.В. ПОПОВ, Ф. Д'АКАПИТО, А. ПУРИ</b>	
<b>ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.....</b>	<b>184</b>
<b>П.Д. ГРИГОРЬЕВ, Р. РАМАЗАШВИЛИ, М.В. КАРЦОВНИК</b>	
<b>ЭФФЕКТИВНЫЙ g-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ, ИЗМЕРЯЕМЫЙ ПО МАГНИТНЫМ КВАНТОВЫМ ОСЦИЛЛЯЦИЯМ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ .....</b>	<b>185</b>
<b>М.Д. ГРИЦКЕВИЧ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, И.В. АНИЩЕНКО, В.Ю. ФОМИНСКИЙ, А.Ю. ГОЙХМАН</b>	
<b>ОСОБЕННОСТИ ИМПУЛЬСНОЙ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МИШЕНЕЙ MoS<sub>2</sub> И MoSe<sub>2</sub> И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОСАЖДАЕМЫХ ТВЕРДОСМАЗОЧНЫХ НАНОПОКРЫТИЙ....</b>	<b>188</b>
<b>Н.Н. ДЕГТЯРЕНКО, К.С. ГРИШАКОВ</b>	
<b>ОБ УСТОЙЧИВОСТИ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ АТОМАРНОГО ВОДОРОДА.....</b>	<b>190</b>
<b>П.Н. ДЕГТЯРЕНКО, А.С. МАНКЕВИЧ, А.В. МАРКЕЛОВ, А.А. МОЛОДЫК, С.В. САМОЙЛЕНКОВ</b>	
<b>СОВРЕМЕННОЕ РАЗВИТИЕ ПРОИЗВОДСТВА ВТСП ЛЕНТ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ В КОМПАНИИ С-ИННОВАЦИИ.....</b>	<b>192</b>
<b>К.А. ДМИТРИЕВА, П.И. БЕЗОТОСНЫЙ, О.Ю. ВИЛКОВ, А.Г. РЫБКИН, А.А. СЛОБОДЧИКОВ, Н.С. ПАВЛОВ, И.А. НЕКРАСОВ</b>	
<b>ИССЛЕДОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СВЕРХПРОВОДНИКА SnAs .....</b>	<b>194</b>
<b>И.В. ЗАГОРОДНЕВ, Д.А. РОДИОНОВ, А.А. ЗАБОЛОТНЫХ</b>	
<b>РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БОЛЬШИХ ПРОВОДЯЩИХ 2D ДИСКАХ .....</b>	<b>196</b>
<b>О.Б. ЗАЙНУЛЛИН, В.А. КОМОРНИКОВ, И.С. ТИМАКОВ</b>	
<b>МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ВОДОРАСТВОРИМЫХ СОЛЕЙ КОБАЛЬТА И НИКЕЛЯ.....</b>	<b>198</b>

<b>Б.В. ИВАНОВ, Т.А. АНФИМОВА СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДИК ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ИССЛЕДОВАНИЮ ГИДРИДООБРАЗУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ</b>	<b>200</b>
<b>М.В. ИЛЬИНА, О.И. ИЛЬИН, А.В. ГУРЬЯНОВ, Н.Н. РУДЫК ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РОСТА НА АДГЕЗИЮ ОРИЕНТИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК.....</b>	<b>202</b>
<b>З.А. ИСАХАНОВ, Р.М. ЁРКУЛОВ, Ш.А. ТУЛЯГАНОВА ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР СОЗДАНЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ СВОБОДНОЙ ПЛЕНОЧНОЙ СИСТЕМЫ Si/Cu .....</b>	<b>204</b>
<b>Н. КАНТАЙ, Б.К. РАХАДИЛОВ, Д.Н. КАКИМЖАНОВ ПОЛУЧЕНИЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫМ МЕТОДОМ .....</b>	<b>206</b>
<b>П.Ф. КАРЦЕВ, Д.С. КОРЧАГИН ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВИХРЕВОГО ПИННИНГА В РАМКАХ ТЕОРИИ ГИНЗБУРГА-ЛАНДАУ .....</b>	<b>208</b>
<b>П.Ф. КАРЦЕВ, И.О. КУЗНЕЦОВ УЧЕТ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КИНЕТИКИ РЕЛАКСАЦИИ СВЕРХПРОВОДНИКА ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ УЛЬТРАКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ.....</b>	<b>210</b>
<b>О.В. КАШУРНИКОВА АНАЛИЗ EXAFS-СПЕКТРОВ НАНОПОРОШКОВ <math>Gd_2Hf_2O_7</math> МЕТОДОМ ОБРАТНОГО МОНТЕ-КАРЛО .....</b>	<b>212</b>
<b>Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ, П. ЛОГИНОВ, Е.А. ЛЕВАШОВ IN-SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПОКРЫТИЯ Zr-Mo-Si-B ПРИ НАГРЕВЕ ДО 1000°C В КОЛОННЕ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО МИКРОСКОПА .....</b>	<b>214</b>
<b>Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ, А.Д. СЫТЧЕНКО, Е.А. ЛЕВАШОВ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ Ta-Zr-Si-B-C-N, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ МАГНЕТРОННОМ РАСПЫЛЕНИИ МИШЕНИ TaZrSiB В СРЕДЕ Ar, N<sub>2</sub> И C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> .....</b>	<b>216</b>
<b>А.Н. КИРЯКОВ, А.Ф. ЗАЦЕПИН, Т.В. ДЬЯЧКОВА, А.П. ТЮТЮННИК, Ю.Г. ЗАЙНУЛИН, А.В. ФОКИН ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ</b>	

<b>ПРОЗРАЧНЫХ НАНОКЕРАМИК <math>MgAl_2O_4</math> ЛЕГИРОВАННЫХ МАРГАНЦЕМ.....</b>	<b>218</b>
<b>Ю.В. КИСЛИНСКИЙ, К.И. КОНСТАНТИНЯН, А.М. ПЕТРЖИК, А.В. ЗАЙЦЕВ, А.В. ШАДРИН, Г.А. ОВСЯННИКОВ, G. CRISTIANI, G. LOGVENOV ДЖОЗЕФСОНОВСКИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С ПРОСЛОЙКОЙ ИЗ МАТЕРИАЛА С СИЛЬНЫМ СПИНОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ.....</b>	<b>220</b>
<b>В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, Т.А. ЗУБОВА ЭЛЕМЕНТЫ ГАЗОВОЙ НАНОСЕНСОРИКИ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ.....</b>	<b>222</b>
<b>В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, И.Н. КОЦ, О.А. АГЕЕВ НАНОРАЗМЕРНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ ЭМИССИОННЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ SiC.....</b>	<b>224</b>
<b>В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, В.В. ПРОКОФЬЕВА, Ю.В. МОРОЗОВА, О.А. АГЕЕВ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ АТОМНО-СЛОЕВОГО ТРАВЛЕНИЯ И ФОКУСИРОВАННЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ .....</b>	<b>226</b>
<b>В.А. КОМОРНИКОВ, И.С. ТИМАКОВ, О.Б. ЗАЙНУЛЛИН, В.В. ГРЕБЕНЕВ, И.П. МАКАРОВА, Е.В. СЕЛЕЗНЕВА ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ВОДНО - СОЛЕВЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОТОНООБМЕННЫХ КОМПОЗИТНЫХ МЕМБРАН .....</b>	<b>228</b>
<b>П.В. КОНАРЕВ МЕТОДЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ В БЕЛКОВЫХ И ЛИПИДНЫХ СМЕСЯХ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ .....</b>	<b>230</b>
<b>А.Е. КРЮКОВА, П.В. КОНАРЕВ, В.В. ВОЛКОВ СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕШЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ РЯДОМ ИТЕРАТИВНЫХ АЛГОРИТМОВ ПРИ АНАЛИЗЕ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ОТ РАСТВОРА КРЕМНЕЗОЛЯ .....</b>	<b>232</b>
<b>М.Ш. КУРБАНОВ, Б.М. АБДУРАХМАНОВ, У.М. НУРАЛИЕВ, С.А. ТУЛАГАНОВ ВЫПЛАВКА ТЕХНИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ И</b>	

<b>ФЕРРОСИЛИЦИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАЗООБРАЗНОГО УГЛЕРОДИСТОГО ВОССТАНОВИТЕЛЯ.....</b>	<b>234</b>
М.Ш. КУРБАНОВ, И.Д. ЯДГАРОВ, В.Г. СТЕЛЬМАХ, А.Н. УЛУКМУРАДОВ, У.Б. УЛЖАЕВ <b>ПРОЦЕССЫ АДСОРБЦИИ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> ГРАФЕНОМ И ЕГО КРАЕМ .....</b>	<b>236</b>
А.Е. ЛУКЪЯНОВ, В.Д. НЕВЕРОВ, А.В. КРАСАВИН, А.П. МЕНУШЕНКОВ <b>ОЦЕНКА КОНСТАНТЫ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СОЕДИНЕНИЯХ Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>VO<sub>3</sub> .....</b>	<b>238</b>
И.В. МАЛИКОВ, В.А. БЕРЕЗИН, Л.А. ФОМИН, Ю.А. ПЕРЕВОЗЧИКОВА, Н.С. БАННИКОВА, Е.И. ПАТРАКОВ, Л.И. НАУМОВА, А.А. СЕМЯННИКОВА, М.А. МИЛЯЕВ, В.В. МАРЧЕНКОВ <b>ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Co<sub>2</sub>FeAl, Co<sub>2</sub>CrSi и Co<sub>2</sub>NiSi ДЛЯ СПИН-ИНЖЕКЦИОННОЙ ТГЦ-ФОТОНИКИ .....</b>	<b>240</b>
Б.П. МИХАЙЛОВ, А.Б. МИХАЙЛОВА, В.Я. НИКУЛИН, И.В. БОРОВИЦКАЯ, П.В.СИЛИН <b>ВЛИЯНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА MgB<sub>2</sub> – КЕРНА В ОБОЛОЧКАХ ИЗ МЕДИ И АЛЮМИНИЯ .....</b>	<b>242</b>
Т.И. МОГИЛЮК, П.Д. ГРИГОРЬЕВ <b>О ВЛИЯНИИ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОЙ ЧАСТИ СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ НА МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ И СОПРОТИВЛЕНИЯ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ .....</b>	<b>244</b>
А.Ю. МОЛОКОВА, В.В. ПОПОВ, А.П.МЕНУШЕНКОВ, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ, Е.В. ХРАМОВ, Р.Д. СВЕТОГОРОВ, В.Ю. МУРЗИН, А.Б. КАЛИНКО, В.В. КУРИЛКИН <b>ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТИТАНАТОВ Eu<sup>2+</sup><sub>(1-x)</sub>Eu<sup>3+</sup><sub>x</sub>TiO<sub>(3+x/2)</sub> .....</b>	<b>246</b>
А.Н. МОРОЗ, А.Н. МАКСИМОВА, В.А. КАШУРНИКОВ, И.А. РУДНЕВ <b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИХРЕВОЙ ДИНАМИКИ ВТСП В ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ .....</b>	<b>248</b>
Р.А. МУМИНОВ, С.А. РАДЖАПОВ, Б.С.РАДЖАПОВ, В.И. ЧЕПУРНОВ, А.В. ГУРСКАЯ, М.В. ДОЛГОПОЛОВ <b>КРЕМНИЕВЫЕ</b>	

<b>ДЕТЕКТОРЫ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С НЕБОЛЬШИМИ УТЕЧКАМИ, ИЗМЕРЕНИЕ БЕТА-СПЕКТРОВ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ .....</b>	<b>250</b>
<b>Ж.Х. МУРЛИЕВА, Д.К. ПАЛЧАЕВ, М.Э. ИСХАКОВ, Р.М. ЭМИРОВ, С.Х.ГАДЖИМАГОМЕДОВ ФОРМИРОВАНИЕ И РЕЛАКСАЦИЯ ЗАРЯДОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В <math>Ti_{67}Al_{33}</math> .....</b>	<b>252</b>
<b>В.Д. НЕВЕРОВ, А.Е. ЛУКЪЯНОВ, А.В. КРАСАВИН ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯРОННЫХ ЭФФЕКТОВ В ФОСФОРЕНЕ .....</b>	<b>254</b>
<b>Н.Н. НИЁЗБЕКОВ, И.В. САЙКОВ, А.Ю. МАЛАХОВ, И.В. ДЕНИСОВ ПОЛУЧЕНИЕ СВАРКОЙ ВЗРЫВОМ ДВУХСЛОЙНЫХ ЛИСТОВ С ПЛАКИРУЮЩИМ СЛОЕМ ИЗ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМГ6 .....</b>	<b>256</b>
<b>Д.К. ПАЛЧАЕВ, Ж.Х. МУРЛИЕВА, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, М.Х. РАБАДАНОВ СВЯЗЬ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ОБЪЕМА И ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ДЛЯ КЕРАМИК НА ОСНОВЕ <math>Y_2O_3</math> .....</b>	<b>258</b>
<b>В.В. ПОПОВ, А.П. МЕНУШЕНКОВ, А.Ю. МОЛОКОВА, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ, Е.Б. МАРКОВА, А.Г. ЧЕРЕДНИЧЕНКО, Н.А. ЦАРЕНКО, И.В. ЩЕТИНИН ВЛИЯНИЕ ВИДА РЗЭ НА СТРУКТУРУ И КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ТИТАНАТОВ <math>Ln_2Ti_2O_7</math> ...</b>	<b>260</b>
<b>В.В. ПОПОВ, А.П.МЕНУШЕНКОВ, А.Ю. МОЛОКОВА, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ, Р.Д. СВЕТОГОРОВ, И.В. ЩЕТИНИН, Н.А. ЦАРЕНКО, К.В. ПОНКРАТОВ ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРУ ПОРОШКОВ ВОЛЬФРАМАТОВ РЗЭ .....</b>	<b>262</b>
<b>В.В. ПОПОВ, А.П. МЕНУШЕНКОВ, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ, Б.Р. ГАЙНАНОВ, Г.Р.КАСТРО, В.Ю. МУРЗИН, А.Б. КАЛИНКО, И.В.ЩЕТИНИН ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ <math>(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7</math> (<math>0 &lt; x &lt; 1, 0 &lt; y &lt; 1</math>)</b>	<b>264</b>
<b>А.Р. ПРИЩЕПА, А.В. САДАКОВ, С.Ю. ГАВРИЛКИН ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩЕГО СВЕРХПРОВОДНИКА <math>KFe_2As_2</math> В МАГНИТНОМ ПОЛЕ .....</b>	<b>266</b>

<b>А.Э. РАБАДАНОВА, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, Д.К. ПАЛЧАЕВ, Ш.П. ФАРАДЖЕВ, П.М. САЙПУЛАЕВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК <math>Bi_{1-x}La_xFeO_3</math>, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ.....</b>	<b>268</b>
<b>Р.И. РОМАНОВ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, О.В. РУБИНКОВСКАЯ, В.Н. НЕВОЛИН, В.Ю. ФОМИНСКИЙ МИКРО-, НАНО- И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПЛЕНОК <math>WSe_2</math> ДЛЯ ФОТОКАТОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ.....</b>	<b>270</b>
<b>О.В. РУБИНКОВСКАЯ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, Р.И. РОМАНОВ, В.Ю. ФОМИНСКИЙ ИМПУЛЬСНОЕ ЛАЗЕРНОЕ ОСАЖДЕНИЕ НАНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ СЛОЕВ <math>Mo-S-P</math> ИЗ КОМПОЗИТНОЙ МИШЕНИ <math>MoS_2/P</math> И ИХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРИ РАСЩЕПЛЕНИИ ВОДЫ.....</b>	<b>272</b>
<b>А.И. САВВАТИМСКИЙ КРИВАЯ ПЛАВЛЕНИЯ ГРАФИТА (ОБ ОШИБОЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЯХ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ) .....</b>	<b>274</b>
<b>А.И. САВВАТИМСКИЙ, С.В. ОНУФРИЕВ, Г.Е. ВАЛЬЯНО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ КАРБИДОВ <math>ZrC</math>, <math>HfC</math>, <math>TaHfC</math> В ОБЛАСТИ ПЛАВЛЕНИЯ ПРИ БЫСТРОМ (МИКРОСЕКУНДНОМ) НАГРЕВЕ ТОКОМ.....</b>	<b>276</b>
<b>А.И. САВВАТИМСКИЙ, С.В. ОНУФРИЕВ, Г.Е. ВАЛЬЯНО, С.А. МУБОЯДЖАН ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КАРБИДА ГАФНИЯ (<math>HfC</math>) В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 2000 – 5000 К.....</b>	<b>278</b>
<b>С.В. САВУШКИНА, Л.Е. АГУРЕЕВ, А.А. АШМАРИН ИССЛЕДОВАНИЕ СПЛАВА <math>Al-Zr-Cr</math>, ПОЛУЧЕННОГО ИСКРОВОМ ПЛАЗМЕННЫМ СПЕКАНИЕМ .....</b>	<b>280</b>
<b>П.С. САВЧЕНКОВ, П.А. АЛЕКСЕЕВ ОСОБЕННОСТИ ПРОМЕЖУТОЧНО-ВАЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ <math>Eu</math> В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ 1-2-2: <math>EuCu_2(Si,Ge)_2</math>.....</b>	<b>282</b>
<b>Г.В.СИВЦОВА, С.В.САВУШКИНА, А.А. АШМАРИН ИССЛЕДОВАНИЕ ДИОКСИД ЦИРКОНИЕВЫХ ПОКРЫТИЙ, ФОРМИРУЕМЫХ МИКРОДУГОВЫМ ОКСИДИРОВАНИЕМ С ДОБАВЛЕНИЕМ В ЭЛЕКТРОЛИТ НАНОПОРОШКА ОКСИДА ИТТРИЯ.....</b>	<b>283</b>

<b>Н.Н. СИТНИКОВ, И.А. ХАБИБУЛЛИНА, А.В. ШЕЛЯКОВ, Г.В. СИВЦОВА БЫСТРОЗАКАЛЁННЫЕ СЛОИСТЫЕ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЛЕНТЫ ИЗ СПЛАВА <math>Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}</math> С ОБРАТИМЫМ ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ .....</b>	<b>285</b>
<b>Н.И. СНЕГИРЁВ, И. С. ЛЮБУТИН, А.Г. КУЛИКОВ, Ю.А. МОГИЛЕНЕЦ, К.А. СЕЛЕЗНЕВА, С.В. ЯГУПОВ, М.Б. СТРУГАЦКИЙ ВЛИЯНИЕ ИЗОМОРФНОЙ ПРИМЕСИ НА СТРУКТУРНУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ТРИГОНАЛЬНЫХ БОРАТОВ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОТЖИГЕ .....</b>	<b>287</b>
<b>Ж.Ш. СОДИКЖАНОВ, Б.Е. УМИРЗАКОВ ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ И ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ <math>CdS</math> ИМПЛАНТАЦИЕЙ ИОНАМИ <math>Ba^{+}</math> .....</b>	<b>289</b>
<b>А. СОЛОВЬЕВ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, Р.И. РОМАНОВ, В.Ю. ФОМИНСКИЙ, В.Н. НЕВОЛИН ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМОВ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ ПЛЕНОК <math>WO_3</math> ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФОТОЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ ...</b>	<b>291</b>
<b>К.Л. СТАНКЕВИЧ, Г.А. ОВСЯННИКОВ, В.В. ДЕМИДОВ, Т.А. ШАЙХУЛОВ СПИНОВЫЙ ТОК НА ГРАНИЦЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МАНГАНИТ/ИРИДАТ, МАТЕРИАЛ С СИЛЬНОМ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ .....</b>	<b>293</b>
<b>А.С. СТАРИКОВСКИЙ, М.А. ОСИПОВ, И.А. РУДНЕВ ЛЕВИТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАМАГНИЧЕННЫХ СТОПОК ВТСП ЛЕНТ .....</b>	<b>295</b>
<b>С.В. СТРИЖОВА, И.А. РУДНЕВ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СИСТЕМЫ МАЛОГО СФЕРИЧЕСКОГО ТОКАМАКА НИЯУ МИФИ .....</b>	<b>297</b>
<b>А.Д. СЫТЧЕНКО, Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ ВЛИЯНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОДЛОЖКИ НА ПОВЕДЕНИЕ ПОКРЫТИЙ <math>Zr-Si-B</math> ПРИ ТРЕНИИ СКОЛЬЖЕНИЯ И ВОЗДЕЙСТВИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ УДАРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗОК .....</b>	<b>299</b>

<b>А.Д. СЫТЧЕНКО, Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ MoSiB, MoHfSiB, MoZrSiB</b> .....	301
<b>А.В. ФРОЛОВ, А.П. ОРЛОВ, А.А. СИНЧЕНКО, П. МОНСО КОЛЛЕКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ, ИНИЦИИРОВАННЫЙ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ</b> 303	
<b>А.В. ФРОЛОВ, А. ОЛЕЙНИЧАК, П.А. ЗЛИЩЕВА, Н.А. НЕБОГАТИКОВА, И.В. АНТОНОВА, В.А. СКУРАТОВ ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА И ОКСИДА ГРАФЕНА, ОБЛУЧЕННОГО ТЯЖЕЛЫМИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОНАМИ</b> .....	305
<b>Л.В. ФУРОВ О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПЫТАНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ТЕПЛОВОЙ УДАР</b> ..	307
<b>В.И. ЧЕПУРНОВ, А.В. ГУРСКАЯ, О.В. КУЗНЕЦОВ, М.В. ДОЛГОПОЛОВ ОПТИМИЗАЦИЯ БЕТА-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ C-14 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО И GEANT4</b> . 309	
<b>В.И. ЧЕПУРНОВ, Г.В. ПУЗЫРНАЯ, Д.А. ЕЛХИМОВ, А.В. ГУРСКАЯ, А.А. КУЗНЕЦОВА, О.В. КУЗНЕЦОВ АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ БЕТА-РАСПАДА ВПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ SiC/Si</b> .....	311
<b>М.Б. ШАВЕЛКИНА, Б.В. КЛЕЙМЕНОВ, Г.Е. ВАЛЬЯНО, Р.Х. АМИРОВ ГРАФЕН ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГЕТИКИ: ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ КОМПОЗИТА N-ГРАФЕН - ПОЛИМЕР</b> .....	313
<b>Г.Ш. ШАПИЕВ, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, Д.К. ПАЛЧАЕВ, М.Х. РАБАДАНОВ, Ж.Х. МУРЛИЕВА, П.М. САЙПУЛАЕВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ <math>Y(Fe_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}</math></b> .....	315
<b>А.В. ШЕЛЯКОВ, О.Н. СЕВРЮКОВ, Н.Н. СИТНИКОВ, К.А. БОРОДАКО, И.А. ХАБИБУЛЛИНА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ <math>TiNiCu</math> С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ МЕДИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ МЕТОДОМ ПЛАНАРНОГО ЛИТЬЯ</b> .....	317
<b>И.В. ЩЕТИНИН, Р.В. СУНДЕЕВ, А.В. КАМЫНИ, В.Н. ВЕРБЕЦКИЙ, В.П. МЕНУШЕНКОВ, А.Г. САВЧЕНКО ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ</b>	

<b>В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЯ <math>Sm_2Fe_{17}N_x</math>, ПОЛУЧЕННЫХ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ ПРИ РАЗНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ.....</b>	<b>319</b>
<b>Д.С. ЯШКИН, П.А. БРАЖНИК, И.В. КУЛИКОВ, А.А. КАРТАМЫШЕВ ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТОКОНЕСУЩУЮ СПОСОБНОСТЬ ЗАХВАТЫВАЮЩИХ ВИТКОВ .....</b>	<b>321</b>
<b>Секция СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ.....</b>	<b>323</b>
<b>Н.Н. АРСЕНЬЕВ, А.П. СЕВЕРЮХИН СВОЙСТВА НИЗКОЛЕЖАЩИХ <math>2^+</math> СОСТОЯНИЙ В <math>^{132,136}Te</math>.....</b>	<b>324</b>
<b>И.Н. БОРЗОВ САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД К БЕТА-РАСПАДУ НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ ЯДЕР .....</b>	<b>326</b>
<b>Р.Р. ГАЛЛЯМОВ, А.М. ФЕДОТОВ ВЫЧИСЛЕНИЕ АМПЛИТУД КЭД ПРОЦЕССОВ В ПОЛЕ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ ПО ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ .....</b>	<b>328</b>
<b>Д.А. ГОЖЕВ, С.Г. БОЧКАРЕВ, А.В. БРАНТОВ, В.Ю. БЫЧЕНКОВ СТОХАСТИЧЕСКОЕ УСКОРЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МОЩНОГО ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА С МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ МИШЕНЯМИ.....</b>	<b>330</b>
<b>А.П. СЕВЕРЮХИН ДВУХФОНОННАЯ СТРУКТУРА НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ АТОМНЫХ ЯДЕР .....</b>	<b>332</b>
<b>М.Л. ГОРЕЛИК, Г.В. КОЛОМИЙЦЕВ, М.Г. УРИН ЧАСТИЧНО-ДЫРОЧНАЯ ДИСПЕРСИОННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ НЕМАГИЧЕСКИ ЯДЕР. ПРИЛОЖЕНИЕ К ОПИСАНИЮ <math>0^+</math> ГИГАНТСКИХ РЕЗОНАНСОВ.....</b>	<b>334</b>
<b>К.Е. ГОРОДНИЧЕВ, С.И. ГЛАЗЫРИН, П.П. ЗАХАРОВ, С.Е. КУРАТОВ ВЛИЯНИЕ ШЕРОХОВАТОСТИ НА СЖАТИЕ ГАЗА В МИШЕНЯХ ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА.....</b>	<b>336</b>
<b>С.Е. КУРАТОВ, С.И. БЛИННИКОВ, С.Ю. ИГАШОВ, Д.С ШИДЛОВСКИЙ ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ РАСЧЕТА ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КОНЕЧНОЙ СИСТЕМЕ. ....</b>	<b>338</b>

<b>А.М.ГРУДИНИНА, ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПНОГО МАГНИТОЭКСИТОНА .....</b>	<b>Н.С.ВОРОНОВА, ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ .....</b>	<b>Ю.Е.ЛОЗОВИК, СОСТОЯНИЯ .....</b>	<b>340</b>
<b>К.С. КРЫЛОВ, В.Д. МУР ДРОБНОЕ КВАНТОВАНИЕ ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА В ЗАДАЧАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ .....</b>			<b>342</b>
<b>П.Д. ЛУКЪЯНОВ, Д.Н. ВОСКРЕСЕНСКИЙ, Е.Э КОЛОМЕЙЦЕВ САМОСОГЛАСОВАННЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ АДРОННОГО ГАЗА МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ .....</b>			<b>344</b>
<b>Е.А. ЦЫГАНКОВ, Д.С. ЧУЧЕЛОВ, С.А. ЗИБРОВ, М.И. ВАСЬКОВСКАЯ, В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ, С.В. ПЕТРОПАВЛОВСКИЙ, В.П. ЯКОВЛЕВ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА СВЕТОВОЙ СДВИГ В УСЛОВИЯХ КПП РЕЗОНАНСА.....</b>			<b>346</b>
<b>Т.В. ЛИСЕЙКИНА, С.В. ПОПРУЖЕНКО НЕИЗЛУЧАЮЩИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ .....</b>			<b>348</b>
<b>М.А. РАКИТИНА, С.И. ГЛАЗЫРИН, А.В. БРАНТОВ, В.Ю. БЫЧЕНКОВ ПОРОГ ИОННО-ЗВУКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И АНОМАЛЬНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ.....</b>			<b>350</b>
<b>Е.С. СОЗИНОВ, А.М. ФЕДОТОВ ФОРМАЛИЗМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО МИРОВЫМ ЛИНИЯМ В СКАЛЯРНОЙ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ .....</b>			<b>352</b>
<b>Д. БЛЭКМЭН, Р. НЮТЕР, Ф. КОРНЕЕВ, В. ТИХОНЧУК ПЛАЗМЕННЫЕ ВОЛНЫ С УГЛОВЫМ ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ.....</b>			<b>355</b>
<b>С.А. СУББОТИН, Н.С. ВОРОНОВА, И.Л. КУРБАКОВ, Ю.Е. ЛОЗОВИК СТАТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ ЭКСИТОНОВОГО БОЗЕ-ГАЗА С УТЕЧКОЙ .....</b>			<b>357</b>
<b>Б.А. ТУЛУПОВ, М.Л. ГОРЕЛИК, Ш. ШЛОМО, М.Г. УРИН СВОЙСТВА ИЗОСКАЛЯРНЫХ ГИГАНТСКИХ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ РЕЗОНАНСОВ В СРЕДНЕ-ТЯЖЕЛЫХ МАГИЧЕСКИХ ЯДРАХ: ПОЛУМИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ.....</b>			<b>359</b>
<b>С.С. САУТБЕКОВ, М.И. ПШИКОВ, А.Г. АСЫЛБЕКОВА ИЗЛУЧЕНИЕ РАВНОУСКОРЕННО ДВИЖУЩЕЙСЯ ЧАСТИЦЫ .....</b>			<b>361</b>

Е.Е. ГОРОДНИЧЕВ, Д.Б. РОГОЗКИН **КОГЕРЕНТНОЕ ОБРАТНОЕ РАССЕЙЯНИЕ ОТ АНСАМБЛЯ МИ-ЧАСТИЦ, ПОМЕЩЕННОГО В СРЕДУ С МАГНИТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ** ..... 364

**Секция ФИЗИКА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ ..... 367**

Э.К. АНДЕРЖАНОВ, С.П. МЕДВЕДЕВ, А.М. ТЕРЕЗА, С.В. ХОМИК, Б.Д. ХРИСТОФОРОВ **УДАРНАЯ ВОЛНА И ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ВЗРЫВЕ ЗАРЯДА КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА В ТРУБЕ С КСЕНОНОМ** ..... 368

А.С. АНТРОПОВ, В.В. СТЕГАЙЛОВ **ДИФФУЗИЯ НАНОПУЗЫРЕЙ В ОЦК-УРАНЕ: ТЕОРИЯ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ** ..... 370

Ю.Б. БАЗАРОВ, М.Ю. БАЗАРОВ, В.А. БОРИСЁНОК, В.А. БРАГУНЕЦ, М.А. КАРПОВ, Д.А. ПРОНИН, В.Г. СИМАКОВ, Е.В. ХАЛДЕЕВ, Е.Е. ШЕСТАКОВ **РЕЗУЛЬТАТЫ РЕГИСТРАЦИИ СВЕТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ В УДАРНО НАГРУЖЕННОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ КВАРЦА** ..... 372

Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, С.А. ГУБИН, Ж.А. АМИР **ЛИЯНИЕ ВИДА ПОТЕНЦИАЛА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ГЕЛИЯ** ..... 374

Ю.А. БОГДАНОВА, С.В. ГОРКУНОВ, С.А. КОЗЛОВА, В.А. ШАРГАТОВ **ЭВОЛЮЦИЯ ФРОНТА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С ИЗМЕНЯЮЩИМСЯ КАПИЛЛЯРНЫМ ДАВЛЕНИЕМ** ..... 376

А. С. БУРКАЦКИЙ, Ю. Б. КУДАСОВ, Д. А. МАСЛОВ, О. М. СУРДИН, В. Н. ПАВЛОВ **МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ** ..... 378

Д.А. ВАСИЛЬЕВ, И.О. ШАМШИН, В.С. АКСЁНОВ, Н.М. КУЗНЕЦОВ, С.М. ФРОЛОВ, П.А. СТОРОЖЕНКО **САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ МИКРОКАПЕЛЬ ПГ-2**..... 380

П.А. ВЛАСОВ, В.Н. СМИРНОВ, О.Б. РЯБИКОВ, Д.И. МИХАЙЛОВ, В.А. ПОЛЯНСКИЙ, И.Л. ПАНКРАТЬЕВА **ХИМИЧЕСКАЯ ИОНИЗАЦИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ УГЛЕВОДОРОДОВ В**

<b>ОТРАЖЕННЫХ УДАРНЫХ ВОЛНАХ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ И КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.....</b>	<b>382</b>
<b>Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, В.А. ВЫСОЦКИЙ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ АЛЮМИНИЯ В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ</b>	<b>384</b>
<b>М.А. ГОЛЕНИЩЕВ, М.Е. СТЕПАНОВ, А.В. КАРАБУЛИН, В.И. МАТЮШЕНКО ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ НИКЕЛЕВЫХ НАНОПРОВОЛОК И НАНОШАРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ.....</b>	<b>386</b>
<b>С.В. ГОРКУНОВ ЗАТУХАНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В КАНАЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ПРЕПЯТСТВИЯМИ.....</b>	<b>388</b>
<b>С.В. НЕСКОРОМНЫЙ, В.Г. ВИНОГРАДОВ, С.О. АГЕЕВ, Е.Л. СТРИЖАКОВ, Е.Г. ГРИГОРЬЕВ ВЫСОКОВОЛЬТНАЯ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНАЯ КОНСОЛИДАЦИЯ КАРБИДА ГАФНИЯ.....</b>	<b>390</b>
<b>Л.И. ГРИШИН, А.Ю. ДОЛГОБОРОДОВ, В.Г. КИРИЛЕНКО, М.А. БРАЖНИКОВ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ И ГОРЕНИЯ НАНОТЕРМИТОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ.....</b>	<b>392</b>
<b>С.П. ЗОТКИН, А.А. СЕЛЕЗЕНЕВ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУГАСНОГО ДЕЙСТВИЯ ЗАРЯДОВ В МОДЕЛЬНЫХ ОПЫТАХ .....</b>	<b>394</b>
<b>Вас.С. ИВАНОВ, Р.Р. ТУХВАТУЛЛИНА, В.С. ИВАНОВ, С.М. ФРОЛОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В КОРОБКЕ ПЕРЕДАЧ МЕТОДОМ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ.....</b>	<b>396</b>
<b>А.В. ИВЧЕНКО ТЕРМОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДНЫХ СИСТЕМ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРЯДА С НЕПОДВИЖНЫМ И ДВИЖУЩИМСЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ БАРЬЕРОМ.....</b>	<b>398</b>

<b>М.А. КАДАТСКИЙ, К.В. ХИЩЕНКО КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ УДАРНЫХ АДИАБАТ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ МЕТАЛЛОВ.....</b>	<b>401</b>
<b>М.В. КАЗАЧЕНКО, И.О. ШАМШИН, В.С. АКСЁНОВ, С.М. ФРОЛОВ ОЦЕНКА ДЕТОНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА ПОЛИЭТИЛЕНА И ПОЛИПРОПИЛЕНА.....</b>	<b>403</b>
<b>Р.И.КАНЫГИН, И.И. КАНЫГИН, Е.Е. МЕШКОВ, И.А. НОВИКОВА ВИЗУАЛИЗАЦИЯ СЛОЖНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МАРКЕРОВ .....</b>	<b>406</b>
<b>А.Д. КИВЕРИН, И.С. ЯКОВЕНКО, Б.В. КИЧАТОВ, А.М. КОРШУНОВ ЭФФЕКТ КУМУЛЯЦИИ В ПЕНАХ И МЕХАНИЗМ РАЗВИТИЯ ДЕТОНАЦИИ .....</b>	<b>408</b>
<b>С.А. КОЗЛОВА, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ БЕНЗОЛА МЕТОДАМИ РЕАКЦИОННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ .....</b>	<b>410</b>
<b>Н.Д. КОНДРАТЮК, В.В. ПИСАРЕВ ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ СМАЗОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ...</b>	<b>412</b>
<b>С.Н. КОПЫЛОВ, П.С. КОПЫЛОВ, И.П. ЕЛТЫШЕВ ИНГИБИРОВАНИЕ ВЗРЫВНОГО РАСПАДА АЦЕТИЛЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ.....</b>	<b>414</b>
<b>А.В. КУДИНОВ, С.А. ГУБИН, Ю.А. БОГДАНОВА, СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ МЕТАНА .....</b>	<b>416</b>
<b>А.В. КУДИНОВ, С.А. ГУБИН, Ю.А. БОГДАНОВА КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРНОГО УГЛЕРОДА ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ РАЗЛОЖЕНИИ МЕТАНА... </b>	<b>418</b>
<b>В.В. ЛАВРОВ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА В УСЛОВИЯХ ДЕТОНАЦИИ ВВ ГРУППЫ II.....</b>	<b>420</b>
<b>Л.И. ЛИПЕНКОВА, Д.В. МИЛЬЧЕНКО, А.И. ПЯТОЙКИНА ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ТОНКОСЛОЙНЫХ ЗАРЯДОВ С МОДИФИЦИРУЮЩИМИ ДОБАВКАМИ .....</b>	<b>422</b>

Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, У.Д. ВАГИНА <b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ГЕЛИЯ И ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА</b> .....	424
З.И. МАМЕДОВ, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА <b>ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕЛИЯ ВО ФЛЮИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ</b> .....	426
З.И. МАМЕДОВ, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА <b>ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДА ВО ФЛЮИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ</b> .....	428
С.П. МЕДВЕДЕВ, А.Н. ИВАНЦОВ, С.В. ХОМИК, М.В. СИЛЬНИКОВ, А.И. МИХАЙЛИН, Э.К. АНДЕРЖАНОВ, А.М. ТЕРЕЗА <b>МОДЕЛИРОВАНИЕ СФЕРИЧЕСКИХ УДАРНЫХ ВОЛН ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЗРЫВА НА КОНИЧЕСКОЙ УДАРНОЙ ТРУБЕ</b> .....	430
Г.Э. НОРМАН <b>КЛАССИЧЕСКОЕ И КВАНТОВОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ</b> .....	432
Г.М. ОСТРОУМОВА, Н.Д. ОРЕХОВ, В.В. СТЕГАЙЛОВ <b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НУКЛЕАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИОННЫХ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ</b> .....	434
Д.С. ПЛАКСИНА <b>ПАТЕНТНАЯ АНАЛИТИКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТУШЕНИЯ РЕЗЕРВУАРОВ</b> .....	436
В.А. ПУШКОВ, Ю.В. БАТЬКОВ <b>ДИНАМИЧЕСКОЕ РАСТЯЖЕНИЕ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМЦ НА УСТАНОВКЕ СОСТАВНОГО СТЕРЖНЯ ГОПКИНСОНА</b> .....	438
И.А. САДЫКОВ, С.М. ФРОЛОВ, К.А. АВДЕЕВ, В.С. АКСЕНОВ, И.О. ШАМШИН <b>БУКСИРУЕМАЯ МОДЕЛЬ СУДНА С ГОРЕНИЕМ ТОПЛИВНОЙ СМЕСИ В ДНИЩЕВОЙ КАВЕРНЕ</b> .....	440
Г.Э. НОРМАН, И.М. САИТОВ <b>ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВОДОРОД ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ</b> .....	442
Н.Н. СЕРЕДКИН, С.А. КОНЮХОВ <b>ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТУГОПЛАВКИХ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ</b>	

<b>(КАРБИДОВ И НИТРИДОВ МЕТАЛЛОВ IV ГРУППЫ) В ОБЛАСТИ ИХ ПЛАВЛЕНИЯ И ЖИДКОЙ ФАЗЫ (2000 – 5000 К)</b>	<b>444</b>
А.А. АГАПОВ, А.С. СОФЬИН, С.И. СУМСКОЙ, С.Х. ЗАЙНЕТДИНОВ <b>РАСШИРЕНИЕ СЖАТОГО ГАЗА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ</b> .....	<b>446</b>
А.А.СТАНОВОВ, Е.Н. БОГДАНОВ <b>УДАРНО-ВОЛНОВАЯ СЖИМАЕМОСТЬ НЕРЕАГИРУЮЩЕГО ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ ОКТОГЕНА</b> .....	<b>448</b>
М.Е. СТЕПАНОВ, М.И. КУЛИШ, А.В. КАРАБУЛИН, В.И. МАТЮШЕНКО <b>ПИРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОНДЕНСАЦИИ НАНОЧАСТИЦ В ГАЗООБРАЗНОМ И СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ</b> .....	<b>450</b>
А.М. ТЕРЕЗА, Г.Л. АГАФОНОВ, А.С. БЕТЕВ, С.П. МЕДВЕДЕВ <b>РЕДУЦИРОВАНИЕ ДЕТАЛЬНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПИРОЛИЗА, ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ</b> .....	<b>452</b>
Д.В. ЧЕПЕЛА, Ю.Н. БУХАРЕВ <b>ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАПРЕГРАДНЫХ ОСКОЛОЧНЫХ ПОТОКОВ С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА ПРОГРАММ ЛОГОС</b> .....	<b>454</b>
В.А. ШАРГАТОВ <b>ДИНАМИКА И УСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕНИЙ В ВИДЕ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ, ОПИСЫВАЮЩИХ ФРОНТ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ</b> .....	<b>456</b>
А.А. АГАПОВ, А.С. СОФЬИН, С.И. СУМСКОЙ <sup>1</sup> , С.Х. ЗАЙНЕТДИНОВ <b>ПАРАМЕТРЫ УДАРНЫХ ВОЛН ПРИ ДЕТОНАЦИИ И ДЕФЛАГРАЦИИ ТОПЛИВНО-ВОЗДУШНЫХ ОБЛАКОВ</b> .....	<b>458</b>
С. М. ФРОЛОВ, И. О. ШАМШИН, В. С. АКСЕНОВ, М. В. КАЗАЧЕНКО <b>РАНЖИРОВАНИЕ ТОПЛИВНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ПО ИХ ДЕТОНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ЭТАЛОННОЙ ИМПУЛЬСНО-ДЕТОНАЦИОННОЙ ТРУБЫ</b> .....	<b>460</b>
А.С. СОФЬИН, С.И. СУМСКОЙ, С.Х. ЗАЙНЕТДИНОВ <b>РАСЧЕТЫ УДАРНЫХ ВОЛН ПРИ РАЗРЫВЕ МАГИСТРАЛЬНОГО ГАЗОПРОВОДА</b> .....	<b>462</b>

**Секция**  
**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ**  
**СИСТЕМ И КВАНТОВОЙ МЕТРОЛОГИИ**

Руководитель секции      – д.ф.-м.н., член-корр. РАН  
   Колачевский Николай Николаевич

Секретари секции            – к.ф.-м.н., доцент каф. №78  
   Борисюк Петр Викторович,  
   – к.ф.-м.н., ассистент каф. №78  
   Курельчук Ульяна Николаевна

Тел.: 8 (495) 788-56-99, доб. 9914

E-mail: UNKurelchuk@mephi.ru

А.Я. ДЗЮБЛИК<sup>1</sup>, Б.Е. ГРИНЮК<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт Ядерных Исследований НАН Украины, Киев, Украина*

<sup>2</sup>*Институт Теоретической Физики им. Н.Н.Боголюбова НАН Украины, Киев*

## **РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЯХ**

Изучено кулоновское возбуждение ядер свободными электронами в плазме с учетом экранирования поля ядер. Численные расчеты в борновском приближении искаженных волн для <sup>201</sup>Hg показали, что экранирование приводит к подавлению реакции при низких энергиях и соответственно при относительно низких температурах плазмы. Рассмотрено также влияние электронного экранирования на реакции синтеза при низких энергиях. Проведены расчеты фактора усиления реакции, вызванного экранированием, в адиабатическом приближении и в приближении внезапного возмущения. Кроме того, проделаны вариационные расчеты.

A.YA. DZYUBLIK<sup>1</sup>, B.E. GRINYUK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute for Nuclear Research of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

<sup>2</sup>*N.N.Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

## **ROLE OF ELECTRONIC SCREENING IN LOW-ENERGY NUCLEAR REACTIONS**

The Coulomb excitation of nuclei by free electrons in plasma is studied, taking into account screening of the nuclear field. Numerical calculations in the distorted wave Born approximation for <sup>201</sup>Hg have shown that screening leads to inhibition of the reaction at low energy and respectively at relatively low temperatures of plasma. An influence of the electronic screening on the low-energy fusion is also considered. The calculations for the reaction enhancement factor, provided by screening, are carried out in the adiabatic and sudden perturbation approximations. Besides, the variation calculations are done.

Изучалось кулоновское возбуждение ядер в плазме свободными электронами, кинетическая энергия которых превышает пороговую энергию возбуждения ядер [1]. Раскладывая волновую функцию падающих электронов по парциальным волнам, мы рассчитали сечение реакции с помощью известных формул Альдера и др. Численные расчеты для ряда ядер показали, что неупругое рассеяние электронов может быть эффективным методом возбуждения ядер, а сечение возбуждения ядер с электрическими мультипольными переходами существенно превышает сечение для ядер с магнитными переходами.

Роль электронного экранирования учитывалась в работе [2]. При этом считалось, что фактор экранирования описывается экспонентой. Для слабо ионизированной плазмы экранирование в основном обусловлено связанными

электронами, и радиус экранирования почти совпадает с радиусом атома. Опять при вычислении искаженных волновых функций электронов в экранированном кулоновском потенциале использовалось разложение по парциальным волнам. Радиальные волновые функции разложения  $F_l(kr)$  рассчитывались численно. С помощью этих функций находилась зависимость сечения  $\sigma_{\text{exc}}(E)$  возбуждения ядра  $^{201}\text{Hg}$  от энергии  $E$  падающих электронов при нескольких значениях радиуса экранирования. В этом ядре генерируются E2-переходы из основного  $3/2^-$  состояния в возбужденный уровень  $1/2^-$  с энергией  $E_0=1,556$  кэВ. Рассчитана также скорость возбуждения ядер в зависимости от температуры плазмы в интервале от нуля до 10 МК. Считалось, что электроны описываются максвелловским распределением по скоростям. Найдено, что при очень малых значениях радиуса экранирования  $\sim 10^{-3}$  нм реакция подавлена практически во всем этом интервале температур. Возможно, такая ситуация реализуется в звездах с большой плотностью.

Нами рассмотрена также реакция низкотемпературного слияния ядер в окружении электронов, которые рассматривались как единая связанная система. Уравнение Шредингера решалось как в адиабатическом приближении, когда скорости атомных электронов значительно превышают относительную скорость ядер, так и в противоположном приближении внезапного возмущения. Сечение реакции, как обычно, записывалось в виде произведения вероятности туннелирования сквозь кулоновский барьер и предэкспоненциального энергетического множителя. Показано, что экранирование влияет только на проницаемость барьера.

#### *Список литературы*

1. G.Gosselin, N.Pillet, V.Mèot, P.Morel, A.Ya.Dzyublik, Phys. Rev. C 2009, Vol. 79, 01460
2. A.Ya.Dzyublik, V.Mèot, G.Gosselin, P.Morel, EPL 2013, Vol. 102, 62001.

Е.В. ТКАЛЯ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ВНУТРЕННЯЯ ЭЛЕКТРОННАЯ КОНВЕРСИЯ ИЗОМЕРА $^{229m}\text{Th}$ В РИДБЕРГОВСКОМ ИОНЕ $\text{Th}^{3+}$ И АНИОНЕ $\text{Th}^-$**

Показано, что в ридберговском атоме (ионе) тория распад изомера  $^{229m}\text{Th}$  ( $3/2^+$ , 8.3 эВ) по каналу внутренней конверсии происходит только через ридберговский электрон и может быть существенно замедлен.

E.V. TKALYA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia*

## **INTERNAL CONVERSION OF THE $^{229m}\text{Th}$ ISOMER STATE IN THE RYDBERG $\text{Th}^{3+}$ ION AND $\text{Th}^-$ ANION**

It was shown that in the Rydberg atom (ion) of thorium, the decay of the  $^{229m}\text{Th}$  ( $3/2^+$ , 8.3 eV) isomer state through the internal conversion channel occurs only through the Rydberg electron and can be significantly slowed down.

Показано, что в ридберговском атоме (ионе) тория распад изомера  $^{229m}\text{Th}$  ( $3/2^+$ , 8.3 эВ) по каналу внутренней конверсии происходит только через ридберговский электрон (Рис.1) и может быть существенно замедлен. Уже при относительно небольших значениях главного квантового числа и орбитального момента ридберговского состояния вероятность конверсии  $W_{IC}$  уменьшается на 9 порядков величины и становится меньше вероятности  $\gamma$ -излучения  $W_\gamma$  (Рис.2). Распад  $^{229m}\text{Th}$  замедляется также и в анионе тория, несмотря на дополнительный пятый «валентный» электрон. Этот контринтуитивный результат является следствием диффузии электронной оболочки, уменьшением энергий связи валентных электронов и зависимостью  $1/v$  от скорости вылетевшего электрона в формуле для вероятности внутренней конверсии вблизи порога.

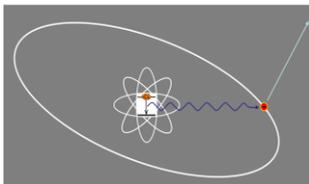


Рис. 1. Схема распада изомера  $^{229m}\text{Th}$  ( $3/2^+$ , 8.3 эВ) по каналу внутренней конверсии через ридберговский электрон

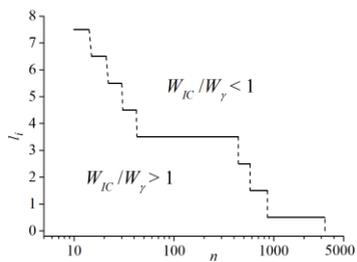


Рис. 2. Отношение вероятностей внутренней конверсии  $W_{IC}$  и  $\gamma$ -излучения  $W_\gamma$ .

П.В. БОРИСЮК<sup>1</sup>, О.С. ВАСИЛЬЕВ<sup>1</sup>, С.П. ДЕРЕВЯШКИН<sup>1,2</sup>,  
Н.Н. КОЛАЧЕВСКИЙ<sup>1,2,3</sup>, Ю.Ю. ЛЕБЕДИНСКИЙ<sup>1,3</sup>, С.С. ПОТЕШИН<sup>1</sup>,  
А.А. СЫСОЕВ<sup>1</sup>, Е.В. ТКАЛЯ<sup>1</sup>, Д.О. ТРЕГУБОВ<sup>1,2,3</sup>, К.Ю. ХАБАРОВА<sup>2</sup>,  
В.П. ЯКОВЛЕВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup> Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет),  
Долгопрудный, Россия

## ИОНЫ ТОРИЯ В ЛИНЕЙНОЙ КВАДРУПОЛЬНОЙ ЛОВУШКЕ

Рассмотрены последние результаты в области работы с ионами тория, захваченными в ионную ловушку Пауля. Описана оригинальная многосекционная ловушка и возможные варианты ее использования для исследования изомерного перехода в ядре тория-229. Проведена характеристика процесса захвата ионов полученных методом лазерной абляции.

P.V. BORISYUK<sup>1</sup>, O.S. VASILIEV<sup>1</sup>, S.P. DEREVYASHKIN<sup>1,2</sup>,  
N.N. KOLACHEVSKY<sup>1,2,3</sup>, Y.Y. LEBEDINSKY<sup>1,3</sup>, S.S. POTESHIN<sup>1</sup>, A.A.  
SYSOEV<sup>1</sup>, E.V. TKALYA<sup>1</sup>, D.O. TREGUBOV<sup>1,2,3</sup>, K.Y. KHABAROVA<sup>2</sup>,  
V.P. YAKOVLEV<sup>1</sup>

<sup>1</sup> National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia

<sup>2</sup> The Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences (LPI RAS), Moscow,  
Russia

<sup>3</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

## THORIUM IONS IN THE LINEAR QUADRUPLE TRAP

The recent results of the trapped thorium ions studies are considered. The original multi-sectional Paul trap and the ways to use it for thorium nuclear isomeric transition examinations are described. The trapping process of ions obtained by laser ablation is described in detail.

Исследование низколежащего изомерного перехода в ядре изотопа тория-229 представляет существенный интерес как для фундаментальной науки, так и для ряда прикладных применений. В последние годы достигнут ряд важных результатов в данной области. В 2016 году было впервые проведено прямое детектирование перехода путем регистрации сигнала внутренней конверсии [1]. В 2017 году было измерено характерное время распада изомерного состояния в нейтральном атоме тория через канал внутренней конверсии [2]. В 2018 году проведено исследование различий в сверхтонкой структуре электронных уровней ионов  $\text{Th}^{2+}$  в основном и изомерном ядерных состояниях [3]. В 2019 году опубликованы уточненные данные измерений энергии изомерного перехода [4].

Один из наиболее перспективных и распространенных подходов исследования низколежащего изомерного перехода в ядре изотопа тория-229 основывается на работе с ионами тория, захваченными в ионную ловушку.

В данной работе описан процесс загрузки ловушки Пауля высокоэнергетичными ионами  $\text{Th}^{3+}$ , полученными методом лазерной абляции. В работе описан ряд методов, позволивших увеличить эффективность загрузки ловушки и время удержания захваченных ионов. Продемонстрирована возможность дозагрузки ионной ловушки, позволяющая увеличить общее количество захваченных ионов более чем на порядок.

Достигнутый прогресс позволяет рассматривать описанную систему как полноценный инструмент для работы с облаком захваченных ионов тория и открывает путь к дальнейшим экспериментам по лазерному охлаждению и спектроскопии.

#### *Список литературы*

1. B. Seiferle, L.v.d. Wense, M. Laatiaoui, et al // Nature, 2016. Vol 533
2. B. Seiferle, L. von der Wense, and P. G. Thirolf // Phys. Rev. Lett. 118, 2017.
3. E. Peik, M.V. Okhapkin, P. G. Thirolf, et al // Nature, 2018 Vol 556
4. B. Seiferle, L.v.d. Wense, M., P.V. Bilous, et al // Nature, 2019. Vol 573

Е.Ф. СТЕЛЬМАШЕНКО<sup>1</sup>, О.А. КЛЕЗОВИЧ<sup>1</sup>, В.Н. БАРЫШЕВ<sup>1</sup>, В.А.  
ТИЩЕНКО<sup>1</sup>, И.Ю. БЛИНОВ<sup>1</sup>, В.Г.ПАЛЬЧИКОВ<sup>1,2</sup>, В.Д.  
ОВСЯННИКОВ<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>ФГУП ВНИИФТРИ Менделеево, Московская область, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

<sup>3</sup>Воронежский госуниверситет, Университетская пл. 1, Воронеж, Россия

## ИЗМЕРЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СВЧ ПОЛЯ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ С ПОМОЩЬЮ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ

В данной работе представлены результаты измерений напряженности электрического поля с помощью измерителя нового типа. В качестве чувствительного элемента данного измерителя выступает стеклянная ячейка, в которую помещены атомы щелочных металлов, возбужденных до ридберговских состояний. Получены простые аппроксимационные выражения для численного расчета амплитуды перехода между ридберговскими  $nD_{5/2}$  и  $(n+1)P_{3/2}$  состояниями с большими главными квантовыми числами  $n$ . Разработана методика измерения частоты резонанса электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) в спектре поглощения пробного излучения.

E.F. STELMASHENKO<sup>1</sup>, O.A. KLEZOVICH<sup>1</sup>, V.N. BARYSHEV<sup>1</sup>, V.A.  
TISHCHENKO<sup>1</sup>,

I.YU. BLINOV<sup>1</sup>, V.G. PALCHIKOV<sup>1,2</sup>, V.D. OVSIANNIKOV<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>FSUE VNIIFTRI Mendeleevo, Moscow region, Russian Federation

<sup>2</sup>National research nuclear University «MEPHI», Moscow, Russian Federation

<sup>3</sup>Voronezh state University, University square 1, Voronezh, Russian Federation

## MEASUREMENTS OF RF E-FIELD STRENGTH IN A WIDE RANGE USING RYDBERG ATOMS

This paper presents the results of measuring the electric field strength using a new type of meter. The sensitive element of this meter is a glass cell in which the atoms of alkali metals excited to the Rydberg States are placed. Simple approximation expressions are obtained for numerical calculation of the transition amplitude between Rydberg  $nD_{5/2}$  and  $(n+1)P_{3/2}$  States with large principal quantum numbers  $n$ . We have developed a method for measuring the frequency of resonance of electromagnetic-induced transparency (EIP) in the absorption spectrum of probe radiation.

В настоящее время в мировом метрологическом сообществе ведутся исследования нового метода измерения напряженности электрических полей СВЧ диапазона, в котором используется взаимодействие ридберговских атомов с измеряемым полем. Данный метод предоставляет возможность создания измерителя, который будет обладать высоким, субволновым пространственным разрешением, а также высокой точностью и воспроизводимостью измерений,

что делает привлекательным его возможное применение в качестве метрологического стандарта напряженности электрического поля.

Напряженность электрического поля СВЧ излучения можно измерить с помощью расщепления Аутлера-Таунса (АТ) пика ЭИП, возникающего в спектре излучения пробного лазера [1]. Для генерации данного излучения был выбран DBR лазер (лазер с распределенным Брэгговским отражением) с длиной волны 780.24 nm. Чтобы измерить величину расщепления АТ, использовалась дополнительная частотная модуляция тока инжекции данного лазера  $F_{mod} = 60$  МГц, с помощью которой у пика ЭИП появлялись боковые составляющие. Далее с помощью полученной частотной шкалы измерялось значение расщепления АТ.

Также, для вычисления значения напряженности были проведены теоретические расчеты матричных элементов  $\mathcal{R}$  электродипольных переходов из  $nD_{5/2}$ -состояний в состояния  $(n+1)P_{3/2}$  в атомах рубидия на частотах СВЧ излучения  $\omega = E_{nD_{5/2}} - E_{(n+1)P_{3/2}}$  от 2.1 GHz до 196.55 GHz, соответствующих переходам между ридберговскими состояниями с главными квантовыми числами  $n$  от 23 до 99. Радиальная часть матричного элемента электродипольного перехода рассчитывалась методом квантового дефекта (МКД). Результаты численных расчетов матричных элементов дипольного перехода  $nD_{5/2} \rightarrow (n+1)P_{3/2}$  в области главных квантовых чисел  $n=10\div 200$  ридберговских состояний атомов рубидия хорошо согласуются с соответствующими данными расчетов в работе [2]. С полученных результатов  $\mathcal{R}$  в МКД-приближении для состояний с  $n = 30, 60, 100$  было получено интерполяционное выражение, воспроизводящее расчеты матричных элементов  $\mathcal{R}$  в области главных квантовых чисел  $n > 10$  с относительной погрешностью не более  $10^{-6}$ . В ходе измерений было выяснено, что величина расщепления АТ зависит от поперечного смещения ячейки в направлении, перпендикулярном прямой, по которой распространяются лазерные пучки. Для частот 4.78, 17.04, 126.50, 150.40, 196.55 ГГц поля были получены соответствующие графики распределения напряженности электрического поля в зависимости от поперечного смещения ячейки с атомами.

#### Список литературы

1. Autler, S. H., Townes C. H. // Phys. Rev. 1955. V. 100. P. 703. Cohen-Tannoudji C.N. (1996) The Autler-Townes Effect Revisited. In: Chiao R.Y. (eds) *Amazing Light*. Springer, New York, NY.
2. Holloway C. L., Gordon J.A., Jefferts S., Schwarzkopf A., Anderson D.A., Miller S.A., Thairachoen N., Raithel G. // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. 2014. V. 62. P. 6169.

Д.И. ПРОВОРЧЕНКО, Д.А.МИШИН, Е.С.ФЕДОРОВА, Д.О.ТРЕГУБОВ,  
А.А.ГОЛОВИЗИН, В.Н.СОРОКИН, К.Ю.ХАБАРОВА,  
Н.Н.КОЛАЧЕВСКИЙ

*Физический институт имени П.Н.Лебедева Российской Академии Наук, Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ШТАРКОВСКОГО СДВИГА ЧАСТОТЫ ЧАСОВОГО ПЕРЕХОДА В АТОМАХ ТУЛИЯ В ОПТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 1064 НМ**

В работе исследуется возможность применения оптической решетки на длине волны 1064 нм для создания оптических часов на основе атомов тулия. Для этого измеряется зависимость сдвига частоты часового перехода в зависимости от интенсивности формирующего решётку излучения с точностью порядка 10 мГц.

D.I.PROVORCHENKO, D.A.MISHIN, E.S.FEDDOROVA,  
D.O.TREGUBOV, A.A.GOLOVIZIN, V.N.SOROKIN,  
K.YU.KHABAROVA, N.N.KOLACHEVSKIY

*Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

## **MEASUREMENT OF THE STARK SHIFT IN THULIUM ATOMS IN OPTICAL LATTICE AT WAVELENGTH 1064 NM**

In this work we investigate the possibility of using the 1064 nm optical lattice to build the optical clock based on thulium atoms. To achieve this goal we need to measure the frequency shift of clock transition depending on the intensity of the radiation forming the lattice with the accuracy of the order of 10 mHz.

В последнее время, оптические часы находят всё больше различных применений в прикладных и научных задачах. Примером первых является задачи навигации и создание компактных гравиметров для поиска полезных ископаемых, среди вторых, например, поиск дрейфа фундаментальных констант и проверка основополагающих физических теорий.

В нашей лаборатории разрабатываются оптические часы на основе нейтральных атомов тулия. Для метрологических приложений данная платформа интересна из-за наличия у атомов тулия спектрально-узкого ( $\gamma = 1.2$  Гц) перехода на длине волны  $\lambda = 1.14$  мкм, который обладает низкой чувствительностью к тепловому излучению окружающей среды и статическим электрическим полям [1].

Необходимым элементом любых современных оптических часов на основе нейтральных атомов является оптическая решётка. Оптической решёткой называется периодический потенциал, создаваемый двумя встречными лазерными пучками, которые формируют стоячую волны. В областях

максимума поля, энергия основного состояния уменьшается из-за динамического эффекта Штарка, вследствие чего данный потенциал является удерживающим. Использование оптической решётки позволяет полностью исключить сдвиги частоты, вызываемые эффектом Доплера первого порядка и эффектом отдачи, однако приводит к появлению дополнительного сдвига частоты, вызываемого динамическим эффектом Штарка, так как энергия двух уровней часового перехода изменяется по-разному в присутствии поля, формирующего решётку. Сдвиг частоты зависит от величины поляризуемости атомов, которая, в свою очередь, зависит от длины волны лазерного излучения, формирующего решётку и, в случае его линейной поляризации, угла между его электрической компонентой и осью квантования системы. Длина волны, при которой в заданной конфигурации эксперимента Штарковский сдвиг обращается в ноль, называется «магической».

Нашей группой была экспериментально найдена магическая длина волны для часового перехода в атомах тулия  $\lambda = 813.329(6)$  нм [1], для чего была измерена зависимость поляризуемости от длины волны для двух ориентаций электрического поля: параллельно и перпендикулярно оси квантования. В ходе исследования было замечено, что во втором случае Штарковский сдвиг вызываемый излучением на длине волны  $\lambda = 1064$  нм близок к нулю с точностью порядка 1 Гц. Из-за доступности и качества источников лазерного излучения на эту длину волны она является очень удобной для использования, поэтому было принято решение исследовать эту точку подробнее.

В работе исследуется вызванный эффектом Штарка сдвиг частоты часового перехода в атомах тулия в зависимости от мощности оптической решётки с точностью порядка 10 мГц.

#### *Список литературы*

1. A.Golovizin, E.Fedorova, D.Tregubov, D.Sukachev, K.Khabarova, V.Sorokin and N.Kolachevsky//Inner-shell clock transition in atomic thulium with a small blackbody radiation shift. // Nature communications 10(1): 1724

М.И. ВАСЬКОВСКАЯ, Е.А. ЦЫГАНКОВ, Д.С. ЧУЧЕЛОВ,  
С.А. ЗИБРОВ, В.В. ВАСИЛЬЕВ, В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ

*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, Москва, Россия*

## **ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ БУФЕРНЫХ ГАЗОВ НА СВЕТОВОЙ СДВИГ В АТОМНЫХ ЯЧЕЙКАХ ДЛЯ КПП-СТАНДАРТА ЧАСТОТЫ**

Теоретически и экспериментально показано, что световой сдвиг частоты резонанса когерентного пленения населенностей (КПП) зависит от давления буферных газов (Ar, N<sub>2</sub>) в атомных ячейках, используемых в КПП-стандарте. Подавление сдвига (за счет подбора спектра излучения диодного лазера, ток накачки которого модулируется СВЧ сигналом) становится невозможным при превышении некоторого критического значения суммарного давления. Предложен новый метод подавления светового сдвига с помощью обратной связи, использующей модуляцию мощности СВЧ поля.

M. I. VASKOVSKAYA, E. A. TSYGANKOV, D. S. CHUCHELOV,  
S. A. ZIBROV, V. V. VASSILIEV AND V. L. VELICHANSKY

*P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, 119991, Moscow, Russia*

## **EFFECT OF THE BUFFER GASES ON THE LIGHT SHIFT IN ATOMIC CELLS FOR CPT-BASED FREQUENCY STANDARD**

We theoretically and experimentally demonstrate that the light shift of the coherent population trapping (CPT) resonance frequency depends on the buffer gases pressure (Ar, N<sub>2</sub>) in atomic cells used in CPT-based frequency standard. The light shift suppression (due to correction of the spectrum of a diode laser, the pump current of which is modulated by a RF signal) becomes impossible when a certain value of the buffer gases pressure is exceeded. A new technique of the light shift cancellation by means of a feedback utilizing the RF power modulation is proposed.

Одним из способов формирования оптического поля, необходимого для наблюдения КПП-резонанса, является СВЧ-модуляция тока накачки диодного лазера типа VCSEL (vertical-cavity surface-emitting laser), в результате которой спектр излучения становится полихроматическим. В этом случае, каждая компонента оптического поля, взаимодействуя с атомной средой, приводит к световому сдвигу энергетических уровней атомов, и, следовательно, частоты КПП-резонанса. Известно, что суммарный световой сдвиг, являющийся результатом действия всех оптических полей, может быть сведен к нулю корректным выбором спектрального распределения, т.е. индексом СВЧ-модуляции [1]. В данной работе исследовано влияние буферных газов в атомной ячейке на световой сдвиг. Анализ зависимостей частоты КПП-резонанса от мощности СВЧ поля для ячеек с разными суммарными давлениями буферных газов (смесь Ar+N<sub>2</sub>) показал, что при некотором суммарном давлении  $P_m$ , ноль светового сдвига совпадает с минимумом зависимости частоты КПП-резонанса

от мощности модулирующего СВЧ поля. При большем давлении зануление светового сдвига невозможно (рис. 1).

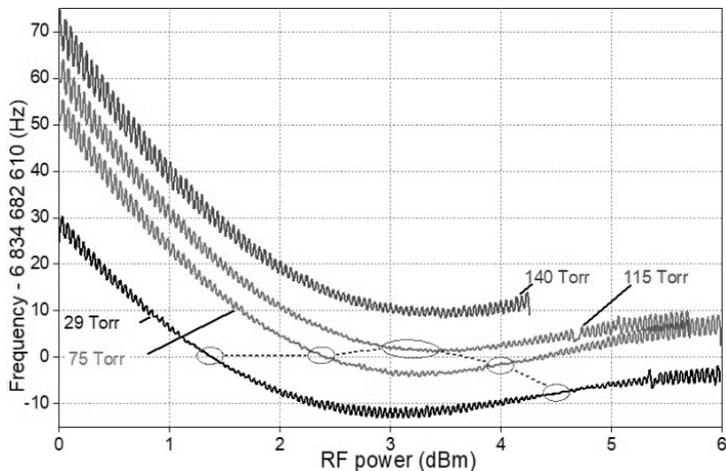


Рис.1. Зависимость частоты КПП-резонанса от мощности СВЧ поля, модулирующего ток накачки лазера (ячейки 29, 75, 115 и 140 Torr) при одновременной модуляции полной интенсивности излучения, которая из-за светового сдвига проявляется в мелкомасштабном изменении частоты. Для удобства восприятия, кривые смещены вниз на величины, соответствующие сдвигу от буферных газов для каждой ячейки.

В результате предложен метод стабилизации глубины модуляции тока лазера, т.е. мощности СВЧ поля, предполагающий использование ячейки с суммарным давлением буферных газов  $P_m$ . С помощью обратной связи осуществляется стабилизация мощности СВЧ поля в минимуме зависимости частоты резонанса от мощности СВЧ поля, который совпадает с точкой нулевого светового сдвига.

#### *Список литературы*

1. M. Zhu, L.S. Cutler «Theoretical and experimental study cell frequency standard of light shift in a CPT-based Rb vapor», 32nd Annual Precise Time and Time Interval (PTTI) Meeting, 2000.

Д.С. ЧУЧЕЛОВ<sup>1</sup>, М.И. ВАСЬКОВСКАЯ<sup>1</sup>, С.А. ЗИБРОВ<sup>1</sup>, В.В.  
ВАСИЛЬЕВ<sup>1</sup>, В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ<sup>1,2</sup>, М.Ю. БАСАЛАЕВ<sup>3</sup>, В.И.  
ЮДИН<sup>3</sup>, А.В. ТАЙЧЕНАЧЕВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Институт лазерной физики СОРАН, Новосибирск, Россия*

## **ДИНАМИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РЕЗОНАНСА КОГРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ФАЗОВОЙ МОДУЛЯЦИИ**

В работе представлен новый метод формирования сигнала ошибки для стабилизации частоты генератора по резонансу когерентного пленения населённости. Метод заключается в периодической импульсной модуляции разности фаз оптических полей, формирующих резонанс КПН. Предложенный метод подавляет сдвиг частоты резонанса, возникающий из-за его асимметрии, и на  $\sim 30\%$  увеличивает крутизну линейной части сигнала ошибки по сравнению с методом гармонической частотной модуляции. Результаты эксперимента согласуются с теоретическим расчетом, выполненным для трехуровневого атома и бихроматического поля.

D.S. CHUCHELOV<sup>1</sup>, M.I. VASKOVSKAYA<sup>1</sup>, S.A. ZIBROV<sup>1</sup>, V.V.  
VASSILIEV<sup>1</sup>, V.L. VELICHANSKY<sup>1,2</sup>, M. YU. BASALAEV<sup>3</sup>, V.I. YUDIN<sup>3</sup>,  
A.V. TAICHENACHEV<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

<sup>3</sup> *Institute of Laser Physics, Siberian Branch of RAS, Novosibirsk, Russia*

## **DYNAMIC CONTINUOUS-WAVE SPECTROSCOPY OF COHERENT POPULATION TRAPPING AT PHASE-JUMP MODULATION**

We present a new method of generating an error signal for stabilization the frequency of the generator to the frequency of coherent population trapping resonance. The method uses periodic pulsed modulation of the phase difference of optical fields that form the CPT resonance. The method allows to suppress the shift of the resonance frequency arising from its asymmetry, and to increase the slope of the linear part of the error signal by  $\sim 30\%$  in comparison with the method of harmonic frequency modulation. The experimental results are in good agreement with theoretical predictions based on a mathematical model of a three-level  $\Lambda$  system in a bichromatic field.

Одним из основных методов стабилизации частоты в стандартах является метод экстремального регулирования. В этом методе асимметрия опорного резонанса сдвигает частоту, ухудшая долговременную стабильность. В

малогобаритном КПН стандарте частоты асимметрия резонанса возникает из-за неравенства компонент лазерного излучения, которое трудно устранить из-за нелинейного взаимодействия полей в лазере. Предложен и исследован новый метод формирования сигнала ошибки, в котором асимметрия резонанса не вызывает сдвига стабилизируемой частоты. Этот метод основан на возбуждении КПН резонанса в бихроматическом оптическом поле при импульсной модуляции относительной разности фаз полей. На интервале времени с постоянной разностью фаз атомы накачиваются в непоглощающее состояние чувствительное к разности фаз двух компонент поля. После скачка разности фаз наблюдается переходный процесс оптической накачки в новое непоглощающее состояние (рис.1а). При этом динамика поглощения зависит от двухфотонной отстройки и величины скачка относительной разности фаз. Сигнал ошибки формируется как разность проинтегрированных сигналов поглощения для скачков фазы с противоположными знаками. Дополнительным преимуществом предложенного метода является увеличение (на  $\sim 30\%$ ) крутизны линейной части сигнала ошибки по сравнению с традиционным методом формирования где сигнал ошибки создается гармонической модуляцией частоты и синхронным детектированием.

(а) (б)

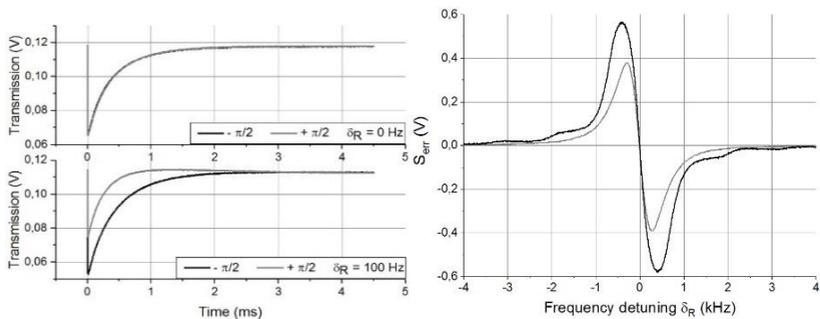


Рис. 1.(а) Сигналы пропускания при импульсной фазовой модуляции на вершине КПН-резонанса (сверху) и при отстройке 100 Гц (снизу). (б) Сигналы ошибки, сформированные методом гармонической частотной модуляции (серая кривая) и методом фазовых скачков (черная кривая).

О.Б. АНАНЬИН<sup>1</sup>, Р.Ш. РАМАКОТИ<sup>1</sup>, А.П. МЕЛЕХОВ<sup>1</sup>, В.Г. СРЕДИН<sup>2</sup>,  
В.В. КРАВЧЕНКО<sup>1</sup>, И.А. ГЕРАСИМОВ<sup>1</sup>, Г.С. БОГДАНОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ,  
Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Военная академия РВСН им. Петра Великого, Балашиха, Россия*

## **ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОЛУПРОВОДНИК CDHGTE**

Получены экспериментальные данные по эмиссии фотоэлектронов с поверхности образца CdHgTe под действием интенсивного мягкого рентгеновского излучения, которые позволили рассчитать амплитудные значения электрического поля на поверхности полупроводника, действие которого приводит к смещению ионов ртути из узлов кристаллической решётки и образованию точечных дефектов.

O.B. ANANIN<sup>1</sup>, R.S. RAMAKOTI<sup>1</sup>, A.P. MELEKHOV<sup>1</sup>, V.G.  
SREDIN<sup>2</sup>, V.V. KRAVCHENKO<sup>1</sup>, I.A. GERASIMOV<sup>1</sup>, G.S. BOGDANOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Military Academy of the Strategic Missile Forces named after Peter the Great, Balashikha,  
Russia*

## **STUDY OF THE FORMATION PROCESS OF POINT DEFECTS UNDER THE INFLUENCE OF INTENSE SOFT X-RAY RADIATION ON THE CDHGTE SEMICONDUCTOR**

Experimental data of photoelectrons emission from the surface of a CdHgTe sample under the influence of intense soft x-ray radiation were obtained, which made it possible to calculate the amplitude values of the electric field on the surface of a semiconductor, the action of which leads to the displacement of mercury ions from the nodes of the crystal lattice and the formation of point defects.

Узкозонные полупроводниковые твёрдые растворы теллуридов кадмия и ртути (Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te) являются одним из лидеров среди материалов, используемых для создания современной оптоэлектронной аппаратуры ИК-диапазона спектра. В работе приведены результаты, которые позволяют описать механизм образования точечных дефектов в полупроводнике CdHgTe под действием интенсивного мягкого рентгеновского излучения (МРИ). Предполагалось, что значительная часть излучения переходит в тепловой нагрев материала. Но в работе [1] показано, что тепловое воздействие не приводит к

изменению состояния кристаллической решетки. Поэтому основную роль здесь играют нетепловые механизмы дефектообразования.

В рамках эксперимента полупроводниковый образец облучался интенсивным МРИ от лазерной плазмы с использованием рентгеновского концентратора. Спектр МРИ находится в диапазоне от 60 до 300 Эв с мощностью  $5 \cdot 10^4$  Вт, длительностью импульса 20 нс и энергией в импульсе МРИ порядка 1 мДж.

Полупроводник был помещен в середину сферы, в которой предусмотрено отверстие для попадания МРИ на образец. В процессе взаимодействия с излучением образуются фото-, Оже- и вторичные электроны, которые покидают поверхность полупроводника и достигают поверхности сферы. Для увеличения сигнала и воздействия на все несвязанные с атомом электроны между образцом и сферой была приложена разность потенциалов, максимальное значение которой составляло минус 300 вольт. Сигналы со сферы и рентгеновского *pin*-диода приведены на рисунке 1.

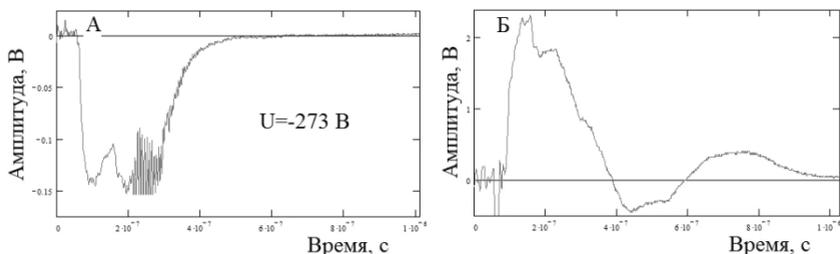


Рис. 1. А- сигнал тока электронов со сферы на нагрузке 50 Ом. Б- сигнал с рентгеновского *pin*-диода.

Таким образом, с использованием данной схемы удалось получить информацию о количестве электронов, которые покинули поверхность полупроводника  $N_e \approx 4.7 \cdot 10^9$ . На образце образуется некомпенсированный заряд  $Q \approx 7.5 \cdot 10^{-10}$  Кл на всей глубине поглощения МРИ (порядка 1 мкм), который, как предполагается, является причиной создания внутреннего приповерхностного электрического поля, амплитудное значение которого достигает  $E \sim 10^8$  В/м.

Как показано в [2] наличие такого поля может быть причиной выхода ионов ртути из узлов кристаллической решетки образования точечных дефектов.

#### Список литературы

1. Р. Ш. Рамакоти, О. Б. Ананьин, А.П. Мелехов и др.// Ядерная физика и инжиниринг, 2019
2. Средин В.Г., Войцеховский А.В., Ананьин О.Б. и др.// Прикладная физика, 2018 №4

Г.А. АГЕЕВ, П.В. БОРИСЮК

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ АНАЛОГО-ЦИФРОВОЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ НА ОСНОВЕ ФОТОННО- КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

Представлена концепция электрооптического аналого-цифрового преобразователя (далее – АЦП), преобразующего электрическое напряжение в передаваемый по оптическому интерфейсу цифровой код. Предлагаемое устройство представляет собой фотонный АЦП с оптической дискретизацией и оптическим квантованием, основанный на электрооптических модуляторах и компараторах оптической интенсивности в виде резонансных фотонно-кристаллических структур.

G.A. AGEEV, P.V. BORISYUK

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **ELECTRO-OPTICAL ANALOG-TO-DIGITAL CONVERTER BASED ON PHOTONIC CRYSTAL STRUCTURES**

The concept of an electro-optical analog-to-digital converter with optical sampling and optical quantization, based on electro-optical modulators and optical intensity comparators based on resonant photonic crystal structures, is presented. Proposed device converts electrical voltage into a digital code transmitted via an optical interface.

Фотонные и, в частности, электрооптические АЦП являются объектом одних из наиболее перспективных исследований, направленных на преодоление ограничений традиционных электронных АЦП в быстродействии. Основными ограничивающими факторами электронных АЦП являются временные характеристики электронной элементной базы: неопределённость компараторов, апертурная ошибка и паразитные RC, ограничивающие полосу сигнала, а также шумы. Фотонные АЦП лишены многих вышеперечисленных недостатков: лазерные источники света обладают высокой временной стабильностью, что позволяет на несколько порядков снизить апертурную ошибку, а оптические методы квантования сигнала значительно превосходят в скорости электронные [1,2].

Наибольшее распространение получили электрооптические АЦП на основе модуляторов интерференционного типа, в частности – Маха-Цендера. Данная идея была предложена относительно давно, в 1975 г. [3], но распространения эти АЦП не получили по причине имеющихся у них серьезных недостатков. Основные из них – это сложность изготовления, слишком высокое полуволновое напряжение модуляторов для реализации малого шага

квантования, а также отсутствие эффективных методов оптического квантования. Недавние открытия в области фотонных кристаллов продемонстрировали возможность создания планарных структур, пригодных для использования в качестве оптических компараторов интенсивности [4,5]. Данные структуры представляют собой модификацию channel drop фильтров, полученную путем добавления частиц с выраженным эффектом Керра в резонансное кольцо в фотонном кристалле. В результате, резонансное кольцо пропускает через себя оптическое излучение в определенном диапазоне интенсивности и может быть использовано для оптического квантования. Значительный прогресс был достигнут также в сфере оптических модуляторов, заключающийся в создании фазовращателей нового типа: на обратносмещённом рп переходе, на МОП конденсаторах, и ряда других. Также были освоены технологии производства модуляторов на основе тонких пленок ниобата лития, чередующихся рп переходах и полимерах. Благодаря этим открытиям удалось снизить полуволновое напряжение модуляторов и вносимые оптические потери. Вышеперечисленные достижения в элементной базе фотоники в совокупности с развитием технологий производства открывают перспективы для создания эффективного с технической и экономической точек зрения высокоскоростного электрооптического АЦП.

Принцип действия предлагаемого АЦП основан на квантовании интенсивности оптических импульсов, поступающих из электрооптических модуляторов при помощи компараторов оптической интенсивности на основе кольцевых резонаторов в фотонном кристалле. Дискретизация осуществляется путем генерации последовательности импульсов лазером с синхронизацией мод.

#### *Список литературы*

1. Valley G. Photonic analog-to-digital converters // Opt. Expr. 2007. V. 15. P. 1955–1982.
2. Стариков Р.С. Фотонные АЦП // Успехи современной радиоэлектроники. 2015. Т. 1. № 3. С. 3–39
3. Taylor H. An electro-optic analog-to-digital converter // Proc. IEEE. 1975. Т. 63. С. 1524–1525.
4. Mehdizadeh F., и др. A Novel Proposal for All Optical Analog-to-Digital Converter Based on Photonic Crystal Structures // IEEE Photonics Journal. 2017. Т. 9. № 2.
5. Tavousi A., Mansouri-Birjandi M., Saffari M. Successive approximation-like 4-bit full-optical analog-to-digital converter based on Kerr-like nonlinear photonic crystal ring resonators // Physica E. 2015. Т. 83. С. 101 – 106.

А.А. ТАВЛЕЕВ, Ю.Д. АРАПОВ, П.В. КУБАСОВ, П.Н. ЯРОЩУК  
*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики  
им. Н. Л. Духова, г. Москва, Россия*

## **ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ЗВУКА В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ВЫНУЖДЕННОГО РАССЕЯНИЯ МАНДЕЛЬШТАМА-БРИЛЛЮЭНА**

Представленная работа направлена на решение задачи по созданию универсального устройства проверки интерферометрических измерительных комплексов. Принцип работы создаваемого устройства основан на возникновении нелинейного эффекта - вынужденного рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (ВРМБ) - под воздействием лазерного излучения в оптических волокнах. В результате выполненной работы на основе рассмотрения параметров нелинейного эффекта в оптических трактах при различных условиях, сформулированы рекомендации для разработки комплекса и созданию универсальной методики проверки измерительных комплексов типа PDV, VISAR и Фабри-Перо.

A.A. TAVLEEY, YU. D. ARAPOV, P.V. KUBASOV, P.N. YAROSHCHUK

*N. L. Dukhov All-Russian Scientific Research Institute of Automatics,  
Moscow, Russia*

## **DETERMINATION OF SOUND SPEED IN OPTICAL FIBERS BASED ON THE STIMULATED MANDELSTAM-BRILLION SCATETING EFFECT**

This work is focused on creating multipurpose device for calibration of interferometric measuring systems. Operating principle of such device is based on appearing of a nonlinear effect – stimulated Mandelstam-Brillion scattering (SMBS) which appears because of influence of laser radiation in optical fiber. As a result there were conducted investigations of parameters of nonlinear effect in optical paths under different conditions. There were formulated recommendations for designing device and methods for calibration of measuring systems such as PDV, VISAR, and Fabry-Perot.

В экспериментах по исследованию ударно-волнового нагружения с использованием диагностики скорости движения ускоряемых объектов на основе лазерно-интерферометрических систем для увеличения уровня полезного сигнала необходимо применять источники лазерного излучения высокой мощности. При этом для увеличения количества каналов регистрации часто используется временное уплотнение с протяженными линиями задержки сигнала, что может привести к проявлению нелинейных оптических эффектов [1]. В настоящей работе предлагается использовать один из подобных эффектов – вынужденное рассеяние Мандельштама-Бриллюэна – чтобы создать

аппаратуру для поверки комплексов измерения скорости типа PDV, VISAR и Фабри-Перо.

Создание универсального стенда для диагностики и поверки лазерно-интерферометрических приборных комплексов является актуальной задачей, которая обеспечит возможность калибровки и поверки за счет измерения спектрального сдвига отраженного назад сигнала, обусловленного эффектом ВРМБ в оптическом волокне.

ВРМБ представляет собой нелинейный процесс, который может возникать в оптических волокнах при мощности излучения много меньшей, чем требуется для прочих нелинейных эффектов [2]. Он проявляется в виде генерации стоксовой волны, распространяющейся в обратном направлении и содержащей наибольшую часть начальной энергии. Величина спектрального сдвига зависит от скорости ультразвуковой волны образующейся в оптическом волокне. Поскольку скорость звука в среде является величиной измеримой и известной с высокой точностью, то это можно использовать для калибровки и поверки лазерно-оптических измерителей скорости.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальной отработки оптической схемы для наблюдения эффекта ВРМБ при различных условиях при измерении спектрального сдвига на основе гетеродинного принципа. Выполнены оценки для величины скорости звука для оптических волокон с сердцевинной из различных типов материалов. Проведено сравнение полученных данных с расчетными значениями скорости звука в оптических волокнах.

На основании полученных данных сформированы рекомендации по построению поверочного устройства для лазерно-гетеродинных измерительных комплексов.

#### *Список литературы*

1. Иванов А.Б. Волоконная оптика: компоненты, системы передачи, измерения. – М.: Компания САЙРУС СИСТЕМС, 1999.
2. Govind P. Agrawal, "Nonlinear Fiber Optics" Fourth Edition, The Institute of Optics University of Rochester Rochester, New York (2007).

А.В. ФРОЛОВ<sup>1</sup>, А.П. ОРЛОВ<sup>1</sup>, А.А. СИНЧЕНКО<sup>1,2</sup>, П. МОНСО<sup>3</sup>  
*1 Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,  
Москва*  
*2 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Москва*  
*3 Институт Нееля НЦНИ, Гренобль*

## **КОЛЛЕКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ, ИНИЦИИРОВАННЫЙ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ**

Продемонстрирована возможность коллективного движения волны зарядовой плотности (ВЗП) в микромостиках на основе NbSe<sub>3</sub>, ориентированных перпендикулярно цепочкам ВЗП, в магнитном поле. Обнаружен эффект повторного возникновения скольжения ВЗП при повышении температуры от 4 К до 50 К. Тем самым получено прямое доказательство, что данный эффект является эффектом скольжения ВЗП под действием электрического поля Холла, порождаемого нормальным током в направлении поперек цепочек.

A.V. FROLOV<sup>1</sup>, A.P. ORLOV<sup>1</sup>, A.A. SINCHENKO<sup>1,2</sup>, P. MONCEAU<sup>3</sup>

*<sup>1</sup>Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow*

*<sup>2</sup>M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

*<sup>3</sup>Institut NEEL, Grenoble, France*

## **CHARGE DENSITY WAVE COLLECTIVE ELECTRON TRANSPORT INITIATED BY MAGNETIC FIELD**

The possibility of collective motion of a charge density wave (CDW) in microbridges based on NbSe<sub>3</sub> oriented perpendicular to the chains of the CDW in a magnetic field is demonstrated. The effect of the re-occurrence of CDW sliding with an increase in temperature from 4 K to 50 K was found. Thus, direct evidence is obtained that this effect is the CDW sliding under the action of the Hall electric field generated by a normal current in the direction across the chains.

Коллективное движение (скольжение) волн зарядовой плотности (ВЗП) в квазиодномерных соединениях проявляется в резком возрастании проводимости в электрических полях, превышающих некоторое пороговое поле  $E > E_c$ , определяемое пиннингом [1]. В обычной геометрии проникновение электрического поля обеспечивается приложением внешнего напряжения, сопровождаемым током нормальных носителей. В результате, эффект скольжения возникает при большом нормальном токе протекающем в том же направлении, приводящему к эффектам трения ВЗП и к существенному джоулеву разогреву.

Недавно было обнаружено, что при низких температурах в геометрии пропускания тока в направлении поперек цепочек ВЗП в микроструктурах на основе  $\text{NbSe}_3$  в перпендикулярном магнитном поле возникает сильная пороговая нелинейность [2]. Выше некоторого порогового значения тока проводимость микромостиков резко уменьшается почти на порядок. Данный нелинейный режим сопровождается генерацией когерентного высокочастотного электромагнитного излучения, проявляющегося на вольт-амперных характеристиках структур при одновременном наложении постоянного и переменного высокочастотного электрических полей в виде токовых ступеней Шапиро, эквидистантных по напряжению, также как и при нестационарном эффекте Джозефсона в сверхпроводниках. Мы показываем, что данный эффект является результатом скольжением ВЗП под действием электрического поля Холла, порождаемого током нормальных носителей в направлении поперек цепочек [3]. При этом величина тока ВЗП почти на два порядка превосходит порождающий его ток нормальных носителей. Ток ВЗП полностью компенсируется обратным противотоком нормальных носителей, который, в свою очередь, приводит к появлению напряжения Холла уже в направлении поперек цепочек ВЗП, которое и измеряется в эксперименте. Петля с нулевой суммой этих двух токов замкнута периодическими процессами преобразования заряда посредством проскальзывания фазы, порождая спонтанные когерентные осцилляции. В данном сценарии коллективное движение ВЗП начинается при полном отсутствии тока нормальных носителей в направлении вдоль цепочек ВЗП. Коллективный транспорт ВЗП в такой геометрии во многих аспектах отличается от скольжения ВЗП в обычной геометрии под действием приложенного внешнего напряжения. Так, в отличие от обычной геометрии, проводимость ВЗП резко возрастает при понижении температуры. Обнаружен необычный размерный эффект: в узких, шириной менее 2 мкм, микромостиках, наблюдается сильная зависимость порогового электрического поля инициации движения ВЗП от магнитного поля, полностью отсутствующая в обычной геометрии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 18-02-00295.

*Список литературы*

1. P. Monceau, *Advances in Physics* 61, 325 (2012).
2. Andrey P. Orlov et al., *npj Quantum Materials* 61 (2017).
3. A. V. Frolov, et al., *Phys. Rev. B*, 100, 245126 (2019)

П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ

*ТашГТУ, Ташкент, Республика Узбекистан*

## **КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПОСТРОЕНИИ ЭТАЛОНА ВОЛЬТА**

P.M. MATYAKUBOVA, R.R. KULUEV

*Tashkent State Technical University, Tashkent, Republic of Uzbekistan*

## **QUANTUM JOSEPHSON EFFECT AND ITS APPLICATION IN THE CONSTRUCTION OF THE STANDARD VOLTA**

За последние десятилетия для построения эталонов стали применять новые физические эффекты, достаточно изученные физиками: квантовый эффект Джозефсона, квантовый эффект Холла, эффект Мейснера, эффект Мессбауэра и др. особенно важное значение в развитии эталонной измерительной техники, а в будущем и рабочих средств измерений имеют квантовые эффекты Джозефсона и Холла.

При температуре ниже определенной, свойственной данному металлу или сплаву, называемой критической температурой  $T_{кр}$ , он переходит в особое, сверхпроводящее состояние, в котором электрические и магнитные свойства принципиально отличаются от тех, которые металл (сплав) имеет при обычных температурах.

Эффект Джозефсона возникает между двумя сверхпроводниками, образующими туннельный контакт. Если два проводника (в обычном состоянии) разделены окисной пленкой толщиной порядка  $10^{-7}$  см, то из-за туннельного эффекта электроны переходят из одного проводника в другой и между ними устанавливается электрическое равновесие (разность потенциалов между проводниками равно нулю). Если же к проводникам приложить известную разность потенциалов, то через туннельный контакт будет протекать электрический ток.

Если туннельный контакт образуется между двумя сверхпроводниками, то возникает эффект Джозефсона (стационарный или нестационарный), открытый английским ученым Б.Джозефсоном в 1962 г. Туннельный контакт при этом часто называют джозефсоновским.

Нестационарный эффект Джозефсона возникает в случае, когда к джозефсоновскому контакту прикладывается постоянное напряжение  $U$ . При этом через контакт будет протекать переменный ток.

$$i(t) = I_0 \sin[\varphi_0 + (2e/h)Ut], \quad (1)$$

Где  $I_0$  и  $\varphi_0$  – постоянные величины, характеризующие амплитуду силы постоянного электрического тока и начальную фазу соответственно;  $e = 1,602 \times 10^{-19}$  Кл – заряд электрона (с точностью до 3-го знака после запятой);  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж · с – постоянная Планка.

Из этого следует очевидное выражение

$$\omega = (2e/h)U, \quad (2)$$

где  $\omega = 2\pi f$  – круговая частота.

Величина  $\omega/U = 2e/h = 483,59767$  МГц/мкВ является постоянной Джозефсона.

Нестандартный эффект Джозефсона обратим: если джозефсоновский контакт облучать электромагнитным полем с частотой  $\omega$ , то на контакте напряжение будет ступенчатым образом изменяться в зависимости от частоты внешнего электромагнитного поля с зависимостью

$$U = n(h/2e)f, \quad (3)$$

Где  $f$  – частота электромагнитного поля.

П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ  
*TashGTU, Tashkent, Republic of Uzbekistan*

## **ЕМКОСТНЫЕ ЭФФЕКТЫ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ДАТЧИКОВ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭП**

P.M. MATYAKUBOVA, R.R. KULUEV

*Tashkent State Technical University, Tashkent, Republic of Uzbekistan*

## **CAPACITIVE EFFECTS FOR CONSTRUCTION OF EF TENSION SENSORS**

Обзор физических эффектов, принципиально возможных для построения датчиков напряженности ЭП промышленной частоты, проводился с позиций классификации, предложенной В.Я. Ложниковым в работах При этом под физическим эффектом понимается частное (конкретное) проявление физического явления, а под физическим явлением – изменение свойства физического тела. С точки зрения построения датчиков напряженности ЭП наибольший интерес представляют одинарные и двойные физические эффекты, проявляющиеся при одними двухвоздействиях соответственно.

На одинарных физических эффектах принципиально возможны девять типов, а на двойных – семьдесят два типа датчиков. Однако, учитывая, что подавляющее большинство двойных физических эффектов мало изучено, и принимая во внимание отсутствие в литературе сведений о ярко выраженных изменениях радиоактивных, химических свойств физических тел и их временных параметров под действием ЭП, критической оценке были подвергнуты шесть групп одинарных физических эффектов:

1) электроэлектрические; 2) электромагнитные; 3) электромеханические; 4) электротепловые; 5) электрооптические; 6) электропространственные.

К емкостным эффектам относятся эффекты изменения диэлектрической проницаемости некоторых диэлектриков (сегнетоэлектриков, ферродиэлектриков) под действием напряженности ЭП. Изменение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектриков под действием напряженности ЭП объясняется тем, что внешнее поле вызывает в сегнетоэлектриках поляризацию не только за счет смещения электрических зарядов, но и за счет смещения и переориентации целых областей доменов.

Емкостные эффекты широко используются для построения датчиков напряженности ЭП В одних датчиках в качестве чувствительного элемента используется сегнетоэлектрик, расположенный между обкладками конденсатора. Конденсатор выступает в роли модулятора тока за счет изменения

под действием ЭП емкости в измерительной цепи. Изменение тока в цепи пропорционально измеряемой напряженности ЭП. В других датчиках в качестве чувствительного элемента используется полупроводник варикапа, изменяющего свою емкость под действием напряженности ЭП. Варикап включается в мостовую цепь. При полной компенсации мостовой цепи на её выходе устанавливается напряжение, величина и знак которого соответствуют модулю и направлению вектора напряженности ЭП.

Датчики, основанные на емкостном эффекте, обладают нелинейными характеристиками  $\varepsilon = f(E)$ ,  $\varepsilon$  - диэлектрическая проницаемость;  $E$  - напряженность ЭП)

**П.М. МАТЯКУБОВА, Р.Р. КУЛУЕВ, К.Н. ЭРГАШЕВА**

*TashGTU, Tashkent, Республика Узбекистан*

## **РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ КОТРОЛЯ ОПТИЧЕСКОГО КАЧЕСТВА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ КОНОСКОПИИ**

Целью настоящего исследования является разработка и техническая реализация нового высокоточного метода контроля оптической однородности крупногабаритных монокристаллов, применяемых в современных оптоэлектронных устройствах.

**P.M. MATYAKUBOVA, R.R. KULUEV**

*Tashkent State Technical University, Tashkent, Republic of Uzbekistan*

## **DEVELOPMENT OF A SOFTWARE AND HARDWARE COMPLEX FOR MONITORING OF OPTICAL QUALITY OF SINGLE CRYSTAL OPTOELECTRONIC ELEMENTS BY THE METHOD OF LASER CONOSCOPY**

The purpose of this study is the development and technical implementation of a new high-precision method for monitoring the optical uniformity of large-sized single crystals used in modern optoelectronic devices.

В настоящей работе для обнаружения оптических неоднородностей в кристаллах применяется метод лазерной коноскопии, основанный на анализе интерференционных (коноскопических) картин, возникающих при прохождении через оптический кристалл конических пучков лазерного света. Метод коноскопии (т.е. использование конических световых пучков) известен с конца XIX в., а с конца 90-х гг. для получения коноскопических картин начали применяться лазеры. Несмотря на высокую чувствительность интерференционных линий (т.н. изохром) к оптическим аномалиям, данный метод до недавнего времени позволял проводить только грубую и качественную оценку оптической однородности кристалла, т.к. не было точной теории для описания изохром в коноскопических картинах.

В настоящей работе применяется новый математически строгий аппарат, позволяющий правильно описывать форму изохром одноосных или слабо двуосных кристаллов, на основе которого разработана модель для расчета вариаций показателей преломления и величин механических напряжений в объемах кристалла с оптическими неоднородностями путем анализа вызываемых ими искажений изохром в коноскопических картинах. Концепция комплекса. Разрабатываемый программно-аппаратный комплекс должен

включать в себя источник лазерного излучения, оптическую схему получения и оцифровки коноскопических картин, систему позиционирования кристалла-образца, а также блоки управления узлами аппаратной части комплекса и обмена данными между комплексом и ПК с установленным ПО для анализа коноскопических картин.

Применение лазера в методе коноскопии позволяет, во-первых, получать изохромы высоких порядков, которые более чувствительны к оптическим неоднородностям, а во-вторых исследовать оптическую однородность в глубине массивных кристаллов без необходимости вырезания из них тонких образцов, что дает возможность проводить неразрушающий контроль оптической однородности больших партий крупногабаритных монокристаллов еще до того, как их разрежут на заготовки элементов будущих устройств.

Наличие прецизионной системы перемещения кристалла-образца относительно конического пучка лазерных лучей позволит, путем сканирования отдельных участков внутри крупногабаритного кристалла, определить локализацию оптических неоднородностей в его объеме.

Высокая чувствительность изохром к оптическим неоднородностям материала делает метод коноскопии перспективным для контроля оптического качества кристаллов. Разработанные теоретические и технические аспекты метода лазерной коноскопии позволяют реализовать новый способ обнаружения в массивных кристаллах оптических неоднородностей, их классификации, определения их точного местоположения в объеме материала и численной оценки вызываемых ими оптических искажений. Создаваемый программно-аппаратный комплекс должен использоваться в качестве основного технического средства контроля оптического качества кристаллов, предназначенных для лазерных, оптоэлектронных и акустооптических устройств, в т. ч. при их массовом производстве.

#### *Список литературы*

1. Айдинян Н.В., Арямин Е.Е., Морозова К.А., Костюк А.В., Кутуз-зов Д.С., Калугин И.В., Кузьмина М.Д., Воронцов М.С. Изохромы в коноскопических картинах одноосных кристаллов при произвольных ориентациях нормали относительно оптической оси // Вестник ТвГУ. Серия «Физика». Тверь, 2014. Выпуск 3. С. 37–65.
2. Гречушников Б.Н., Желудев И.С., Залесский А.В., Пикин С.А., Семи-летов С.А., Урусовская А.А., Чистяков И.Г., Шувалов Л.А. Современная кристаллография. Т.4. Физические свойства кристаллов. М.: Наука, 1981. – 496 с.
3. Кутузов Д.С., Морозова К.А., Шмелева А.В., Рыбина С.С., Калугин И.В., Самохвалов Н.Е.. Исследование оптических аномалий в одноосных кристаллах методом лазерной коноскопии. // XXII Каргинские чтения с между-народным участием. Всероссийская научно-техн. конф. молодых ученых «Фи-зика, химия и новые технологии» 26 марта 2015 года, г. Тверь: тезисы докладов, – Тверь. гос. ун-т, 2015. – С. 74.

Д. Г. ФИСЕНКО, В. С. МОЗГОВОЙ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ФОРМИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО ПОРТФЕЛЯ ПРОЕКТОВ ГЕОЛОГОРАЗВЕДОЧНЫХ РАБОТ НА СРЕДНЕСРОЧНУЮ ПЕРСПЕКТИВУ**

В настоящем докладе рассматривается задача формирования портфеля проектов геологоразведочных работ с учетом технологических, лицензионных, финансовых и других ограничений. Представлена математическая модель проблемы в виде задачи линейного программирования. Сформулированы варианты постановки задачи, целевая функция и ограничения, и соответствующие им системы уравнений на краткосрочный и среднесрочный периоды планирования. Представлены уравнения для учета основных ограничений: целевых показателей, прироста запасов, не превышения доступного бюджета, выполнения лицензионных обязательств, наличия переходящих работ и приоритетности выполнения отдельных проектов ГРП.

D.G. FISENKO, V.S. MOZGOVOY

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **FORMATION OF THE OPTIMAL PORTFOLIO OF MEDIUM-TERM EXPLORATION PROJECTS**

This report considers the problem of obtaining a portfolio of exploration projects taking into account some limitations. A mathematical model of the problem is formalized as a linear programming problem. Variants of the problem statement, objective function and constraints, and the corresponding system of equations for the short-term and medium-term are formulated. Equations are presented for accounting the main constraints: target indicators, increment in stocks, not exceeding the adequate budget, fulfilling license obligations, accounting for transitional work and implementation priority of individual geological exploration projects.

В планировании деятельности нефтегазовых компаний часто возникают задачи формирования оптимального портфеля проектов геологоразведочных работ (ГРП), т.е. определения перечня проектов ГРП, реализация которых наиболее эффективна и целесообразна. Под эффективностью обычно понимается максимизация прибыли или реже – минимизация расходов.

При решении этой задачи требуется соблюдение большого количества условий: целевые показатели нефтегазовой компании по восполнению запасов должны быть достигнуты, количество нарушенных лицензионных обязательств не должны превышать допустимое значение, затраты на ГРП не могут превышать определенный объем и др.

В настоящей работе приведена формализация задачи поиска оптимального портфеля проектов ГРП с использованием методов линейно-целочисленного

программирования. Сформулированы постановки задачи и системы уравнений формирования оптимального портфеля проектов ГРР на краткосрочную и среднесрочную перспективу. Выведены основные уравнения для ограничений, целевых показателей, выполнения бюджета, лицензионных обязательств, переходящих работ и приоритетности выполнения отдельных проектов ГРР.

В результате был разработан модуль оптимизации для системы управления проектами ГРР.

*Список литературы*

1. Litvin Y.V., Kulik V.S., Fisenko D.G. and others// Проблемы экономики и управления нефтегазовым комплексом. – №10(178) – 2019

А.Ю. ГРИБОВ, О.И. БЕРДАСОВ, Д.В. СУТЫРИН, С.Н. СЛЮСАРЕВ  
*ФГУП ВНИИФТРИ, р.п. Менделеево, Солнечногорский район, Московская область,  
Россия*

## **ПРИНЦИП ФОРМИРОВАНИЯ ШКАЛЫ ВРЕМЕНИ НА ОСНОВЕ ОПТИЧЕСКОГО РЕПЕРА ЧАСТОТЫ**

Несмотря на то, что оптические реперы частоты достигли больших успехов за последние десятилетия, их широкому применению в метрологических институтах препятствует отсутствие инфраструктуры, которая характерна для радиочастотной области. В данной работе мы рассматриваем работу оптического репера частоты в составе ГЭТ-1 2018 и предлагаем дальнейшее развитие инфраструктуры в оптической области на примере создания хранителя времени в оптическом диапазоне.

A.YU. GRIBOV, O.I. BERDASOV, D.V. SUTYRIN, S.N. SLYUSAREV

*FSUE VNIIFTI, Mendeleevo, Solnechnogorsk district, Moscow region, Russia*

## **TIME SCALE DEVELOPMENT BASED ON OPTICAL CLOCK**

Despite the fact that optical frequency references have achieved great success over the past decades, their widespread use in metrological institutes is hindered by the lack of infrastructure, which is characteristic of the radio frequency region. In this paper, we consider the work of the optical frequency reference as part of GET-1 2018 and propose further development of the infrastructure in the optical field using the example of developing a time-keeper in the optical range.

Повышение требований к точности согласования шкал времени вызывает необходимость поиска новых подходов к их формированию. Существуют два основных направления для решения данной задачи с использованием оптического репера частоты (ОРЧ). Первый способ более подробно описан в работе [1] и подразумевает создание шкалы с использованием ОРЧ наравне с цезиевыми и рубидиевыми реперами. Второй способ заключается в формировании шкалы времени только на основе ОРЧ и хранителей частоты в микроволновом диапазоне [2-4]. Для его реализации необходимо решить несколько основных задач: определить абсолютное значение частоты ОРЧ относительно цезиевого репера либо шкалы времени, связанной с ТАИ; определить дрейф частоты хранителя (ВМ) относительно ОРЧ [5]; создать аппаратно-программный комплекс для непрерывного формирования шкалы времени.

Дальнейшее повышение точности согласования шкал времени достигается путем создания хранителя частоты в оптическом диапазоне и его непрерывного сличения с хранителем частоты микроволнового диапазона. Для решения этой задачи, нами предложена схема, представленная на рис. 1. В качестве лазерного источника планируется использовать волоконный эрбиевый лазер Koheras

Adjustic E15, работающий на длине волны 1542 нм с собственной спектральной шириной линии излучения менее 100 Гц и обеспечивающий выходную мощность излучения около 40 мВт. Использование длины волны телекоммуникационного диапазона (1,5 мкм) предоставляет возможность передавать ультрастабильные сигналы по волоконным линиям на большие расстояния. В нашем случае, здания, в которых располагается оптический хранитель частоты и водородные мазеры из состава первичного эталона ГЭТ 1 - 2018, находятся друг от друга на расстоянии порядка 1 км. Для предотвращения искажений, вносимых в сигнал волоконной линией передачи, требуется наличие дополнительной схемы компенсации фазового шума. Она реализуется следующим образом: выходное лазерное излучение делится на две составляющие, основная часть мощности передаётся по оптическому волокну на удалённый объект, где небольшая его доля попадает на зеркало Фарадея, поворачивающее поляризацию на 90 градусов относительно налетающего пучка. Отражённое излучение повторно проходит через волоконную линию и сбивается на фотодетекторе ФД 1 с составляющей, не прошедшей через линию передачи. Таким образом, формируется сигнал биений, содержащий информацию о фазовых шумах, возникших в процессе двойного прохода через линию, который далее сравнивается посредством фазового детектора с сигналом опорного генератора (Генератор 1).

Результирующий сигнал ошибки подаётся на генератор управляемый напряжением (ГУН), который контролирует подстраивающий волоконный акустооптический модулятор АОМ 1, работающий в первом порядке на частоте 80 МГц и обеспечивающий подавление вносимых линией фазовых шумов. Акустооптический модулятор АОМ 2, работающий на фиксированной частоте 40 МГц в минус первом порядке и располагающийся на удалённом конце волоконной линии передачи, позволяет отличить отраженное излучение от нежелательных обратных переотражений, которые не сдвинуты по частоте. Контроллеры поляризации, установленные на обоих концах линии, обеспечивают постоянную максимизацию согласования поляризации в плечах, формирующих биения на фотодетекторе ФД 1.

Около 1 мВт лазерного излучения на длине волны 1542 нм подаётся на безофсетный фемтосекундный синтезатор оптических частот (ФСОЧ 2) фирмы Avesta, обеспечивающий передачу стабильности в радиодиапазон для сравнения с ансамблем водородных лазеров посредством системы компараторов, расположенной на объекте “Сигнал”. Такая же мощность излучения поступает на аналогичный синтезатор ФСОЧ 1, стабилизированный по оптическому стандарту частоты на атомах  $^{87}\text{Sr}$ , что позволяет осуществлять синхронизацию хранителя частоты в оптическом диапазоне с ОРЧ.

Обычно для проверки корректной передачи частоты строят две идентичные волоконные линии, однако в нашем случае такая возможность существует за

счёт одновременного сохранения в схеме варианта работы, где в качестве хранителя частоты по-прежнему выступает водородный лазер ВМ18, связанный посредством радиооптической линии с ансамблем водородных лазеров.

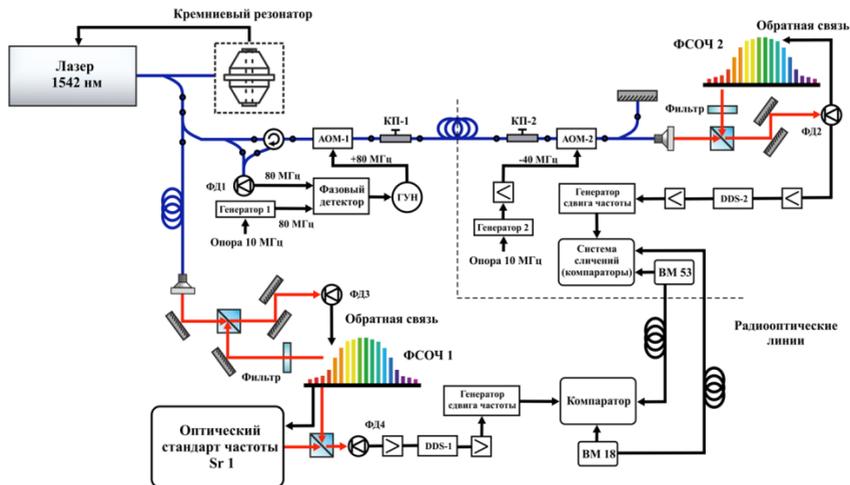


Рис. 1. Схема сравнения на основе оптического хранителя: КП-1, КП-2 – контроллеры поляризации; ГУН – генератор, управляемый напряжением; ВМ 18, 53 – ключевые для измерений водородные лазеры; АОМ-1 – АОМ, обеспечивающий подавление вносимых линией фазовых шумов; АОМ-2 – АОМ, позволяющий отличить отраженное излучение от нежелательных обратных переотражений.

Отсутствие в кремнии процессов старения, которые обуславливают дрейф частоты в ULE-резонаторах, открывает возможность создания лазерных систем с малым дрейфом. Частотный дрейф такого резонатора имеет линейный характер и составляет порядка 100 мкГц/сек [6], т.е. около 8,64 Гц ( $\sim 2,01 \cdot 10^{-14}$ ) за сутки. После его компенсации остаточные колебания частоты лазерной системы будут на два порядка ниже, т.е. на уровне 1 мкГц/сек, что соответствует дрейфу около 86,4 мГц ( $\sim 2,01 \cdot 10^{-16}$ ) за сутки. Использование системы на основе криогенного кремниевого резонатора позволит реализовать хранитель частоты в оптическом диапазоне и потребует синхронизации с ОРЧ не чаще одного раза в сутки.

#### Список литературы

1. Yao J. et al., Journal of The Institute of Navigation, 65(4) 601 (2018).
2. Grebing C., et al., Optica, 3(6) 563 (2016).
3. Ido T. et al., Proceedings of the 48th Precise Time and Time Interval Systems and Application
4. Meeting, Monterey, CA.15-17 (2017).
5. Nachisu H., et al., Scientific Reports, 8, 4243 (2018).

6. Сутырин Д. В. и др., Квантовая электроника, 49(2), 199 (2019).
7. Matei D. G. et al., Phys. Rev. Lett. 118, 263202 (2017).

С.М. ИГНАТОВИЧ<sup>1</sup>, М.Н. СКВОРЦОВ<sup>1</sup>, В.И. ВИШНЯКОВ<sup>1</sup>,  
Н.Л. КВАШНИН<sup>1</sup>, В.А. ВАСИЛЬЕВ<sup>1</sup>, Д.В. БРАЖНИКОВ<sup>1,2</sup>,  
В.И. ЮДИН<sup>1,2,3</sup>, А.В. ТАЙЧЕНАЧЕВ<sup>1,2</sup>, С.Н. БАГАЕВ<sup>1,2</sup>,  
И.Ю. БЛИНОВ<sup>4</sup>, В.Г. ПАЛЬЧИКОВ<sup>4,5</sup>, Ю.С. САМОХВАЛОВ<sup>4</sup>, Д.А.  
ПАРЁХИН<sup>4</sup>, Е.А. ЗОТОВ<sup>4</sup>, М.П. МАЛАХ<sup>4</sup>, С.М. КОБЦЕВ<sup>6</sup>, В.А.  
ГАЙСЛЕР<sup>7</sup>

<sup>1</sup> *Институт лазерной физики СО РАН, Новосибирск, Россия*

<sup>2</sup> *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

<sup>3</sup> *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

<sup>4</sup> *Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений, Менделеево, Московская область, Россия*

<sup>5</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

<sup>6</sup> *ООО «ТехноСкан», Новосибирск, Россия*

<sup>7</sup> *Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия*

## **МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕРХМИНИАТЮРНОГО КВАНТОВОГО СТАНДАРТА ЧАСТОТЫ**

Рассмотрены последние результаты метрологических характеристик разработанного сверхминиатюрного стандарта частоты на основе эффекта когерентного пленения населенностей, который является первым реализованным стандартом подобного типа в России. Продемонстрирована долговременная непрерывная автономная работа (порядка нескольких месяцев) стандарта, а также достижение высокой долговременной нестабильности частоты (порядка нескольких единиц  $10^{-12}$ ) на суточном интервале измерений, что соответствует передовому мировому уровню.

Создание малогабаритного высокостабильного квантового стандарта частоты позволит реализовать в большем объеме в прецизионной аппаратуре потребителей ГЛОНАСС потенциальные точности этой системы. Использование эффекта когерентного пленения населенностей (КПН) позволяет отказаться от использований СВЧ резонатора, что позволяет кардинально уменьшить размеры стандарта при сохранении высоких метрологических характеристик. Целью настоящей работы является разработка сверхминиатюрного высокостабильного квантового стандарта частоты на основе эффекта когерентного пленения населенностей для прецизионной аппаратуры потребителей ГЛОНАСС.

Разработанный сверхминиатюрный стандарт частоты времени и частоты на основе эффекта когерентного пленения населенностей является первым реализованным стандартом подобного типа в России. Впервые в России создана и освоена технология изготовления сверхминиатюрных рубидиевых ячеек, а также технология производства лазеров в миниатюрном (на уровне нескольких кубических миллиметров) исполнении. Продемонстрирована долговременная

непрерывная автономная работа (порядка нескольких месяцев) стандарта, а также достижение высокой долговременной нестабильности частоты (порядка нескольких единиц  $10^{-12}$ ) на суточном интервале измерений, что соответствует передовому мировому уровню.

Разработанный стандарт частоты предназначен к использованию в качестве элемента навигационно-временных устройств для изделий высокоточного применения, обеспечивая их прогнозируемой временной информацией с требуемой точностью при потере сигналов ГНСС.

**Секция**  
**ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И**  
**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Руководитель секции	– д.ф.-м.н., профессор Кудряшов Николай Алексеевич
Секретарь секции	– к.ф.-м.н., доцент Рябов Павел Николаевич

Тел./факс.: 8 (495) 788-56-99, доб. 9072

E-mail: [pnryabov@mephi.ru](mailto:pnryabov@mephi.ru)

**В.В. НАЗАРОВ**

*НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

## **АНАЛИЗ ДВУХ МОДЕЛЕЙ ОПИСАНИЯ ПРОЦЕССА ДЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЧНОСТИ ПРИ СОВМЕСТНОМ РАСТЯЖЕНИИ И КРУЧЕНИИ ТРУБЧАТЫХ ОБРАЗЦОВ**

При аппроксимации опытных данных длительной прочности, полученных в условиях сложного напряженного состояния, рассматривают различные инварианты тензора напряжений (максимальное нормальное напряжение, интенсивность напряжений удвоенное максимальное касательное напряжение), а так же их линейные комбинации с одним материальным параметром. Погрешность суммарного расхождения экспериментальных данных и аппроксимирующих значений всегда меньше для линейных комбинаций с материальным параметром, чем для базовых инвариантов тензора напряжений, что предопределяет преимущественное использование на практике этих линейных комбинаций с материальным параметром. В данной работе рассмотрены две модели описания процесса длительной прочности при сложном напряженном состоянии. Первая из двух – линейная комбинация интенсивности напряжений и максимального нормального напряжения. Вторая из двух – линейная комбинация удвоенного максимального напряжения сдвига и максимального нормального напряжения. Из анализа результатов статистической обработки экспериментальных данных, полученных при растяжении и кручении трубчатых образцов, установлено влияние каждого из двух максимальных напряжений на время разрыва, а также преимущество использования одной из двух этих моделей.

**V.V. NAZAROV**

*Institute of Mechanics Lomonosov Moscow State University,  
Moscow, Russian Federation*

## **ANALYSIS OF TWO MODELS FOR DESCRIBING THE CREEP RUPTURE PROCESS UNDER SIMULTANEOUS TENSION AND TORSION OF THE TUBULAR SPECIMENS**

Various invariants of the stress tensor (maximum normal stress, Mises equivalent stress, doubled maximum tangent stress) are considered, as well as their linear combinations with one material parameter when approximating the experimental data of the creep-rupture obtained under complex-stress state. The error of the total discrepancy between the experimental data and the approximating values is always less for linear combinations with the material parameter than for the basic invariants of the stress tensor. This determines the predominant use in practice of these linear combinations with the parameter. In this paper we consider two models for describing the creep-rupture process under complex-stress state. The first is linear combination of the Mises equivalent stress and the maximum normal stress. The second is linear combination of the doubled maximum tangent stress and the maximum normal stress. The effect of each of two maximum stresses on the creep-rupture process is established from the analysis of the results of statistical processing of experimental data obtained under tension and torsion of tubular specimens.

Задача описания времени в момент разрушения в условиях ползучести и сложного напряженного состояния заключается в выборе инварианта (эквивалентного напряжения) тензора напряжений, приводящего к наименьшей суммарной погрешности расхождения опытных данных относительно отрезка аппроксимирующей прямой. В качестве зависимости времени в момент разрушения от эквивалентного напряжения принято использовать степенную функцию с двумя материальными параметрами. В статьях [1–2] показано, что линейная комбинация двух базовых инвариантов тензора напряжений с одним материальным параметром по сравнению с одним базовым инвариантом почти всегда приводит к меньшей погрешности. Из анализа погрешностей при статистической обработке опытных данных по длительной прочности в условиях сложного напряженного состояния рекомендуется использовать линейную комбинацию интенсивности напряжений и максимального нормального напряжения с одним материальным параметром  $s_{e\text{inv}}^1 = [1 - b_1]s_{\text{mises}} + b_1s_{\text{max}}$  при  $0 \leq b_1 \leq 1$  [3]. Так как интенсивность напряжений – абстрактная величина, то вместо нее предложено использовать удвоенное максимальное касательное напряжение, при этом эквивалентное напряжение примет вид  $s_{e\text{inv}}^2 = [1 - b_2]t_{\text{max}} + b_2s_{\text{max}}$  при  $0 \leq b_2 \leq 1$ . Величины материальных параметров  $b_1$  и  $b_2$  устанавливают влияние каждого базового инварианта тензора напряжений на время в момент разрушения.

	$s_{\text{max}}$	$2t_{\text{max}}$
$0 \leq b_2 < 0,5$	слабое влияние	сильное влияние
$0,5 < b_2 \leq 1$	сильное влияние	слабое влияние

При анализе погрешностей двух эквивалентных напряжений использовались опытные данные [4–6]. Анализ погрешностей не выявил превосходства каждого из двух рассмотренных эквивалентных напряжений.

#### Список литературы

1. Локощенко А.М., Назаров В.В. // Авиаци.-косм. техн. и техн. 2004, № 7, С. 124–128.
2. Локощенко А.М. // Механика твердого тела. 2010, № 4, С. 164–181.
3. Лебедев А.А. // Проблемы прочности. 1996, № 2, С. 25–46.
4. Dyson В.Ф., Mclean D. // Metal Science. 1977, Vol. 11, no. 2, P. 37–45.
5. Cane В.Ж. // Advances in Fracture Research – Cannes, 1981, Vol. 3, P. 1285–1293.
6. Назаров В.В. // Завод. лаб. Диагн. матер. 2013, Т. 79, № 8, С. 60–61.

А.А. КУТУКОВ, Н.А. КУДРЯШОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **АВТОМАТИЗАЦИЯ ПОСТРОЕНИЯ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ R-ФУНКЦИИ**

Рассмотрен алгоритм построения точных решений нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием метода R-функции, который представляет собой разновидность метода простейших уравнений. На основе алгоритма написана программа в системе компьютерной алгебры Maple. Работа программы протестирована на уравнениях, описывающих распространение импульсов в оптической среде.

A.A. KUTUKOV, N.A. KUDRYASHOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **AUTOMATION OF THE CONSTRUCTION OF EXACT SOLUTIONS OF NONLINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS BY THE R-FUNCTION METHOD**

An algorithm for constructing exact solutions of nonlinear ordinary differential equations using the R-function method, which is a variation of the method of simple equations has been considered. The program was written in the Maple computer algebra system. The program has been tested on equations describing the propagation of pulses in an optical fiber.

Известно, что многие физические процессы описываются нелинейными дифференциальными уравнениями. Для неинтегрируемых нелинейных дифференциальных уравнений в настоящее время существует ряд методов для нахождения точных решений [1], наиболее предпочтительным среди которых является метод простейших уравнений [2], поскольку он обобщает другие методы и прост в реализации.

В данной работе рассматривается алгоритм автоматизации метода простейших уравнений [3-5] с использованием R-функции [6-8] вида

$$R(z) = \frac{4a}{4a^2 e^{z^2} + \chi e^{-z}}. \quad (1)$$

Легко убедиться, что функция  $R(z)$  имеет полюс первого порядка и является решением уравнения

$$R_z^2 = R^2(1 - \chi R^2). \quad (2)$$

Алгоритм нахождения точных решений дифференциальных уравнений вида

$$M_n(y, y_z, y_{zz}, \dots) = 0 \quad (3)$$

состоит в следующем:

1. Определение порядка полюса  $p$  уравнения (3) по углу наклона ребра многоугольника Ньютона, соответствующего ведущим членам рассматриваемого уравнения [5].
2. Задание усечённого разложения  $y(z) = \sum_{k=0}^p A_k R^k(z)$ .
3. Автоматическая подстановка усечённого разложения в уравнение (3) с учётом уравнения (2).
4. Приравнивание нулю коэффициентов при одинаковых степенях  $R(z)$  и, при наличии,  $R_z(z)$ .
5. Решение переопределённой системы уравнений.
6. Построение решения уравнения (3) с учётом вида функции  $R(z)$ .
7. Проверка точного решения путём подстановки в исходное уравнение.

Удобство программной реализации данного алгоритма заключается в том, что на шаге 3 не используется вид функции  $R(z)$ , а производные  $y, y_z, y_{zz}, \dots$  вычисляются при помощи уравнения (2). В случае, если уравнение (3) содержит только производные чётного порядка, на шаге 4 не возникает производной  $R_z(z)$ , что упрощает нахождение точного решения.

Программа протестирована на уравнениях, описывающих распространение импульсов в оптической среде [6-8].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-11-00209.

*Список литературы*

1. Кудряшов Н.А. Методы нелинейной математической физики // Издательский дом “Интеллект”. 2010. 368 с.
2. Kudryashov N.A. // *Chaos, Solitons & Fractals*. 2005. Vol. 24. I. 5. P. 1217–1231
3. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. 2019. № 2019661587
4. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А. // *Вестник НИЯУ “МИФИ”*. 2019. Т. 8. №3. С. 284–289.
5. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. 2019. № 2019617572.
6. Kudryashov, N.A. // *Optik*. 2020. Art. no. 163550. (In press).
7. Kudryashov, N.A. // *Applied Mathematics and Computation*. 2020. Vol. 371. Art. no. 124972.
8. Kudryashov, N.A. // *Applied Mathematics Letters*. 2020. Vol. 103. Art. no. 106155.

В.В. ЦЕГЕЛЬНИК

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь*

## **АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЕШЕНИЙ ТРЕХМЕРНЫХ НЕХАОТИЧЕСКИХ КОНСЕРВАТИВНЫХ СИСТЕМ**

В работе исследованы аналитические свойства решений семейства трехмерных нехаотических консервативных систем с двумя квадратичными нелинейностями и одной константой. В предположении, что независимая переменная является комплексной, проведен Пенлеве-анализ каждой системы семейства.

V.V. TSEGEL'NIK

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus*

## **ANALYTICAL PROPERTIES OF SOLUTIONS OF THREE-DIMENSIONAL NON-CHAOTIC CONSERVATIVE SYSTEMS**

The analytical properties of solutions of family of three-dimensional conservative systems with two quadratic nonlinearities and one constant are investigated. Painleve' analysis of each system in the family is performed on the assumption that the independent variable is a complex variable.

Работы Спротта [1, 2] связаны с вопросом о том, насколько простой может быть трехмерная автономная система непрерывного времени, если она хаотична. Данный вопрос тесно связан с интересной и пока нерешенной проблемой определения минимальных условий для хаоса. В работе [3] было показано, что все диссипативные трехмерные автономные системы с четырьмя элементами в правых частях нехаотичны. Аналогичный результат для консервативных систем (за исключением одной) был получен в [4].

В данном сообщении представлены результаты исследования аналитических свойств решений консервативных систем с двумя квадратичными нелинейностями и одной константой [4]

$$\dot{x} = y^2 + yz, \quad \dot{y} = x, \quad \dot{z} = 1. \quad (1)$$

$$\dot{x} = y^2 + z^2, \quad \dot{y} = x, \quad \dot{z} = 1. \quad (2)$$

$$\dot{x} = 1 + y^2, \quad \dot{y} = xz, \quad \dot{z} = y. \quad (3)$$

$$\dot{x} = \varepsilon + y^2, \quad \dot{y} = z^2, \quad \dot{z} = x. \quad (4)$$

$$\dot{x} = 1 + y^z, \quad \dot{y} = x^2, \quad \dot{z} = x. \quad (5)$$

$$\dot{x} = 1 + yz, \quad \dot{y} = x^2, \quad \dot{z} = y. \quad (6)$$

$$\dot{x} = 1 + yz, \quad \dot{y} = z^2, \quad \dot{z} = x. \quad (7)$$

$$\mathcal{X} = 1 + \varepsilon y^2, \quad \mathcal{Y} = x^2, \quad \mathcal{Z} = x. \quad (8)$$

$$\mathcal{X} = 1 + yz, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = \varepsilon y. \quad (9)$$

$$\mathcal{X} = 1 + z^2, \quad \mathcal{Y} = x^2, \quad \mathcal{Z} = y. \quad (10)$$

$$\mathcal{X} = z^2 + \varepsilon, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = y. \quad (11)$$

$$\mathcal{X} = 1 + y, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = x^2. \quad (12)$$

$$\mathcal{X} = 1 + y, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = y^2. \quad (13)$$

$$\mathcal{X} = 1 + y, \quad \mathcal{Y} = z^2, \quad \mathcal{Z} = x^2. \quad (14)$$

$$\mathcal{X} = 1 + y, \quad \mathcal{Y} = z^2, \quad \mathcal{Z} = xy. \quad (15)$$

$$\mathcal{X} = x^2 + y, \quad \mathcal{Y} = 1, \quad \mathcal{Z} = -2zx. \quad (16)$$

$$\mathcal{X} = 1 + z, \quad \mathcal{Y} = x^2, \quad \mathcal{Z} = xy. \quad (17)$$

$$\mathcal{X} = y^2 + y, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = 1. \quad (18)$$

$$\mathcal{X} = y^2 + z, \quad \mathcal{Y} = 1, \quad \mathcal{Z} = x^2. \quad (19)$$

$$\mathcal{X} = y^2 + z, \quad \mathcal{Y} = x^2, \quad \mathcal{Z} = 1. \quad (20)$$

$$\mathcal{X} = y^2 + z, \quad \mathcal{Y} = xz, \quad \mathcal{Z} = 1. \quad (21)$$

В (1) – (21)  $x, y, z$  – неизвестные функции независимой переменной  $t$ ;  $\varepsilon^2 = 1$ .  
В предположении, что переменная  $t$  является комплексной, доказана

Теорема. Системы (1), (9), (16), (19) являются системами Пенлеве-типа.

*Список литературы*

1. Sprott J.C. // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 50. P. R647 – R650.
2. Sprott J.C. // Phys. Lett. A. 1997. Vol. 228. P. 271 – 274.
3. Heidel J., Zhang Fu. // Nonlinearity. 1999. Vol. 10. P. 1289 – 1303.
4. Heidel J., Zhang Fu. // Nonlinearity. 1999. Vol. 12. P. 617 – 633.

Н.А. КУДРЯШОВ, Т.Д. ШАРОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ФЕРМИ-ПАСТА-УЛАМА**

Рассмотрена обобщенная модель Ферми-Паста-Улама с учетом выражений более высоких порядков. Получено нелинейное дифференциальное уравнение пятого порядка, описывающее возмущения в цепочке масс. Получено точное решение уравнения в виде волновых функций и проведен анализ полученных решений.

N.A. KUDRYASHOV, T.D. SHAROVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **ANALYTICAL SOLUTION OF THE GENERALIZED FERMI-PASTA- ULAM MODEL**

A generalized Fermi-Pasta-Ulam model subject to expressions of higher orders is considered. A fifth-order nonlinear differential equation which describes perturbations in the mass chain is obtained. A search for particular solutions of the equation in the form of wave functions is performed and an analysis of the obtained solutions is carried out.

Ферми, Паста и Улам изучали проблему распространения возмущений в твердом теле [1]. Они надеялись показать, что начальное условие, при котором энергия содержится в низших модах, благодаря нелинейному взаимодействию будет переходить в состояние статистического равновесия. Вместо этого в вычислительном эксперименте они получили неравновесное поведение, включая квазипериодические возвраты к начальному состоянию.

Рассматриваемая модель состоит из точечных масс, соединенных пружинами. Движение  $i$ -й массы зависит от сил, действующих со стороны соседних масс, и описывается вторым законом Ньютона[2]:

$$m\ddot{y}_i = F_{i,i+1} - F_{i-1,i}$$

где  $y_i$  - координата положения равновесия  $i$ -й массы, а сила  $F_{i-1,i}$  выбирается в виде:

$$F_{i-1,i} = k(\Delta l) + \alpha(\Delta l)^2 + \beta(\Delta l)^3 + \gamma(\Delta l)^4 + \delta(\Delta l)^5, \Delta l = y_i - y_{i-1}$$

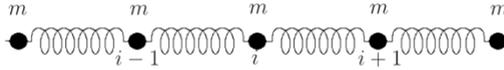


Рис.1. Взаимодействие масс в модели Ферми, Паста и Улама

В данной работе получено нелинейное дифференциальное уравнение пятого порядка для описания возмущения в цепочке масс:

$$u_t + \alpha u u_x + \lambda^2 u_{xxx} + \frac{\gamma k^2}{2} u^3 u_x + \frac{5\delta k^3}{16} u^4 u_x + \alpha \lambda^2 u u_{xxx} + 2\alpha \lambda^2 u_x u_{xx} + \frac{3\beta k}{4} u^2 u_x + \frac{3\beta k}{4} \lambda^2 u^2 u_{xxx} + \frac{3\beta k}{4} \lambda^2 u_x^3 \quad (1)$$

$$+ 3\beta k \lambda^2 u u_x u_{xx} + \frac{2}{5} \lambda^4 u_{xxxxx} = 0$$

Крускал и Забуски нашли, что первые три члена уравнения приводят к уравнению Кортевега-деФриза. Важное преимущество уравнения заключается в том, что численное моделирование волн, описываемых уравнением КдФ дало объяснение парадокса ФПУ и позволило авторам сформулировать концепцию солитона[3].

Точное решение уравнения (1) получено с помощью метода построения точных решений нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Используя замену  $u(x, t) = w(z), z = x - C_0 t$ , решение уравнения ищем в виде

$$w(z) = A_0 + A_1 R(z), \text{ где } R(z) = 4a^4 (4a^2 e^{-\mu z} + \xi e^{\mu z})^{-1} \quad (2)$$

При следующих ограничениях на коэффициенты:

$$A_0 = 0, C = 0, C_0 = \frac{2}{5} \mu^4 \lambda^4 + \lambda^2 \mu^2, \alpha = 0$$

$$\beta = \frac{8\mu^2 \xi \lambda^2 (4\lambda^2 \mu^2 + 1)}{A_1^2 a^6 k (6\lambda^2 \mu^2 + 1)}, \delta = \frac{96\mu^4 \xi^2 \lambda^4 (12\lambda^2 \mu^2 + 7)}{5(6\lambda^2 \mu^2 + 1) A_1^4 a^1 2k^3}, \gamma = 0$$

решение является уединенной волной, напоминающей солитон Кортевега – де Фриза.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-11-00209.

*Список литературы*

1. Fermi E., Pasta J., and Ulam S. In: Collected Papers of E. Fermi, 1955, v., p.978.

2. Кудряшов Н.А. Методы нелинейной математической физики: Учебное пособие. М.: МИФИ, 2008. 352 с.

3. N.A. Kudryashov, From the Fermi–Pasta–Ulam Model to Higher-Order Nonlinear Evolution Equations, Reports on Mathematical Physics Volume 77, Issue 1, February 2016, Pages 57-67.

Н.И. СИДНЯЕВ, Н.С. КЛИМОВА

*Московский государственный технический университет им Н.Э. Баумана*

## **ВЕРОЯТНОСТНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТОЛКНОВЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦ В КОСМИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ**

Изучается влияние космического пространства на вероятность столкновения микрочастиц с защитной оболочкой. Показано, что от длительного пребывания в космическом вакууме заметно меняются характеристики материалов космических аппаратов. При орбитальном движении в достаточно плотных слоях верхней атмосферы Земли, а также под действием бомбардировки заряженными частицами космической радиации может происходить сильное разрыхление материала поверхностей космических аппаратов и его распыление в окружающее пространство.

N.I. SIDNYAEV, N.S. KLIMOVA

*Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia*

## **PROBABLE METHOD FOR DETERMINING THE COLLISION OF MICROPARTICLES IN SPACE**

The influence of space on the probability of collision of microparticles with the protective shell is studied. It is shown that the characteristics of spacecraft materials significantly change after a long stay in the space vacuum. During orbital motion in sufficiently dense layers of the earth's upper atmosphere, as well as under the influence of bombardment by charged particles of cosmic radiation, a strong loosening of the material on the surfaces of spacecraft can occur and its dispersion into the surrounding space.

Вероятностные законы взаимодействия отдельной элементарной частицы с покрытием космического аппарата известны [1]. Требуется найти макроскопические характеристики процессов, в которых участвует большое количество таких частиц: плотности, потоки и т.п. Эта ситуация удобна для использования метода Монте-Карло. Рассмотрим случай, когда на поверхность КА размером  $0 \leq x \leq h$  под углом  $90^\circ$  падает поток микрочастиц с энергией  $E_0$ . При столкновении с атомами вещества несущей поверхности частицы могут упруго рассеиваться или поглощаться. Предположим, что энергия частицы при рассеянии не меняется и любое направление «отскока» частицы от атома одинаково вероятно.

Вычислим вероятность прохождения микрочастиц сквозь оболочку  $p^+$ , вероятность отражения частицы поверхностью  $p^-$  и вероятность поглощения частицы в защитной оболочке  $p^0$ . Взаимодействие характеризуется сечением поглощения  $S_c$  и сечением рассеяния  $S_s$ . Полное сечение  $S = S_c + S_s$ . Вероятность поглощения  $-S_c/S$ , рассеяния  $-S_s/S$ . Длина свободного пробега частицы  $\lambda$  – случайная величина, принимающая положительные значения с плотностью

$p(x) = Se^{-Sx}$ . Средняя длина  $M\lambda = 1/S$ . Формула для разыгрывания  $\lambda: \lambda = (\ln \gamma^{-1})/S$ . Задача симметрична относительно оси  $x$ , так что направление частицы после рассеяния определяется углом  $\varphi$  между направлением скорости частицы и осью  $Ox$ . Равная вероятность любого направления равносильна равномерному распределению  $\mu = \cos \varphi$  на интервале  $(-1, 1)$ . Формула разыгрывания  $\mu$  на границе:  $\mu = 2\gamma - 1$ .

Для расчёта путём моделирования истинных траекторий предполагается, что частица испытала  $k$ -е рассеяние внутри защитной оболочки в точке с абсциссой  $x_k$  и начала двигаться в направлении  $\mu_k$ . Разыгрывается  $\lambda$  и вычисляется абсцисса следующего столкновения  $x_{k+1} = x_k + \lambda_k \mu_k$ . Если  $x_{k+1} > h$ , то частица добавляется к числу прошедших. Если  $x_{k+1} < 0$ , то частица добавляется к числу отражённых. Если  $0 \leq x_{k+1} \leq h$ , то частица испытала столкновение внутри защитной оболочки. Если  $\gamma < S_0/S$ , то частица добавляется к числу поглощённых. Иначе частица испытала рассеяние в точке  $x_{k+1}$ . Разыгрываем  $\mu_k$  и повторяем цикл с другими значениями  $\gamma$ . Каждое значение используется один раз. Начальные значения для каждой траектории:  $x_0 = 0$ ,  $\mu_0 = 1$ . После расчёта  $N$  траекторий:  $N^+$  частиц прошли сквозь защитную оболочку,  $N^-$  отразились от неё, а  $N^0$  частиц были поглощены. Вероятности приближённо равны отношениям:  $p^+ \approx N^+/N$ ,  $p^- \approx N^-/N$ ,  $p^0 \approx N^0/N$ . Таким методом трудно вычислить вероятность  $p^+$ , когда она очень мала.

Рассмотрим схему расчёта с использованием весов. Предполагается, что вдоль одной траектории движется  $\omega_0$  одинаковых микрочастиц. При столкновении количество поглощённых частиц в среднем равно  $\omega_0(S_0/S)$ , а рассеянных частиц  $-\omega_0(S_0/S)$ . Вместо  $\omega_k$  частиц говорят об одной частице с весом  $\omega_k$ . Начальный вес  $\omega_0$  полагают равным 1. При каждом столкновении количество микрочастиц будет уменьшаться  $\omega_{k+1} = \omega_k(S_0/S)$ . Траектория не может закончиться поглощением.

Существуют разнообразные способы расчёта. Метод Монте-Карло позволяет решать сложные задачи о микрочастицах: исследуемая среда может состоять из различных веществ и иметь любую геометрическую структуру; энергия частицы при столкновении может меняться. Метод позволяет учитывать много различных процессов.

#### Список литературы

1. Сидняев Н.И. Исследование разрушения поверхности КА при контактном взаимодействии с микрочастицами космической среды/Космические исследования. 2018. Т. №56, №3, с. 233-242.

А.А. САРИН, Г.В. ДОЛГОЛЕВА

*Московский Государственный Университет, мех-мат*

## **ВЛИЯНИЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ СЛОЕВ МИШЕНИ НА ЕЕ ГОРЕНИЕ**

Влияние перемешивания слоев на параметры микромишеней в термоядерном синтезе рассматривается на примерах опубликованных мишеней. Перемешивание слоев рассчитывается по  $k$ - $\epsilon$  модели. Полученные с помощью численного моделирования результаты составляют немаловажный вклад в изучение задач инерционного термоядерного синтеза.

A.A. SARIN, G.V. DOLGOLEVA

*The Moscow State University, meh-mat*

## **INFLUENCE OF MIXING THE LAYERS OF TARGET ON ITS COMBUSTION**

The influence of mixing layers on the parameters of microtargets in the thermonuclear fusion is examined based on the examples of the published targets. Mixing layers is calculated by  $k$ - $\epsilon$  the model. The results obtained with the aid of the numerical simulation compose the important contribution to the study of the tasks of inertia thermonuclear fusion.

Доклад посвящен математическому моделированию перемешивания, возникающего на границе раздела слоев при сжатии сложных мишеней в задачах управляемого термоядерного синтеза. Для адекватного описания физики лазерной плазмы необходимо учитывать большое количество физических процессов. Ограниченность наших возможностей в проведении экспериментов с полномасштабным термоядерным горением в мишенях с необходимостью диктует обращение к численному моделированию. Это не только позволяет объяснить эксперимент, способствуют пониманию их результатов, но и облегчает проведение самих экспериментов, прогнозирование их результатов. Все вычислительные эксперименты проведены по методике, ориентированной на численное исследование физических процессов, протекающих в лазерной плазме [1]. Методика содержит расчет следующих процессов: движение среды при наличии отрыва температур (ионов и электронов), поглощение лазерной энергии с учетом отражения от критической плотности, перенос тепла электронами и ионами с ограничением диффузионных потоков, спектральный перенос излучения в квазидиффузионном приближении и его взаимодействие с веществом, ионизация вещества и возбуждение ионов в неравновесной нестационарной плазме, многогрупповой перенос быстрых заряженных частиц, кинетика термоядерных реакций и перемешивание слоев. Уравнения состояния, спектральные пробеги излучения, коэффициенты электронной и

ионной теплопроводности, электрон- ионной релаксации и поглощения лазерной энергии рассчитывались согласно составу плазмы /2/.

Перемешивание слоев рассчитывается по к-ε модели /3/.

Влияние перемешивания слоев на параметры микромишеней в термоядерном синтезе рассматривается на примерах опубликованных мишеней /4/-/5/. В расчетах рассматривались все процессы, описанные выше.

Для каждого расчета приводятся геометрия мишени, вид энерговложения и таблица. Таблица содержит результаты расчетов мишеней без учета перемешивания слоев и с учетом. В ней содержатся следующие величины: вложенная в мишень энергия,  $F$  - энергия выделившаяся в результате термоядерных реакций,  $K$  - коэффициент усиления мишени ( $K = F/E$ ),  $L$  - длина зоны перемешивания.

Полученные с помощью численного моделирования результаты составляют немаловажный вклад в изучение задач инерционного термоядерного синтеза.

#### *Список литературы*

1. Долголева Г.В. Методика расчета движения двух температурного излучающего газа (Программа СНД) // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 2/13/. С. 29.
2. Бельков С.А., Долголева Г.В. Модель среднего иона для расчета кинетики ионизации, населенностей возбужденных уровней и спектральных коэффициентов переноса излучения в программе СНДП. // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып.1. С. 59.
3. Неуважаев В.Е. Математическое моделирование турбулентного перемешивания. РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, 2007.
4. Бельков С.А., Бондаренко С.В., Вергунова Г.А. и др. Термоядерные мишени прямого облучения лазерным импульсом мегаджоульного уровня // ЖЭТФ. 2015, т. 148, вып. 4(10). С 781-798.
5. Долголева Г.В., Лебо А.И., Лебо И.Г. Моделирование сжатия термоядерных мишеней на уровне энергии лазера порядка 1 МДж // Математическое моделирование. 2016. Т. 28. № 1. С. 23-32.
6. Долголева Г.В., Забродин А.В. Кумуляция энергии в слоистых системах и реализация безударного сжатия. М.: Физматлит, 2004.

И.А. МОЛОШНИКОВ<sup>1</sup>, А.В. ГРЯЗНОВ<sup>1</sup>, Д.С. ВЛАСОВ<sup>1</sup>,  
А.Г. СБОЕВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия,*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ВЫБОР ЭФФЕКТИВНОГО НЕЙРОСЕТЕВОГО МЕТОДА ФОРМИРОВАНИЯ ЗАГОЛОВКОВ**

В работе сравниваются несколько подходов к формализации задачи получения кратких аннотаций на основе нейросетевого моделирования: абстрактивного на базе нейронной сети с вниманием и экстрактивного для выделения наиболее характерной последовательности слов в тексте. По результатам сравнения различных подходов на корпусе РИА Новости метод на основе экстракции последовательных n-грамм слов показал наивысший результат.

I.A.MOLOSHNIKOV<sup>1</sup>, A.V.GRYAZNOV<sup>1</sup>, D.S.VLASOV<sup>1</sup>,  
A.G.SBOEV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*National Research Center «Kurchatov Institute»,*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

## **SELECTING AN EFFECTIVE NEURAL NETWORK METHOD FOR HEADLINE GENERATION**

The paper compares several approaches to formalizing the tasks to obtain brief annotations: based on neural network modeling: analysis, based on a neural network with attention and extraction to highlight the most characteristic words in the text. According to the results of comparing various approaches on base of the RIA News corpus, the method using the extraction of sequential n-grams of the dictionary showed the highest result. В настоящее время для формирования заголовков существуют два типа подходов: абстрактивный и экстрактивный, которые сравниваются в данной работе на корпусе РИА Новости [1]. Сравнение проводится с применением метрики ROUGE L [2] по максимальному соответствию n-грамм слов эталонного заголовка новости из корпуса и сгенерированного заголовка, полученного с применением анализируемых подходов.

Абстрактивный подход заключается в построении модели, способной генерировать заголовок, который может содержать слова и фразы, не встречающиеся в тексте новости, но наилучшим образом отражающие суть текста новости. Наилучшие результаты на базе применения такого подхода демонстрируют нейронные сети топологии трансформер [3], основанные на слоях с множественным механизмом внимания (multiheadattention). В идеальном случае оценка такого подхода стремится к 1, т.е. максимальному соответствию, но в силу сложности решаемой задачи (необходимо определить о чём новость и

сформировать фразу на естественном языке) на выбранном корпусе такие модели дают 0,4 по ROUGEL[4].

Экстрактивный метод основан на выделении из оригинального текста новости последовательности слов, максимально соответствующей заголовку. На соревновании Диалог 2019 [5] в качестве базового метода было предложено брать первое предложение новости, как наиболее характеризующее текст. Такой подход даёт 0,23 ROUGEL. Выбор предложения из всего текста с максимальной метрикой оценки позволяет достигнуть 0,28 ROUGEL. Для английского языка такой метод даёт хорошие результаты [6], но использование всего предложения может быть избыточным или в случаях, когда есть смысловые элементы, разделённые на несколько предложений. В данной работе мы расширили базовый метод за счет поиска последовательности слов (длиной от 1 до 18 слов) таким образом, что их использование в качестве заголовка даёт максимальный ROUGE L. Такой подход дал 0,51 ROUGEL.

По результатам проведенной работы можно сделать вывод о перспективности совместного использования двух подходов – экстрактивной и абстрактивной. На основе методов выделения лучшего предложения и последовательности слов можно формировать обучающую выборку для экстрактивной нейросетевой модели — её задача выделить наиболее важные моменты в тексте. А задачей абстрактивной модели будет генерации хорошо читаемого заголовка на основе выделенных значимых слов и предложений.

Работы выполнены при поддержке гранта РФФИ №18-37-00331 «мол\_а» и с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт», <http://computing.nrcki.ru>.

#### *Список литературы*

1. Gavrilo D., Kalaidin P., Malykh V. Self-attentive model for headline generation, 2019.
2. Lin, Chin-Yew, ROUGE: A Package for Automatic Evaluation of Summaries, 2004.
3. Vaswani A. et al. Attention is all you need, 2017.
4. Sokolov A. M. Phrase-based attentional transformer for headline generation, 2019.
5. Malykh V.A., Kalaidin P.S., Headline Generation Shared Task on Dialogue'2019.
6. Liu Y., Lapata M. Text Summarization with Pretrained Encoders, 2019.

В.С. ДРЮМА

*Институт Математики и Информатики, Кишинев, Молдова*

## ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ

Геометрические характеристики Риманова пространства, оснащенного 14-мерной Риччи-плоской метрикой на решениях системы уравнений Навье-Стокса применяются для изучения их свойств.

V.S. DRYUMA

*Institute of Mathematics and Informatics, Kishnev, Moldova*

## GEOMETRIC PROPERTIES OF THE NAVIER-STOKES EQUATIONS AND THEIR APPLICATIONS

Geometric characteristics of the Riemann space equipped with the 14-dimensional Ricci-flat metrics are used to study of their properties.

Система уравнений Навье-Стокса для течений несжимаемой вязкой жидкости рассматривается с геометрической точки зрения основанной на ассоциированном с нею 14-мерного пространства с координатами  $(x, y, z, t, \eta, \rho, m, u, v, w, p, \xi, \zeta, n)$ , оснащенного Риччи-плоской  $R_{ik}=0$  метрикой вида

$$\begin{aligned} ds^2 = & 2dxdu + 2dydv + 2dtdp + 2d\eta d\xi + 2dpd\zeta + \\ & 2dzdw + 2dmdn + (-u(U^2 + P) - vUV - pU - wUW + \\ & + \mu(wU_z + vU_y + uU_x))d\eta^2 + (-v(V^2 + P) - uUV - \\ & pV - wVW + \mu(wV_z + vV_y + uV_x))d\rho^2 + (-w(W^2 + P) \\ & - vWV - pW - uUW + \mu(wW_z + vW_y + uU_x))dm^2 - \\ & (uU + vV + wW)dt^2, \end{aligned}$$

где  $U, V, W, P, \mu$  – компоненты скорости течения, давления и вязкости жидкости, зависящие от координат  $(x, y, z, t)$  (см. [1]).

Рассматриваемое пространство принадлежит к известному классу многомерных римановых пространств с нулевыми скалярными инвариантами, составленными из компонент тензора кривизны Римана и его ковариантными производными. В докладе будут построены примеры ненулевых дифференциальных параметров Бельтрами а также ненулевых инвариантов,

Картана с помощью которых строятся соотношения между функциями  $U, V, W, P$ , совместные с уравнениями течения жидкости. В частности из различных условий на тензоры кривизны метрики и уравнений геодезических линий находится уравнение гиперповерхности  $\Theta(x, y, z, t, u, v, w, p) = 0$ , имеющей важное значение для понимания топологических свойств уравнений Навье-Стокса.

*Список литературы*

1. V. Dryuma. The Ricci-flat space related with the Navier-Stokes equations. Buletinul Academiei de Stiintse a Republicii Moldova, Mathematica, no.2(69), 2012, p.99-102.

Н.Н. ФИМИН, В.М. ЧЕЧЕТКИН

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Российская Федерация*

## **ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ КОГЕРЕНТНЫЕ ВИХРЕВЫЕ СИСТЕМЫ И ГЕОМЕТРИЯ НА МНОГООБРАЗИЯХ МОНЖА-КЛЕБША**

Для описания вихревых квазиупорядоченных макро- и мезоструктур используется методика приведения уравнений Эйлера и Навье-Стокса к гамильтоновой форме. Производится переход к геометрическому описанию гидродинамики на основе многообразий Монжа. Получены универсальные критерии возникновения и распада когерентных структур в терминах девиации геодезических линий на упомянутых многообразиях.

N.N. FIMIN, V.M. CHECHETKIN

*Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russian Federation*

## **HYDRODYNAMIC COHERENT VORTEX SYSTEMS AND GEOMETRY ON THE MONGE-CLEBSCH MANIFOLDS**

To describe the vortex quasi-ordered macro- and mesostructures, we use the technique of reducing the Euler and Navier-Stokes equations to the Hamiltonian form. A transition is made to the geometric description of hydrodynamics based on Monge manifolds. Universal criteria are obtained for the emergence and decay of coherent structures in terms of the deviation of geodesic lines on the manifolds.

Геометризация описания вихревых гидродинамических систем может быть произведена на основе введения потенциалов Монжа-Клебша,

$$\{([^\alpha]M)\}_{\alpha=1, \overline{m}}, \quad \mathbf{v} = -([^4]M) \cdot ([^1]M)_x - s \cdot ([^2]M)_x - ([^3]M)_x$$

что приводит к гамильтоновой форме исходных уравнений Эйлера. Для этого мы строим кинетический потенциал Лагранжа с помощью поля скорости потока, которое предварительно определяется с помощью набора скалярных потенциалов Монжа и термодинамических соотношений. Следующим шагом является преобразование полученного лагранжиана с помощью преобразования Лежандра в функцию Гамильтона

$$H \equiv \sum_{\alpha'=1}^{m-1} [^{\alpha'}]P \cdot [^{\alpha'}]M_t - p = \frac{1}{2[{}_{\beta_0}]P} \left( \sum_{\alpha'=1}^{m-1} [^{\alpha'}]P \cdot [^{\alpha'}]M_x \right)^2 + [{}_{\beta_0}]Pu([{}_{\beta_1}]P, [{}_{\beta_0}]P)$$

и правильное введение обобщенных импульсов, канонически сопряженных с переменными конфигурации, в новом фазовом пространстве динамической системы:

$${}_{[1]}P = \frac{\partial \pi}{\partial ({}_{[1]}M_t)} = \rho^{[4]}M, \quad {}_{[2]}P = \frac{\partial \pi}{\partial ({}_{[2]}M_t)} = \rho s,$$

$${}_{[3]}P = \frac{\partial \pi}{\partial ({}_{[3]}M_t)} = \rho$$

Далее, используя полученную гамильтонову функцию, определим гамильтоново пространство на кокасательном расслоении над потенциальным многообразием Монжа. Вычислив гессиан гамильтониана, получим коэффициенты фундаментального тензора гамильтонова пространства, определяющие его метрику:

$$g^{\alpha' \beta'} (\{ {}_{[\mu']} M \}, \{ {}_{[\eta']} P \}) = \frac{1}{2} \partial^2 H / \partial {}_{[\alpha']} P \partial {}_{[\beta']} P.$$

Далее мы определим аналоги коэффициентов Кристоффеля для N-линейной связи. Рассматривая уравнения Эйлера-Лагранжа

$$\left. \frac{d^2 {}_{[\alpha']} P}{dt^2} - C^{\beta' \gamma'} ({}_{[\alpha']} M, \{ {}_{[\eta']} P \}) \right|_{{}_{[\alpha']} M = {}_{[\alpha']} M_0} \frac{d {}_{[\beta']} P}{dt} \frac{d {}_{[\gamma']} P}{dt} = 0$$

с полученными коэффициентами связности, мы приходим к геодезическим уравнениям в виде горизонтальных и вертикальных траекторий в гамильтоновом пространстве. Анализируя полученную систему уравнений геодезического движения с точки зрения устойчивости решений, можно получить важные физические выводы относительно исходной гидродинамической системы. Для этого мы исследуем возможное увеличение или уменьшение бесконечно малого расстояния между геодезическими вертикальными траекториями - решения соответствующей системы уравнений Якоби-Картана:

$$\frac{D_p^2 ({}_{[\alpha']} \Pi)}{dt^2} + \left( \frac{d {}_{[\beta']} P_0}{dt} \right) \left( \frac{d {}_{[\gamma']} P_0}{dt} \right) ({}_{[\eta']} \Pi) S_{\alpha'}^{\beta' \gamma' \eta'} = 0.$$

В результате мы можем сформулировать весьма общие критерии распада и разрушения вихревой континуальной системы.

А.В. АКСЕНОВ, К.П. ДРУЖКОВ

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
Москва, Россия*

## **ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ДВУМЕРНОЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ НАД НЕРОВНЫМ ДНОМ**

Рассматривается система уравнений двумерной мелкой воды над неровным дном. Получена переопределенная система уравнений для определения функций, задающих законы сохранения. Проведено исследование полученной системы уравнений на совместность. Получен общий вид решения переопределенной системы уравнений. Приведено классифицирующее уравнение. Показано, что система уравнений двумерной мелкой воды над неровным дном при любом профиле дна обладает не более, чем девятимерным пространством гидродинамических законов сохранения. Найдены все гидродинамические законы сохранения для всевозможных профилей дна.

A.V. AKSENOV, K.P. DRUZHKOV

*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

## **HYDRODYNAMIC CONSERVATION LAWS OF THE SYSTEM OF EQUATIONS OF TWO-DIMENSIONAL SHALLOW WATER ABOVE A ROUGH BOTTOM**

A system of equations of two-dimensional shallow water above a rough bottom is considered. An overdetermined system of equations for determining the functions forming the conservation laws is obtained. The general form of the solution of the overdetermined system is found. The classification equation is given. The system of equations of two-dimensional shallow water above the rough bottom for any profile of the bottom is shown to have no more than the nine-dimensional space of the hydrodynamic conservation laws. All of the hydrodynamic conservation laws have found for all possible bottom profiles.

В работах [1, 2] была рассмотрена система уравнений одномерной мелкой воды над неровным дном и были найдены все гидродинамические законы сохранения.

В безразмерных переменных система уравнений двумерной мелкой воды над неровным дном имеет следующий вид [3]

$$\begin{aligned}u_t + uu_x + vu_y + \eta_x &= 0, \\v_t + uv_x + vv_y + \eta_y &= 0, (1) \\ \eta_t + ((\eta + h)u)_x + ((\eta + h)v)_y &= 0.\end{aligned}$$

Здесь  $u = u(x, y, t), v = v(x, y, t)$  – компоненты средней по глубине горизонтальной скорости;  $\eta(x, y, t)$  – отклонение свободной поверхности;  $h = h(x, y)$ ;  $z = -h$  – профиль дна;  $\eta + h \geq 0$ .

Под гидродинамическими законами сохранения системы уравнений (1) будем понимать дивергентные формы вида

$$D_x(P) + D_y(Q) + D_t(R),$$

равные нулю на системе уравнений (1):

$$(D_x(P) + D_y(Q) + D_t(R))\Big|_{(1)} = 0.$$

Здесь  $P = P(x, y, t, u, v, \eta), Q = Q(x, y, t, u, v, \eta), R = R(x, y, t, u, v, \eta)$ ;  $D_x, D_y, D_t$  – операторы полной производной по соответствующей координате.

Система определяющих уравнений для законов сохранения имеет вид

$$\begin{aligned} P_u - uR_u - (\eta + h)R_\eta &= 0, & Q_u - vR_u &= 0, & P_v - uR_v &= 0, \\ Q_v - vR_v - (\eta + h)R_\eta &= 0, & P_\eta - R_u - uR_\eta &= 0, & (2) \\ Q_\eta - R_v - vR_\eta &= 0, & P_x + Q_y + R_t - (uh_x + vh_y)R_\eta &= 0. \end{aligned}$$

Система уравнений (2) была исследована на совместность. В результате был получен новый базовый закон сохранения

$$\begin{aligned} P &= u(\eta + h)(u^2 + v^2 + 2\eta), \\ Q &= v(\eta + h)(u^2 + v^2 + 2\eta), \\ R &= (\eta + h)(u^2 + v^2 + \eta - h), \end{aligned}$$

дополняющий закон сохранения массы. Также были найдены все гидродинамические законы сохранения системы уравнений двумерной мелкой воды над неровным дном, дополнительные к базовым.

#### *Список литературы*

1. Аксенов А.В., Дружков К.П. Законы сохранения, симметрии и точные решения уравнений мелкой воды над неровным дном // Вестник Национального исследовательского ядерного университета "МИФИ". 2016. Т. 5, № 1, С. 38–46.
2. Aksenov A.V., Druzhkov K.P. Conservation laws and symmetries of the shallow water system above rough bottom // Journal of Physics: Conference Series, Institute of Physics (United Kingdom). 2016. V. 722, P. 1–7.
3. Стокер Дж. Волны на воде. Математическая теория и приложения. М.: Государственное издательство иностранной литературы. 1959.

А.А. КОЖУРИН  
НИИ “Курчатовский институт”, Москва, Россия

## ДВУМЕРНАЯ ТРАНСПОРТНАЯ МОДЕЛЬ НЕЙТРАЛОВ НА ОСНОВЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПРОХОЖДЕНИЯ ПОТОКОВ ЧЕРЕЗ ЯЧЕЙКИ

Внесены существенные коррективы в модель транспорта атомарных нейтралов, основанную на вероятностях прохождения потоков через ячейки расчётной сетки. Сравнением с методом Монте-Карло проверена корректность расчёта концентраций нейтралов.

A.A. KOZHURIN

*NRC “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia*

## TWO-DIMENSIONAL NEUTRAL TRANSPORT MODEL BASED ON PROBABILITIES OF A FLOW TRANSMISSION THROUGH CELLS

Significant corrections are introduced to an atomic neutral transport model based on probabilities of flow transmission through cells of a computational grid. Correctness of the neutral density calculation is verified by comparison with the Monte-Carlo method.

Модель ТЕР (transmission-escapeprobability) [1, 2] описывает стационарное распределение атомарных нейтралов в токамаке в двумерном случае. В модели рассчитываются вероятности перехода (transmission) и ухода (escape) для потоков в каждой ячейке расчётной сетки, далее строится система линейных уравнений баланса потоков по всей сетке. Решение этой системы позволяет найти плотность и распределение по энергии нейтралов в каждой ячейке.

В данной работе, по сравнению со статьей [2], уточнено теоретическое описание вероятностей перехода. В частности, функция Бикли третьего порядка  $Ki_3$  заменена на  $Ki_2$  [3], вместо новой эмпирической аппроксимации для вероятности ухода оставлена форма, как в статье [1] (там же она обоснована теоретически), а также пересчитан вклад внешнего источника в группах.

Геометрия задачи: 9 квадратных ячеек со сторонами размером 3 см, организованных 3 на 3. На правой границе правой средней ячейки задан изотропный источник. Стенки полностью отражают поток нейтралов. Ограничимся однородной (по ячейкам) плазмой.

На рисунках 1а,б представлены зависимости относительной разности суммарного числа нейтралов во всём объёме  $\delta N_{sum}$  и максимальной относительной разности концентрации нейтралов  $\delta N_{max}$ , рассчитанных по двум методам, в зависимости от концентрации плазмы с температурой 50 эВ. Видно, что по полному числу нейтралов отклонение незначительно (рис. 1а). Однако с ростом плотности плазмы сильно растёт  $\delta N_{max}$ , и связано это с недостаточной

статистикой метода Монте-Карло (в этих расчётах использовались 10000 пробных частиц). Увеличение количества пробных частиц в методе Монте-Карло позволяет учесть нейтралы в хвосте максвелловского распределения.

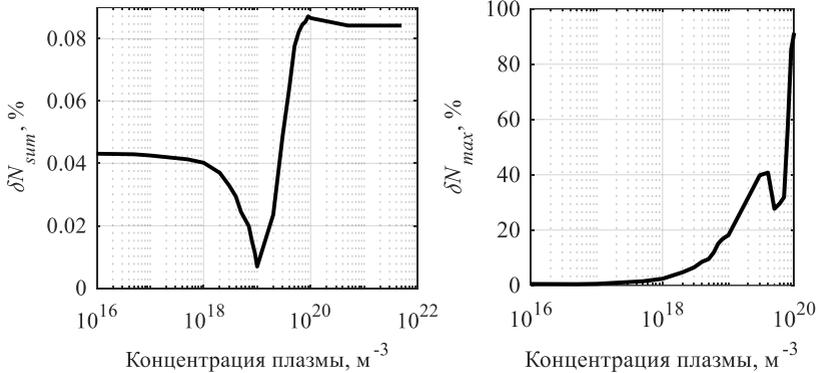


Рис. 1а,б

Таким образом, показано, что модель ТЕР может давать результат, удовлетворительно согласующийся с расчётом по методу Монте-Карло.

#### Список литературы

1. Stacey W. M., Mandrekas J. A transmission/escape probabilities model for neutral particle transport in the outer regions of a diverted tokamak //Nuclear Fusion. – 1994. – Т. 34. – №. 10. – С. 1385.
2. Rubilar R., Stacey W. M., Mandrekas J. Comparison of the TEP method for neutral particle transport in the plasma edge with the Monte Carlo method //Nuclear fusion. – 2001. – Т. 41. – №. 8. – С. 1003.
3. Stacey W. M. Nuclear reactor physics. – John Wiley & Sons, 2018

М.В.ДОЛГОПОЛОВ, И.Н.РОДИОНОВА

*Самарский государственный технический университет, Самара, Россия  
Лаборатория математической физики*

## **ДЕЛЬТА-ЗАДАЧИ ДЛЯ ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА– ДАРБУ С ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ДЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ**

Рассмотрены задачи на обобщенное уравнение Эйлера–Дарбу с отрицательными параметрами в прямоугольной области, содержащей линии сингулярности коэффициентов уравнения. Исследуются граничные условия для излучения. Поставлена краевая задача с заданными значениями искомого решения на параллельных сторонах прямоугольника с условиями сопряжения относительно решения и его нормальных производных как на линиях сингулярности коэффициентов, так и на внутренней характеристической линии. Методом интегральных уравнений исследована разрешимость поставленных задач.

M. V. DOLGOPOLOV, I. N. RODIONOVA

*Samara POLYTECH, Samara, Russia*

*Atomic and Subatomic Technologies Platform & Laboratory of Mathematical Physics, Samara,  
Russia*

## **DELTA PROBLEMS FOR THE GENERALIZED EULER-DARBOUX EQUATION WITH BOUNDARY CONDITIONS FOR RADIATION**

Problems for the generalized Euler–Darboux equation with negative parameters in the rectangular region containing the singularity lines of the equation coefficients are considered. Boundary conditions for radiation are investigated. The boundary value problem with the specified values of the desired solution on the parallel sides of the rectangle with conjugation conditions relative to the solution and its normal derivatives both on the lines of the singularity of coefficients and on the internal characteristic line is posed. The solvability of the set tasks is investigated by the method of integral equations.

### *Список литературы*

1. I. N. Rodionova, V. M. Dolgoplov, M. V. Dolgoplov, “Delta-problems for the generalized Euler–Darboux equation”, Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 21:3 (2017), 417–422
2. И. В. Волович, О. В. Грошев, Н. А. Гусев, Э. А. Курьянович, “О решениях волнового уравнения на неглобально гиперболическом многообразии”, Избранные вопросы математической физики и р-адического анализа, Сборник статей, Тр. МИАН, 265, МАИК «Наука/Интерпериодика», М., 2009, 273–287; Proc. Steklov Inst. Math., 265 (2009), 262–2.

Л.В. ВЛАДИМИРОВА, А.Ю. ЖДАНОВА, И.Д. РУБЦОВА  
*Санкт-Петербургский государственный университет, Россия*

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА В ЗАДАЧЕ ОПТИМИЗАЦИИ ДИНАМИКИ ПУЧКА**

Рассматриваемый генетический алгоритм глобальной оптимизации использует нормальное распределение и имеет ряд существенных преимуществ по сравнению с алгоритмом случайного поиска с “памятью”. Обсуждаемый метод применяется в задаче оптимизации динамики пучка в линейном волноводном ускорителе, которая сводится к поиску глобального экстремума функционала качества в многомерной области изменения управляющих параметров. Алгоритм быстро сходится и может быть с успехом использован при решении задач многомерной оптимизации, в том числе в сочетании с направленными методами.

L.V. VLADIMIROVA, A.Y. ZHDANOVA, I.D. RUBTSOVA

*St. Petersburg State University, Russia*

## **APPLICATION OF THE GENETIC GLOBAL SEARCH ALGORITHM IN BEAM DYNAMICS OPTIMIZATION**

### **PROBLEM**

The global genetic optimization algorithm under consideration uses the normal distribution and has a number of significant advantages as compared with the random search algorithm with “memory”. The method in question is applied to the problem of beam dynamics optimization in a linear waveguide accelerator; the problem is reduced to global extremum search of quality functional in multidimensional region of control parameters variation. The algorithm quickly converges and can be successfully used in solving multidimensional optimization problems, including its combination with directed methods.

Несмотря на обилие и разнообразие имеющихся методов глобального поиска, существует потребность в простых в реализации и быстро сходящихся алгоритмах. Проблема выбора такого алгоритма актуальна для задач оптимизации динамики заряженных пучков, которые математически часто формулируются как задачи нахождения экстремума функционала качества в пространстве управляющих параметров [1-3]. Направленные методы позволяют найти лишь локальный экстремум функционала, поэтому их использование должно предваряться случайным поиском в заданной области  $D$  [4].

Идея генетических стохастических методов состоит в моделировании поколений точек («особей») в области  $D$  так, чтобы последовательность поколений с вероятностью 1 сходилась к точке глобального экстремума. Алгоритмы различаются способами получения точек следующего поколения на

основе предыдущего. Для случайного поиска с «памятью» [5, 4] через положения точек  $k$ -го поколения определяются параметры нормального распределения (центр и матрица ковариаций); точки  $(k + 1)$ -го поколения являются выборочными из этого распределения. Используемый нами алгоритм [6] осуществляет процедуру перехода к следующему поколению без вычисления матрицы ковариаций, что значительно упрощает расчеты, особенно при большой размерности пространства параметров.

Генетический алгоритм [6] применяется при оптимизации продольной динамики пучка в линейном волноводном ускорителе. В качестве управляющих функций используются законы изменения безразмерной амплитуды поля ускоряющей волны и синхронной фазы. Параметры оптимизации (84 параметра) – значения производных управляющих функций в узлах сетки. Критерий качества представляет собой связку частных критериев, соответствующих следующим целям оптимизации: обеспечение требуемой выходной энергии пучка, минимизация энергетической и фазовой неоднородности пучка на выходе ускорителя, максимизация захвата частиц в режим ускорения, обеспечение монотонности группирования, минимизация влияния дефокусирующего фактора. Сходимость с заданной точностью достигнута при 3 итерациях.

Оптимизация позволила снизить фазовый разброс на выходе прибора с 2.83 до 1.73 рад, уменьшить относительный разброс по энергиям с 0.91 до 0.37 и повысить коэффициент захвата с 96.5% до 98.5%.

*Список литературы*

1. D.A. Ovsyannikov // Proc. RuPAC-2012.<http://www.JACoW.org>, pp. 68-72.
2. A.D. Ovsyannikov, D.A. Ovsyannikov, V.V. Altsybeyev, A.P. Durkin, V.G. Papkovich // Problems of Atomic Science and Technology, 2014. V. 91, № 3. Pp. 116-119.
3. D.A. Ovsyannikov et al // J. Phys.: Conf. Ser., 2019, 1238 012070
4. L.V. Vladimirova, D.A. Ovsyannikov // J. Phys.: Conf. Ser., 2019, 1238 012073
5. С.М. Ермаков, Л.В. Митиоглова // Автоматика и вычислительная техника, №5, Рига, 1977. С. 38-41.
6. S.M. Ermakov, D.N. Semenchikov // Communications in Statistics – Simulation and Computation, 2019, URL: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/03610918.2019.1672739>.

С.З. АДЖИЕВ<sup>1</sup>, В.В. ВЕДЕНЯПИН<sup>2</sup>, И.В. МЕЛИХОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,*

<sup>2</sup> *ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва; РУДН, Москва, Россия*

## **КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ВЛАСОВА И ФОККЕРА– ПЛАНКА И МОДЕЛЬ АГРЕГИРОВАНИЯ ДИСПЕРСНОГО ТВЁРДОГО ВЕЩЕСТВА**

Рассматривается многопараметрическое молекулярно-кинетическое описание образования нанодисперсного твёрдого вещества из пересыщенного пара или раствора. Предлагается описывать дальнедействующее взаимодействие частиц кинетическим уравнением типа Власова [1]–[4], частным случаем которого является рассматриваемое нами для описания процессов агрегации уравнение типа Фоккера–Планка.

S.Z. ADZHIEV<sup>1</sup>, V.V. VEDENYAPIN<sup>2</sup>, I.V. MELIKHOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Lomonosov Moscow State University*

<sup>2</sup> *Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow; RUDN-  
University, Moscow, Russia*

## **THE KINETIC VLASOV AND FOKKER–PLANK EQUATIONS AND MODEL OF AGGREGATION OF DISPERSED SOLIDS**

A multi-parameter molecular kinetic description of the formation of a nanosized solids from a supersaturated vapor or solution is considered. It is proposed to describe the long-range interaction of particles with a kinetic equation of the Vlasov [1]–[4] type, a particular case of which is the Fokker–Plank type equation that we consider to describe aggregation processes.

В работах Дж.К. Максвелла [5], Л. Больцмана [6] и других исследователей статистического подхода возникает функция распределения по скоростям и координатам, зависящая от времени. Теперь же возникает многопараметрическое описание. Это связано с тем, оно стало доступным для экспериментального наблюдения. Проблема состоит в том, чтобы, проведя априорные эксперименты, написать уравнения на функции распределения по этим многим параметрам [7]–[10]. Нас, в первую очередь, интересует притяжение, которое является дальнедействующим, и поэтому описывается уравнением типа Власова. Именно притяжение обеспечивает столкновения частиц, которые могут привести либо к объединению частиц, либо к последующему их распаду. Основной параметр определяется числом атомов (молекул), составляющих частицу, [12], [13], [7], [8] и их видом. Следующий параметр, который надо учитывать – это форма частиц [11]. Мы выписываем уравнение типа Фоккера–Планка [6], [7], [9] для этого случая. Важными

оказываются не только сохраняющиеся величины, но и монотонно меняющиеся [2], [5], [10], [13].

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по программе повышения конкурентоспособности РУДН "5–100" среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2016–2020 гг.

#### *Список литературы*

1. Власов А.А. Статистические функции распределения. М.: Наука. 1966.
2. Веденяпин В.В. Кинетические уравнения Больцмана и Власова. М.: Физматлит, 2001.
3. Веденяпин В.В., Негматов М.А., Фимин Н.Н. Уравнения типа Власова и Лиувилля, их микроскопические, энергетические и гидродинамические следствия // Известия РАН. 2017. Т. 81. № 3 С. 45–82.
4. Максвелл Дж.К. О динамической теории газов // Труды по кинетической теории. Пер. с англ. М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2011. С. 173–230; пер. с англ.: Maxwell J.C. On the Dynamical Theory of Gases // Philosophical Magazine, 1868, 4 ser, 35 (235), 141–144.
5. Больцман Л. Дальнейшие исследования теплового равновесия между молекулами газа // Избранные труды. М.: Наука, 1984. С. 125–189; пер. с нем.: Boltzmann L. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen // Wien. Ber. 1872. 66. 275–370; Wissenschaftliche Abhandlungen, v. 1, Barth, Leipzig, 1909. 316–402.
6. Мелихов И.В. Эволюционный подход к созданию наноструктур // Наносистемы: физика, химия, математика, 2010, 1(1), 148–155.
7. Мелихов И.В., Рудин В.Н., Козловская Э.Д., Аджиев С.З., Алексеева О.В. Морфологическая память полимеров и возможности её использования при разработке технологий новых материалов // Теоретические основы химической технологии. 2016. Т. 50. № 3. С. 268–268.
8. Аджиев С.З., Веденяпин В.В., Волков В.В., Мелихов И.В. Обобщенные уравнения типа Больцмана для агрегации в газе // ЖВМиМФ. 2017. Т. 57. № 12. С. 2065–2078.
9. Adzhiev S. Z., Melikhov I. V., Vedenyapin V. V. Approaches to determining the kinetics for the formation of a nano-dispersed substance from the experimental distribution functions of its nanoparticle properties // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2019. Vol. 10, no. 5. P. 549–563. DOI 10.17586/2220-8054-2019-10-5-549-563.
10. Adzhiev Sergey, Batishcheva Janina, Melikhov Igor and Vedenyapin Victor Kinetic Equations for Particle Clusters Differing in Shape and the H-theorem // Physics. 2019. 1(2). P. 229–252. DOI 10.3390/physics1020019.
11. Smoluchowski M. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen // Z. Phys. Chem. 1917. 92. P. 129–168. Смолуховский М. Опыт математической теории кинетики коагуляции коллоидных растворов. Ред. А.И. Рабинович, П.С. Васильев. ОНТИ, 1936. С. 7–39.
12. Becker R., Doring W. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dampfer // Ann. Phys. 1935. V. 24. P. 719–752.
13. Веденяпин В.В., Аджиев С.З., Казанцева В.В. Энтропия по Больцману и Пуанкаре, экстремали Больцмана и метод Гамильтона–Якоби в негамильтоновой ситуации // Современная математика. Фундаментальные направления. 2018. Т. 64, № 1. С. 37–59. DOI: 10.22363/2413-3639-2018=64-1-37-59.

Ю.М. СУВОРОВА<sup>1</sup>, А.М. КАМИОНСКАЯ<sup>1</sup>, Е.В. КОРОТКОВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии»  
РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МЕТОД ПОИСКА НОВЫХ КОПИЙ SINE ПОВТОРОВ**

Представлен новый метод поиска размытых копий SINEповторов полной длины. Метод состоит из двух этапов. На первом этапе подбирается оптимальная позиционно-весовая матрица (ПВМ). На втором с помощью построенной ПВМ производится поиск подобий. На обоих этапах производится учет корреляции соседних символов, что позволяет увеличить алфавит и соответственно разрешающую способность метода. С помощью разработанного метода проведено исследование генома риса. В результате найдены новые копии SINEповторов, не включенные в стандартную аннотацию. Проведена оценка ложных позитивов.

Y.M. SUVOROVA<sup>1</sup>, A.M. KAMIONSKAYA<sup>1</sup>, E.V. KOROTKOV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Federal State Institution «Federal Research Centre «Fundamentals of Biotechnology» of  
the Russian Academy of Sciences», Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **METHOD FOR DETECTION OF NEW COPIES OF SINEREPEATS**

We represent here a new method for the detection of new copies of SINE elements. The method is based on the correlation of pairs of symbols. The correlation is used for the construction of a position-specific matrix as well as for the search of new repeat copies using the matrix. This allows us to enlarge the alphabet and to increase the sensitivity of the method. The method was used to study the rice genome. As a result, new copies of SINE repeats that were not included in the standard annotation were found. The number of false positives was evaluated.

SINE повторы (short interspersed elements, короткие диспергированные повторы) происходят из транспозонов, которые с помощью ферментов способны перемещаться по геному и создавать новые копии себя. Со временем копии повторов накапливают мутации, что значительно затрудняет их идентификацию стандартными методами и поиска подобий. В геномах млекопитающих SINE повторы представлены в большом количестве (в основном семействами Alu и MIR) и хорошо изучены. Однако, в геномах растений найдено достаточно небольшое количество SINEповторов<sup>1</sup>, хотя известно, что геномы растений насыщены повторами других типов.

Разработанный нами метод поиска слабых подобий между символьными последовательностями основан на учете корреляций соседних символов. Это

позволяет находить более размытые подобию на статистически значимом уровне. Учет корреляция соседних символов производится как на этапе построения позиционно-весовой матрицы (ПВМ), для подбора оптимальной ПВМ используется генетический алгоритм, так и на этапе последующего сканирования, которое производится с помощью модифицированной процедуры динамического программирования. Данный подход позволяет замечать размытое подобие вплоть до двух случайных замен на позицию. Ранее аналогичный метод был использован для поиска аминокислотных повторов и поиска сдвигов рамки считывания в генах<sup>2,3</sup>.

В данной работе мы применили этот метод для поиска новых копий SINEповторов в геноме риса (*OryzasativaJaponica*). В качестве исходной последовательности был использован повтор OsSN1 из базы данных SINEbase<sup>1</sup> длиной 293 символа, на его основе была создана ПВМ и подобраны оптимальные веса за вставку и делецию. С помощью полученной ПВМ были просканированы все 12 хромосом генома риса, загруженные из базы данных Ensembl, суммарной длиной 375,049,285 нуклеотидов.

В результате сканирования было найдено 1702 полных копии этого повтора в геноме. Из них 255 приходятся на области, которые не были ранее описаны, как повтор (для сравнения использовалась аннотация Ensembl). Уровень ложных позитивов при выбранном пороговом значении составил менее 4%. Для оценки ложных позитивов были использованы перемешанные последовательности хромосом.

#### *Список литературы*

1. Vassetzky, N. S. & Kramerov, D. A. // Nucleic Acids Res. 2013. Vol. 41. P 83-89.
2. Suvorova, Y. M., Korotkova, M. A. and others // DNA Res. 2019. Vol. 26 № 2P. 157–170.
3. Pugacheva, V., Korotkov, A. & Korotkov, E. // Stat. Appl. Genet. Mol. Biol. 2016. Vol. 15, P. 381–400

М.Б. ИСКАКОВ, Г.Б. АБИЛДАЕВА, Ю.К. ШАКИРОВА, Н.К.  
САВЧЕНКО, С.К. ЖУМАГУЛОВА

*Карагандинский государственный технический университет, Караганда, Казахстан*

## **МЕТОДИКА СОЗДАНИЯ 3-D МОДЕЛИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ НА ОСНОВЕ МАТЕРИАЛОВ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ РАЗВЕДКИ**

Рассмотрены основные этапы создания модели. Предложена обобщенная структура 3-D модели. Представлены материалы для построения 3-мерной структурно-геометрической модели МПИ.

M.B. ISKAKOV, G.B. ABILDAEVA, YU.K. SHAKIROVA,  
N.K.SAVCHENKO, S.K. ZHUMAGULOVA

*Karaganda State Technical University, Karaganda, Kazakhstan*

## **METHODOLOGY FOR CREATING A 3-D MODEL OF A FIELD BASED ON GEOLOGICAL EXPLORATION MATERIALS**

The main stages of creating a model are considered. A generalized structure of the 3-D model is proposed. The materials for building a 3-dimensional structural-geometric model.

Главная задача трехмерного моделирования – это визуализация геологической структуры месторождения. Все пакеты программ трехмерного моделирования месторождений в настоящее время нацелены на геостатистические методы оценки запасов. Трехмерное моделирование и геостатистика при решении задач этого класса являются основным инструментом геолога для подсчета запасов [1]. На основе анализа практики компьютерного моделирования месторождений можно предложить обобщенную структуру 3-D модели, которая состоит из следующих составных частей:

- геологическая база данных (данные геологической и эксплуатационной разведки);
- база данных маркшейдерских измерений.

Как правило, эти данные хранятся в электронной базе данных. Также следует отметить, что конкретный состав модели месторождения зависит от исходной горно-геологической информации и от характера решаемых задач. Цель моделирования – это построение каркасной геологической модели объектов или блочной модели месторождения для использования в процессе планирования горных работ.

Выделим и кратко опишем основные этапы создания модели:

1. Подготовка исходных данных. На данном этапе определяется граница моделируемого геологического объекта и целевое назначение будущей модели.

На основе этих требований формируется рабочая база данных с первичными данными геологической разведки и маркшейдерских измерений, которые выбираются из следующих таблиц базы данных:

- координаты устьев скважин;
- векторные модели вертикальных и горизонтальных сечений по разведочным линиям;
- принятые структурные колонки.

2. Отображение исходных данных на регулярную координатную сеть[2]. В рамках данной стадий моделирования решаются следующие задачи:

– приведение данных в единый масштаб. Так как вертикальные и горизонтальные сечения по разведочным линиям в общем случае могут быть построены в различных масштабах необходимо выполнить перерасчет данных для приведения к единому знаменателю;

– по упорядоченному и приведенному к единому масштабу измерения набору вертикальных сечений разведочных линий строится первая каркасная 3-мерная модель;

– по упорядоченному и приведенному к единому масштабу измерения набору горизонтальных сечений разведочных линий строится вторая каркасная 3-мерная модель;

– на основе этих двух моделей строится принятая 3-мерная модель;

– на основе данных принятой структурной колонки и 3-мерной модели создается окончательная модель пространственного распределения изучаемого свойства геологического объекта.

3. Конвертирование данных модели в среду используемой ГИС. Далее полученные материалы с применением специальных алгоритмов с учетом требований используемой ГИС конвертируется и загружается в ее базу данных. С помощью этой ГИС строятся цифровые модели поверхностей и решаются поставленные задачи.

#### *Список литературы*

1. Геология и разведка месторождений полезных ископаемых. Учебник для студ. учреждений высш. проф. образования/ В.В.Авдонин, В.В. Мосейкин, Г.В. Ручкин и др. Под ред. В.В.Авдонина. – М.: Издательский центр «Академия», 2011. – 416 с.

2. Исаков М.Б., Абилдаева Г.Б. Методика перевода материалов подсчета запасов и утверждения кондиции в цифровой формат. Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации: труды международной научно-практической конференции, 14-15 июня 2019 г. С.154-156.

А.С. ЕГОРОВ<sup>1</sup>, А.А. БРЕХОВА<sup>2</sup>

*<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

*<sup>2</sup>Саровский физико – технический институт – филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Саров, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ИСКАЖЕНИЙ КРУПНОГАБАРИТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**

Рассмотрены методы поиска коэффициентов разложения волновых фронтов реальных оптических элементов по полиномам Цернике. Выполнена аппроксимация полученных фронтов полиномами Цернике и найдены соответствующие коэффициенты разложения. Проведен анализ низкочастотных возмущений волнового фронта. На основе полученных коэффициентов разложения выполнено моделирование фазового экрана двумя способами и проведено их сравнение.

A.S. EGOROV<sup>1</sup>, A.A. BREKHOVA<sup>2</sup>

*<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

*<sup>2</sup>Sarov State Physics and Technical Institute (Branch of the Moscow Engineering Physics  
Institute), Sarov, Russia*

## **MODELING OF PHASE DISTORTIONS OF LARGE-SIZED OPTICAL ELEMENTS**

Methods for searching the decomposition coefficients real optical elements wave fronts by Zernike polynomials are considered. The obtained fronts are approximated by Zernike polynomials and the corresponding decomposition coefficients are found. The analysis of low-frequency perturbations of the wavefront is carried out. Based on the obtained decomposition coefficients, the phase screen was modeled in two ways and compared.

В настоящее время к качеству оптических элементов предъявляются все более и более жесткие требования. Это связано с необходимостью создания сложных и высокоточных приборов и установок для научно-экспериментальных и промышленных целей. Одним из основных критериев качества являются требования к искажениям волнового фронта [1]. Для совершенствования процесса создания оптических элементов, необходимо на основании маленькой партии уметь моделировать серию однотипных фазовых фронтов, необходимых для принятия решения о приемлемости текущих методов создания таких элементов и возможности работы экспериментальной установки.

В данной работе на основе методов поиска коэффициентов разложения по полиномам Цернике написана программа в пакете программ MATLAB, которая позволила вычислить коэффициенты разложения двумя способами: методом наименьших квадратов с применением и без применения ортонормализации

Грама-Шмидта [2]. Метод с ортонормализацией Грама-Шмидта оказывается предпочтительнее, когда количество используемых полиномов Цернике лежит в диапазоне 25-90 штук. Вне этого диапазона метод нестабилен и может привести к неверным результатам. Одной из причин нестабильности можно назвать непригодность метода для описания высокочастотных отклонений волнового фронта. Однако, метод наименьших квадратов при больших количествах полиномов Цернике в разложении тоже нуждается в проверке и может нести неверную информацию об исследуемом волновом фронте. В качестве оцениваемых параметров качества разложения брались среднеквадратическое отклонение и максимальное отклонение волнового фронта.

На основе полученных значений коэффициентов при полиномах Цернике реальных волновых фронтов было проведено моделирование по данным о нескольких однотипных элементах двумя способами и набрана статистика.

Была выявлена несостоятельность метода выбора случайного коэффициента каждого вида из набора коэффициентов для пяти реальных волновых фронтов, так как смоделированный фронт сильно отличался от реального по контролируемым параметрам. Причиной несостоятельности метода может являться заметное отличие используемых при моделировании волновых фронтов друг от друга.

В методе, когда добавлялись члены в диапазон значений между максимальным и минимальным коэффициентом, а затем выбирался случайный коэффициент удалось добиться лучших результатов и смоделированные фронты с учетом стандартной ошибки близки к реальным по контролируемым параметрам.

#### *Список литературы*

1. Aikens D., Roussel A., Bray M. Derivation of Preliminary Specifications for Transmitted Wavefront and Surface Roughness for Large Optics Used in Inertial Confinement Fusion // Proceeding of SPIE –1995. – Vol.2633.
2. D.Malacara, J.MartinCarpio-Valadez и J.Javier Sanchez-Mondragon.Wavefront fitting with discrete orthogonal polynomials in a unit radius circle. //Optical Engineering, Vol. 29 No. 6, 672-675, 1990.

Д.С. БОГАЧЁВ<sup>1</sup>, А.А. СЕЛИВАНОВ<sup>1</sup>, Р.Б. РЫБКА<sup>1</sup>,  
И.А. МОЛОШНИКОВ<sup>1</sup>, А.Г. СБОЕВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## **МОДЕЛЬ НА ОСНОВЕ ГРАФОВОЙ СВЁРТОЧНОЙ СЕТИ ДЛЯ ВКЛЮЧЕНИЯ ДЕРЕВЬЕВ СИНТАКСИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ В ЗАДАЧУ КЛАССИФИКАЦИИ ПОЛА АВТОРА ТЕКСТА**

В исследовании предложен классификатор на основе нейронной сети, которая включает свёрточные графовые слои (Graph convolution layers) для учёта признаков структуры деревьев синтаксических зависимостей при решении классификационной задачи профилирования автора текста по полу. Включение синтаксической структуры предложения в пространство входных признаков для задачи классификации пола автора текста позволяет улучшить известные точности в среднем на 3% для корпуса RusPersonality и 4% для корпуса Gender Imitation Crowdsorce "a". Итоговая точность по метрике f1 составляет 84% и 81% соответственно.

D.S. BOGACHEV<sup>1</sup>, A.A. SELIVANOV<sup>1</sup>, R.B. RYBKA<sup>1</sup>,  
I.A. MOLOSHNIKOV<sup>1</sup>, A.G. SBOEV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia

## **GRAPH CONVOLUTION NETWORK MODEL TO INCLUDE DEPENDENCY TREES IN CLASSIFICATION OF THE TEXT'S AUTHOR'S GENDER**

The study proposed a classifier based on a neural network, which includes graph convolution layers to take into account the structural features of the dependency trees in text author profiling by gender. It is shown that the syntactic structure inclusion in input features makes able to improve accuracy by an average of 3% for the RusPersonality corpus and 4% for the Gender Imitation Crowdsorce "a" corpus. The total accuracy (f1-measure) is 84% and 81%, respectively.

Значимая проблема анализа текстовых данных – отсутствие оптимального представления текста в виде математической сущности без потерь информации. Дополнение признакового пространства информацией о структуре предложения позволяет уменьшить влияние этой проблемы и повысить точность классификации текстов, что делает актуальным данное исследование.

Разработана архитектура нейронной сети для включения признаков синтаксической структуры в задачу классификации текстов, отличная от [1]. Архитектура состоит из двухслойной графовой свёрточной сети (ГСС, Graph

Convolution Network)[2] и двунаправленного LSTM-слоя[3] размерностью 128. Вход сети – граф предложения в виде матрицы смежности  $N*N$  и матрицы с признаками узлов  $N*F$ . В ГСС произведение данных матриц умножается на матрицу весов  $W$ , к результату применяется функция активации, полученные вектора для каждого узла графа приводятся к среднему для получения векторного представления текста.

Подход был проверен на двух корпусах, сбалансированных по классам: RusPersonality (валидированный лингвистами набор текстов, 1150 текстов), Gender Imitation Crowdsorce «а» (корпус текстов, собранный на краудсорсинговой платформе, 1664 текста). Для получения синтаксических деревьев использован парсер UDPipe[4].

Эксперимент поставлен аналогично [1]. Метрика оценки точности – F1: для RusPersonality  $84\% \pm 1\%$ , выше baseline[5] на 3%, для GI cs «а»  $81\% \pm 2\%$ , выше baseline[5] на 4%. Результаты сопоставимы с представленными в [1] ( $83\%$  и  $82\%$  соответственно, полученные нами на основе модели LSTM и представления синтаксического дерева для обработки в виде множества путей для каждого слова).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-10084 «МК».

#### *Список литературы*

1. Sboev A., Selivanov A., Rybka R., Moloshnikov I., Bogachev D. A Neural Network Model to Include Textual Dependency Tree Structure in Gender Classification of Russian Text Author. In: Advanced Technologies in Robotics and Intelligent Systems. Mechanisms and Machine Science, vol 80. Springer, 2020
2. Kipf T.N., Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. arXiv preprint arXiv:1609.02907. 2016.
3. Chen T, Xu R, He Y, Wang X. Improving sentiment analysis via sentence type classification using BiLSTM-CRF and CNN. Expert Systems with Applications. 2017
4. <http://ufal.mff.cuni.cz/udpipe>
5. Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Rybka R. A comparison of Data Driven models of solving the task of gender identification of author in Russian language texts for cases without and with the gender deception. Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2017. Vol. 937. № 1. p. 012046.

А. Г. СБОЕВ, А. В. СЕРЕНКО, Р. Б. РЫБКА

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия  
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МОДЕЛЬ СПАЙКОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ С STDP- ОБУЧЕНИЕМ И ТОРМОЗЯЩИМИ МЕЖНЕЙРОННЫМИ СВЯЗЯМИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КЛАССИФИКАЦИИ**

Для сети из одного слоя возбуждающих и одного слоя тормозящих нейронов показано, что на основе биологически мотивированной модели долговременной синаптической пластичности Spike-Timing-Dependent Plasticity возможно обучение сети не только распознаванию изображений, что было ранее показано на примере рукописных цифр MNIST, но и классификации векторов рациональных чисел, на примере задачи ирисов Фишера.

A. G. SBOEV, A. V. SERENKO, R. B. RYBKA

*National Research Centre «Kurchatov Institute», Moscow, Russia  
National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **SPIKING NETWORK MODEL WITH STDP LEARNING AND INHIBITORY INTERNEURONAL CONNECTIONS FOR SOLVING A CLASSIFICATION TASK**

For a neural network comprising one excitatory layer and one inhibitory layer, the biologically-inspired Spike-Timing-Dependent Plasticity is shown to be capable of learning not only the image recognition task of MNIST as known previously, but also a real-valued classification task of Fisher's Iris.

Разработка алгоритмов обучения спайковых (импульсных) нейронных сетей решению задач классификации актуальна ввиду возможности аппаратной реализации спайковых сетей на малоэнергосъёмных нейроморфных вычислительных устройствах. Перспективным механизмом изменения синаптических весов в основе таких алгоритмов обучения может выступать биологически мотивированная модель долговременной синаптической пластичности Spike-Timing-Dependent Plasticity (STDP), пригодная для реализации на мемристорных устройствах.

Недавно [1] была предложена модель спайковой нейронной сети с STDP-пластичностью и тормозящими межнейронными связями для обучения без учителя решению задачи распознавания рукописных цифр из набора данных MNIST. Целью данной работы было показать возможность применения подобного подхода с STDP для решения задачи классификации векторов рациональных чисел на примере задачи ирисов Фишера.

Для этой задачи нами была адаптирована схема сети [1], состоящая из двух слоёв по 100 нейронов: возбуждающего и тормозящего. Каждый возбуждающий нейрон связан непластичной связью с одним тормозящим нейроном, который посредством связей с фиксированными случайными весами тормозит все остальные возбуждающие нейроны. Динамика нейронов обоих слоёв описывается моделью LeakyIntegrate-and-Fire с динамическим порогом; входящий постсинаптический ток подчиняется модели синаптической проводимости. У нейронов возбуждающего слоя по 100 входов, которые обладают аддитивной STDP.

Входные данные подаются на сеть, закодированные средними частотами пуассоновских входящих спайковых последовательностей: компоненты 4-мерного входного вектора дублируются 25 раз, до 100-мерного, и умножаются на 8 Гц. После обучения синаптические веса фиксируются, на сеть ещё раз подаётся обучающая выборка, и каждому нейрону ставится в соответствие тот класс, в ответ на примеры которого он испускал больше спайков. Затем на сеть подаётся тестировочная выборка, и класс тестового вектора определяется по тому, нейроны какого класса испустили максимальное число спайков в ответ на этот вектор.

Точность классификации в среднем по 5 разбиениям кросс-валидации (для тестирования на каждом разбиении отводилось 30 из 150 векторов) составила 93%, с разбросом между разбиениями от 90% до 96%, что находится на одном уровне с результатом в 94% [2] других существующих подходов на основе STDP.

Авторы благодарны Р. Б. Кошкину за помощь в проведении численных экспериментов. Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда №17-71-20111 и с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт», <http://computing.nrcki.ru>.

#### *Список литературы*

1. P. U. Diehl, M. Cook. Unsupervised learning of digit recognition using Spike-Timing-Dependent Plasticity // *Frontiers in Computational Neuroscience*. — 2015.
2. А. Г. Сбоев, А. В. Серенко, Р. Б. Рыбка, Д. С. Власов. Сравнение частотного и временного кодирования данных при решении спайковой сетью со Spike-Timing-DependentPlasticity задачи классификации // *Вестник НИЯУ МИФИ*. — Т. 7. — № 6. — С. 563–568. — 2018.

С. Г. СБОЕВА<sup>1</sup>, А.Г. СБОЕВ<sup>2,3</sup>, А.В. ГРЯЗНОВ<sup>2</sup>, А. В. ЕВТЕЕВА<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова,  
Москва, Россия*

<sup>2</sup>*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Росси  
я*

## **НЕЙРОСЕТЕВОЙ АЛГОРИТМ ВЫДЕЛЕНИЯ ЗНАЧИМОЙ ИНФОРМАЦИИ ИЗ ТЕКСТОВ РУССКОЯЗЫЧНЫХ ОТЗЫВОВ О ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВАХ**

В работе представлен нейросетевой алгоритм анализа интернет-отзывов пользователей о лекарственных препаратах. Валидация алгоритма проводилась на специально подготовленном и размеченном корпусе. Основу алгоритма составляет нейросетевая модель, сочетающая конволюционные и рекуррентные слои, контекстно-зависимые векторные представления слов, условные случайные поля и дополнительные признаки слов, полученные из словарей. Предложенная модель показала результаты сопоставимые с state-of-the-art результатами для данной задачи на стороннем корпусе данных, что демонстрирует эффективность алгоритма в целом.

S.G. SBOEVA<sup>1</sup>, A.G. SBOEV<sup>2,3</sup>, A.V. GRYAZNOV<sup>2</sup>, A.V. EVTEEVA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*I.M. Sechenov First Moscow State Medical University (Sechenov University), Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **NEURAL NETWORK ALGORITHM FOR ALLOCATING VALUABLE INFORMATION FROM TEXTS OF RUSSIAN- LANGUAGE REVIEWS ON MEDICINES**

The paper presents a neural network algorithm for analyzing online user reviews of drugs. The algorithm was validated on a specially prepared and annotated corpora. The basis of the algorithm is a neural network model combining convolutional and recurrence layers, context-dependent vector representations of words, conditional random fields and additional features of words obtained from dictionaries. The proposed model showed results comparable to the state-of-the-art results for this task on a corpora for other language.

Тексты, публикуемые, в частности, в социальных сетях, дискуссионных группах и форумах в сети Интернет, могут содержать большое количество значимой информации, полезной для оценки эффективности медицинских препаратов в дополнение к клиническим исследованиям. Целью данной работы является апробация нейросетевого алгоритма выделения значимых сущностей из текстов отзывов на базе современных нейросетевых решений и созданного корпуса размеченных примеров.

Созданный корпус состоит из 1660 примеров оценочных суждений пациентов о лекарственных препаратах различных фармакотерапевтических групп, которые не следуют формальным правилам грамматики и пунктуации русского языка. Аннотации содержат упоминания о таких понятиях, как Medication (17779), Adverse Drug Reaction (844), Disease (9285), Note (2319). Аннотации были выполнены аннотаторами с медицинским и фармацевтическим образованием, которые пользовались специально разработанным совместно со специалистами по методам анализа текстовых данных руководством.

В начале работы алгоритма выделения значимых сущностей выполняется преобработка текста, удаление незначимых символов и токенизация на слова и предложения. Далее последовательность слов кодируется с использованием специальных словарей[1] и векторным представлением слов на базе языковых моделей[2]. Полученные закодированные последовательности анализируются нейросетевой моделью глубокой архитектуры, состоящей из сверточных слоев, двунаправленного LSTM-слоя, а также полносвязного слоя. Модель решает задачу классификации на несколько классов, представленных в корпусных аннотациях. Настройка модели осуществлялась с использованием техники раннего останова, а качество проверялось с применением процедуры кросс валидации.

Точности по метрике полного совпадения слов сущности составляют: 86.7%, 51.7% и 73.4% для сущностей Medication, ADR и Disease, соответственно. Полученные результаты сопоставимы с уровнем точности, полученными для аналогичных корпусов на других языках, и могут рассматриваться как state-of-the-art для поставленной задачи.

#### *Список литературы*

1. Campbell, K.E., Oliver, D.E., Shortliffe, E.H., 1998. The unified medical language system: toward a collaborative approach for solving terminologic problems. Journal of the American Medical Informatics Association 5, 12–16.
2. Peters M. E. et al. Deep contextualized word representations //arXiv preprint arXiv:1802.05365. – 2018.
3. Karimi, S., Metke-Jimenez, A., Kemp, M., Wang, C., 2015. Cadec: A corpus of adverse drug event annotations. Journal of biomedical informatics 55, 73–81.

А.Г. СБОЕВ<sup>1,2</sup>, А.В. НАУМОВ<sup>1</sup>, А.А. СЕЛИВАНОВ<sup>1</sup>,  
Д.В. ГУДОВСКИХ<sup>1</sup>

<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## **НЕЙРОСЕТЕВОЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТОНАЛЬНОСТИ ТЕКСТА ПО ОТНОШЕНИЮ К ЗАДАННОЙ ИМЕНОВАННОЙ СУЩНОСТИ**

Предложен метод определения отношения автора текста к выделенной именованной сущности на базе нейросетевой модели с механизмом внимания. Для обучения и валидации модели был собран и размечен корпус текстов на русском языке. В корпусе содержатся тексты из 3 различных источников данных. Проведена экспериментальная оценка точности предложенной модели в сравнении с классическими методами машинного обучения.

A.G. SBOEV<sup>1,2</sup>, A.V. NAUMOV<sup>1</sup>, A.A.SELIVANOV<sup>1</sup>,  
D.V.GUDOVSKICH<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPHI, Moscow, Russia

## **A NEURAL NETWORK APPROACH FOR NAMED ENTITY BASED SENTIMENT ANALYSIS**

A method for determining the affective states of the author text expressed on different named entities based on the neural network model with an attention mechanism is proposed. The corpus of texts in Russian language has been assembled and labeled for training and validation the model. The corpus contains texts from 3 different data sources. An experimental evaluation of accuracy of the proposed model in comparison with the classical methods of machine learning is shown.

Проблема определения отношения автора текста к одному из объектов его объектов, является одной из основных в задаче автоматического определения тональности текста. Наибольший интерес представляет анализ таких отношений, где в качестве объектов выступают персоны, организации, локации и др. Поэтому, целью данной работы является: разработка нейросетевого метода определения отношения автора текста к заданной именованной сущности, а также специализированного корпуса текстов.

Основой предлагаемого нами нейросетевого метода является модель с интерактивным вниманием[1], где исходный текст и анализируемый объект подавались на разные входы нейронной сети, преобразующей их в отдельные внутренние представления. Полученные представления используются для генерации векторов внимания, которые позволяют захватывать наиболее важную информацию из контекста для конкретного целевого объекта. К этой

модели была добавлена языковая модель ELMO [2], позволяющая получать контекстно-зависимые векторные представления слов, что позволяет учитывать синтаксические и семантические характеристики слов, а также их употребление в различных контекстах.

Для апробации предложенной модели был собран корпус текстов. Корпус содержит предложения на русском языке, отобранные из 3 источников данных: социальные сети (1236 предл.), новости (1659 предл.) и микроблоги (482 предл.). Все отобранные предложения содержат именованные сущности следующих типов: «Персона», «Организация» и «Локация». Именованные сущности были выделены автоматически с помощью открытой библиотеки DeepPavlov[3]. Каждое предложение размечено средствами краудсорсинга Yandex.Toloka на 3 класса тональной оценки: негативный, нейтральный и позитивный. Всего корпус содержит 3377 предложений, выделенные в них объекты и их тональную оценку. Для сравнительных экспериментов использовалось 80% корпуса на тренировку моделей и 20% случайно выбранных примеров на их тестирование.

Для оценки предложенного метода были проведены сравнительные эксперименты с методом случайной оценки и базовым классификатором построенном на основе векторов TF-IDF по n-граммам[4] и метода опорных векторов[5] с линейным ядром. В результате предложенный нейросетевой метод демонстрирует точность по метрике F1\_mасго лучше на 62% чем случайная оценка, и на 24% чем базовый классификатор. Таким образом, представленный метод показывает свою эффективность и может использоваться в решении задач аспектного сентимент анализа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-37-00398 с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт», <http://computing.nrcki.ru/>.

#### *Список литературы*

1. MaD. et al. Interactive attention networks for aspect-level sentiment classification //arXiv preprint arXiv:1709.00893. – 2017.
2. Peters M. E. et al. Deep contextualized word representations //arXiv preprint arXiv:1802.05365. – 2018.
3. Burtsev M. et al. DeepPavlov: Open-source library for dialogue systems //Proceedings of ACL 2018, System Demonstrations. – 2018. – С. 122-127.
4. Salton G., Buckley C. Term-weighting approaches in automatic text retrieval //Information processing & management. – 1988. – Т. 24. – №. 5. – С. 513-523.
5. Hearst M. A. et al. Support vector machines //IEEE Intelligent Systems and their applications. – 1998. – Т. 13. – №. 4. – С. 18-28.

А.Р. КАРИМОВ<sup>1,2</sup>, В.К. БОГДАНОВ<sup>1</sup>, В.В. ДМИТРИЕВА<sup>1</sup>,  
О.А. НАГОВИЦЫНА<sup>1</sup>, Е.А. АНАНЬЕВА<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

## **НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ СЛАБОСТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПЛАЗМОПОДОБНЫХ СРЕД**

Используя приближение Батнагера—Гросса—Крука для интеграла столкновений, исследуется влияние столкновений на образование когерентных структур вблизи локально-равновесных состояний в совокупности частиц, взаимодействующих через потенциал Юкавы. Для данной модели получены нестационарные распределения Максвелловского типа, позволяющие рассмотреть влияние начальных условий на формирование динамических состояний.

A.R. KARIMOV<sup>1,2</sup>, V.K. BOGDANOV<sup>1</sup>, V.V. DMITRIEVA<sup>1</sup>,  
O.A. NAGOVITSYNA<sup>1</sup>, E.A. ANANYEVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Electrophysical Facilities, National Research  
Nuclear University MEPhI, Kashirskoye shosse 31, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences, Izhorskaya 13/19, Moscow,  
Russia*

## **NONLINEAR DYNAMICS OF NONEQUILIBRIUM WEAKLY COLLISIONAL PLASMA-LIKE MEDIA**

Using the Batnager – Gross – Crook approximation for the collision integral, we study the effect of collisions on the formation of coherent structures near locally equilibrium states in the continuum of particles interacting through the Yukawa potential. For this model, unsteady distributions of the Maxwell type are obtained. They allow us to consider the influence of the initial conditions on the formation of dynamic states.

Формирование и динамика нелинейных, долгоживущих структур (так называемых когерентных структур) в диссипативных плазмоподобных средах, далеких от равновесия, представляет интерес для различных приложений, включая исследования биологических объектов [1,2].

В настоящей заметке рассматривается одномерная модель слабостолкновительной среды, состоящей из частиц, взаимодействующих через потенциал Юкавы, описываемая интегро-дифференциальным уравнением Власова, дополненным столкновительным интегралом в форме Батнагера—Гросса—Крука. Для данного уравнения, используя подход [3,4], было построено частное, нелинейное решение максвелловского типа в виде конечного ряда по самосогласованному потенциалу.

Подробно обсуждался случай, описывающий динамику исследуемой системы вблизи локально-равновесных состояний. Полученная функция распределения была использована для анализа начальных условий и столкновений на образование когерентных структур в рассматриваемой модели. В частности, с ее помощью можно выделить область существования локально-равновесных состояний, где коллективные взаимодействия преобладают над диссипативными процессами, а также, рассматривая соответствующую начальную задачу, найти условия формирования максвелловских и немасвелловских распределений в рассматриваемых слабостолкновительных средах.

*Список литературы*

1. B. Kadomtsev, Usp. Fiz. Nauk, vol. 164, 449 (1994).
2. G. Nicolis and I. Prigogine, Self-organization in Nonequilibrium Systems (Wiley, New York, 1977).
3. A. R. Karimov and H. R. Lewis, Physics Plasmas, vol. 6, 759 (1999).
4. A. R. Karimov and H. R. Lewis, Physics Plasmas, vol. 8, 1533 (2001).

С.Ф. ЛАВРОВА, Н.А. КУДРЯШОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ КУРАМОТО-СИВАШИНСКОГО В ПЕРЕМЕННЫХ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ

Проведен анализ нелинейных динамических режимов обобщенного уравнения Курамото-Сивашинского в переменных бегущей волны.

S.F. LAVROVA, N.A. KUDRYASHOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## NONLINEAR DYNAMICS OF THE TRAVELLING WAVE REDUCTION FOR THE GENERALIZED KURAMOTO-SIVASHINSKY EQUATION

An analysis of the nonlinear dynamics regimes of the travelling wave reduction for the generalized Kuramoto-Sivashinsky equation is conducted.

Известно, что обобщенное уравнение Курамото-Сивашинского описывает физические процессы в нелинейных системах [1]. Оно имеет вид

$$u_t + uu_x + u_{xx} + \beta u_{xxx} + u_{xxxx} = 0 \quad (1)$$

Уравнение (1) можно свести к обыкновенному дифференциальному уравнению, используя переменные бегущей волны. Будем искать решение уравнения (1) в виде

$$u(z) = y(z), z = x - Vt,$$

Тогда нормальная система уравнений, соответствующая (1), выглядит следующим образом

$$y_z = u, u_z = r, r_z = Vy - \frac{y^2}{2} - u - \beta r. \quad (2)$$

Нелинейную динамику системы (2) можно исследовать путем построения ее бифуркационной диаграммы и расчета зависимости старшего ляпуновского показателя от параметра.

Бифуркационная диаграмма в данной работе строилась путем сечения решения плоскостью  $y = C$  в положительном направлении изменения

переменной  $y$ . Значения  $x$  из сечения Пуанкаре откладывались по оси ординат и значения параметра  $\beta$  откладывались по оси абсцисс.

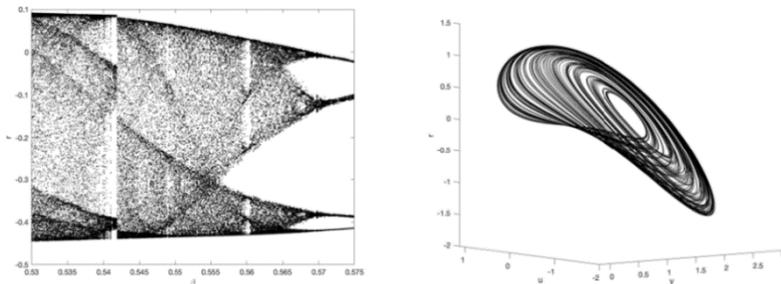


Рис. 1. Бифуркационная диаграмма и аттрактор системы при  $V = 1$ .

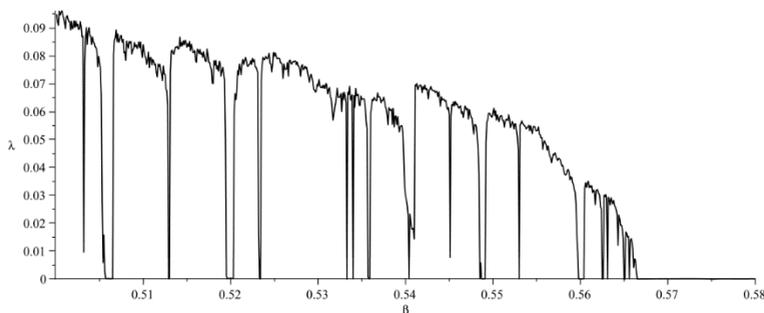


Рис. 2. Зависимость старшего ляпуновского показателя от параметра  $\beta$ ,  $V = 1$ .

Ляпуновские показатели качественно описывают степень расхождения близких траекторий системы. Чтобы обнаружить хаотическое поведение достаточно рассчитать старший ляпуновский показатель. Для его вычисления в данной работе использовался алгоритм Беннетина [2].

Рис. 1 и 2 показывают, что при некоторых значениях параметра  $\beta$  система обладает хаотическим аттрактором, о чем говорят положительный старший ляпуновский показатель и вид сечения Пуанкаре. Хаотический аттрактор системы представлен на рис 1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), № 18-29-10039.

#### Список литературы

1. Sivashinsky G. I. Large cells in nonlinear Marangoni convection //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 1982. – Т. 4. – №. 2. – С. 227-235.
2. Benettin, Giancarlo, et al. "Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems; a method for computing all of them. Part 1: Theory."Meccanica 15.1 (1980): 9-20.

А.В. ПОРУБОВ

*Институт Проблем Машиноведения, Санкт-Петербург, Россия*

## **НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ В ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНОЙ РЕШЕТКЕ ГРАФЕНА**

Разработана геометрически нелинейная модель решетки графена. Связанные нелинейные уравнения движения в частных производных для деформаций получены в континуальном пределе исходных решеточных дискретных уравнений. Разработана асимптотическая процедура для сведения решения связанных уравнений к решению одного управляющего нелинейного уравнения. Некоторые нелинейные деформационные волновые решения изучены аналитически и численно.

A. V. PORUBOV

*Institute for Problems in Mechanical Engineering, Saint Petersburg,, Russia*

## **NONLINEAR WAVES IN GEOMETRIALLY NONLINEAR GRAPHENE LATTICE**

A geometrically nonlinear graphene lattice model is developed. The governing coupled nonlinear partial differential equations of motion for strains are obtained in a continuum limit of the original lattice discrete equations. An asymptotic procedure is developed to reduce the solution of coupled equations to a solution of a single governing nonlinear equation. Some nonlinear strain wave solutions are studied analytically and numerically.

Решеточные модели позволяют описывать деформационные процессы в материалах со сложной внутренней структурой. Менее изученными являются многомерные решеточные модели, например, двумерная модель графена. Результатом дискретного моделирования являются дифференциально-разностные уравнения движения. Однако, нелинейные дискретные уравнения обычно не могут быть решены аналитически, и их решения могут быть получены только численно. В длинноволновом и коротковолновом пределах дискретные уравнения могут быть сведены к уравнениям в частных производных при помощи континуального предела. Полученные таким образом уравнения допускают, по крайней мере, частные аналитические решения.

Решетка графена описывается взаимодействием двух подрешеток, учитывается как поступательное, так и угловое взаимодействия между массами решетки, моделируемое упругими пружинами. Нелинейное рассмотрение угловых взаимодействий порождает геометрически нелинейную модель для энергии деформации. Физическая нелинейность, вызванная упругостью пружины, отличной от описываемой законом Гука, были рассмотрены в нашем предыдущем исследовании [1, 2].

Выражения для энергий для каждой подрешетки записываются отдельно, а связанные управляющие нелинейные дифференциально-разностные уравнения

движения выводятся с использованием вариационного принципа. Эти уравнения не имеют аналитических решений. В длинноволновом случае удается получить в континуальном пределе связанные нелинейные уравнения в частных производных. Однако и эти уравнения все еще не допускают аналитических решений. Была разработана асимптотическая процедура распаривания связанных уравнений с описания преимущественно продольных или сдвиговых волн, распространяющиеся в одном направлении и слабо возмущенных в перпендикулярном. Это позволило вывести отдельные уравнения для продольных или поперечных волн деформации.

В частности, известное уравнение Кадомцева-Петвиашвили получено для слабо поперечно возмущенных плоских продольных волн, в то время как поперечные волны подчиняются другому уравнению с более сложными нелинейными членами. Для обоих уравнений существуют как точные решения, в частности, в виде бегущей уединенной плоской волны деформации, так и асимптотические решения, описывающие поперечную неустойчивость плоской нелинейной волны. Также получены численные решения, описывающие нестационарный процесс локализации волн деформации. Исследуется влияние параметров исходной решеточной модели и роль трансляционной и угловой жесткостей пружин модели решетки графена на локализацию двумерной продольной или поперечной волны.

Работа выполнена в ИПМаш РАН и поддержана грантом РФФ 19-41-04106.

*Список литературы*

1. Porubov A.V., Osokina A.E. // WaveMotion. 2019. Vol. 89, P. 185–192.
2. Porubov A.V., Osokina A.E. // In: A. Berezovski, T. Soomere (eds.), Applied Wave Mathematics II, 151—166, Springer International Publishing, 2019.

**В.К. КОЗЛОВ, М.А. ЧМЫХОВ**

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ НА ОСНОВЕ РЕШАТЕЛЯ OPENFOAM**

Рассматривается математическая модель естественной конвекции в поле сил тяжести. Использована система уравнений, описывающая макроскопическое движение несжимаемой жидкости, в которую входят уравнение Навье-Стокса, уравнение теплопроводности и уравнение непрерывности. Естественная конвекция рассматривается в приближении Буссинеска. Для верификации рассматриваются задачи на ограниченной области, со стенками, поддерживаемыми при фиксированной температуре. Рассматривается задача аналогичная задаче Лоренца. Для численного моделирования используется решатель, реализованный на свободно распространяемом инструментарии OpenFOAM.

**V.K. KOZLOV, M.A. CHMYKHOV**

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **ON NUMERICAL MODELING OF NATURAL CONVECTION BASED ON THE OPENFOAM SOLVER**

The mathematical model of natural convection in the gravity field is considered. A system of equations has been used to satisfy the laws of conservation of energy, mass, and momentum. It includes the heat equation, the continuity equation, and the Navier-Stokes equation. Natural convection is considered in the Boussinesq approximation, in a limited region with walls maintained at a given temperature. A problem similar to the Lorentz problem is considered. Object-oriented programming language OpenFOAM is used for numerical modelling.

В данной работе рассматривается численное моделирование естественной конвекции в поле сил тяжести. Макроскопическое движение жидкости описывается системой уравнений гидродинамики, включающую в себя уравнение Навье-Стокса, переноса тепла и непрерывности. Используем их в приближении Буссинеска, в соответствии с Гершуни [1].

Моделирование проводится с помощью оригинального решателя реализованного с использованием свободно распространяемого инструментария OpenFOAM. Для этого используется модификация решателя isoFoam, в которой добавлено уравнение теплопроводности и, вместо алгоритма PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators), используется SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation). Для обработки результатов моделирования и их визуализации используется пакет ParaView и python. Для верификации рассматривались аналитическая задача и эксперимент по нахождению критического числа Рейля.

Было рассмотрено аналитическое решение задачи стационарного конвективного движения в бесконечном вертикальном слое жидкости между параллельными пластинами при разных температурах, приведенный в работе Гершуни [1]. При численном моделировании рассматривалась прямоугольная граница высотой  $h$  и длиной  $l$ , с различным отношением  $\frac{h}{l} = 1; 2; 4; 8$ . Получена корреляция между отношением  $\frac{h}{l}$  и максимальным отклонением от аналитического решения.

Проведено численное исследование эксперимента из статьи Buhler, Kirchartz, и Oertel [2]. В ней рассматривается эксперимент, описывающий конвекцию в горизонтальной прослойке и появление ячеек Бенара. Геометрия и большинство физических постоянных, используемые при моделировании, равны таковым в статье. Получено критическое число Рэлея, оно относится к диапазону значений от 3042 до 3225.

В работе исследуется задача вынужденного конвективного движения слоя жидкости заключенного между коаксиальными цилиндрами, аналогичная задачи Лоренца [3,4] (кольцо, подогреваемое снизу, охлаждаемое сверху). Получены режимы течения с несколькими сменами направления вращения, проведено изучение режимов течения. Анализ результатов проводится с помощью python и приложения ParaView.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-29-10039.

#### *Список литературы*

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М., Главная редакция физико-математической литературы изд-ва Наука, 1972, 392 с. / Gershuni G.Z., Zhukhovitskii E.M. Convective Stability of Incompressible Fluids. I.P.S.T. 1976, 336 p.
2. Buhler K., Kirchartz K.R., Oertel H. Steady convection in a horizontal fluid layer Acta Mechanica 31, 1979, pp. 155
3. Lorenz, E.N. Deterministic Nonperiodic Flow. Journal of Atmospheric Sciences, 20, 1963, pp. 130-141.
4. Kudryashov, N.A. Analytical solutions of the Lorenz system (2015) Regular and Chaotic Dynamics, 20 (2), pp. 123-133.

А.В. КРЯНЕВ, Н.А. КУДРЯШОВ, Д.Е. СЛИВА  
*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

## **ОПТИМИЗАЦИЯ ЗАТРАТ НА СИСТЕМУ ЗАЩИТЫ ИНФОРМАЦИИ ОТ УГРОЗ**

Защита информации, потенциально доступной через внешние каналы связи, от внешних угроз является одной из актуальных задач. В настоящей работе представлена схема, позволяющая решить задачу оптимизации затрат на систему защиты информации, при реализации которой обеспечен минимум средних суммарных затрат на реализацию системы защиты и потерь из-за оставшихся угроз, реализованных после установления системы защиты.

A.V. KRYANEV, N.A. KUDRYASHOV, D.E. SLIVA

*National Research Nuclear University "MEPhI"*

## **OPTIMIZATION OF COSTS FOR THE INFORMATION PROTECTION SYSTEM FROM THREATS**

Protecting information that is potentially accessible through external communication channels from external threats is one of the urgent tasks. In this paper, we present a scheme that allows us to solve the problem of optimizing the costs of an information security system, the implementation of which ensures a minimum of average total costs for the implementation of the protection system and losses due to the remaining threats realized after the establishment of the protection system.

В современных условиях защита конфиденциальной информации, прежде всего баз данных, помещаемой в системах с потенциальной угрозой, требует существенных затрат.

В настоящей работе рассмотрена схема, с помощью которой решается задача оптимизации затрат на систему защиты информации и находится минимум средних суммарных затрат на реализацию системы защиты и средних потерь из-за угроз, которые могут реализоваться после установления системы защиты.

Целевая функция задачи оптимизации затрат на систему защиты информации имеет следующий вид

$$\psi(PL) = PL + ML(PL), \quad (1)$$

где  $PL$  – затраты на систему защиты,  $ML(PL)$  – среднее значение  $L(PL)$  – потерь от угроз с системой защиты, затраты на реализацию которой составляет величину  $PL$ .

Функцию  $ML(PL)$  можно получить с помощью методов сглаживания и основанных на них схем и алгоритмов.

На рисунке 1 представлены исходные данные и результаты их обработки в процессе решения задачи оптимизации затрат на систему защиты информации. Исходные данные по потерям из-за угроз были получены с помощью датчика нормально распределенной случайной величины с учетом монотонного убывания функции  $ML(PL)$  при увеличении затрат на систему защиты. Графики функций  $\psi(PL)$  и  $ML(PL)$  на рисунке 1 обозначены пунктирными линиями. На рисунке 1 выделено оптимальное значение затрат  $PL_{opt}$ , при котором достигается минимальное значение целевой функции  $\psi(PL)$ .

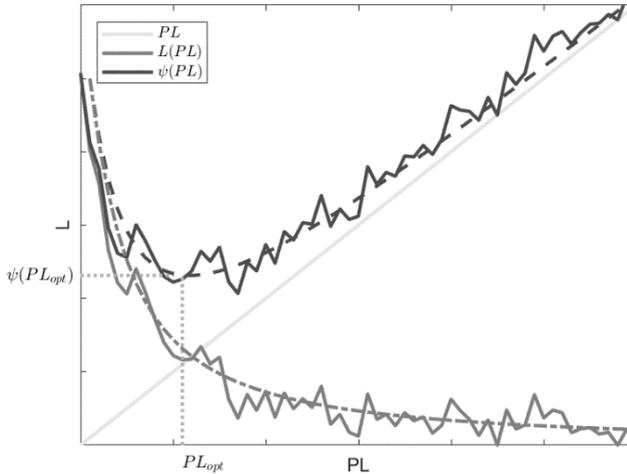


Рис.1. Затраты на систему защиты информации и потери от реализованных угроз

#### Список литературы

1. Kostogryzob A.I. Software Tools Complex for Evaluation Quality. Proceedings of the 34-th Annual Event of the Government Electronics an Information Association, 2000 Engineering and Technical Management Symposium, 2000 p. 63-70.
2. Серeda С.А. Оценка эффективности систем защиты программного обеспечения. КомпьюЛог, №2, 2002.
3. Баутов А. Экономический взгляд на проблемы информационной безопасности. Открытые системы, №2, 2002.
4. Серeda С.А. Анализ средств преодоления систем защиты программного обеспечения. ИНФОРМОСТ, Радиотехника и Телекоммуникации, №4(22), 2002.

Л.С. ӘСЕТОВА, Б.М. НУРЛАНОВА, А.А. АСЕТОВ

*Карагандинский государственный университет им. академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан*

## **РАСЧЕТ НА ИЗГИБ УПРУГО – ПЛАСТИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЫ, ЗАКРЕПЛЕННОЙ ШАРНИРОМ**

В данной работе рассматривается изгиб упруго-пластической пластины, закрепленной шарниром. Расчеты производились с использованием метода разделения переменных и реализован в программе MathCAD. Получены значения и построены эпюры компонентов перемещений, компонентов деформаций.

L.S. ASSETOVA, B.M. NURLANOVA, A.A. ASSETOV

*Academician Y.A. Buketov Karaganda State University, Karaganda, Kazakhstan*

## **CALCULATION OF THE FLEXURE OF A HINGE-SUPPORTED ELASTIC-PLASTIC PLATE**

In this paper, we consider the bending of an elastic-plastic plate fixed by a hinge. Calculations were performed using the method of separating variables and implemented in the MathCAD program. Values are obtained and plots of displacement components and deformation components are constructed.

В современных зданиях чаще всего используют пластины, а не стержни в качестве элемента ремня, обладающего основной подъемной способностью. Для того, чтобы создать любую конструкцию, необходимы предварительные расчеты. И после этого можно будет определить его размеры и из какого материала следует сделать.

Рассмотрим упруго-пластическую пластину прямоугольной формы, закрепленную шарниром, в декартовой системе координат ( $l_1, l_2, h$  – заданные размеры пластины в направлении координатных осей). Пусть на нее действует  $q_0$  равномерно распределенная нагрузка. Расчет на изгиб пластины производим с помощью метода разделения переменных с реализацией в программе MathCAD.

Производим вычисления безмерной функций изгиба пластины. Используя безмерные функции изгиба пластины, определяем большую функцию изгиба  $W(x, y, \xi)$  [1].

Используя функцию изгиба, находим компоненты перемещения, и их эпюры при  $z = 0.5; \xi = 0.5$ . (рис. 1):

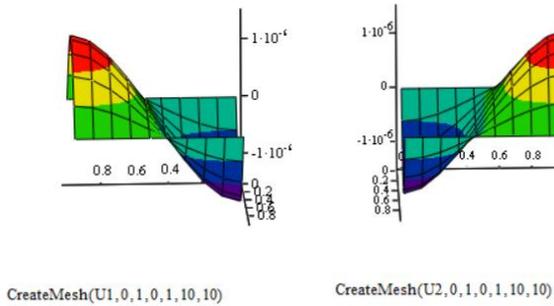


Рис. 1. Компоненты перемещения

Используя компоненты перемещения, определяем компоненты деформаций и строим эпюры при  $z = 0.5$  (рис. 2):

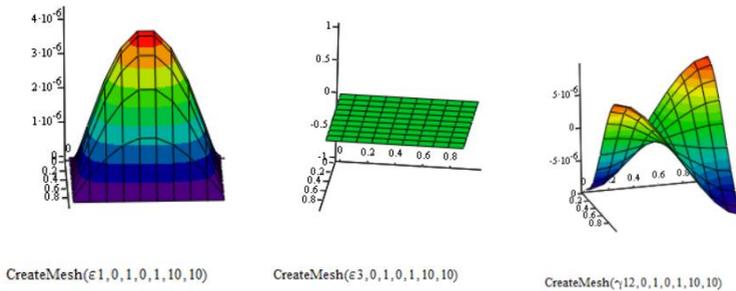


Рис. 2. Компоненты деформации

Далее, можно будет найти компоненты напряжения, используя определенные внутренние силы и построят эпюры с помощью программы MathCAD.

*Список литературы:*

1. Асетова Л.С., Нурланова Б.М., Шакиев Б.Б. Топса аркылы бекітілген серпімді-ілемділі пластинаны иілуге есептеу. – Теоретические и прикладные вопросы математики, механики и информатики: Материалы междунаод. научн. конф., приуроченной к 70-летию д.ф.-м.н., проф. Рамазанова М.И. (12-13 июня 2019 ж.). – Караганда: КарГУ, 2019. – С. 172-173.

Н.А. КУДРЯШОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

**РАЦИОНАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ  
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, СВЯЗАННЫХ СО  
ВТОРЫМ УРАВНЕНИЕМ ПЕНЛЕВЕ**

Изучены четыре нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений связанных преобразованиями со вторым уравнением Пенлеве. Рациональные решения уравнений представлены через полиномы Яблонского-Воробьева.

N.A. KUDRYASHOV

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

**RATIONAL SOLUTIONS OF NONLINEAR DIFFERENTIAL  
EQUATIONS ASSOCIATED WITH THE SECOND PAINLEVE  
EQUATION**

Four nonlinear ordinary differential equations are studied. It is shown that rational solutions of these equations can be found using the Yablonskii-Vorob'ev polynomials.

Известно, что более 120 лет назад Поль Пенлеве открыл нелинейные дифференциальные уравнения, которые определяют принципиально новые типы функций, которые не представляются с помощью алгебраических операций и определяют новый тип специальных функций называемых в настоящее время трансцендентами Пенлеве. В течение долгого времени уравнения Пенлеве считались некоторым любопытным примером нелинейных дифференциальных уравнений. Однако в шестидесятых годах прошлого столетия было установлено, что все уравнения Пенлеве имеют много приложений при описании физических процессов. Среди шести уравнений Пенлеве особенную популярность вследствие их простоты имеют три первых уравнения. В докладе рассматривается второе уравнение Пенлеве, имеющее вид [1]:

$$y_{zz} = 2y^3 + zy + \beta. \quad (1)$$

Известно, что при целых значениях параметра трансценденты Пенлеве вырождаются в рациональные решения, которые представляются в аналитическом виде через полиномы Яблонского-Воробьева.

В докладе показано, что рациональные решения уравнения для сингулярной функции

$$\frac{\varphi_{zzz}}{\varphi_{zz}} - \frac{3}{2} \frac{\varphi_{zz}^2}{\varphi_z^2} - z + (2\beta - 1) \frac{\varphi}{\varphi_z} = 0, \quad (2)$$

соответствующей решениям второго уравнения Пенлеве также выражаются через полиномы Яблонского-Воробьева. Показано, что рациональные решения уравнения для сингулярной функции могут быть последовательно найдены, используя итерационную формулу

$$\varphi_z(z; \beta + 1) = C_2 \frac{\varphi(z; \beta)^2}{\varphi_z(z; \beta)}. \quad (3)$$

В докладе представлен также альтернативный вариант второго уравнения Пенлеве в виде

$$vv_{zz} - \frac{3}{2} v_z^2 - \frac{1}{2} v^4 - zv^2 + (2\beta \pm 1)v = 0. \quad (4)$$

Показано, что рациональные решения уравнения (4) также могут быть найдены через полиномы Яблонского-Воробьева. Уравнение (4) отсутствует в классификации Пенлеве, но с помощью дробно-линейного преобразования приводится к уравнению P<sub>34</sub>.

Таким образом, в докладе представлено расширение списка нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений рациональные решения которых находятся с помощью полиномов Яблонского-Воробьева.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), № 18-29-10025.

*Список литературы*

1. Айнс Э. Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения, М. Факториал, 2005. – 638 с.
2. Кудряшов Н.А. Методы нелинейной математической физики: Учебное пособие – М.: Интеллект, 2010. – 368с.

В.В. БОЧКАРЕВ<sup>1,2</sup>, Б.Д. БРИЛЛИАНТОВ<sup>1,2</sup>, А.В. КРЯНЕВ<sup>2,3</sup>, Д.Т.  
ХАНБИКОВА<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*НТЦ ядерной и радиационной безопасности, Москва*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

<sup>3</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Московская область, Дубна*

## **СТРУКТУРА СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ПРИ ВЫВОДЕ ИЗ ЭКСПЛУАТАЦИИ ОБЪЕКТОВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ**

В докладе рассмотрена структура системы поддержки принятия оптимальных решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии. В предлагаемой структуре предусмотрен анализ различных вариантов вывода из эксплуатации рассматриваемого объекта использования атомной энергии и выбор оптимального варианта вывода его из эксплуатации.

V.V. BOCHKAREV<sup>1,2</sup>, B.D. BRILLIANTOV<sup>1,2</sup>, A.V. KRYANEV<sup>2,3</sup>, D.T.  
HANBIKOVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*STC Nuclear and Radiation Safety, Moscow*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University "MEPhI"*

<sup>3</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Moscow Region, Dubna*

## **SYSTEM STRUCTURE OF SUPPORT OF ADOPTION OF OPTIMUM DECISIONS AT THE TAKING OUT OF OPERATION OF ATOMIC ENERGY USE OBJECTS**

The report examined the structure of the optimum decision support system for the decommissioning of nuclear facilities. The proposed structure provides for the analysis of various options for decommissioning the facility under consideration for atomic energy use and the selection of the best option for decommissioning it.

В докладе предложена структура СППОР по ВЭ ОИАЭ. В предлагаемой структуре предусмотрено наличие схемы анализа различных вариантов ВЭ ОИАЭ, основанной на многокритериальном подходе. В частности, наряду с обычными выводами из эксплуатации (до уровня «зеленой лужайки» и захоронением радиоактивных отходов на месте) объекта использования атомной энергии в модели предусмотрено их оптимальное сочетание с учетом экономической эффективности и обеспечения радиационной безопасности.

Ниже на рисунке приведена блок-схема структуры СППОР по ВЭ ОИАЭ.



Рис. 1. Блок-схема программного комплекса СППОР по ВЭ ОИАЭ

В СППОР заложен принцип универсальности, реализуемый в наличии в СППОР базы данных блоков (справочников) типовых: элементов выводимых из эксплуатации ОИАЭ различных категорий (блоков энергетических ядерных реакторов различных типов, исследовательских и промышленных ядерных реакторов, пунктов хранения радиоактивных отходов (РАО) и др.); технологических операций по ВЭ ОИАЭ; ресурсов, необходимых для реализации типовых технологических операций.

*Список литературы*

1. Experience Using Phenomena Identification and Ranking Technique (PIRT) for Nuclear Analysis. Brookhaven National Laboratory.
2. Микони С.В. Многокритериальный выбор на конечном множестве альтернатив. СПб: Издательство «Лань», 2009.
3. IAEA-TECDOC-1478. Selection of decommissioning. Strategies: Issues and factors. IAEA, 2005.
4. Decommissioning Nuclear Power Plants: Policies, Strategies and Costs. © OECD 2003. Nuclear Energy Agency.

Н.А. КУДРЯШОВ, Д.В. САФОНОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ТЕСТ ПЕНЛЕВЕ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ**

Рассмотрены два нелинейных дифференциальных уравнения в частных производных четвертого порядка для описания оптических импульсов. Эти уравнения не относятся к классу интегрируемых методом обратной задачи рассеяния, поэтому рассматриваются в переменных бегущей волны. Исходные уравнения преобразуются в системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Проведен тест Пенлеве для полученных систем ОДУ. Найдены условия, при которых системы упрощаются до одного ОДУ четвертого порядка. Для одного из полученных уравнений получен первый интеграл. Используя метод простейших уравнений, построены точные решения рассматриваемых ОДУ, выраженные через эллиптическую функцию Вейерштрасса и экспоненциальную функцию.

N.A. KUDRYASHOV, D.V. SAFONOVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **PAINLEVÉ ANALYSIS AND EXACT SOLUTIONS OF NONLINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS FOR DESCRIPTION OF OPTICAL PULSES**

Two nonlinear fourth-order partial differential equations for describing optical pulses are considered. These equations are not integrable by the inverse scattering transform method. So the equations are considered using traveling wave reduction, as a result of which the original equations are transformed into systems of ordinary differential equations (ODE). The Painlevé analysis for the systems of ODEs is conducted. Conditions, under which the system is simplified to a single fourth-order ODE, are obtained when applying the test. The first integral for one of the obtained equations is found. Using the method of simplest equations exact solutions of the considered ODEs are constructed. These solutions are expressed in terms of the elliptic Weierstrass function and the exponential function.

В данной работе изучаются уравнения, предложенные в работе [1]

$$iu_t + \alpha u_{xx} + i\beta u_{xxx} + u_{xxxx} + \mu|u|^2u + \nu|u|^4u = 0,$$

$$iu_t + \alpha u_{xx} + i\beta u_{xxx} + u_{xxxx} + \mu|u|^2u + \nu|u|^4u + \chi|u|^2u_{xx} + \frac{1}{2}i\beta\chi|u|^2u_x = 0,$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\mu$ ,  $\nu$ ,  $\chi$  параметры уравнений. Предложенные уравнения используются для описания импульсов в оптических волокнах. Задача Коши для них не решается методом обратной задачи рассеяния. Поэтому уравнения

рассматриваются в переменных бегущей волны:  $u(x, t) = y(z) \exp(i(\psi(z) - \omega t))$ ,  $z = x - C_0 t$ .

В результате подстановки решения в виде  $u(x, t) = y(z) \exp(i(\psi(z) - \omega t))$ ,  $z = x - C_0 t$ , найдены системы обыкновенных дифференциальных уравнений для мнимой и действительной частей уравнений. Для полученной системы уравнений проведен тест Пенлеве. Установлено, что эти системы ОДУ не являются интегрируемыми в смысле Пенлеве.

При выполнении теста получены условия для скорости бегущей волны  $C_0$  и функции  $\psi(z)$ :  $C_0 = -\frac{1}{2}\alpha\beta - \frac{1}{8}\beta^3$ ,  $\psi_z = -\frac{1}{4}\beta$ . При этих условиях каждое уравнение упрощается до одного обыкновенного дифференциального уравнения четвертого порядка:

$$y_{zzzz} + \left(\alpha + \frac{3}{8}\beta^2\right)y_{zz} + \left(\omega + \frac{1}{16}\alpha\beta^2 + \frac{5}{256}\beta^4\right)y + \mu y^3 + \nu y^5 = 0,$$

$$y_{zzzz} + \left(\alpha + \frac{3}{8}\beta^2\right)y_{zz} + \left(\omega + \frac{1}{16}\alpha\beta^2 + \frac{5}{256}\beta^4\right)y + \left(\frac{1}{16}\chi\beta^2 + \mu\right)y^3 + \nu y^5 + \chi y^2 y_{zz} = 0,$$

Для первого ОДУ получен первый интеграл:

$$y_z y_{zzz} - \frac{1}{2} y_{zz}^2 + \frac{1}{2} \left(\alpha + \frac{3}{8}\beta^2\right) y_z^2 + \frac{1}{2} \left(\omega + \frac{1}{16}\alpha\beta^2 + \frac{5}{256}\beta^4\right) y^2 + \frac{1}{4} \mu y^4 + \frac{1}{6} \nu y^6 = C.$$

Используя метод простейших уравнений [2], построены периодические и уединенные волновые решения, выраженные через эллиптическую функцию Вейерштрасса и экспоненциальную функцию:

$$y(z) = A \sqrt{\rho\{\sqrt{a}(z - z_0); g_2; g_3\} - b},$$

$$y(z) = A \frac{4c \exp\{\sqrt{c}(z - z_0)\}}{\exp\{2\sqrt{c}(z - z_0)\} - 4ac},$$

где  $A, b, c, g_2, g_3$  - постоянные, зависящие от параметров уравнений,  $z_0$  и  $a$  - произвольные постоянные,  $\rho\{z; g_2; g_3\}$  - эллиптическая функция Вейерштрасса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), № 18-29-10039.

#### Список литературы

1. Kudryashov N.A. Construction of nonlinear equations for description of propagation pulses in optical fiber// Optik. 2019. Vol. 192, 162964.
2. Kudryashov N.A. Simplest equation method to look for exact solutions of nonlinear differential equations// Chaos Soliton Fractals. 2005. Vol. 24, P. 1217-1231.

К.В. КАН, Н.А. КУДРЯШОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ ОБОБЩЕННОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ 3-ЕЙ, 5-ОЙ И 7-ОЙ СТЕПЕНИ

Рассмотрено обобщенное нелинейное уравнение Шредингера с нелинейностью 3-ей, 5-ой и 7-ой степени. Найдено точное решение в виде уединенной волны. Построены и проанализированы графики точного решения.

K.V. KAN, N.A. KUDRYASHOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## SOLITARY WAVE SOLUTIONS OF GENERALIZED NONLINEAR SCHRÖDINGER EQUATION WITH CUBIC-QUINTIC-SEPTIC LAW NONLINEARITY

Generalized nonlinear Schrödinger equation with cubic-quintic-septic law nonlinearity is considered. Exact solution in the form of solitary wave is found. Figures of exact solution are constructed and analyzed.

Рассматривается обобщенное уравнение Шредингера в виде [1]:

$$iq_t + ia_1q_x + a_2q_{xx} + ia_3q_{xxx} + a_4q_{xxxx} + ia_5q_{xxxxx} + a_6q_{xxxxxx} + (b_1|q|^2 + b_2|q|^4 + b_3|q|^6)q = 0 \quad (1)$$

Уравнение (1) представляет собой нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных 6-го порядка, учитывающее нелинейность 3-ей, 5-ой и 7-ой степени. Данное уравнение описывает распространение импульсов в оптическом волокне

В общем случае уравнение (1) не проходит тест Пенлеве, поэтому решение рассматриваем в переменных бегущей волны:  $q(x, t) = y(z)e^{i\varphi(x,t)}$ ,

где  $z = x - vt$ ;  $\varphi(x, t) = -kx + \omega t + \theta_0$ .

В результате получаем систему из двух уравнений. Рассмотрим действительную часть:

$$a_6y_{zzzzzz} + (a_4 + 5a_5k - 15a_6k^2)y_{zzzz} + (15a_6k^4 - 10a_5k^3 - 6a_4k^2 + 3a_3k + a_2)y_{zz} - b_3y^7 - b_2y^5 - b_1y^3 + (a_6k^6 - a_5k^5 - a_4k^4 + a_3k^3 + a_2k^2 - a_1k + \omega)y = 0 \quad (2)$$

с учетом ограничений, полученных из мнимой части:

$$a_5 = 6a_6k; a_3 = 40a_6k^3 + 4a_4k; v = a_1 - 96a_6k^5 - 8a_4k^3 - 2a_2k.$$

Порядок полюса  $p=1$ , поэтому решение уравнения (2) ищем в виде:  $y(z) = b_0 + b_1R(z)$ , где  $R(z)$  - решение уравнения:  $R_z^2 = R^2(1 - \chi R^2)$ .

Таким образом, получаем переопределенную систему уравнений для параметров, из которой находим, что решение (2):

$$y(z) = \frac{4(b_2(3k^2 + 5)(D - 3b_1)\chi)^{1/2}}{b_2(3k^2 + 5)(4a^2 + \chi e^{-2\alpha(z-z_0)})} a e^{-\alpha(z-z_0)}, \quad (3)$$

тогда решение исходного уравнения (1) имеет вид:

$$q(x, t) = \frac{4(b_2(3k^2 + 5)(D - 3b_1)\chi)^{1/2} a e^{-\alpha(x-vt-z_0)}}{b_2(3k^2 + 5)(4a^2 + \chi e^{-2\alpha(x-vt-z_0)})} e^{i(-kx+wt+\theta_0)}, \quad (4)$$

где  $D = \sqrt{36k^2 a_2 b_2 + 60 a_2 b_2 + 9 b_1^2}$ .

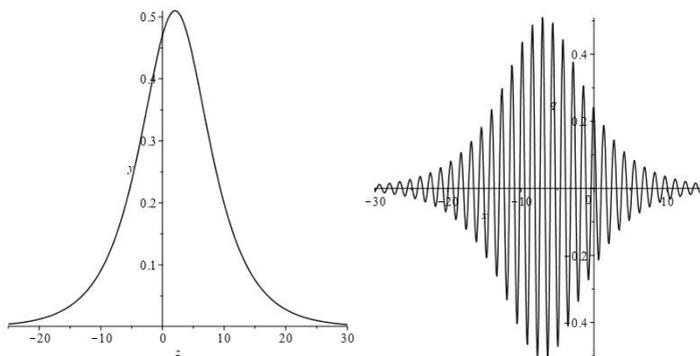


Рис.1. Графики решения (3) (слева) и вещественной части решения (4) (справа) при  $t=10, a=1.0, \alpha=0.2, \chi=1.0, k=4.5, a_2=1.0, b_2=1.0, \theta_0=1.0, z_0=5.5$ .

На рис.1 слева представлена уединенная волна, справа - аналог группового солитона, при значениях параметров, заданных с учетом введенных ограничений.

Таким образом, в работе было получено аналитическое решение нелинейного уравнения Шредингера 6-го порядка с нелинейностью 3-ей, 5-ой и 7-ой степени [1]. Также были построены графики полученных решений с учетом ограничений на некоторые параметры.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-11-00209.

*Список литературы*

1. Biswas, Anjan, et. Al. Highly dispersive optical solitons with cubic-quintic-septic law by F-expansion // *Optik*. 182. pp. 897-906.
2. Кудряшов Н.А. Методы нелинейной математической физики: Учебное пособие – М.: МИФИ, 2008. – 352с.

Н.А. КУДРЯШОВ, С.С. ЯНКОВСКИЙ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ ОДНОГО ИЗ ОБОБЩЕНИЙ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

В работе найдены решения обобщенного уравнения Шредингера в виде уединенных волн двух типов. Получены ограничения на параметры уравнения, при которых данные решения существуют.

N.A. KUDRYASHOV, S.S. YANKOVSKIY

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## SOLITARY WAVES OF ONE OF THE GENERALIZATIONS OF THE SCHRÖDINGER EQUATION

In this paper two types of solitary wave solutions of the generalized Schrödinger equation were found. Moreover we obtained constraints on the parameters of the equation when these solutions exist.

Рассматривается обобщение нелинейного уравнения Шредингера в виде:

$$iq_t + aq_{xx} + (b_1|q|^{-2n} + b_2|q|^{-n} + b_3|q|^n + b_4|q|^{2n})q = 0. \quad (1)$$

Уравнение (1) используется для описания распространения сигнала в оптической среде. Первый член уравнения (1) отвечает за изменение решения во времени; коэффициент  $a$  определяет групповую скорость волн; остальные члены нелинейные. Рассматриваемое уравнение обобщает ряд уравнений, изученных ранее. При  $b_1 = 0$  уравнение(1) становится уравнением с антикубической нелинейностью, а при  $b_1 = b_2 = b_3 = 0$  и  $n = 1$  модель в точности соответствует нелинейному уравнению Шредингера, в котором  $|q|^2$  является керровской нелинейностью. В данной работе ищутся решения уравнения (1) в виде уединенных волн.

Заметим, что рассматриваемое уравнение является неинтегрируемым, и задача Коши для него не решается. При помощи замен:  $q(x, t) = g(\xi)e^{i\varphi(x, t)}$  и  $g(\xi) = f^{\frac{1}{n}}(\xi)$  уравнение (1) сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$b_1n^2 + b_2n^2f - n^2(\omega + ak^2)f^2 + b_3n^2f^3 + b_4n^2f^4 + \\ + a(1 - n)(f')^2 + anff'' = 0. \quad (2)$$

Будем искать решение уравнения (1) в виде уединенной волны [1]:  $f(\xi) = \sum_{i=1}^P A_i Q^i(\xi)$ , где  $A_i$  - константы,  $Q(\xi)$  - функция, определяющая форму волны, а  $P$  - максимальная степень полюса уравнения.

В качестве функций, определяющих форму волны возьмем:  $Q(\xi) = \frac{1}{1+e^{\beta\xi}}$  и  $R(\xi) = \frac{e^{-\gamma\xi}}{c+be^{-2\gamma\xi}}$ . Для обеих функций были найдены ограничения на параметры уравнения и построены графики решений (рис.1).

Ограничения на параметры для волн вида  $Q(\xi)$  (при  $\beta = 1$ ) имеют вид:

$$A_1^2 = -\frac{a(1+n)}{b_4 n^2}, \quad A_0 = -\frac{A_1(2+n) + \frac{b_3(1+n)}{b_4}}{4+2n}, \quad \omega = 3b_3 A_0 + 6b_4 A_0^2 + \frac{a}{n^2} - \frac{3aA_0}{nA_1} - ak^2, \quad b_2 = 3b_3 A_0^2 + 8b_4 A_0^3 + aA_0 \frac{(2-n)}{n^2} - \frac{6aA_0^2}{nA_1},$$

$$b_1 = -b_2 A_0 + \frac{aA_0^2}{n^2} + A_0^3(2b_3 - \frac{3a}{nA_1}) + 5b_4 A_0^4.$$

Ограничения на параметры для волн вида  $R(\xi)$  (при  $\gamma = 1$ ) имеют вид:

$$B_1^2 = \frac{\chi a(1+n)}{b_4 n^2}, \quad B_0 = -\frac{b_3(1+n)}{4+2n}, \quad \omega = 3b_3 B_0 + 6b_4 B_0^2 + \frac{a}{n^2} - ak^2, \quad b_2 = 3b_3 B_0^2 + 8b_4 B_0^3 + \frac{aB_0(2-n)}{n^2}, \quad b_1 = -3b_4 B_0^4 - b_3 B_0^3 - \frac{aB_0^2(1-n)}{n^2}.$$

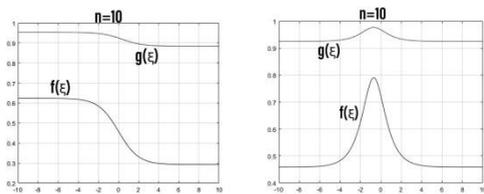


Рис.1. Графики решений (для  $Q(\xi)$  -слева, для  $R(\xi)$  - справа).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), № 18-29-10039.

*Список литературы*

1. Hamood Ur Rehman, NaeemUllah, M.A. Imran, Highly dispersive optical solitons using Kudryashov's method, *Optik*, Volume 199, 2019.

А.Д. ПОЛЯНИН, А.И. ЖУРОВ

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия*

## **ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЯХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Дан краткий обзор существующих модификаций метода функционального разделения переменных. Предлагается новый более общий подход для построения точных решений нелинейных уравнений математической физики, который основан на неявных преобразованиях в комбинации с использованием принципа расщепления. Эффективность такого подхода иллюстрируется на нелинейных уравнениях диффузионного типа, которые содержат реакционные и конвективные члены с переменными коэффициентами. Описано много новых точных решений с функциональным разделением переменных и решений типа обобщенной бегущей волны.

A.D. POLYANIN, A.I. ZHUROV

*Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, RAS, Moscow, Russia*

## **FUNCTIONAL SEPARATION OF VARIABLES IN NONLINEAR EQUATIONS OF MATHEMATICAL PHYSICS**

The existing modifications of the method of functional separation of variables are overviewed. A new more general approach is proposed to the construction of exact solutions of nonlinear equations of mathematical physics, which is based on an implicit transformation and the splitting principle. The effectiveness of the approach is illustrated by nonlinear diffusion equations that contain reaction and convective terms as well as variable coefficients. A substantial number of new exact solutions with functional separation of variables and generalized traveling wave solutions are described.

Для определенности будем рассматривать нелинейные уравнения математической физики с двумя независимыми переменными

$$F(x, t, u_x, u_t, u_{xx}, u_{xt}, u_{tt}, \dots) = 0, \quad (1)$$

где  $u = u(x, t)$  – искомая функция.

Для построения точных решений уравнения (1) на начальном этапе используется нелинейное преобразование с интегральным членом

$$\vartheta = \int \zeta(u) du, \quad (2)$$

где  $\vartheta = \vartheta(x, t)$  и  $\zeta = \zeta(u)$  – функции, которые ищутся в ходе дальнейшего анализа. После того, как эти функции будут определены, интегральное

соотношение (2) будет задавать точное решение рассматриваемого уравнения в неявном виде.

Будем считать, что уравнение (1) после преобразования (2) допускает представление в билинейной форме:

$$\sum_{n=1}^N \Phi_n \Psi_n = 0, \quad (3)$$

где

$$\Phi_n = \Phi_n(x, t, \vartheta_x, \vartheta_t, \vartheta_{xx}, \dots), \Psi_n = \Psi_n(u, \zeta, \zeta'_u, \zeta''_{uu}, \dots). \quad (4)$$

Для построения точных решений уравнения (3)–(4) используем принцип расщепления, описанный ниже.

*Принцип расщепления.* Рассматриваем линейные комбинации двух наборов элементов  $\{\Phi_j\}$  и  $\{\Psi_j\}$ , входящих в (3), которые связаны соотношениями

$$\sum_{n=1}^N \alpha_{ni} \Phi_n = 0, i = 1, \dots, l; \sum_{n=1}^N \beta_{nj} \Psi_n = 0, j = 1, \dots, m, \quad (5)$$

где  $1 \leq l \leq N - 1$  и  $1 \leq m \leq N - 1$ . Константы  $\alpha_{ni}$  и  $\beta_{nj}$  в (5) выбираются так, чтобы билинейное равенство (6) удовлетворялось тождественно (это всегда можно сделать). Важно отметить, что соотношения (5) носят чисто алгебраический характер и не связаны с конкретным видом дифференциальных форм (4).

В соотношения (5) подставляются дифференциальные формы (4), что приводит к системам дифференциальных уравнений для искомых функций  $\vartheta = \vartheta(x, t)$  и  $\zeta = \zeta(u)$ , которые входят в (2).

Описанный подход обобщает различные модификации метода обобщенного разделения переменных и позволяет строить новые точные решения нелинейных уравнений математической физики (в том числе и уравнений достаточно общего вида, которые зависят от произвольных функций). Приведены примеры построения точных решений уравнений диффузионного типа.

Т.И. САВЁЛОВА, Н.С. ТОЛМАЧЁВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ФРО И ПФ**

Получены и проанализированы две новые математические модели для описания функции распределения ориентаций (ФРО) и полюсных фигур (ПФ) на основе преобразования группы вращений трехмерного евклидова пространства в трехмерное проективное пространство ( $SO(3) \rightarrow \mathbb{R}P^3$ ). Построены графики ФРО и соответствующих им ПФ для частных случаев. Численно исследована зависимость данных функций от параметров.

T.I. SAVYOLOVA, N.S. TOLMACHYOVA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **NUMERICAL STUDY OF NEW MATHEMATICAL MODELS FOR APPROXIMATING THE ODF AND PF**

Two new mathematical models for describing the orientation distribution function (FRO) and pole shapes (PF) based on the transformation of the rotation group of a three-dimensional Euclidean space into a three-dimensional projective space ( $SO(3) \rightarrow \mathbb{R}P^3$ ) are obtained and analyzed. Graphs of FRO and corresponding PF for special cases are constructed. A numerical study of the dependence of these functions on parameters is carried out.

Одной из важных задач количественного текстурного анализа является восстановление ФРО зерен поликристаллов по ПФ. ПФ получают экспериментально рентгеновским или нейтронным методами.

Обычно ФРО и ПФ описываются в виде ряда Фурье по обобщенным шаровым функциям. Представление ФРО и ПФ в виде суперпозиции некоторых стандартных функций получило широкое распространение в связи с наличием сравнительно небольшого количества параметров для описания и более наглядным изображением функций.

Среди стандартных функций широко используются нормальные распределения на группе вращений  $SO(3)$  и ПФ, отвечающие им. Но эти функции представляются также в виде ряда Фурье. Более удобны для вычисления стандартные функции, имеющие аналитическое выражение.

В данной работе получены новые математические модели для описания ФРО и ПФ на основе преобразования  $SO(3) \rightarrow \mathbb{R}P^3$  [1], где  $SO(3)$  – группа вращений трехмерного евклидова пространства,  $\mathbb{R}P^3$  – проективное трехмерное

пространство. При определении ПФ семейство кривых  $\pm \vec{h} = g\vec{y}$ , где вращение  $g \in \text{SO}(3)$ ,  $\vec{h}$  – заданное кристаллографическое направление,  $\vec{y}$  – единичный вектор на сфере  $S^2$  переходят в прямые [2].

В [3] рассмотрен класс стандартных функция для аппроксимации ФРО и ПФ и их преобразование в  $\mathbb{R}^3$ . Эти функции получены в результате приближения к нормальному распределения на группе  $\text{SO}(3)$ .

В качестве модели для ФРО рассматривается нормальное распределение в  $\mathbb{R}^3$ , имеющее круговой характер рассеяния

$$\hat{f}_1(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^3} \exp\left(-\frac{x_1^2+x_2^2+x_3^2}{2\sigma^2}\right).$$

Используя преобразование [3]

$$\begin{cases} x_1 = \cot\frac{\beta}{2} \cos\frac{\alpha+\gamma}{2} \left(\cos\frac{\alpha-\gamma}{2}\right)^{-1}, \\ x_2 = \cot\frac{\beta}{2} \sin\frac{\alpha+\gamma}{2} \left(\cos\frac{\alpha-\gamma}{2}\right)^{-1}, \\ x_3 = -\tan\frac{\alpha-\gamma}{2}, \end{cases}$$

где  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ ,  $g = (\alpha, \beta, \gamma) \in \text{SO}(3)$  – углы Эйлера,  $\beta \in [0, \pi]$ ,  $\alpha, \gamma \in [0, 2\pi]$ , получен образ данной модели в пространстве вращений

$$f_1(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{|\cot\frac{\beta}{2}|}{4(\sqrt{2\pi}\sigma)^3 \cos^4\frac{\alpha-\gamma}{2} \sin^2\frac{\beta}{2}} \exp\left(-\frac{\cot^2\frac{\beta}{2} + \sin^2\frac{\alpha-\gamma}{2}}{2\sigma^2 \cos^2\frac{\alpha-\gamma}{2}}\right).$$

Однако ПФ такой ФРО в общем случае имеет неустранимые разрывы. Поэтому в качестве второй модели рассматривалась функция

$$\hat{f}_2(x_1, x_2, x_3) = D(\sigma)(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \exp\left(-\frac{x_1^2+x_2^2+x_3^2}{2\sigma^2}\right),$$

образ которой

$$f_2(\alpha, \beta, \gamma) = D(\sigma) \frac{(\cot^2\frac{\beta}{2} + \sin^2\frac{\alpha-\gamma}{2}) |\cot\frac{\beta}{2}|}{4 \cos^6\frac{\alpha-\gamma}{2} \sin^2\frac{\beta}{2}} \exp\left(-\frac{\cot^2\frac{\beta}{2} + \sin^2\frac{\alpha-\gamma}{2}}{2\sigma^2 \cos^2\frac{\alpha-\gamma}{2}}\right),$$

где  $D(\sigma)$  - нормирующий множитель.

*Список литературы*

1. Савёлова Т.И. О решении одной обратной задачи дифракции. ДАН СССР, 1982, т.266, №3, с.590-593.

2. Savyolova T.I. Determination of Domains of Dependence Through the Solution of an Ultrahyperbolic Differential Equation. Textures and Microstructures. 1996, v.25. p.183-195.

3. Ivanova T.M., Nikolaev D.I. New Standard Function for Quantitative Texture Analysis. Phys. stat. sol. (b) 228, 2001, №3, p.825-836.

**И.В. ПОНОМАРЕВ, Г.В. ДОЛГОЛЕВА**

*Московский государственный университет  
имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ  
ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МИШЕНЕЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ  
РЕЖИМАХ БЕЗУДАРНОГО СЖАТИЯ И СОСТАВА  
РАБОЧЕЙ ОБЛАСТИ**

В работе проведено численное исследование различных режимов безударного сжатия цилиндрических мишеней, в том числе проверено влияние нескольких априорных параметров в формулах энерговложения при безударном сжатии однокаскадных и двухкаскадных мишеней на горение рабочей области. Численно исследовано горение мишени при замене пучка падающей энергии переменной ширины на пучок с фиксированной шириной.

**I. V. PONOMAREV, G. V. DOLGOLEVA**

*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

**NUMERAL RESEARCH OF WORK OF CYLINDRICAL  
TARGETS AT THE DIFFERENT MODES OF UNSTRESSED  
COMPRESSION AND COMPOSITION OF SCRATCH AREA**

Numeral research of the different modes of unstressed compression of cylindrical targets is in-process conducted, including influence of a few a priori parameters is tested in the formulas of energy input at the unstressed compression of single- cascade and two- cascade targets on burning of scratch area. Burning of target is numeral investigational at substituting of bunch to falling energy of variable width by a bunch with the fixed width.

Мишень – это слоистая система сферическая или цилиндрическая. Основная задача управляемого термоядерного синтеза – это так сжать «рабочую» область мишени, как правило состоящую из дейтерия и трития, чтобы в ней начались термоядерные реакции и энерговыведение в результате этих реакций было больше, чем вложенная энергия, т.е. энергия, пошедшая на сжатие мишени (коэффициент усиления больше единицы). В этих случаях говорят, что мишень горит. В работах [1], [2] был получен вид энерговложения такой, чтобы рабочая область сжималась безударным образом для однокаскадной и двухкаскадной мишеней соответственно. В расчетах, приведенных в публикациях энергия вкладывалась во всю «тяжелую» область. При вложении энергии область разлетается и меняет свою первоначальную ширину. Но такое энерговложение не совсем удобно выполнить в техническом плане. Поэтому были проведены расчеты с фиксированной шириной пучка, равного первоначальной длине «тяжелой» области. В формулах для энерговложения есть ряд априорных параметров. В данной работе проводится численная проверка влияния этих параметров на горение рабочей области. Сопоставляются результаты численных

расчетов мишеней при различных математических приближениях и при различном составе «рабочей» области.

Главной характеристикой в работе мишени является энерговыделение рабочей области. За этой характеристикой мы и следим в расчетах. Дополнительные характеристики привлекаются лишь для того, чтобы понять, проиллюстрировать отличия в энерговыделении.

Итоги: в работе исследовано влияние нескольких априорных параметров в формулах энерговложения при безударном сжатии однокаскадных и двухкаскадных мишеней на горение рабочей области. Численно проверено горение мишени при замене пучка падающей энергии переменной ширины на пучок с фиксированной шириной. Сопоставлены результаты численных расчетов мишеней при различных математических приближениях и при различном составе «рабочей» области.

Из проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- энерговклад в систему нужно «затянуть»: в формулу энерговыделения необходимо ввести множитель, меньший единицы (приблизительно 0.2);

- при вложении энергии в фиксированную область нужно этот множитель еще уменьшить (приблизительно 0.1);

- в однокаскадной и двухкаскадной мишенях можно уменьшить состав трития, в однокаскадной мишени можно уменьшить до 0.3, а в двухкаскадной до 0.2 и мишени будут гореть.

#### *Список литературы*

1. Долголева Г.В., Забродин А.В. Кумуляция энергии в слоистых системах и реализация безударного сжатия // М., Физматлит, 2004.

2. Забродин А.В., Долголева Г.В. Двухкаскадная конструкция термоядерной микромишени для осуществления управляемого термоядерного синтеза под действием мощного тяжелоионного драйвера (ускорителя) // Сборник «Проблемы современной механики», изд. МГУ, с. 164-179, 2008.

Р.В. МУРАТОВ, Н.А. КУДРЯШОВ, П.Н. РЯБОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛОС АДИАБАТИЧЕСКОГО СДВИГА НА ДВУМЕРНЫХ ЭЙЛЕРОВЫХ СЕТКАХ**

В работе предлагается математическая модель движения упруго-пластичной сплошной среды с нелинейным законом пластической текучести, а также эффективная численная схема для моделирования данной задачи на двумерных эйлеровых сетках. На основе предложенного метода исследуются процессы формирования полос адиабатического сдвига (ПАС) при высокоскоростных сдвиговых деформациях.

R.V. MURATOV, N.A. KUDRYASHOV, P.N. RYABOV

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **A NUMERICAL SIMULATION OF PROCESSES OF ADIABATIC SHEAR BANDS FORMATION ON TWO- DIMENSIONAL EULERIAN MESHES**

In this work we suggest a mathematical model of motion of the elastoplastic materials with nonlinear plasticity constitutive law; we also propose an effective numerical method for simulation of such tasks on two-dimensional eulerian meshes. Based on the proposed method, we study the formation of multiple adiabatic shear bands (ASB) at high-speed shear deformations.

Самоорганизация стабильных структур в физических системах является одним из наиболее любопытных явлений в нелинейной математике. Ярким примером такого процесса является самоорганизация полос адиабатического сдвига (ПАС) [1-3]. Одной из сложностей при численном моделировании таких процессов на лагранжевых сетках является «запутывание» сетки при высоких деформациях. В данной работе используется эйлеровское описание сплошной среды. Движение упруго-пластичной сплошной среды описывается классическими законами сохранения с добавлением определяющих соотношений:

- 1)  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0;$
- 2)  $\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \times \vec{v} - \boldsymbol{\sigma}) = 0;$
- 3)  $\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} E - \boldsymbol{\sigma} \vec{v}) = 0, E = e(\rho, T) + \frac{u^2 + v^2}{2};$
- 4)  $\dot{\mathbf{s}} = 2\mu(\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p), \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \frac{3\mathbf{s}}{2\bar{\sigma}} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p(\bar{\sigma}, T), \boldsymbol{\sigma} = -p(\rho) + \mathbf{s}.$

Уравнение (4) представляет собой запись закона Гука после дифференцирования. Данная система является гиперболической, поэтому численная аппроксимация основана на методе типа Годунова: пересчет переменных происходит после суммирования одномерных потоков через грани ячеек. Численный поток через грань считается согласно методу Куранта-Изаксона-Риса:

$$\vec{F}(\vec{q}^+, \vec{q}^-) = F\left(\frac{\vec{q}^+ + \vec{q}^-}{2}\right) + \Omega_L |\Lambda| \Omega_R (\vec{q}^- - \vec{q}^+), A = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{q}} = \Omega_L \Lambda \Omega_R,$$

Здесь  $\vec{q}^-$  и  $\vec{q}^+$  вектора консервативных переменных с двух сторон от грани, а  $A = \Omega_L \Lambda \Omega_R$  – спектральное разложение Якобиана одномерной системы уравнений.

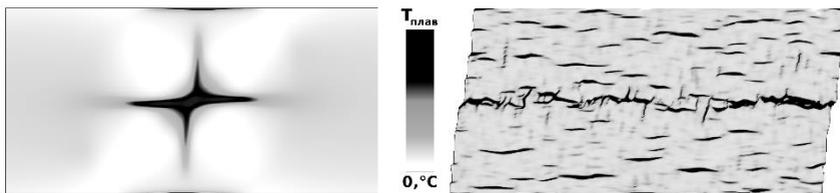


Рис. 1. Распределение температуры в образце после деформации. Слева – формирование ПАС при точечном возмущении температуры. Справа – формирование ПАС при наличии множественных геометрических дефектов в образце.

На рисунке 1 слева представлены результаты моделирования тестовой задачи [4], верхняя и нижняя часть образца толщиной 1 см сдвигаются в разные стороны с постоянной скоростью. Формирование ПАС обусловлено наличием температурного возмущения в центре образца в начальный момент времени. Справа показано формирование множественных ПАС в аналогичном образце, которые обусловлены наличием геометрических дефектов в образце в начальный момент времени.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 18-11-00209.

#### Список литературы

1. N. Kudryashov, R. Muratov, P. Ryabov// Appl. Math. Comput. 2018. Vol. 338, P. 164–174.
2. N. Kudryashov, R. Muratov, P. Ryabov// J. Phys.: Conf. Series, 1205:1 (2019)
3. N. Kudryashov, R. Muratov, P. Ryabov// AIP Conference Proceedings, 2116 (2019)
4. R.C. Batra, D.S. Liu// J. Appl. Mech. 1989. Vol. 56, P. 527–534.

Н.А. КУДРЯШОВ, А.С. САЛИН

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТЕПЛОУДЕЛЯЮЩЕМ ЭЛЕМЕНТЕ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА**

Изучена задача распределения температуры в ТВЭЛе ядерного реактора с граничными условиями третьего рода в пяти областях с разными характеристиками, составлена программа численного моделирования процесса.

N.A. KUDRYASHOV, A.S. SALIN

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **NUMERICAL MODELING OF THE TEMPERATURE DISTRIBUTION IN A FUEL ELEMENT OF A NUCLEAR REACTOR**

The problem of temperature distribution in the nuclear fuel rod with boundary conditions of the third kind in five regions with different characteristics was studied, a program for numerical simulation of the process was compiled.

Распределение температуры в ТВЭЛе – один из важных факторов, влияющих на поведение продуктов деления в топливных таблетках, процессы диффузии и парообразования. В процессе работы реактора может меняться микроструктура топливной таблетки под действием протекающих в ней процессов. Одно из значительных изменений подобного рода - формирование пористого ринг-слоя по краю топливной таблетки. В процессе работы реактора топливный элемент может плавиться, если температура топливной таблетки превосходит по величине температуру плавления диоксида урана, что в свою очередь может привести к катастрофическим последствиям [1].

Известно, что ТВЭЛ представляет собой длинный цилиндрический стержень, длина которого намного больше его диаметра, поэтому задача рассматривается в цилиндрической системе координат с симметрией вдоль оси стержня и по всем углам в плоскости, перпендикулярной ей. Уравнение, описывающее процесс теплопередачи запишется в виде:  $C(r,t)\rho(r,t)T_t = (\chi(r,t)rT_r)_r + q(r)$ , где  $C(r,t)\rho(r,t)$  - кусочно-заданные функции, постоянные в каждой области,  $q(r)$  – постоянный тепловой поток, который отличен от нуля только в области топливной таблетки,  $\chi(r,t)$  – коэффициент теплопроводности. В области с топливом  $\chi(r,t) = 1/(A+BT)$  [1], в остальных областях – константа. В начальный момент времени температура предполагается всюду постоянной. На границах элемента происходит теплообмен по закону Ньютона.

Для численного моделирования используется разностная аппроксимация уравнения на равномерной прямоугольной сетке. Используется чисто неявная схема, с итерационным уточнением коэффициентов теплопроводности на каждом временном слое. Система линейных алгебраических уравнений относительно температуры в узловых точках на новом временном слое с трёхдиагональной матрицей решается методом прогонки. Из результатов моделирования видно, что через некоторое время устанавливается стационарное распределение температуры.

Для проверки результатов численного моделирования рассматривается стационарное уравнение теплопроводности в каждой области с учётом граничных условий и условий сшивки на границах областей: равенство температур и тепловых потоков. Получена система из десяти алгебраических уравнений относительно произвольных коэффициентов, полученных при решении дифференциальных уравнений. В силу того, что оба граничных условия третьего рода, решения не строились в аналитическом виде. Поэтому для проверки работы программы использованы стационарные уравнения теплопроводности в этих областях с более простыми граничными условиями. В результате составлена программа, позволяющая моделировать процесс теплопроводности в ТВЭЛе с различными параметрами материалов, начальными и граничными условиями.

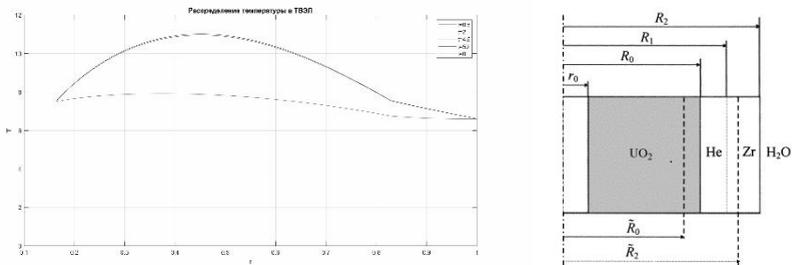


Рис. 1. Результаты численного моделирования безразмерного уравнения теплопроводности(слева) и устройство ТВЭЛ (справа).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 18-11-00209.

*Список литературы*

1. Kudryashov N.A., Khlunov A.V., Chmykhov M.A.//Com. in Nonl. Sci. Num. Simulat., 15, 1240-1252 (2009).

К.Е. ШИЛЬНИКОВ, М.Б. КОЧАНОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ НЕЛИНЕЙНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ПОДВИЖНЫХ СЕТКАХ**

Для численного решения двумерной задачи нелинейной теплопроводности используется переход в подвижную систему координат. Локальная скорость последней выбирается таким образом, чтобы исследуемый процесс в ней был близок к стационарному. Такой выбор системы координат приводит к сгущению расчетной сетки вблизи особенностей решения. Это позволяет улучшить качество получаемого численного решения при малом количестве узлов расчетной сетки. Численный алгоритм протестирован на задаче о распространении тепловой волны по нулевому фону, имеющей точное решение.

K.E. SHILNIKOV, M.B. KOCHANOV

*National Research Nuclear University MEPHI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia*

## **NUMERICAL SOLUTION OF THE TWO-DIMENSIONAL NONLINEAR HEAT CONDUCTIVITY PROBLEM ON MOVING GRIDS**

For the numerical solving of the two-dimensional nonlinear heat conduction problem a transition to a moving coordinate system is used. The local speed of the latter is chosen in such a way that the process under study in it is close to stationary. Such a choice of the coordinate system leads to a concentration of grid nodes near the solution features. This allows to improve the quality of the obtained numerical solution with a small number of computational grid nodes. The numerical algorithm is tested on the heat wave propagation problem, which has an exact solution.

Рассматривается начально-краевая задача для нелинейного уравнения теплопроводности в двумерном случае с краевыми условиями типа Дирихле:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial W^\alpha}{\partial x^\alpha} = 0, \quad W^\alpha = -k(u)\delta^{\alpha\beta} \frac{\partial u}{\partial x^\beta}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (1)$$

$$(x^1, x^2) \in I^2 = (0, 1) \times (0, 1), \quad t > 0, \quad u|_{r=0} = 0, \quad u|_{\partial I^2} = \varphi(x^1, x^2, t). \quad (2)$$

Известно, что подобные задачи допускают негладкие решения [1], в частности решения типа бегущей волны [2], распространяющейся по нулевому фронту в случае степенной зависимости коэффициента теплопроводности от температуры. В таких случаях стандартные методы требуют использования малого шага для пространственной сетки для получения удовлетворительных результатов, что приводит к высоким вычислительным затратам.

В работе предложен подход к решению подобных задач, основанный на переходе в подвижную систему координат  $x^\alpha = x^\alpha(y^\beta, \tau)$ ,  $t = \tau$ , обеспечивающий сгущение расчетной сетки вблизи особенностей решения [3].

Введём обозначения:

$$\Psi_\beta^\alpha = \frac{\partial x^\alpha}{\partial y^\beta}, \quad -Q^\alpha = \frac{\partial x^\alpha}{\partial \tau}, \quad \Psi = \det(\Psi_\beta^\alpha) \neq 0, \quad \Omega_\beta^\alpha = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\beta}.$$

В новой системе координат уравнение (1) может быть записано в дивергентной форме:

$$\frac{\partial(\Psi u)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\Omega_\alpha^\beta F^\alpha \Psi)}{\partial y^\beta} = 0, \quad F^\alpha = W^\alpha + Q^\alpha u, \quad W^\alpha = -k(u) \delta^{\alpha\nu} \Omega_\nu^\gamma \frac{\partial u}{\partial y^\gamma}. \quad (3)$$

При этом необходимо выполнение условий совместности:

$$\frac{\partial \Psi_\beta^\alpha}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q^\alpha}{\partial y^\beta}, \quad \frac{\partial \Psi_\beta^\alpha}{\partial y^\gamma} = \frac{\partial \Psi_\gamma^\alpha}{\partial y^\beta}. \quad (4)$$

Оптимальная скорость системы координат даётся выражением:

$$Q^\mu = \Psi_\gamma^\mu \Omega_\alpha^\beta \frac{\partial}{\partial y^\beta} (k(u) \delta^{\alpha\nu} \Omega_\nu^\gamma). \quad (5)$$

Уравнения (3)– решаются в области  $(y^1, y^2) \in I^2$ ,  $\tau > 0$ . Начальные условия для  $\Psi_\beta^\alpha$  отвечают недеформированной сетке. Скорость границы определяется из одномерной редукции уравнения, угловые узлы неподвижны. Поставленная задача решалась с помощью явной схемы, основанной на конечно-разностной аппроксимации уравнений (3)–.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-71-00108).

#### Список литературы

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 2004. С. 800.
2. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: Интеллект. 2008. С. 504.
3. Мажукин А.В., Мажукин В.И. Динамическая адаптация в параболических уравнениях // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47, № 11. С. 1913–1936.

Г.В.ДОЛГОЛЕВА

*Московский Государственный Университет, мех-мат*

## **ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ФОКЕРА-ПЛАНКА**

В последнее время все чаще рассматриваются разностные схемы, согласованные с дифференциальными уравнениями, которые они аппроксимируют. В газодинамике такие схемы называли полностью консервативными. В данной работе рассматриваются согласованные схемы для уравнений Фокера-Планка. Этими уравнениями описываются многие процессы в физике и механике. В данной работе она используется для описания изменения спектральной плотности излучения и энергии вещества в результате спектрального комптоновского рассеяния, что зачастую необходимо для задач управляемого термоядерного синтеза.

G.V. DOLGOLEVA

*Moscow State University, meh-mat*

## **NUMERICAL SOLUTION OF THE FOKKER-PLANK EQUATION SYSTEM**

Recently, difference schemes compatible with the differential equations that they approximate are increasingly being considered. In gas dynamics, such schemes were called completely conservative. In this paper, we consider consistent schemes for the Fokker-Plank equations. These equations describe many processes in physics and mechanics. In this paper, it is used to describe changes in the spectral density of radiation and energy of a substance as a result of spectral Compton scattering, which is often necessary for problems of controlled thermonuclear fusion.

В последнее время все чаще рассматриваются разностные схемы, согласованные с дифференциальными уравнениями, которые они аппроксимируют. В газодинамике такие схемы называли полностью консервативными. В данной работе рассматриваются согласованные схемы для уравнения Фокера-Планка. Это уравнение описывает многие процессы в физике и механике. В данной работе оно используется для описания изменения спектральной плотности излучения и энергии вещества в результате спектрального комптоновского рассеяния. Это уравнение получено в приближении Компанейца [1]. Входящий в уравнения для спектрального излучения поток – это сумма производной и линейная добавка плотности излучения.

Система уравнений дополняется граничными условиями вида: поток на границах спектрального интервала равен нулю.

Структура этого уравнения с граничными условиями диктует три свойства, которым должно удовлетворять любое точное решение.

Во-первых, при положительных коэффициентах в уравнениях решение должно быть положительно. Далее из вида уравнений вытекает закон сохранения определенной величины, назовем его число частиц. И последнее: наличие равновесного решения.

Все эти три свойства дифференциального уравнения желательно сохранить и в разностной схеме. К тому же при записи разностной схемы встают вопросы точности и устойчивости.

При выборе разностной схемы была поставлена еще одна задача: записать схему так, чтобы она не накладывала ограничения на шаг по спектру.

При записи разностной схемы для системы уравнений обеспечить выполнение числа частиц не сложно, сложнее получить неотрицательность решения и наличие равновесного решения.

Поскольку решение определено в полуцелых узлах, а поток в целых, то есть некая вольность, связанная с определением решения в целых узлах. Самое простое положить его равным полусумме значений в двух соседних узлах. Но в этом случае неотрицательное решение получаем при ограничении на сетку по спектру, чего хотелось бы избежать с самого начала.

Было предложено ввести параметр  $\delta$  при записи потока в целом узле через полуцелые и выбирать его так, чтобы по схеме получить равновесные и неотрицательные решения.

Схема записана, показана устойчивость схемы.

Система разностных уравнений записана относительно решения в трех соседних узлах по спектру и ее естественно решать прогонкой. Но корректность прогонки (диагональное преобладание в матрице перехода) диктует ограничение на временной шаг.

Ограничения можно избежать, если применить метод сопряженной прогонки (прогонки по столбцам).

Численная проверка рассмотренного метода счета спектрального комптоновского рассеяния была проведена сравнением с расчетами по методу Монте-Карло.

#### *Список литературы*

1. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики. М.: Наука, т.1, 1971,695.

К.В. БРУШЛИНСКИЙ, Е.В. СТЕПИН

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия  
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ РАВНОВЕСИЯ ПЛАЗМЫ, ОКРУЖАЮЩЕЙ ПРОВОДНИК С ТОКОМ**

Магнитные ловушки-галатеи с токнесущими проводниками, погружёнными в плазму, но изолированными от неё – предмет теоретических, экспериментальных и численных исследований. В докладе представлена математическая модель равновесной плазменной конфигурации вокруг прямого проводника и исследование её устойчивости.

K.V. BRUSHLINSKII, E.V. STEPIN

*Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, Moscow, Russia  
National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia*

## **MATHEMATICAL MODEL AND STABILITY INVESTIGATION OF PLASMA EQUILIBRIUM AROUND A CURRENT-CARRYING CONDUCTOR**

Magnetic galatea-traps with current-carrying conductors immersed into plasma without contact with it are a permanent topic of theoretical, experimental and numerical investigations. The lecture presents a mathematical model of equilibrium plasma configurations around a straight conductor and its stability analysis.

Постоянным объектом исследований в области управляемого термоядерного синтеза являются ловушки, предназначенные для удержания плазмы магнитным полем. Представляет интерес перспективный класс ловушек, в которых магнитное поле создается проводниками с током, погружёнными в плазменный объём, но не соприкасающимися с горячей плазмой. Внимание к ним привлечено А.И. Морозовым, назвавшим их «галатеями» [1]. Важную роль в разработке и исследованиях галатей играют математическое моделирование и расчёты с помощью современных вычислительных комплексов [2,3]. Используются плазмостатические модели строго равновесных конфигураций удерживаемой плазмы и плазмодинамические – касающиеся формирования таких конфигураций.

В докладе проблема устойчивости рассмотрена на примере кольцевой конфигурации, окружающей прямой проводник с током (рис. 1), которую следует считать простейшим элементом окрестности проводника в любой галатее. Одномерная математическая модель равновесной конфигурации описывается тремя функциями – давлением  $p(r)$ , напряженностью магнитного поля  $H(r)$  и плотностью электрического тока  $j(r)$ . Они удовлетворяют двум

уравнением плазмостатики, поэтому многообразие конфигураций зависит от произвольного выбора одной из них. Удобно задавать давление  $p(r)$ , обращающееся в нуль на поверхности проводника ( $r = 1$ ) и имеющее максимум  $p_0$  на конечном расстоянии от него ( $r = r_1$ ) (рис. 2). Поле и ток находятся из уравнений плазмостатики [3]. Такие конфигурации могут существовать при ограничении на максимальное давление  $p_0$ .

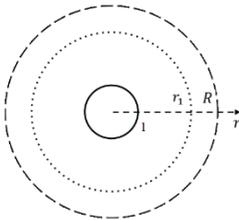


Рис. 1. Проводник и его окрестность

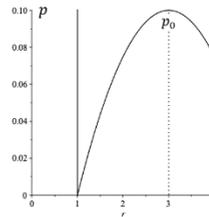


Рис. 2. Распределение давления плазмы

МГД-устойчивость равновесия плазмы исследуется в линейном приближении. Линеаризованные на состоянии покоя МГД-уравнения для малых трёхмерных возмущений сводятся при наличии симметрии к системам уравнений для гармоник меньшей размерности, в нашем случае одномерных, и вопрос об устойчивости решается либо методом «стрельбы», либо с помощью «энергетического принципа» [4]. В результате анализа и расчётов серии вариантов рассматриваемых конфигураций установлено, что они устойчивы, если внешняя граница  $r = R$  близка к максимуму давления ( $r = r_1$ ), а с возрастанием  $R$  требование устойчивости усиливает указанное выше ограничение на максимум давления  $p_0$ . Тенденция к неустойчивости наиболее сильна для гармоник возмущений, пропорциональных  $\exp(im\varphi - ikz)$ , гофрированных по осевой координате  $z$  и не зависящих от азимута  $\varphi$  ( $m = 0$ ). С возрастанием частоты  $k$  эта тенденции усиливается, а в Фурье-гармониках с большими значениями  $m$  – ослабляется.

Более подробно модель конфигураций в окрестности проводника обсуждается в [5].

#### Список литературы

1. Морозов А.И. // Физ. плазмы. 1992. Т. 18, Вып. 3, С. 305-316.
2. Морозов А.И., Савельев В.В. // УФН. 1998. Т. 168, № 11, С. 1153-1194.
3. Брушлинский К.В. Математические и вычислительные задачи магнитной газодинамики. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 200 с.
4. Кадомцев Б.Б. // Вопросы теории плазмы – М.: Госатомиздат, 1963. Вып. 2, С. 92-131.
5. Брушлинский К.В., Степин Е.В. // Дифф. ур. 2020 (в печати).

<sup>1</sup>М.А.КОРОТКОВА, <sup>2</sup>А.М.КАМИОНСКАЯ И <sup>1,2</sup>Е.В. КОРОТКОВ

<sup>1</sup>Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия

## МАТЕМАТИЧЕСКИЙ МЕТОД КЛАССИФИКАЦИИ ПРОМОТОРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ИЗ ГЕНОМА *A.THALIANA*

Математический метод для создания классов промоторных последовательностей был разработан. Метод был применен для расчета классов промоторных последовательностей из генома *A.thaliana*. Всего было получено 16 статистически достоверных классов промоторных последовательностей с размерами классов от 8000 до 100 промоторов. Полученные классы позволяют идентифицировать потенциальные промоторные последовательности в различных геномах с числом ложных позитивов не более  $10^3$  на геном.

<sup>1</sup>M.A. Korotkova, <sup>2</sup>A.M.Kamionskya and <sup>1,2</sup>E.V. Korotkov

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup>Institute of Bioengineering, Research Center of Biotechnology of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia.

### **A mathematical method for the classification of promoter sequences from the *A.thaliana* genome**

A mathematical method for creating classes of promoter sequences has been developed. The method was used to calculate the classes of promoter sequences from the *A.thaliana* genome. A total of 16 statistically significant classes of promoter sequences were obtained with class sizes ranging from 8,000 to 100 promoters. The classes obtained allow us to identify potential promoter sequences in various genomes with the number of false positives not exceeding  $10^3$  per genome.

Ранее мы разработали математический метод для создания множественного выравнивания для сильно различающихся нуклеотидных последовательностей (MAVDS). Под сильно различающимися последовательностями будем понимать последовательности, накопившие более 2.5 случайных замен ( $x$ ) на один нуклеотид относительно друг друга. MAVDS позволяет строить статистически значимые выравнивания для  $x$  в интервале от 2.5 до 4.4. Мы показали, что ранее разработанные алгоритмы могут строить статистически значимые множественные выравнивания до  $x < 2.5$ . Этот метод был применен для построения множественного выравнивания для промоторных последовательностей из генома *A.thaliana*. Ранее статистически значимое множественное выравнивание множественное выравнивание не было построено для промоторных последовательностей, так как для них  $x = 3,7$ . Промотор представляет собой последовательность ДНК, которая узнается РНК полимеразой как стартовая площадка для начала транскрипции. Промоторные

последовательности были получены с сайта: <https://epd.epfl.ch//index.php> [1]. Мы использовали 22694 промоторных последовательностей из генома *A.Thaliana*. Обозначим множество этих последовательностей как  $S$ . Каждый из промоторов имел длину равную 600 нуклеотидам. Промотор включал в свой состав последовательности от -499 до +100 относительно первого оснований первого кодона (+1 позиция гена). Для создания классов промоторных последовательностей мы вначале методом MAVDS строили множественное выравнивание для всех 22694 последовательностей. В результате мы получали множественное выравнивание для которого мы рассчитывали позиционно-весовую матрицу  $W(600,16)$ . Однако, не все промоторные последовательности из множества  $S$  могут иметь статистически значимое выравнивание с матрицей  $W(600,16)$ . Поэтому мы выравнивали каждую промоторную последовательность из множества  $S$  относительно матрицы  $W(600,16)$ . Затем в первый класс мы выбирали такие промоторные последовательности из множества  $S$ , которые имеют неслучайное выравнивание относительно матрицы  $W(600,16)$ . Такие промоторные последовательности можно отнести к одному классу. Этот класс характеризуется матрицей  $W(600,16)$ . Для создания дальнейших классов мы удаляли из множества  $S$  все последовательности, которые имеют неслучайное выравнивание относительно матрицы  $W(600,16)$  и получали множество  $S_1$ . Далее для  $S_1$  итеративно повторялась процедура создания класса, как это было сделано выше для множества  $S$ . Если в ходе итеративной процедуры объем множества  $S$  становился менее 100 промоторов то процедура классификации останавливалась. Всего удалось создать 16 статистически значимых классов промоторных последовательностей с объемами классов в интервале от 8000 до 100.

1. Dreos R. et al. The eukaryotic promoter database in its 30th year: focus on non-vertebrate organisms // *Nucleic Acids Res.* Namia, 2017. Vol. 45, № D1. P. D51–D55.

**Секция**  
**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО**  
**ТЕЛА, ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ**  
**И НАНОСИСТЕМ**

Руководитель секции — д.ф.-м.н., профессор  
Менушенков Алексей Павлович

Секретарь секции — к.ф.-м.н., Кузнецов Алексей  
Владимирович

Тел./факс.: 8 (495) 788-56-99, доб. 8020

E-mail: AVKuznetsov@mephi.ru

**Б.М. АБДУРАХМАНОВ, М.М. АДИЛОВ, М.Ш. КУРБАНОВ**

*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук  
Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан*

## **ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ НА ОСНОВЕ ГРАНУЛИРОВАННОГО КРЕМНИЯ**

Применение гранулированного кремния (ГК) позволяет создать подобие системы «электронный кристалл-фононное стекло» и снизить стоимость материалов. На ГК из кремниевого шлама и скраба удается получить значения коэффициента Зеебека  $\sim 500$  мкВ/град, а величину теплопроводности снизить в 7-9 раз по сравнению с монокристаллическим кремнием. Высокую проводимость ГК предлагается достигать за счет организации резонансного туннелирования носителей тока через наноразмерную пленку окисла, покрывающего частицы ГК.

**B.M. ABDURAKHMANOV, M.M. ADILOV, M.SH. KURBANOV**

*Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the  
Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan*

## **HEAT ENERGY CONVERTERS BASED ON GRANULATED SILICON**

The use of granular silicon (GS) makes it possible to create a system like “electronic crystal-phonon glass” and reduce the cost of materials. With GS from silicon sludge and scrub it is possible to obtain the Zeebeck coefficient values of  $\sim 500$   $\mu\text{V} / \text{deg}$  and reduce the thermal conductivity by 7–9 times as compared with single-crystal silicon. The high conductivity of GS can be achieved by resonant tunneling of current carriers through a nanoscale oxide film covering the GS particles.

Одно из возможных решений задачи повышения термоэлектрической добротности ( $Z$ ) преобразователей тепловой энергии (ПТЭ) базируется на создании системы «электронный кристалл-фононное стекло» (ЭК-ФС), что реализуется применением дорогостоящих нанотехнологий. Другая проблема в этой области техники заключается в нахождении более дешевых материалов для ПТЭ взамен дорогостоящих существующих вообще далека от своего решения. Искомое техническое решение возможно путем вовлечения в сферу термоэлектрических материалов различных модификаций не монокристаллического кремния, монокристаллы, которого в силу малого значения коэффициента Зеебека ( $\alpha$ ) и, наоборот, высоких значений теплопроводности ( $\gamma$ ), в этом качестве не пригодны.

Нами показано, что при легировании кремния глубокими примесями до высоких концентраций, или при использовании поликристаллических образцов удастся повысить в 2 раза  $\alpha$  и снизить  $\gamma$  за счет проявления тепловольтаического эффекта, заключающегося в генерации носителей заряда с поглощением субзонных фотонов с участием глубоких энергетических уровней. Оптимальным

вариантом для проявления тепловольтаического эффекта является изготовление рабочего тела ПТЭ из ГК, то есть из кремниевого порошка с заданной зернистостью и уровнем легирования исходного сырья, в котором частицы порошка приведены в соприкосновение друг с другом без разрушения наноразмерной пленки  $\text{SiO}_2$ , неизбежно возникающей на поверхности при их контакте с кислородом воздуха. Не трудно видеть, что подобный материал представляет собой двухкомпонентную систему, подобную искомой ЭК-ФС, для которой выражение для термоэлектрической добротности имеет вид:

$Z_{\text{эф}} = \alpha_{\text{Si}}^2 \sigma_{\text{SiO}_2} / \gamma_{\text{SiO}_2}$ , где  $\alpha_{\text{Si}}$  - коэффициент Зеебека самой кремниевой частицы, который можно регулировать размером частиц, дефектностью их поверхности, а также легированием глубокими примесями, в том числе, просто выбором кремниевого сырья, в котором имеются подобные примеси, например, технического кремния;  $\gamma_{\text{SiO}_2}$  – теплопроводность двуокиси кремния, величина которой, как известно, намного меньше таковой у кремния;  $\sigma_{\text{SiO}_2}$  – проводимость окисла, то есть параметр, который для увеличения  $Z$  нужно максимально увеличить.

На ПТЭ, выполненных из ГК с размером частиц  $\sim 30$  мкм, при  $\sim 500\text{K}$  величина  $\alpha$  составила  $\sim 500$  мкВ/град, а теплопроводность снижена в 7-9 раз по сравнению с монокристаллическим кремнием. Обсуждаются конструкции ПТЭ, рабочее тело у которых выполнено из изотипного материала или, наоборот, имеет области из ГК с различным типом проводимости. Показано, что повышения проводимости возможно достичь или созданием на поверхности  $\text{SiO}_2$  локальных нанотолщинных островков из проводящего материала, например, из  $\text{SnO}_2$ , которые могут служить своеобразным «плацдармом» для туннелирующих носителей заряда или организацией резонансного туннелирования носителей заряда, для чего в  $\text{SiO}_2$  необходимо создать энергетические уровни у дна зоны проводимости окисла, отвечающие определенным условиям. Обсуждаются технологические приемы реализации этой задачи.

Г. АБДУРАХМОНОВ<sup>1</sup>, Г. ВАХИДОВА<sup>1</sup>,  
Д.А. ТАШМУХАМЕДОВА<sup>2</sup>, М.Б. ЮСУПЖОНОВА<sup>2</sup>,  
Б.Е. УМИРЗАКОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ташкентский Государственный Технический Университет, Узбекистан*

<sup>2</sup>*Национальный Университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан*

## **ПРОБЛЕМЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВТОРИЧНЫХ ЭНЕРГОРЕСУРСОВ**

Оценен объем вторичных энергоресурсов (бросового тепла) в Узбекистане по источникам их образования (около 200 млрд кВт\*ч в год), рассмотрены экономические и экологические следствия их использования. Показаны возможные пути решения научно-технических проблем, возникающих при использовании вторичных энергоресурсов, в частности, для получения электроэнергии.

G. ABDURAKHMONOV<sup>1</sup>, G. VAKHIDOVA<sup>1</sup>,  
D.A. TASHMUKHAMEDOVA<sup>2</sup>, M.B. YUSUPJONOVA<sup>2</sup>,  
B.E. UMIRZAKOV

<sup>1</sup>*Tashkent State Technical University, Uzbekistan*

<sup>2</sup>*National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan*

## **PROBLEMS OF SECONDARY ENERGY RESOURCES USAGE**

The volume of secondary energy resources (waste heat) in Uzbekistan is estimated by the sources of their formation (about 200 billion kWh per year), the economic and environmental consequences of their use are considered. Possible ways of solving scientific and technical problems arising from the use of secondary energy resources, in particular, to generate electricity, are shown.

Потребление электрической энергии – наиболее универсальной и удобной формы используемой энергии – на душу населения является одним из важных показателей степени развития современного общества. Для непрерывного экономического развития любого государства требуется рост ее производства.

Однако современное производство электроэнергии сопровождается одновременным выбросом в окружающую среду до 50-70 % энергии первичных энергоносителей (природный газ, нефть, уголь) в виде бросового тепла. В производственных процессах также до 80 % энергии (в том числе и электрической) превращается в бросовое тепло. Все это бросовое тепло образует вторичные энергоресурсы (ВЭР), которые не только съедают большую часть энергии первичных энергоносителей, но и наносят вред окружающей среде (тепловое загрязнение). Поэтому преобразование энергии ВЭР в электрическую позволяет одновременно экономить первичные энергоносители (природный газ,

нефть, уголь) и улучшить экологическую обстановку, т.е. является «зеленой» энергетикой в полном смысле.

Установки ОЦР [1], отличающиеся от обычных тепловых электростанций с паровой турбиной и электромеханическим генератором тем, что вместо воды применяется легкокипящая органическая жидкость (аналог фреона), дорогие и сложные в эксплуатации из-за необходимости герметизации всего парового тракта, работающего при высоких давлениях (20-30 МПа). При использовании котлов-утилизаторов или абсорбционных чиллеров (холодильников) потребуется строительство дорогих теплотрасс или хладопроводов от источника ВЭР до потребителя, которые обычно находятся на значительном удалении друг от друга.

Поэтому во всем мире идет интенсивный поиск других физических принципов преобразования тепловой энергии в электрическую, среди них наиболее перспективным считается термоэлектрический способ. В термоэлектрических устройствах нет подвижных частей, они бесшумны, долговечны, но пока они изготавливаются из редких, ядовитых веществ со сложной технологией, что делает эти устройства весьма дорогими для широкого применения. Кроме того, крайне неравномерное распределение месторождений сырья для этих устройств по странам создает геополитические риски. Вследствие этого, одним из важнейших направлений современного материаловедения является поиск новых термоэлектрических материалов с повышенной эффективностью, производимых из распространенного, безвредного и дешевого сырья по возможно простой технологии. В качестве такого термоэлектрического материала авторы настоящей работы рассматривают наноструктурированные силикаты, легированные оксидами переходных металлов. Сочетание наноструктурирования с легированием обеспечивает в этих материалах высокую электропроводность  $\sigma$  и низкую теплопроводность  $\kappa$  при высоких значениях коэффициента термоЭДС  $S$  (до 1700 мкВ/К), что говорит о возможности достижения высокой безразмерной термоэлектрической добротности  $ZT = S^2 T \sigma / \kappa$  и высокого КПД. Стоимость термоэлектрических генераторов на основе легированных силикатов оценивается на уровне 2000 долларов США/кВт.

#### *Список литературы*

1. Caillat T., Fleunal J.-P. and Borshchevsky A. (1997) Development of high efficiency thermoelectric generators using advanced thermoelectric materials. DOI: 10.1063/1.54794.

Ю.В. АГРАФОНОВ, И.С. ПЕТРУШИН  
*Иркутский государственный университет, Россия*

## **ОБОБЩЕНИЕ СИНГЛЕТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ СФЕР В КОНТАКТЕ С ТВЕРДОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ**

Проведен обзор теоретических методов исследования молекулярной структуры жидкостей, граничащих с твердой поверхностью. Установлено, что существующие на данный момент нелинейные интегральные уравнения для частичных функций распределения не имеют аналитического решения для пространственно-неоднородных жидкостей. Предложено линейное интегральное уравнение, допускающее аналитическое решение для системы твердых сфер вблизи твердой поверхности.

Yu. V. AGRAFONOV, I.S. PETRUSHIN

*Irkutsk State University, Russia*

## **GENERALIZATION OF SINGLET APPROXIMATION FOR HARD SPHERES MOLECULAR SYSTEM NEAR THE SOLID SURFACE**

A review of theoretical methods for studying the molecular structure of liquids bordering a solid surface is carried out. It is established that the currently existing nonlinear integral equations for partial distribution functions do not have an analytical solution for spatially inhomogeneous liquids. A linear integral equation is proposed that allows an analytical solution for a system of solid spheres near a solid surface.

Анализ локальной молекулярной структуры жидкостей является сложной задачей, поскольку в них отсутствует дальний порядок, характерный для кристаллов. Тем не менее, было разработано много теоретических методов, позволяющих рассчитывать локальную микроструктуру жидкостей и расплавов. Среди них наиболее широко используются метод численного эксперимента и метод нелинейных интегральных уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения, которые, как правило, приходится решать сложными численными методами. Подробный анализ численных методов решения приведен в работах [1-3]. Аналитическое решение для этих функций распределения возможно лишь для частных случаев, например, для одномерной и двумерной задачи [4].

Для молекулярной системы, граничащей с твердой поверхностью, численное решение трехмерной задачи требует огромных вычислительных ресурсов. Поэтому стараются решать только уравнение для одночастичной функции распределения, аппроксимировав двухчастичную функцию распределения ее значением вдали от поверхности, применяя так называемое синглетное приближение. В результате получается нелинейное интегральное уравнение для одночастичной функции распределения, зависящей только от одной переменной

– расстояния от частицы до поверхности. Данное уравнение также может быть решено численно, однако уже не требует больших вычислительных ресурсов.

Обзор синглетных приближений приведен в ставшей уже классической работе [1]. Отметим, что на данный момент нет интегральных уравнений, допускающих аналитическое решение для практически важной задачи о структуре жидкости вблизи ограничивающей твердой поверхности в трехмерном случае. Поэтому формулировка интегрального уравнения, допускающего аналитическое решение для трехмерного пространства, остается актуальной задачей.

Нами предложено обобщение синглетного уравнения для молекулярной системы вблизи твердой поверхности в приближении Перкуса–Иефика. Уравнение имеет вид линейного интегрального уравнения Фредгольма второго рода. Для системы твердых сфер уравнение допускает аналитическое решение. Возможно обобщение данного уравнения на молекулярные системы с реалистичными потенциалами межчастичного взаимодействия, что важно для практических задач материаловедения.

#### *Список литературы*

1. D.A. Tikhonov, O.E. Kiselyov, G.A. Martynov, G.N. Sarkisov. Singlet integral equation in the statistical theory of surface phenomena in liquids//Jorn.of Mol.Liquids. 1999. V.82. p. 3- 17.
2. Yu. Agrafonov, I. Petrushin. Two-particle distribution function of a non-ideal molecular system near a hard surface / // Physics Prosedia.- 2015.- V. 71.- P. 364-368
3. Yu Agrafonov, I Petrushin. Close order in the molecular system near hard surface //Journal of physics: Conference Series 747 (2016) 012024
4. Yan He, Stuart A. Rice, and Xinliang Xu. Analytic solution of the Ornstein- Zernike relation for inhomogeneous liquids// J. Chem. Phys. 2016. V. 145.234508

Е.С. АЗАРОВА<sup>1</sup>, Г.М. МАКСИМОВА<sup>2</sup>, В.А. БУРДОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия*

## **1D НЕОДНОРОДНЫЕ НАНОКОЛЬЦА ИЗ ЩЕЛЕВЫХ ДИРАКОВСКИХ МАТЕРИАЛОВ: ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА И ПЕРСИСТЕНТНЫЕ ТОКИ**

В рамках одномерной (1D) модели рассчитаны электронные спектры и персистентные токи (ПТ) в нанокольцах Ааронова-Бомы (АБ), изготовленных из таких дираковских материалов, как щелевой графен, силицен или германен. Рассмотрено влияние неоднородностей на эти характеристики. Изучено влияние заполнения зоны проводимости на эффект АБ в 1D кольце.

E.S. AZAROVA<sup>1</sup>, G.M. MAKSIMOVA<sup>2</sup>, V.A. BURDOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Russia*

## **1D INHOMOGENEOUS NANORINGS IN GAPPED DIRAC MATERIALS: ELECTRONIC PROPERTIES AND PERSISTENT CURRENTS**

Electronic spectra and persistent currents of nanoscale Aharonov-Bohm (AB) rings made of Dirac materials like gapped graphene, silicene or germanene are calculated within the framework of the one-dimension (1D) model. The effect of inhomogeneities on these characteristics is considered. The influence of conduction band filling on the AB effect in the 1D ring is studied.

С момента открытия эффекта АБ и первого его наблюдения кольцевые устройства продолжают привлекать к себе внимание исследователей. В течение последних десяти лет появилось множество работ, посвященных кольцевым графеновым наноструктурам [см., например, 1 – 4]. В ряде теоретических работ исследовались электронные спектры в различных графеновых кольцах [см., например, 2]. Впервые осцилляции проводимости АБ на графеновом кольце в открытой геометрии (с контактами) были зарегистрированы Руссо с соавторами [3].

В данной работе представлен расчет электронных состояний и ПТ в дираковском кольце АБ радиуса  $R$  в рамках 1D модели с эффективным гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\eta v_F}{R} \left[ \sigma_\theta \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) + i \frac{\sigma_r}{2} + \sigma_z \Delta + IV(\theta) \right], \quad (1)$$

где  $\sigma_r = \sigma_x \cos\theta - \eta\sigma_y \sin\theta$ ,  $\sigma_\theta = \sigma_x \sin\theta + \eta\sigma_y \cos\theta$ ,  $v_F$  – скорость Ферми,  $\Phi_0$  – квант магнитного потока,  $\sigma_{x, y, z}$  – матрицы Паули,  $\eta = \pm 1$  — индекс долины,  $V(\theta)$  – потенциал взаимодействия электрона с дефектом:  $V(\theta) = 0$  при  $0 < \theta < \theta_f$  и  $V(\theta) = V_0$  при  $\theta_f < \theta < 2\pi$ ;  $\Delta$  – щелевой параметр.

В результате расчета электронного спектра показано, что наличие дефекта в графеновом кольце приводит к антикроссингу уровней и к появлению уровней, почти не зависящих от магнитного потока  $\Phi$ , что вызывает уменьшение ПТ и сглаживание их зависимости  $J(\Phi)$ . Однако во внешнем поперечном электрическом поле ПТ неоднородного кольца из силицена (германена) не является гладкой функцией магнитного потока: возникают две группы уровней, характеризующихся различными спин-долинными индексами, пересечение которых вызывает скачки ПТ. Обнаружено, что ПТ электронов проводимости в дираковском кольце при высокой степени заселенности зоны не чувствительны к наличию дефекта. Исследован энергетический спектр кольца с произвольным числом локальных периодически распределенных дефектов (сверхрешетка на кольце). Для щелевого графена показано формирование энергетических подзон, количество уровней в которых равно числу дефектов на кольце. Рассмотрено влияние энергетического беспорядка на зонную структуру кольца: неупорядоченное изменение высоты барьеров означает потерю вращательной симметрии, что в свою очередь приводит к антикроссингу уровней и сглаживанию зависимости  $J(\Phi)$ , т.е. к уменьшению ПТ в таком кольце так же, как в случае одиночного дефекта [5].

Работа выполнена в рамках государственного задания и частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект РФФИ № 18-32-00740-мол\_a).

#### *Список литературы*

1. P. Recher et al. // Physical Review B, Vol. 76, 235404 (2007).
2. D.R. da Costa et al. // Physical Review B, Vol. 89, 075418 (2014).
3. S. Russo et al. // Physical Review B, Vol. 77, 085413 (2008).
4. D. Smirnov, H. Schmidt, and R.J. Haug // Applied Physics Letters, Vol. 100, 203114 (2012).
5. E.S. Azarova, G.M. Maksimova, V.A. Burdov // Physica E, Vol. 106, 140 (2019).

Л.Э. АЛИМОВ, А.В. АНУФРИЕВ, А.В. ГУРСКАЯ, В.И. ЧЕПУРНОВ

*Самарский университет, Россия*

*Самарский государственный технический университет, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КАРБИДОКРЕМНИЕВОЙ ФАЗЫ 3C-SiC В РАЗЛИЧНЫХ РЕАЛИЗАЦИЯХ DFT**

Проведены расчеты зонных энергетических диаграмм и глубоких уровней проводились в программных приложениях Siesta в орбитальном базисе и VASP в базисе плоских волн. Проведено исследование чувствительности к фазе радиоизотопа углерода-14 и моделирование глубоких уровней.

L.E. ALIMOV, A.V. ANUFRIEV,  
A.V. GURSKAYA, V.I. CHEPURNOV

*Samara University, Russia*

*Samara POLYTECH, Russia*

### **MODELING THE BAND STRUCTURE OF THE 3C-SiC SILICON CARBIDE PHASE IN VARIOUS DFT IMPLEMENTATIONS**

Calculations of band energy diagrams and deep levels were performed in Siesta software applications in the orbital basis and VASP in the plane wave basis. Sensitivity to the phase of the carbon-14 radioisotope was studied and deep levels were simulated.

Интерес к исследованию фазы карбида кремния 3C-SiC в данной работе мотивирован ее применением в бетавольтаике [1]. Практическая реализация бетавольтаических преобразователей сталкивается с проблемой недостаточной эффективности преобразования энергии в полупроводниках из-за наличия самопоглощения в слое радиоизотопа [2], а также из-за недостаточно оптимально подобранных геометрических параметров самого преобразователя, включая глубину залегания р-п-перехода. Новые экспериментальные данные [3] также могут говорить и об изменении зонной структуры полупроводника при диффузии в него радиоизотопа, что требует дополнительных исследований.

В связи с развитием численных методов и наращиванием мощностей компьютеров стали популярны для исследования структуры материалов подходы на основе теории функционала плотности (DFT) [4,5]. Он позволяет исследовать и зонную структуру. Анализ, связанный с построением зонной диаграммы структуры с р-п переходом и гетеропереходом, строится на основе данных о работах выхода и сродстве с электроном. Данная информация обычно известна для структур нелегированных радиоизотопом, но отсутствуют данные о работе выхода для легированных структур изовалентной примесью

(радиоизотопом C-14), что затрудняет их построение, исследование и применение.

Проведено моделирование зонной структуры фазы карбида кремния 3C-SiC на основе DFT в двух программных приложениях Siesta [6] в орбитальном базисе и VASP [7] в базисе плоских волн. Были выбраны рекомендованные псевдопотенциалы и обменно-корреляционный функционал Пердью-Бурке-Эрзенхова (PBE) [8] в обобщенном градиентном приближении. Проведено исследование чувствительности к фазе радиоизотопа углерода-14, изменению ширины запрещенной зоны и параметра решетки и моделирование глубоких уровней.

Модель закрепления уровня Ферми вблизи наиболее глубокого уровня [9,10] при воздействии высокоэнергетической радиации получена с помощью решения уравнения Шредингера с использованием стационарной теории возмущений. Было использовано уравнение Липпмана-Швингера, включающее в себя функцию Грина. В результате был подтвержден вывод о том, что наиболее глубокий уровень находится в точке перегиба функции Грина, и он является универсальным энергетическим уровнем, единым во всех родственных полупроводниках, который выступает как фундаментальный параметр кристалла, характеризующий как свойства объемного дефектного материала, так и интерфейсные характеристики полупроводника.

#### *Список литературы*

1. Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48. № 6, С. 901-909
2. Нагорнов Ю.С. // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. N3(27). С.136-145
3. Чепурнов В.И., Пузырная Г.В., Гурская А.В. и др. // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Т. 22. № 3. С. 55-67
4. P. Hohenberg and W. Kohn. // Phys. Rev., 136:864, 1964
5. W. Kohn and L. Sham. Phys. // Rev., 140:1133, 1965
6. Soler, José M. et.al. // Journal of Physics: Condensed Matter. 14 (11): 2745–2779. (2002)
7. O.Gunnarsson, E.Koch, and M. Martin // Phys. Rev. B 54, 11169 (1996)
8. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997)
9. В.Н. Брудный, С.Н. Гриняев, Н.Г. Колин, // Физика и техника полупроводников 2003. Т. 37. № 5. С. 557-564.
10. В.Н. Брудный // Вестник Томского государственного университета 2005. № 285. С. 95-102.

Д.В. АМАСЕВ<sup>1</sup>, К.А. САВИН<sup>2</sup>, П.А. ФОРШ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия*

## **ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ РЗНТ:Si**

Исследованы электрические и фотоэлектрические свойства композитных материалов на основе полимера и наночастиц кремния, полученных при помощи лазерной абляции пористого кремния.

D.V. AMASEV<sup>1</sup>, K.A. SAVIN<sup>2</sup>, P.A. FORSH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Lomonosov Moscow State University, Russia*

## **ELECTRICAL AND PHOTOELECTRICAL PROPERTIES OF PZNT: Si COMPOSITES**

The electrical and photoelectric properties of composite materials based on polymer with embedded silicon nanoparticles obtained by laser ablation of porous silicon are studied.

В последнее время полимерные материалы на основе поли(3-гексилтиофена) (РЗНТ) вызывают большее внимание исследователей в области оптоэлектроники и фотовольтаики. Интерес обусловлен перспективами использования органических полимерных полупроводников в качестве материалов для солнечных элементов, транзисторов, фотодетекторов [1]. Использование полимеров с наночастицами кремния является одним из активно развивающихся в солнечной энергетике направлений. Однако, фотоэлектрические процессы, происходящие в данных композитах и определяющие их свойства, требуют подробного изучения.

Одним из способов создания наночастиц кремния является фемтосекундная импульсная лазерная абляция кристаллического кремния. При этом получают наночастицы кремния с размерами 30-100 нм.

В данной работе исследовались электрические и фотоэлектрические свойства тонких пленок композитов на основе полимера РЗНТ, содержащего наночастицы кремния с различным типом проводимости и с различной относительной концентрацией (РЗНТ:Si). Массовая доля нанокристаллов Si в композите изменялась от 0 до 30 %.

Измерения ВАХ композитов РЗНТ:Si показали, что введение наночастиц Si приводит к увеличению величин проводимости и фотопроводимости. Причем,

при увеличении относительной концентрации наночастиц Si в композите величины проводимости и фотопроводимости изменяются немонотонно. Исследования спектральных зависимостей фотопроводимости композитов в диапазоне энергий квантов света 1.2 – 2.8 эВ показали, что введение наночастиц Si в РЗНТ приводит к увеличению величины фотопроводимости во всем указанном спектральном диапазоне. Увеличение фотопроводимости наблюдалось при введении в РЗНТ как наночастиц кремния p, так и наночастиц кремния n-типа. Однако, величина фотопроводимости и форма её спектральной зависимости зависели от типа проводимости введенных наночастиц Si. При этом введение наночастиц Si p – типа позволяет увеличить фотопроводимость композитов в большей степени. Спектры фотолюминесценции полимера и композитов содержат 3 пика на 630-640 нм, 690-710 нм и 820-830 нм, отвечающие соответственно за межзонную излучательную рекомбинацию, первый и второй вибронные пики [2]. По мере увеличения доли наночастиц (НЧ) замечено затухание фундаментальной фотолюминесценции при практически неизменной интенсивности люминесценции возбужденных состояний.

В работе предложены и рассмотрены возможные механизмы приводящие к полученным эффектам влияния наночастиц кремния на электрические и фотозлектрические свойства композитов РЗНТ:Si.

Таким образом, было показано, что введение наночастиц кремния позволяет увеличить проводимость и фотопроводимость полимеров РЗНТ. Использование наночастиц Si p – типа в композитах РЗНТ:Si приводит к более заметному эффекту.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект мол\_а № 18-32-00417).

#### *Список литературы*

1. H. Hoppe et al., Adv. Polym. Sci., 214, Polymer solar cells. Photoresponsive Polym. II 1–86 (2007).
2. O. Dimitriev, D. Blank, C. Ganser, C. Teichert. J. Phys. Chem. C 2018, 122, 30, 17096-17109.

О.Б. АНАНИН<sup>1</sup>, Р.Ш. РАМАКОТИ<sup>1</sup>, А.П. МЕЛЕХОВ<sup>1</sup>, В.Г. СРЕДИН<sup>2</sup>,  
В.В. КРАВЧЕНКО<sup>1</sup>, И.А. ГЕРАСИМОВ<sup>1</sup>, Г.С. БОГДАНОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Военная академия РВСН им. Петра Великого, Балашиха, Россия

## **ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОЛУПРОВОДНИК CdHgTe**

Получены экспериментальные данные по эмиссии фотоэлектронов с поверхности образца CdHgTe под действием интенсивного мягкого рентгеновского излучения, которые позволили рассчитать амплитудные значения электрического поля на поверхности полупроводника, действие которого приводит к смещению ионов ртути из узлов кристаллической решётки и образованию точечных дефектов.

O.B. ANANIN<sup>1</sup>, R.S. RAMAKOTI<sup>1</sup>, A.P. MELEKHOV<sup>1</sup>,  
V.G. SREDIN<sup>2</sup>, V.V. KRAVCHENKO<sup>1</sup>, I.A. GERASIMOV<sup>1</sup>,  
G.S. BOGDANOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia

<sup>2</sup>Military Academy of the Strategic Missile Forces named after Peter the Great, Balashikha,  
Russia

## **STUDY OF THE FORMATION PROCESS OF POINT DEFECTS UNDER THE INFLUENCE OF INTENSE SOFT X-RAY RADIATION ON THE CDHGTE SEMICONDUCTOR**

Experimental data of photoelectrons emission from the surface of a CdHgTe sample under the influence of intense soft x-ray radiation were obtained, which made it possible to calculate the amplitude values of the electric field on the surface of a semiconductor, the action of which leads to the displacement of mercury ions from the nodes of the crystal lattice and the formation of point defects.

Узкозонные полупроводниковые твёрдые растворы теллуридов кадмия и ртути (Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te) являются одним из лидеров среди материалов, используемых для создания современной оптоэлектронной аппаратуры ИК-диапазона спектра. В работе приведены результаты, которые позволяют описать механизм образования точечных дефектов в полупроводнике CdHgTe под действием интенсивного мягкого рентгеновского излучения (МРИ). В работе [1] показано, что тепловое воздействие не приводит к изменению состояния кристаллической решетки. Поэтому основную роль здесь играют нетепловые механизмы дефектообразования.

В рамках эксперимента полупроводниковый образец облучался интенсивным МРИ от лазерной плазмы с использованием рентгеновского концентратора. Спектр МРИ находится в диапазоне от 60 до 300 Эв с мощностью  $5 \cdot 10^4$  Вт, длительностью импульса 20 нс и энергией в импульсе МРИ порядка 1 мДж.

Полупроводник был помещен в середину сферы, в которой предусмотрено отверстие для попадания МРИ на образец. В процессе взаимодействия с излучением образуются фото-, Оже- и вторичные электроны, которые покидают поверхность полупроводника и достигают поверхности сферы. Для увеличения сигнала и воздействия на все несвязанные с атомом электроны между образцом и сферой была приложена разность потенциалов, максимальное значение которой составляло минус 300 вольт. Сигналы со сферы и рентгеновского *pin*-диода приведены на рисунке 1.

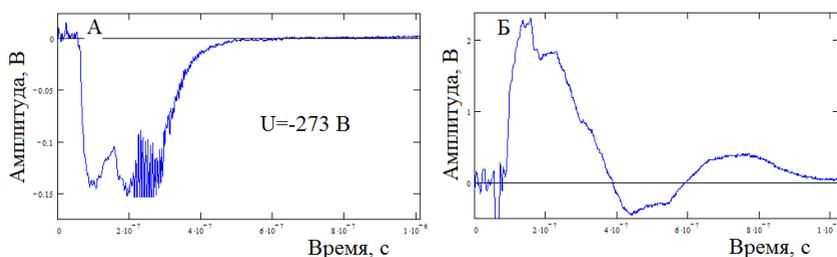


Рисунок 1. А- сигнал тока электронов со сферы на нагрузке 50 Ом. Б- сигнал с рентгеновского *pin*-диода.

Таким образом, с использованием данной схемы удалось получить информацию о количестве электронов, которые покинули поверхность полупроводника  $N_e \approx 4.7 \cdot 10^9$ . На образце образуется некомпенсированный заряд  $Q \approx 7.5 \cdot 10^{-10}$  Кл на всей глубине поглощения МРИ (порядка 1 мкм), который, как предполагается, является причиной создания внутреннего приповерхностного электрического поля, амплитудное значение которого достигает  $E \sim 10^8$  В/м. Как показано в [2] наличие такого поля может быть причиной выхода ионов ртути из узлов кристаллической решетки образования точечных дефектов.

#### Список литературы

1. Р. Ш. Рамакоти, О. Б. Ананьин, и др.// Ядерная физика и инжиниринг, 2019
2. Средин В.Г., Войцеховский А.В., и др.// Прикладная физика, 2018 №4

Н.С. АНИСИМОВ, В.И. ЧЕПУРНОВ, Г.В. ПУЗЫРНАЯ, М.В.  
ДОЛГОПОЛОВ

*Самарский университет, Россия*

*Самарский государственный технический университет, Россия*

## **БАРЬЕР ШОТТКИ В ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ БЕТА-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ**

В докладе представлены результаты экспериментальных исследований образцов бета-преобразователей на углероде-14 в карбидокремниевой фазе, полученной методом эндотаксии и рассмотрено решение вопроса разделения носителей посредством барьера Шоттки при металлизации образцов.

N.S. ANISIMOV, V.I. CHEPURNOV, G.V. PUZYRNAYA ,  
M.V. DOLGOPOLOV

*Samara University, Russia*

*Samara POLYTECH, Russia*

## **THE SCHOTTKY BARRIER IN THE TECHNOLOGY OF OBTAINING SEMICONDUCTOR BETA CONVERTERS**

The report presents the results of experimental studies of beta-converters samples on the carbon-14 for the silicon carbide phase obtained by the endotaxy method and considers the issue of metallization of samples.

Данная работа является продолжением исследований, проводимых в Самарском университете с карбидом кремния и его способностью преобразования бета-излучения в электрическую энергию [1]. Результаты исследования световых и темновых характеристик лабораторных образцов [2] дают основание полагать, что введение радиоизотопа в слой n-SiC на уровне диффузионного легирования существенно изменило характеристический параметр – работу выхода электрона из полупроводника, что сформировало дальнейший исследовательский интерес. Был рассмотрен спектр металлизационных композиций. Металлизация к пленке SiC n-типа проводимости выполнялась напылением Ni с подслоем Ti и отжигом в вакууме. Получены барьерные характеристики контакта металл-полупроводник. Возникает Шоттки-переход, способный разделять неравновесные электронно-дырочные пары, генерируемые бета-электронами в области планарной структуры, легированной углеродом-14. Омический контакт для планарной структуры n-SiC к области лишенной легирующей примеси углерода-14 в процессе роста (благодаря предварительной защите толстым слоем SiO<sub>2</sub>) выполняет функцию второго электрода. Металлизация наносится одновременно на оба электрода. ВАХ чипа структуры размером 5x10 мм снималась на характериографе, измерения тока короткого замыкания и напряжение холостого

хода выполнены вольтметром В7-21А с приставкой, исключающей электрические и оптические наводки, и составили соответственно от 7 до 12нА и от 0,1 до 0,3мВ.

*Список литературы*

1. Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И.// Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48. № 6, С. 901-909
2. Чепурнов В.И., Пузырная Г.В., Гурская А.В. и др.// Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Т. 22. № 3. С. 55-67

И.В. АНИЩЕНКО, С.В. ПОКРОВСКИЙ, И.А. РУДНЕВ  
*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ВТСП ЛЕНТАХ 2 ПОКОЛЕНИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА**

В данной работе представлены результаты комплексного мультифизического моделирования неравновесных состояний, возникающих в высокотемпературных сверхпроводящих композитах при импульсном токовом воздействии. При моделировании неравновесных состояний, спровоцированных токовым воздействием, управление переключением осуществляется с помощью самостоятельного или дополнительного импульса тока плотностью  $J > J_c$ . Проведена экспериментальная верификация FEM модели для коротких (<3мс) и длинных (>3мс) импульсов тока.

I.V. ANISHCHENKO, S.V. POKROVSKII, I.A. RUDNEV

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **NUMERIC MODELING OF THE SWITCHING PROCESSES IN THE 2 GENERATION HTS TAPES UNDER THE ELECTRIC CURRENT PULSES IMPACT**

This paper presents of complex multiphysical modeling results of nonequilibrium states arising in high-temperature superconducting composites under the pulsed current impact. When simulating nonequilibrium states provoked by the current pulses, the switching is controlled by an substantive or additional current pulse with a density  $J > J_c$ . An experimental verification of the FEM model for short (<3ms) and long (> 3ms) current pulses was carried out.

В современных системах коммутации высокотемпературные композиты приходят на смену традиционным низкотемпературным сверхпроводникам и зачастую являются неотъемлемой частью таких устройств, как сверхпроводящие накопители энергии [1], токоограничители [2], МРТ томографы [3]. Переключение ВТСП ключа в таких системах происходит посредством генерации неравновесных состояний, как правило, при импульсном токовом, магнитном или локальном тепловом воздействии [4]. В случае импульсных токовых воздействий переход из сверхпроводящего в резистивное состояние обусловлен превышением критического тока сверхпроводника. Моделирование неравновесных состояний, возникающих в сверхпроводниках при одиночном или комбинированном токовых воздействиях, необходимо для проектирования, оптимизации и конструирования переключающих устройств сверхпроводящей электроники, систем накопления и передачи электроэнергии и улучшения их энергоэффективности. Особенно важной задачей является численное исследование процессов переключения ВТСП композитов в различных

температурных режимах работы и подбор параметров охлаждения системы для достижения минимального времени коммутации без деградации токонесущей способности ВТСП элементов. Особенно это относится к системам, в которых в качестве хладагента используется жидкий азот. Численный анализ таких систем достаточно затруднителен ввиду гистерезисного характера кривой кипения жидкого азота и возможностью многократной смены режимов кипения LN<sub>2</sub> при неравновесных условиях работы ВТСП элементов. В данной работе приведены результаты FEM моделирования ВТСП ленты, подверженной воздействию коротких (< 3 мс) и длинных (>3 мс) импульсов тока. Выполнено моделирование и анализ динамики электрофизических процессов, происходящих в слоистой структуре ВТСП композитов с учетом влияния локальных термических процессов в структуре композита, в частности, при наличии неоднородностей критического тока сверхпроводящего слоя. Времена переключения ВТСП композита из сверхпроводящего в нормальное состояние исследованы для различных амплитуд токовых импульсов и различных времен нарастания фронта воздействия. Проведена экспериментальная верификация численной модели. Моделирование выполнено для двух режимов охлаждения: охлаждение жидким азотом с учетом гистерезисного характера кривой кипения и безжидкостное охлаждение в широком интервале температур. Показано, что при эффективном охлаждении локальные всплески тепловыделения могут быть успешно отведены жидким хладагентом или быть скомпенсированы криогенным оборудованием, в таком случае, нет принципиальных ограничений по использованию токов, существенно превышающих критический ток ВТСП. Проведен расчет зависимости скорости переключения ВТСП в нормальное состояние от длительности импульсных нагрузок, которая зависит от соотношения скорости распространения тепла, выделившегося на сверхпроводнике и приводящего к снижению критического тока, и длительности импульса.

#### *Список литературы*

1. Sawa K. et al. // Electrical Contacts, 2001. Proceedings of the Forty-Seventh IEEE Holm Conference on. IEEE, 2001. P. 128–133
2. Dong Keun Park et al. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2009. Vol. 19, № 3. P. 1896–1899.
3. Kim S.B. et al. // Phys. Procedia. 2015. Vol. 65. P. 149–152
4. 4. M. Zhang et al, 2017 Supercond. Sci. Technol. 30, 024005 (pp.7)

Н.М. АРИСТОВА, С.В. ОНУФРИЕВ, А.И. САВВАТИМСКИЙ

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЖИДКОГО КАРБИДА ЦИРКОНИЯ ZrC<sub>x</sub> ДО 5000 К**

Представлен краткий обзор работ, посвященных уточнению фазовой диаграммы системы Zr-C: параметры линий солидуса и ликвидуса, температура и состав конгруэнтно плавящегося карбида, температура эвтектики ZrC-C. Рассмотрены экспериментальные данные по теплоемкости жидкого ZrC<sub>x</sub>, полученные методом импульсного электрического нагрева (представленные ранее только в графическом виде). Выполнена численная обработка кривых  $C_p(T)$  и приведено уравнение, аппроксимирующее температурную зависимость теплоемкости жидкого карбида циркония ZrC<sub>x</sub> ( $C/Zr = 0.95$ ) от точки плавления до 5000 К. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093.

N.M. ARISTOVA, S.V.ONUFRIEV , A.I.SAVVATIMSKIY,

*Joint Institute for High Temperature RAS, Moscow, Russian Federation*

## **SPECIFIC HEAT FOR LIQUID CARBIDE (ZrC<sub>x</sub>) UP TO 5000 К**

The article presents a brief review of studies devoted to the refinement of the phase diagram of the ZrC system: parameters of solidus and liquidus lines, temperature and composition of congruently melting carbide, temperature of eutectic ZrC-C. Experimental data on the specific heat for liquid ZrC<sub>x</sub> were obtained by pulsed electric heating (presented previously only in graphical form). Numerical processing of the  $C_p(T)$  curves is performed and an equation is presented, approximating the temperature dependence of the specific heat for liquid zirconium carbide ZrC<sub>x</sub> ( $C/Zr = 0.95$ ) from the melting point to 5000 K. The experimental study was carried out under the financial support of RFBR grant No. 19-08-00093.

Термодинамические свойства жидкой фазы карбида циркония (температурные зависимости энтальпии и теплоемкости, энтальпии плавления) были изучены сравнительно недавно. До появления экспериментальных данных для жидкого ZrC<sub>x</sub> ([1]) в справочниках и обзорных статьях жидкая фаза либо не рассматривалась, либо приводились оцененные характеристики, полученные расчетным методом или при помощи экстраполяции. Общее число приведенных публикаций – 48. Температурные зависимости удельной введенной (джоулевой) энергии и теплоемкости были представлены лишь в графическом виде, что затрудняло использование этих данных для расчета термодинамических функций карбида циркония в кристаллическом и жидком состояниях. Это обстоятельство побудило авторов настоящей статьи представить полученные ранее результаты измерений энтальпии и теплоемкости в численных значениях. Рассмотрены общие вопросы построения фазовой диаграммы для ZrC; экспериментальные результаты, полученные при импульсном нагреве током.

Детально рассмотрена теплоемкость в жидком состоянии, начиная от точки плавления (3820 К), и вплоть до 5000 К. Получены также табличные данные. Это позволит в последующей работе рассчитать термодинамические функции (теплоемкость, энтропию, энтальпию, приведенную энергию Гиббса) ZrC в кристаллическом и жидком состоянии. Уточненные данные будут внесены в информационно-справочную базу данных ИВТАНТЕРМО. Аппроксимация кривой теплоемкости жидкого  $ZrC_{0.95}$  в температурном интервале 3820-5000 К представлена уравнением:

$$C_p(T) = - 4293.6 + 1.0269 T - 66.273 \cdot 10^{-4} T^2 + 21.757 \cdot 10^9 T^{-2} \text{ (Дж моль}^{-1} \text{ К}^{-1}\text{)}$$

1)

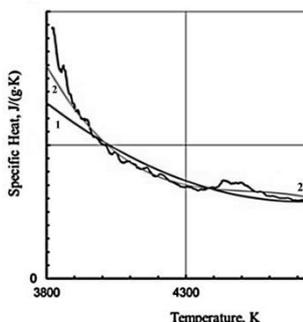


Рис. 1. Зависимость  $C_p$  для жидкой фазы (от  $T = 3820$  К до 5000 К). Неровная кривая представляет эксперимент. 1 – дифференцирование полинома  $E(T)$  степени 3; 2 – то же, но для полинома  $E(T)$  степени 4.

В диапазоне 4800-5000 К два вида дифференцирования дают отклонение в противоположных направлениях. Поэтому для данного диапазона приняты экспериментальные значения – константы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093.

#### Список литературы

1. Savvatimskiy A. I. et al. Measurement of ZrC properties up to 5000 K by fast electrical pulse heating method // J. Mater. Res. 2017. V. 32. № 7. P. 1287-1294.

П.И. БЕЗОТОСНЫЙ, К.А. ДМИТРИЕВА, С.Ю. ГАВРИЛКИН, А.Н.  
ЛЫКОВ, А.Ю. ЦВЕТКОВ

*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

## **ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ ПЛЕНОК**

В работе предложен подход к моделированию сверхпроводящего состояния неоднородных сверхпроводящих пленок в рамках теории Гинзбурга-Ландау. Из условия минимизации функционала ГЛ свободной энергии выведена система уравнений, описывающая сверхпроводящее состояние неоднородной пластины. С использованием полученных уравнений проведены расчеты и сравнение зависимостей критического тока и произведения величины критического тока и внешнего магнитного поля (аналога объемной силы пиннинга) от внешнего магнитного поля для двух случаев: неоднородного и однородного распределений сверхпроводящих свойств по толщине пленки.

P. I. BEZOTOSNYI, K. A. DMITRIEVA, S. YU. GAVRILKIN,  
A. N. LYKOV, A. YU. TSVETKOV

*P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow, Russia*

## **AN APPROACH TO SIMULATION OF THE SUPERCONDUCTING STATE OF INHOMOGENEOUS FILMS**

An approach to modeling the superconducting properties of inhomogeneous superconducting films in the framework of the Ginzburg-Landau theory is proposed. From the condition of minimizing the GL functional of free energy, a system of equations is derived that describes the superconducting state of an inhomogeneous plate. Using the obtained equations, we calculated and compared the dependences of the critical current and the product of the critical current and the external magnetic field (analogue of the pinning force) with the external magnetic field for two cases: inhomogeneous and uniform distributions of superconducting properties over the film thickness.

Тонкие пленки характеризуются неоднородностью их свойств, в том числе сверхпроводящих, по толщине. Для достаточно тонкой пленки параметры ее решетки, а также другие свойства могут ощутимо отличаться от свойств материала, из которого она сделана. В этой связи, модели, описывающие реальные сверхпроводящие пленки, должны учитывать неоднородность свойств по ее толщине.

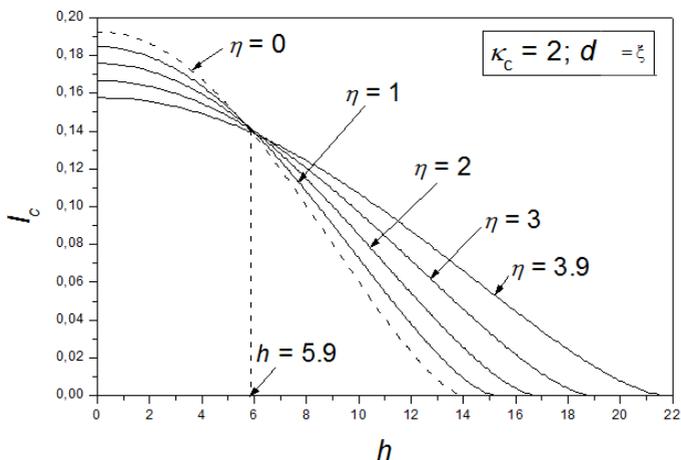


Рис. 1. Зависимости критического тока  $I_c$  от внешнего магнитного поля  $h$  для пластины толщиной  $d = \xi$ . Расчеты проведены для случаев однородного ( $\eta = 0$ ) и неоднородного ( $\eta = 1, 2, 3$  и  $3.9$ ) распределения сверхпроводящих свойств по толщине пластины.  $\xi$  и  $\kappa_c$  - длина когерентности и параметр Гинзбурга-Ландау соответственно в центре пленки,  $\eta$  - параметр характеризующий степень неоднородности пленки.

В работе предложен метод расчета критического состояния неоднородных сверхпроводящих пленок в рамках теории Гинзбурга-Ландау. Из условия минимизации функционала ГЛ свободной энергии выведена система уравнений, описывающая сверхпроводящее состояние неоднородной пластины. Проведен численный расчет зависимостей критического тока пластины от внешнего магнитного поля. Пример представлен на рис. 1. Показано, что при увеличении степени неоднородности пленки критический ток в нулевом внешнем магнитном поле заметно уменьшается, а критическое магнитное поле пленки (при нулевом транспортном токе) увеличивается. При определенной величине внешнего магнитного поля значение критического тока пластины практически не зависит от степени ее неоднородности.

Д. Б. БУЙТКЕНОВ, Б. К. РАХАДИЛОВ, Д. ЕРБОЛАТУЛЫ

*Восточно-Казахстанский государственный университет имени С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан*

## **ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДЕТОНАЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ ДО И ПОСЛЕ ОТЖИГА**

В работе проведено исследование влияния термического отжига на свойства многофазных покрытий  $Ti_3SiC_2/TiC$ , полученных методом детонационного напыления. После отжига наблюдается образование  $TiO_2$  и увеличение содержания фазы  $Ti_3SiC_2$ . Более высокие значения микротвердости были получены после отжига  $800\text{ }^\circ\text{C}$ , которые можно объяснить увеличением содержания  $Ti_3SiC_2$ . По результатам трибологических испытаний установлено, что образование  $TiO_2$  приповерхностных слоев повышает износостойкость покрытий. После отжига наблюдается повышение адгезионной прочности покрытий.

D. B. BUITKENOV, B.K. RAKHADILOV, D. YERBOLATULY

*S. Amanzholov East Kazakhstan State University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan*

## **TRIBOTECHNICAL PROPERTIES OF DETONATION COATINGS BEFORE AND AFTER ANNEALING**

In this work, the effect of thermal annealing on the properties of  $Ti_3SiC_2/TiC$  multiphase coatings obtained by detonation spraying was studied. After annealing,  $TiO_2$  formation and an increase in the  $Ti_3SiC_2$  phase content were observed. Higher microhardness values were obtained after annealing at  $800\text{ }^\circ\text{C}$ , which can be explained by an increase in the  $Ti_3SiC_2$  content. According to the results of tribological tests, it was found that the formation of oxide in the surface layers of coatings increases the wear resistance. After annealing, an increase in the adhesion strength of the coatings is observed.

На сегодняшний день существует достаточное количество способов нанесения покрытий и восстановления изношенных поверхностей, среди которых можно выделить: газопламенное напыление, лазерное напыление, холодное напыление, плазменное напыление, нанесение покрытий вакуумным ионно-плазменным способом и детонационное напыление. В результате анализа перечисленных способов, детонационный метод нанесения покрытий показался наиболее перспективным и простым. К его достоинству следует отнести высокую прочность сцепления ( $100\text{...}180\text{ МПа}$ ) [1,2], высокую плотность, а также возможность нанесения любых материалов на любые поверхности деталей.

В работе [3] нами были получены покрытия  $Ti_3SiC_2$  методом детонационного напыления и исследованы структурно-фазовые изменения. Интерес к  $Ti_3SiC_2$  объясняется уникальным сочетанием в нем свойств металла и керамики. Интерес вызывает и трибологические характеристики системы  $Ti_3SiC_2$ , которые

благодаря слоистому строению могут обеспечивать пониженный коэффициент трения.

Детонационные покрытия были получены на компьютеризированном комплексе детонационного напыления нового поколения ССДС2000 [4]. Термический отжиг проводили в лабораторной трубчатой электропечи СУОЛ-0.4.4/12-М2-У4.2 типа в вакууме  $10^{-2}$  Па. Микротвердость образцов измеряли на приборе ПМТ-3М. Трибологические характеристики покрытий исследовались на трибометре Anton Paar TRB<sup>3</sup> методом шар-диск. Для исследования адгезионных характеристик покрытий, методом “царапания”, использовалась установка скретч-тестер Revetest® RST<sup>3</sup>. Термический отжиг проводили в интервале температур 700-900 °С в течение 1 ч. После отжига наблюдается образование TiO<sub>2</sub> и увеличение содержания фазы Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>. Более высокие значения микротвердости были получены после отжига 800 °С, которые можно объяснить увеличением содержания Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>. Результаты трибологических испытаний покрытий показали, что в случае многофазной покрытий Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>/TiC до отжига коэффициент трения составляет 0,65-0,70. После термического воздействия при температурах 800 °С коэффициент трения составляет 0,30-0,35. Повышение износостойкости связано с образованием TiO<sub>2</sub> приповерхностных слоев и наличием большей доли упрочняющей карбидной фазы TiC [5].

Одним из главных факторов, определяющих качество нанесенного покрытия, влияющее на продолжительность работы, является адгезия. В покрытие до отжига разрушение начинается при силе нагружения индентора 4.07 Н. После термического воздействия при температурах 800 °С разрушение покрытий начинается лишь после достижения нагрузки 13.22 Н, что свидетельствует о высокой адгезионной прочности покрытия.

#### *Список литературы*

1. Ulianitsky V. Yu., Batraev I. S., Shtertser A. A. and others // Adv. powder Tech. 2018. Vol. 29, P. 1859-1864
2. Batraev I. S., Ulianitsky V. Yu. and Dudina D. V. Mat. Today: Proceed. 2017. Vol. 29, 11346–11350
3. Buitkenov D. B., Rakhadilov B. K., Tuyakbaev B. T. and others // Key Engin. Mat. 2019. Vol. 821, P. 301-06
4. Ulianitsky V. Yu., Dudina D. V., Batraev I. S. and others // Mat. Letters. 2016. Vol. 181 P. 127-131
5. Buitkenov Dastan, Rakhadilov Bauyrzhan, Erbolatuly Dosym and Sagdoldina Zhuldyz // Key Engin. Mat. 2020. Vol. 839, P. 137-143

А. С. БУРКАЦКИЙ, Ю. Б. КУДАСОВ, Д. А. МАСЛОВ,  
О. М. СУРДИН, В. Н. ПАВЛОВ

*Саровский физико-технический институт – филиал НИЯУ «МИФИ», Саров, Россия*

## **МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ**

Разработана методика самосогласованного расчета распределения частиц на фронте ударной волны, а также, распределений их динамических характеристик. На примере одномерного кристалла с парным потенциалом взаимодействия между частицами в форме Леннард-Джонса показана сходимость алгоритма самосогласования, исследована зависимость параметров фронта ударной волны от его скорости.

Данная методика применима для произвольных кристаллических структур металлов, в том числе и для кристаллического алюминия.

Предложена методика выбора параметров расчета электронной структуры с применением псевдопотенциалов в программном пакете Quantum ESPRESSO, выполнен расчет кривых сжатия гранецентрированной кубической (ГЦК) фазы алюминия. По кривым сжатия определены параметры потенциала в форме Леннард-Джонса для алюминия в рамках приближения ближайших соседей. Для ГЦК решетки алюминия выполнен расчет распределения частиц на фронте ударной волны, распространяющейся в направлении [100]. Построены графики распределения скорости, плотности, равнодействующих сил на фронте, зависимость количества частиц во фронте ударной волны от скорости ударной волны.

A. S. BURKATSKIY, YU. B. KUDASOV, D. A. MASLOV,  
O. M. SURDIN, V. N. PAVLOV

*Sarov State Physics and Technical Institute (Branch of the Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **MICROSCOPIC MODELLING OF THE SHOCK WAVE FRONT STRUCTURE**

A self-consistent calculation of particles distribution and dynamic properties distributions on a shock wave front procedure was developed. The convergence of the self-consistent algorithm was demonstrated on the one-dimensional crystal with the particle pair interaction potential in the Lennard-Jones form. The dependence of the parameters of the shock wave front on its velocity was investigated.

The present procedure can be used for different crystal structures of metals, including the fcc phase of aluminium.

A method was proposed for selecting parameters for calculating the electronic structure using pseudopotentials in the Quantum ESPRESSO software package, and compression curves for the face-centered cubic (fcc) phase of aluminum were calculated. Using the compression curves, we determined the parameters of the potential in the Lennard-Jones form for aluminum

in the framework of the nearest-neighbor approximation. For the fcc aluminum lattice, the particle distribution on the front of the shock wave propagating in the [100] direction was calculated. Plots of the distribution of velocity, density, resultant forces in the front, the dependence of the number of particles in the shock wave front on the speed of the shock wave were constructed.

В работе представлен метод расчета структуры фронта стационарной ударной волны, сопровождающейся одноосным упругим сжатием кристаллического твердого тела. Упругое одноосное сжатие вполне может быть реализовано в жизни, например, в опытах с фемтосекундным лазером [1].

В основе метода расчета лежит итерационная процедура, позволяющая выбрать межчастичные расстояния в кристалле так, чтобы выполнялись макроскопические законы сохранения массы и импульса, регулирующие перенос вещества через фронт ударной волны. В процессе расчёта возникает необходимость определения сил межчастичного взаимодействия. Расчет сил ведется через потенциал парного взаимодействия, который записан в форме Леннард-Джонса. Необходимые параметры потенциала могут быть получены аппроксимацией кривой одноосного сжатия, построенной благодаря серии проведенных квантово-механических расчетов в Quantum ESPRESSO. Программный пакет QE вычисляет электронную структуру методом псевдопотенциалов [2].

#### *Список литературы*

1. Жаховский В. В., Иногамов Н. А. Уруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2010. – Т. 92. – №. 8. – С. 574-579.
2. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials //Journal of physics: Condensed matter. – 2009. – Т. 21. – №. 39. – С. 395502.

Д.А. БУЧНЫЙ<sup>1</sup>, В.С. ЛИТВИН<sup>1</sup>, В.А. УЛЬЯНОВ<sup>2</sup>, В.Г.  
СЫРОМЯТНИКОВ<sup>2</sup>, А.А. СТОЛЯРОВ<sup>1</sup>, Д.Н. ТРУНОВ<sup>1</sup>, С.Н.  
АКСЕНОВ<sup>1</sup>, В.Н. МАРИН<sup>1</sup>, Р.А. САДЫКОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Петербургский институт ядерной физики НИЦ «Курчатовский Институт», Гатчина, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ НЕМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА УСТАНОВКЕ “ГОРИЗОНТ”**

Приводятся результаты эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) на образцах немагнитных сплавов 40ХНЮ (NiCrAl), БрБ-2 (CuBeNi) и MoTiC на установке «Горизонт» (нейтронном рефлектометре-малоугловом спектрометре), на импульсном источнике нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН.

D.A. BUCHNYY<sup>1</sup>, V.S. LITVIN<sup>1</sup>, V.A. ULYANOV<sup>2</sup>,  
V.G. SYROMYATNIKOV<sup>2</sup>, A.A. STOLYAROV<sup>1</sup>, D.N. TRUNOV<sup>1</sup>,  
S.N. AXENOV<sup>1</sup>, V.N. MARIN<sup>1</sup>, R.A. SADYKOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute for Nuclear Research of RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC Kurchatov Institute, Gatchina, Russia*

## **NON-MAGNETIC ALLOYS RESEARCH USING SANS METHOD AT THE INSTRUMENT “GORIZONT”**

The results of the small angle neutron scattering (SANS) on the non-magnetic alloys 40HNU (NiCrAl), BrB-2 (CuBeNi) and MoTiC using the instrument “GORIZONT” (neutron reflectometer-small angle spectrometer) on the pulsed neutron source IN-06 of the INR RAS are presented.

Актуальной проблемой метода МУРН исследования вещества является подбор материалов элементов установки, которые, обладая требуемыми физическими свойствами, давали бы как можно меньший вклад в рассеяние нейтронов. При исследованиях в магнитных полях также недопустима высокая магнитная восприимчивость этих материалов. На данный момент основными инструментами для создания высоких давлений на образце МУРН являются наковальни и камеры с сапфировыми окнами, значительно ограничивающие либо объем образца, либо максимально достижимое давление. БрБ2 (Cu-основной, Be-2%, Ni-0.5%), 40ХНЮ (Ni-основной, Cr-41%, Al-3.5%) [1] и (Mo-86%, Ti-10%, C-3%) – немагнитные сплавы, которые в перспективе могут быть использованы для изготовления камер высокого давления системы поршень-цилиндр.

Был проведен тестовый эксперимент по МУРН на образцах данных сплавов с целью оценки их вклада в рассеяние нейтронов (Рис. 1).

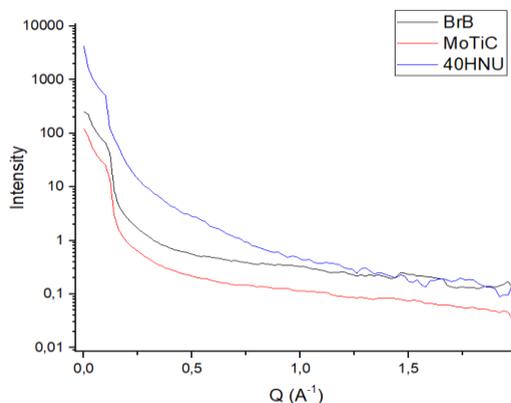


Рис. 1 Спектры МУРН на немагнитных сплавах

Видно, что сплав MoTiC обладает сечением нейтронного рассеяния на несколько порядков меньше, чем 40ХНЮ и, следовательно, предпочтителен при изготовлении элементов экспериментальной установки.

*Список литературы*

1. Литвин В. С., Алексеев А. А., Трунов Д. Н., Аксенов С. Н., Клементьев Е. С., Марин В. Н., Поташев С. И., Столяров А. А., Лебедь Ю. Б., Кузнецов В. Л., Кузнецов С. П., Мешков И. В., Садыков Р. А. Нейтронная дифракция и спектрометрия на импульсном источнике “РАДЭКС” ИЯИ РАН. Поверхность. 2019, №3, С. 25-31

В.В. ВОЛКОВ<sup>1</sup>, А.Е. КРЮКОВА<sup>1,2</sup>, П.В. КОНАРЕВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

## **ПОИСК РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЧАСТИЦ ПО РАЗМЕРАМ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНЫХ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ОТ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ**

На ряде двух- и трех-компонентных модельных данных малоуглового рассеяния от систем полидисперсных сферических частиц исследована возможность определения функции распределения частиц по размерам методами регуляризации, прямого поиска гистограммы и в виде суперпозиции гладких аналитических функций. Рассмотрены преимущества и недостатки этих подходов. Показано, что их комбинированное использование позволяет находить приемлемые решения даже в случае существенной зашумленности данных.

V.V. VOLKOV<sup>1</sup>, A.E. KRYUKOVA<sup>1,2</sup>, P.V. KONAREV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>NRC "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

## **DETERMINATION OF PARTICLE SIZE DISTRIBUTIONS BY EXAMPLE OF MODEL DATA OF SMALL ANGLE SCATTERING FROM POLYDISPERSION SYSTEMS OF SPHERICAL PARTICLES**

Using a series of two- and three-component model data of small-angle scattering from systems of polydisperse spherical particles, the possibility of determination of the particle size distribution function by regularization methods, a direct histogram search, and as a superposition of smooth analytical functions has been investigated. The advantages and disadvantages of these approaches are considered. It is shown that their combined use allows one to find acceptable solutions even in the case of significant data noise.

Метод малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния - нередко единственный способ, позволяющий качественно и количественно исследовать строение многокомпонентных систем, свойства которых определяются структурными особенностями и/или включениями в наноразмерном диапазоне, без специальной подготовки образцов. Наиболее общей характеристикой таких систем служит функция распределения рассеивающих неоднородностей по размерам. При этом, даже в случае неоднородностей произвольной формы, кривая распределения с удовлетворительной точностью может быть описана моделью полидисперсных сферических частиц. Однако, сильная корреляция параметров распределения приводит к очень плохой обусловленности обратной задачи и, как следствие, к сильной зависимости решения от возмущений исходных данных, типов алгоритмов поиска и их параметров. Поэтому поиск

условий, при которых решение становится устойчивым и однозначным, является чрезвычайно важным этапом разработки методов анализа данных рассеяния.

В данной работе мы рассмотрели случаи двух- и трех-компонентных систем полидисперсных сферических частиц с разнесенными и частично перекрывающимися распределениями компонент. Для этих систем были смоделированы наборы данных малоуглового рассеяния без шума и с шумом (распределение Пуассона). Программа GNOM [1] основана на решении линейной задачи наименьших квадратов с регуляризацией (одновременная минимизация квадратичной невязки эксперимент-модель и квадрата взвешенной нормы первой производной по решению). Программа MIXTURE [2] (и ее вариант POLYMIX, использующий модифицированный алгоритм Левенберга-Марквардта) ищет распределение в виде суперпозиции нескольких гладких аналитических функций (распределений Шульца) и свободна от многих недостатков первого подхода. Программа VOLDIS ищет распределение непосредственно в виде гистограммы. Показано, что на невозмущенных данных все три программы находят практически точное решение, на зашумленных данных разброс форм распределений часто может оказаться неприемлемым. Тем не менее, комбинирование методов позволяет не только оценивать устойчивость решения, но и получать приемлемые результаты, как было показано в [3].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-90190).

*Список литературы*

1. Svergun D.I. // J. Appl. Cryst. 1992. Vol. 25. P. 495-503.
2. Konarev P.V., Volkov V.V., Sokolova A.V. et al. // J. Appl. Cryst. 2003, Vol. 36, P. 1277-1282.
3. Kryukova A.E., Konarev P.V., V.V. Volkov V.V. et al. // J. Mol. Liq. 2019, Vol.283, P. 221-224.

С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ<sup>1</sup>, М.Х. ГАДЖИЕВ<sup>2</sup>, Д.К. ПАЛЧАЕВ<sup>1</sup>, Ж.Х. МУРЛИЕВА<sup>1</sup>, Г.Б. РАГИМХАНОВ<sup>1</sup>, Н.А. ДЕМИРОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

## **МОРФОЛОГИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ YBCO ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПЛАЗМЕННЫМ ПОТОКОМ**

Приведены результаты исследования морфологии поверхности сверхпроводящей наноструктурированной керамики состава  $YBa_2Cu_3O_{7-y}$  (YBCO) после воздействия плазменным потоком аргона. Установлено, что воздействие потоком плазмы приводит к модификации поверхности в виде: уплотнения и рекристаллизации. Наблюдаются «оплавленные» зерна с монолитным сопряжением друг с другом.

S.KH. GADZHIMAGOMEDOV<sup>1</sup>, M.KH. GADZHIEV<sup>2</sup>,  
D.K. PALCHAEV<sup>1</sup>, ZH.KH. MURLIEVA<sup>1</sup>, G.B. RAGIMKHANOV<sup>1</sup>, N.A.  
DEMIROV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Dagestan State University, Makhachkala, Russia

<sup>2</sup>Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia

## **MORPHOLOGY OF NANOSTRUCTURED CERAMICS YBCO AFTER EXPOSURE OF THE PLASMA FLOW**

The results of studying the surface morphology of a superconducting nanostructured ceramic of the composition  $YBa_2Cu_3O_{7-y}$  (YBCO) after exposure to a plasma stream of argon are presented. It is established that exposure to a plasma stream leads to surface modification in the form of: compaction and recrystallization. "Melted" grains with monolithic conjugation with each other are observed.

Нано структурирование сверхпроводящих образцов YBCO приводит к снижению прочности связи между зёрнами, уменьшению размеров кристаллитов и возникновению наноразмерных дефектов структуры, способствующих [1] пиннингу вихрей. Для создания таких центров эффективно используется [2] методы вакуумно-дугового синтеза.

В работе приведены результаты исследования морфологии поверхности сверхпроводящей наноструктурированной керамики состава  $YBa_2Cu_3O_{7-y}$  (YBCO) после воздействия плазменным потоком аргона. Керамика YBCO была получена по химической технологии [3, 4]. Синтезированный методом сжигания нитрат-органических прекурсоров порошок предварительно термообработывался в течение 20 часов при 910°C (скорость подъема до температуры  $v_{\text{под}} \sim 4,9^\circ\text{C}/\text{мин}$ ). После термообработки порошок прессовался под давлением  $\sim 100$  МПа и спекался в течение 1 часа при температуре 920°C ( $v_{\text{под}}$

~0,75 °С/мин). Воздействие на керамический образец плазменной струей из смеси аргона и азота с кислородом (при токе 250 А и расходе газа 1÷3 г/с) осуществлялось в течение ~ 60с на расстоянии 20 мм от среза сопла плазмотрона [4].

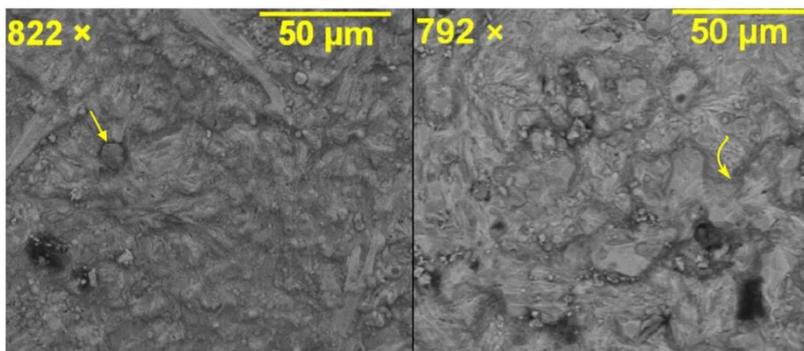


Рис. 1. Морфология наноструктурированной керамики YBCO после воздействия плазменным потоком аргона

Как видно (рис.1), воздействие потоком плазмы привело к сильному «оплавлению» зерен, образующих монолитно сопряженную структуру поверхностного слоя керамики. Под воздействием плазмы также происходят «растворение» побочных фаз (на рис. слева стрелкой указано зерно оксида меди) и рекристаллизация основной фазы (на рис. справа стрелкой указана граница).

Работа была поддержана грантом РФФИ № 18-08-00092а.

#### *Список литературы*

1. Rudnev I., Podlivaev A. // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. – 2016. – V. 26, №4. – P. 8200104.
2. Lepeshev A.A., Patrin G.S., Yurkin G.Yu. et al. // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2018. – V. 31. – P. 3841–3845.
3. Гаджимогомедов С. Х., Палчаев Д. К., Палчаев Н. А. и др. // Кристаллография, 2019, том 64, № 3, с. 451–455.
4. Rabdanova A. E., Gadzhimagomedov S. Kh., Palchaev D. K. et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V.1385. P. 012028.

Б.Р. ГАЙНАНОВ<sup>1</sup>, О.В. ЧЕРНЫШЕВА<sup>1</sup>, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ<sup>1</sup>,  
А.П. МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, В.В. ПОПОВ<sup>1,2</sup>, Ф. Д'АКАПИТО<sup>3</sup>, А. ПУРИ<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция*

## ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Мы изучили процесс кристаллизации и локальной перестройки атомной структуры в образцах  $(Pr_{1-x}Yb_x)_2Ti_2O_7$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) и  $Pr_2(Zr_{1-y}Ti_y)_2O_7$  ( $0 \leq y \leq 1$ ), синтезированных сочетанием золь-гель и методов соосаждения с последующим прокаливанием прекурсоров. Показано влияние замещения катионов на локальную и кристаллическую структуру, а так же температуру фазового перехода.

B.R. GAYNANOV<sup>1</sup>, O.V. CHERNYSHEVA<sup>1</sup>,  
A.A. YASTREBSEV<sup>1</sup>, A.P. MENUSHENKOV<sup>1</sup>, V.V. POPOV<sup>1,2</sup>,  
F. D'AKAPITO<sup>3</sup>, A. PURI<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *National Research Centre Kurchatov Institute, Moscow, Russia*

<sup>3</sup> *European Center for Synchrotron Radiation, Grenoble, France*

## LOCAL STRUCTURAL CHARACTERISTICS OF COMPLEX OXIDES BASED ON RARE-EARTH AND TRANSITION METALS

We have studied the process of the crystallization and local atomic structure rearrangement in  $Pr_2(Zr_{1-y}Ti_y)_2O_7$  ( $0 \leq y \leq 1$ ),  $(Pr_{1-x}Yb_x)_2Ti_2O_7$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) samples synthesized by combination of sol-gel and coprecipitation methods with the subsequent calcination of precursors. The effect substitution of cations on the local and crystalline structure, as well as the temperature of the phase transition was shown.

В настоящее время большой интерес вызывают исследования так называемых твердотельных активных материалов, обладающих полифункциональными свойствами, к которым относятся сложные оксиды d- и f- элементов, и в частности титанаты, цирконаты, гафнаты, молибдаты и вольфраматы редкоземельных элементов (РЗЭ), являющиеся перспективными керамическими материалами для создания теплозащитных покрытий нового поколения, твердых электролитов, матриц для хранения радиоактивных отходов, поглотителей нейтронов в ядерных реакторах, датчиков различных газов и катализаторов [1]. В рамках работы по исследованию особенностей кристаллической и локальной структуры были получены новые

фундаментальные знания о фазовых превращениях в сложнооксидных соединениях  $(Pr_{1-x}Yb_x)_2Ti_2O_7$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) и  $Pr_2(Zr_{1-y}Ti_y)_2O_7$  ( $0 \leq y \leq 1$ ).

Изучение серии соединений  $(Pr_{1-x}Yb_x)_2Ti_2O_7$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) с помощью вейвлет и фурье анализа показало, что по мере увеличения концентрации Pr увеличивается температура при которой происходит упорядочение атомов вокруг Yb и постепенное разупорядочение пироклорной структуры. Вокруг атома Pr наблюдается обратная закономерность при увеличении концентрации Yb. В этом случае окружение Pr стремится выстроиться в пироклороподобную структуру при температурах  $\sim 800^\circ C$  ( $x < 0.5$ ), дальнейшее увеличение концентрации Yb сдвигает образование пироклорной структуры к температурам  $1200^\circ C$  и выше. Аналогичное поведение окружения Pr наблюдается в серии  $Pr_2(Zr_{1-y}Ti_y)_2O_7$  ( $0 \leq y \leq 1$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 18-12-00133).

*Список литературы*

1. J. Farmer, L. Boatner, B. Chakoumakos, et al// J. Alloys Compd. 2014 Vol. 605, P. 63-70

П.Д. ГРИГОРЬЕВ<sup>1,2</sup>, Р. РАМАЗАШВИЛИ<sup>3</sup>, М.В. КАРЦОВНИК<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической физики им Л.Д.Ландау РАН, Черноголовка, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный университет науки и технологий МИСиС, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France*

<sup>4</sup> *Walther-Meißner-Institut, Garching, Germany*

## **ЭФФЕКТИВНЫЙ g-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ, ИЗМЕРЯЕМЫЙ ПО МАГНИТНЫМ КВАНТОВЫМ ОСЦИЛЛЯЦИЯМ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ**

Используя симметричные аргументы, мы показываем, что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Экспериментальное исследование этого эффекта проводится в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника  $\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова-де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спину, предсказанное для антиферромагнитных проводников. Аналогично, мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова-де Гааза в оптимально легированном электроном купрате Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>. Это указывает на наличие неелевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

P.D. GRIGORIEV<sup>1,2</sup>, R. RAMAZASHVILI<sup>3</sup>, M. V. KARTSOVNIK<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *L.D. Landau Institute for Theoretical Physics RAS, Chernogolovka, Russia*

<sup>2</sup> *National University of Science and Technology "MISIS", Moscow Russia*

<sup>3</sup> *Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France*

<sup>4</sup> *Walther-Meißner-Institut, Garching, Germany*

## **ZEEMAN SPIN-ORBIT COUPLING AND MAGNETIC QUANTUM OSCILLATIONS IN ANTIFERROMAGNETIC METALS**

Using the symmetry arguments we show that in many metals with antiferromagnetic ordering the effective g-factor of charge carries, measured from magnetic quantum oscillations, is zero. The experimental study of this effect is performed in several compounds and compared with proposed theory. We find that the Néel state of the layered organic conductor  $\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> shows no spin modulation of the Shubnikov-de Haas oscillations, contrary to the paramagnetic state of the same material. This is evidence of spin degeneracy of Landau levels -- a direct manifestation of the generic Zeeman spin-orbit coupling, predicted for antiferromagnetic conductors. Likewise, we find no spin modulation in the angle dependence of the slow Shubnikov-de Haas oscillations in the optimally electron-doped cuprate Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>. This points to the presence of Néel order in this superconductor even at optimal doping.

Во многих металлах имеется также антиферромагнитное (АФМ) упорядочение. Рассеяние электронов на вектор АФМ приводит к перестройке их спектра и поверхности Ферми (ПФ), с образованием новой магнитной зоны Бриллюэна. Ранее было показано [1-5], что это влияет на Зеемановское расщепление спектра электронов в магнитном поле. В частности, если магнитное поле  $\mathbf{B}$  перпендикулярно вектору  $\mathbf{M}$  намагниченности АФМ и вектор АФМ равен половине вектора обратной решетки, то эффективный  $g$ -фактор электронов проводимости обращается в нуль ( $g_{\perp}=0$ ) на некоторой поверхности в импульсном пространстве, которая для кристаллов с высокой симметрией совпадает с границей магнитной зоны Бриллюэна. Поэтому для очень малых карманов ПФ, расположенных точно на этой поверхности, наблюдаемый  $g_{\perp}=0$ . Это может быть обнаружено на угловой зависимости амплитуды магнитных квантовых осцилляций, которая при конечном  $g$ -факторе в сильно анизотропных (квазидвумерных) металлах осциллирует как функция угла наклона  $\mathbf{B}$  и исчезает в точках, называемых спиновыми нулями [6]. В нашей работе [7] показано, что малость карманов ПФ в этом случае не обязательна. Даже если большой карман ПФ образован её перестройкой из-за рассеяния на вектор АФМ, эффективный  $g$ -фактор электронов при  $\mathbf{B} \perp \mathbf{M}$ , например, измеряемый по магнитным квантовым осцилляциям, будет равен нулю из-за симметрии. Строгое обоснование этого утверждения основано на антисимметрии (относительно центра орбиты) зависящего от импульса  $g$ -фактора, получаемого из диагонализации Гамильтониана, и описано в работе [7].

Работа частично поддержана грантами РФФИ 19-02-01000 и 18-02-00280.

#### *Список литературы*

1. R. Ramazashvili, // Physical Review Letters, V. 101, 137202 (2008).
2. R. Ramazashvili, // Physical Review B, V. 79, 184432 (2009).
3. V.V. Kabanov, A. S. Alexandrov, // Physical Review B, V. 77, 132403 (2008); *ibid* V. 81, 099907(E) (2010).
4. R. Ramazashvili, // Physical Review B, V. 80, 054405 (2009).
5. R. Ramazashvili, Physical Review Letters, V. 105, 216404 (2010).
6. D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals* (Cambridge University Press, 1984).
7. R. Ramazashvili, P.D. Grigoriev, T. Helm, F. Kollmannsberger, M. Kunz, W. Biberacher, E. Kampert, H. Fujiwara, A. Erb, J. Wosnitzer, R. Gross, M.V. Kartsovnik, // arXiv: [1908.01236](https://arxiv.org/abs/1908.01236).

М.Д. ГРИЦКЕВИЧ<sup>1</sup>, Д.В. ФОМИНСКИЙ<sup>1</sup>, И.В. АНИЩЕНКО<sup>1</sup>, В.Ю.  
ФОМИНСКИЙ<sup>1</sup>, А.Ю. ГОЙХМАН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Балтийский федеральный университет им. И.Канта, Калининград, Россия

## **ОСОБЕННОСТИ ИМПУЛЬСНОЙ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ МИШЕНЕЙ MoS<sub>2</sub> И MoSe<sub>2</sub> И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОСАЖДАЕМЫХ ТВЕРДОСМАЗОЧНЫХ НАНОПОКРЫТИЙ**

Исследованы лазерно-инициированные структурные и морфологические изменения в спрессованных мишенях MoS<sub>2</sub> и MoSe<sub>2</sub>, использованных для получения антифрикционных нанопокровтий методом импульсного лазерного осаждения. Выявлены значительные различия в механизме абляции этих материалов, которые обуславливали важные различия в структурообразовании покрытий MoS<sub>x</sub>/Mo и MoSe<sub>x</sub>/Mo. Приведены результаты исследования структуры, морфологии и трибологических свойств этих нанопокровтий (коэффициента трения, износостойкости) при тестировании по методике скольжения шарика по диску в условиях различной влажности и изменении температур испытаний от 22°C до -100°C

M.D.GRITSKEVICH<sup>1</sup>, D.V. FOMINSKI<sup>1</sup>, I.V. ANISHCHENKO<sup>1</sup>,  
V.Y. FOMINSKI<sup>1</sup>, A. Yu. GOYHMAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia

<sup>2</sup>Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia

## **FEATURES OF PULSED LASER ABLATION OF MoS<sub>2</sub> AND MoSe<sub>2</sub> TARGETS AND THEIR INFLUENCE ON THE TRIBOLOGICAL PROPERTIES OF THE DEPOSITED SOLID- LUBRICANTS NANO-COATINGS**

Laser-initiated structural and morphological changes in the compressed MoS<sub>2</sub> and MoSe<sub>2</sub> targets used to obtain antifricion nano-coatings by pulsed laser deposition were studied. Significant differences were revealed in the ablation mechanism of these materials, which caused important differences in the structure formation of MoS<sub>x</sub> / Mo and MoSe<sub>x</sub> / Mo coatings. The results of the study of the structure, morphology and tribological properties of these nano-coatings (coefficient of friction, wear resistance) when testing by the technique of sliding the ball across the disk under conditions of different humidity and changing test temperatures from 22 ° C to -100 ° C are presented.

При импульсном лазерном осаждении (ИЛО) тонкоплёночных покрытий на основе дихалькогенидов переходных металлов возникает проблема конгруэнтного переноса химического состава мишеней на подложку. Это

оказывает определённое влияние на трибологические свойства твердосмазочных покрытий.

На рис.1 (а, б) представлены результаты СЭМ исследования мишени  $\text{MoS}_2$ . Видно, что мишень состояла из частиц микронных размеров (5 – 10 мкм). Заметно, что значительное влияние на морфологию возникает после 1-го же импульса, хотя после большего их числа происходило некоторое выглаживание поверхности.

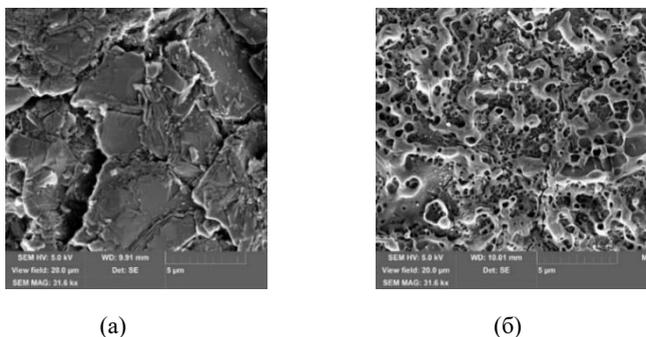


Рис.1. (а) - изображение СЭМ во вторичных (SE) электронах для мишени  $\text{MoS}_2$  после пресования порошка; (б) изображение СЭМ в SE для мишени  $\text{MoS}_2$  после лазерной абляции 5 импульсами.

Для мишени  $\text{MoSe}_2$  были проведены аналогичные СЭМ исследования. Она состояла из плотно упакованных пластинчатых кристаллов. Полировка изменяла морфологию поверхности и вызывала накопление селена в ней. ИЛО с плотностью энергии  $\sim 10$  Дж/см<sup>2</sup> вызывало оплавление поверхности и формирование неровностей в микронном масштабе. Дальнейшее увеличение количества импульсов изменяло соотношения Se/Mo.

Полученные результаты показали, что осаждение микрочастиц могло оказывать негативное влияние на трибологические свойства покрытий  $\text{MoS}_x$ , однако наночастицы в покрытии  $\text{MoSe}_x$  обеспечивали улучшение трибологических свойств этих покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 19-19-00081).

Н.Н. ДЕГТЯРЕНКО, К.С. ГРИШАКОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ОБ УСТОЙЧИВОСТИ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ АТОМАРНОГО ВОДОРОДА**

Методом функционала плотности подробно исследована возможность образования метастабильного водорода. Показано, что структура  $I_{41}/amd$  атомарного металлического водорода может быть динамически устойчива в интервале давления 200÷500 ГПа. Представлены результаты расчетов структурных, энергетических характеристик, электронных и фононных спектров нормальной фазы.

N.N. DEGTYARENKO, K.S. GRISHAKOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## **ON THE STABILITY OF THE METASTABLE PHASE OF ATOMIC HYDROGEN**

The possibility of metastable hydrogen formation was studied in detail using the density functional theory. It is shown that the  $I_{41}/amd$  structure of atomic metallic hydrogen can be dynamically stable in the pressure range of 200÷500 GPa. The results of calculations of structural, energy characteristics, electronic and phonon spectra of the normal phase are presented.

В работе [1] предсказана высокая критическая температура сверхпроводимости  $T_c \sim 200-400$  К для метастабильного атомарного металлического водорода. В соответствии с классическими расчетами [2-4] атомарная фаза водорода может быть метастабильной при понижении давления до атмосферного. Молекулярная фаза водорода превращается в атомную металлическую фазу при высоких давлениях, оцениваемых обычно в 400 ГПа. Теоретическому анализу фазовых переходов молекулярных фаз при увеличении давления посвящено значительное число работ [5-7]. Диапазон стабильности фаз атомарного водорода  $I_{41}/amd$  (480–1000 ГПа) и R-3m (1000–1500 ГПа) рассчитан в [11]. В работе [12] проведен анализ распада металлической фазы при снижении давления ниже переходного. Показано, что металлическое состояние находится в метастабильном долгоживущем состоянии до 10-20 ГПа и распадается мгновенно при более низких давлениях.

В данной работе путем анализа более чем 40 различных структур при давлении 200 ГПа с энергией выше молекулярной фазы подробно исследована возможность образования метастабильного металлического водорода. Показано, что структура  $I_{41}/amd$  атомарного металлического водорода динамически устойчива при уменьшении давления (примерно до 200 ГПа), что расширяет

диапазон устойчивости по сравнению с результатами [13,14]. Представлены результаты расчетов структурных, энергетических характеристик, электронных и фононных спектров нормальной фазы водорода. Качественно, при уменьшении давления результаты обусловлены изменениями, происходящими вблизи минимума потенциальной энергии данной структуры ( $I_{41}/amd$ ) атомарного металлического водорода:

1) при давлениях ( $>400$  ГПа) минимум энергии на PES (поверхность потенциальной энергии) атомарного металлического водорода  $I_{41}/amd$  хорошо определен;

2) при пониженных давлениях ( $400 \div \sim 200$  ГПа) энергетические барьеры атомарного водорода  $I_{41}/amd$  на PES постепенно уменьшаются, что приводит к необходимости проведения расчетов с повышенной точностью в интервале давлений менее 300 ГПа.

Из полученных результатов следует, что атомарный водород структуры  $I_{41}/amd$  метастабилен, но только выше давления  $\sim 200$  ГПа. Можно ли создать метастабильную фазу атомарного водорода, динамически устойчивую при меньших давлениях – вопрос для дальнейших исследований.

*Список литературы*

1. N.W. Ashcroft// Phys. Rev. Lett. 1968.Vol. **21** (26) P. 1748.
2. Yu Kagan and others// UFN 1971. Vol. 105 P. 777.
3. Yu Kagan and others// Sov. Phys. JETP 1972. Vol. 34, 6, 1300.
4. Yu Kagan and others// Sov. Phys. JETP 1977. Vol. 46 P. 511.
5. J.M. McMahon and others //Rev. Mod. Phys. 2012. Vol. 84 (4) P. 1607-1653.
6. Г. Э.Норман, И.М.Сайтов//Письма в ЖЭТФ. 2020. Vol. 111, вып. 3, P. 177 – 182.
7. И. М. Сайтов// ЖЭТФ 2020.Vol. 157(1), P.(в печати).
8. Sam Azadi and W. M. C. Foulkes//Phys. Rev. Vol.88, P. 014115 (2013).
9. C. J. Pickard and R. J. Needs//Nat. Phys. Vol. 3, P.473 (2007).
10. H. K. Mao and R. J. Hemley//Rev. Mod. Phys. 1994. Vol. 66, P. 671.
11. J. M. McMahon and D. M. Ceperley//Phys. Rev. Lett. 2011. Vol.106, P. 165302.
12. S. N. Burmistrov, L. B. Dubovskii//Low Temp. Physics 2017. Vol.43 P. 1152.
13. Н.Н.Дегтяренко, Е.А.Мазур//Письма в ЖЭТФ 2016. Vol. 104, P. 329.
14. Н.Н.Дегтяренко, Е.А.Мазур, К.С.Гришаков//Письма в ЖЭТФ 2017. Vol. 105(10), P.624.

П.Н. ДЕГТЯРЕНКО<sup>1,2</sup>, А.С. МАНКЕВИЧ<sup>1</sup>, А.В. МАРКЕЛОВ<sup>1</sup>,  
А.А. МОЛОДЫК<sup>1,3</sup>, С.В. САМОЙЛЕНКОВ<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>ООО «С-Инновации», Москва, Россия

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup>ЗАО «СуперОкс», Москва, Россия

## СОВРЕМЕННОЕ РАЗВИТИЕ ПРОИЗВОДСТВА ВТСП ЛЕНТ 2-ГО ПОКОЛЕНИЯ В КОМПАНИИ С-ИННОВАЦИИ

На сегодняшний день высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) ленты 2-го поколения являются одним из наиболее перспективных материалов для создания ограничителей тока короткого замыкания, магнитных систем для установок термоядерного синтеза и ускорительной техники. Многие производители в мире работают над совершенствованием технологии производства, в частности над воспроизводимостью при выпуске больших объемов ВТСП-ленты, их механической прочностью, а также стойкостью к радиационным воздействиям. В компании «С-Инновации» ведутся работы по совершенствованию выпускаемой продукции, такие как увеличение критического тока лент до 800 А/12мм при температурах жидкого азота в собственном поле, увеличением инженерной плотности тока до 700 А/мм<sup>2</sup> для применения в сильных магнитных полях более 20 Т и температурах ниже 20 К. Успешно внедрены подходы и получены ВТСП ленты 2-го поколения с более толстым слоем сверхпроводящей пленки и высокой однородностью критического тока по длине, рекордной инженерной плотностью, а также улучшены свойства адгезии. Выпускаемая высококонкурентная продукция используется в проектах по созданию сверхпроводящих устройств для нужд конкретных применений в разных областях.

P. DEGTYARENKO<sup>1,2</sup>, A. MANKEVICH<sup>1</sup>, A. MARKELOV<sup>1</sup>,  
A. MOLODYK<sup>1,3</sup>, S. SAMOILENKOV<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>S-Innovations, LLC, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Joint Institute for High Temperature RAS, Moscow, Russia

<sup>3</sup>SJSC SuperOx, Moscow, Russia

## PRESENT STATUS PRODUCTION OF 2G HTS WIRE AT S-INNOVATIONS

At present time 2G HTS wire is one of the perspective material for using in fault current limiters, fusions and accelerator magnets. Many manufacturers focus their efforts on better satisfying demands of specific wire applications. At S-innovations we work at increasing the critical current up to 800 A/12mm in self-field and 77K, decreasing the critical current density up to 700 A/mm<sup>2</sup> at 20 T and 20 K. We adopt into production the approaches successfully to increase the HTS layer thickness, to modify HTS layer composition. The high quality production is use in project for superconducting equipment creation.

Интенсивное развитие науки и техники, а также электроэнергетики требует создание нового класса материалов, которые способны пропускать большие значения токов и работать, как в условиях сильных магнитных, так и в условиях сильных радиоактивных полей. Одним из таких материалов являются высокотемпературные сверхпроводящие ленты 2-го поколения. Именно разработка ВТСП ленты 2-го поколения с более толстым слоем сверхпроводящей пленки и высокой однородностью критического тока по длине, рекордной инженерной плотностью тока, а также улучшенными свойствами адгезии является, в настоящее время, наиболее актуальной задачей.

В представленной работе проведены комплексные исследования сверхпроводящих свойств ВТСП лент 2-го поколения. Для подробных исследований были использованы образцы ВТСП лент 2-го поколения, полученные при промышленных скоростях осаждения сверхпроводящей пленки методом импульсного лазерного осаждения. Проведены исследования микроструктуры сверхпроводящих материалов методом просвечивающей электронной микроскопии на электронных микроскопах Titan 80-300 (FEI, USA) и Osiris (FEI, USA). Исследовано поведение инженерной плотности тока в сильных магнитных полях до 8 Т и при температурах от 4.2 до 77 К. Рассмотрен вопрос влияния сильных магнитных полей на критическую температуру сверхпроводящего перехода. Изучены вопросы поведения вихревой структуры при изменении стехиометрического состава сверхпроводящей пленки.

В результате проведенной работы удалось провести совершенствование выпускаемой продукции. Увеличить критический ток лент до 800 А/12мм при температурах жидкого азота в собственном поле, а также увеличить инженерную плотность тока до 700 А/мм<sup>2</sup> для применения в сильных магнитных полях более 20 Т и температурах ниже 20 К.

К.А. ДМИТРИЕВА<sup>1</sup>, П.И. БЕЗОТОСНЫЙ<sup>1</sup>, О.Ю. ВИЛКОВ<sup>2</sup>, А.Г. РЫБКИН<sup>2</sup>, А.А. СЛОБОДЧИКОВ<sup>3</sup>, Н.С. ПАВЛОВ<sup>3</sup>, И.А. НЕКРАСОВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, Россия

<sup>3</sup>Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СВЕРХПРОВОДНИКА SnAs

В работе представлены результаты исследования зонной структуры сверхпроводящего материала арсенида олова. Проведено сравнение экспериментальных данных зонной структуры, полученных методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением ARPES, с зонными расчетами, проведенными для поверхностных слоев. Получено, что согласие ARPES спектров с зонными расчетами для поверхностных слоев лучше, чем с зонными расчетами для объемного материала. Тем не менее, одна из зон, наблюдаемая на ARPES спектрах, не воспроизводится ни в расчетах для объемного материала, ни в расчетах для поверхностных слоев.

К.А. DMITRIEVA<sup>1</sup>, P.I. BEZOTOSNYI<sup>1</sup>, O.Yu. VILKOV<sup>2</sup>, A.G. RYBKIN<sup>2</sup>, A.A. SLOBODCHIKOV<sup>3</sup>, N.S. PAVLOV<sup>3</sup>, I.A. NEKRASOV<sup>3</sup>

<sup>1</sup>P.N. Lebedev Physical Institute, RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup> Saint Petersburg State University, Russia

<sup>3</sup>Institute for Electrophysics, RAS, Ural Branch, Ekaterinburg, Russia

## INVESTIGATION OF THE SUPERCONDUCTOR SnAs BAND STRUCTURE

The results of a study of the band structure of the superconducting material of tin arsenide are presented. The experimental data on the band structure obtained by photoelectron spectroscopy with angular resolution ARPES are compared with the band calculations performed for surface. It was found that the agreement between ARPES spectra and band calculations for surface layers is better than with band calculations for bulk material. However, one of the zones observed in the ARPES spectra is not reproduced either in calculations for bulk material or in calculations for surface layers.

Бинарное соединение арсенид олова SnAs в последние годы стал объектом всестороннего исследования ввиду наличия свойств, которые могут быть применены в будущем. В связи с этим большой интерес представляет изучение электронной зонной структуры данного соединения.

В работе представлены результаты экспериментального и теоретического исследования электронной зонной структуры бинарного соединения SnAs. Проведено сравнение экспериментальных данных зонной структуры, полученных методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением ARPES, с зонными расчетами, проведенными для поверхностных слоев.

Получено, что согласие ARPES спектров с зонными расчетами для поверхностных слоев лучше, чем с зонными расчетами для объемного материала. Тем не менее, одна из зон, наблюдаемая на ARPES спектрах, не воспроизводится ни в расчетах для объемного материала, ни в расчетах для поверхностных слоев. Более подробно смотрите [1].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-72-00196). Измерения ARPES проводились в Ресурсном центре «Физические методы поверхностных исследований» СПбГУ.

*Список литературы*

1. Bezotosnyi P. I., Dmitrieva K.A. and others//Physical Review B. 2019. Vol. 100. P. 184514.

И.В. ЗАГОРОДНЕВ, Д.А. РОДИОНОВ, А.А. ЗАБОЛОТНЫХ  
*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*

## **РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БОЛЬШИХ ПРОВОДЯЩИХ 2D ДИСКАХ**

Развита теория резонансного поглощения микроволнового излучения в 2D электронных системах в форме диска, когда длина волны излучения меньше или сравнима с радиусом диска. Аналитически и численно проанализировано положение и ширина основных резонансных линий в зависимости от параметров системы: проводимости и радиуса системы.

I.V. ZAGORODNEV, D.A. RODIONOV, A.A. ZABOLOTNYKH

*Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow*

## **RESONANCE ABSORPTION OF MICROWAVE RADIATION IN LARGE CONDUCTIVE 2D DISK**

Theory of resonant absorption of microwave radiation in 2D electronic systems in the form of a disk is developed when the radiation wavelength is less than or comparable to the radius of the disk. We analyze analytically and numerically dependence of the position and the linewidth of the main resonant peaks on the system parameters: conductivity and radius of the system.

Электромагнитный отклик композитных материалов, состоящих из проводящих включений, вызывает большой интерес и активно исследуется в наноплазмонике и нанофотонике. Вместе с тем начиная с первых работ [1,2] основное внимание уделяется случаю, когда длина волны электромагнитного излучения много больше размеров включений. В этом случае, как правило, можно пренебречь эффектами электромагнитного запаздывания, т.е. при описании микроскопических полей внутри включения считать, что скорость света равна бесконечности. Относительно недавно в полупроводниковых гетероструктурах на основе квантовых ям GaAs/AlGaAs, в которых носители заряда имеют высокую подвижность, было исследовано поглощение микроволнового излучения в больших (до нескольких мм) дисках, т.е. в режиме, когда длина волны электромагнитного излучения сравнима с размерами диска [3,4]. Оказалось, что в этом режиме ширина линии и добротность резонансов с ростом роли электромагнитного запаздывания увеличивается быстрее, чем ожидалось. Эти результаты послужили мотивацией для нашей работы.

Рассмотрим одиночный двумерный диск радиуса  $R$ , проводимость которого будем описывать в рамках динамической модели Друде  $\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}$ , где

$\sigma_0$  - статическая проводимость, а  $\tau$  - время релаксации носителей. Пусть на систему падает внешнее электромагнитное излучение с частотой  $\omega$ , которое содержит гармоники с орбитальным (азимутальным) числом  $l$ . Можно показать [5], что поглощение в системе определяется двумя безразмерными параметрами  $\beta_0 = \frac{\sigma_0}{c} \frac{2\pi R}{\tau c}$  и  $\frac{R}{\tau c}$ . Мы проанализировали поглощение в диске и нашли аналитические положения и ширины основных резонансов. Например, для основной (фундаментальной) моды с орбитальным моментом  $l = 1$  при малом параметре  $\beta_0$  ("низкие" частоты) они имеют следующий вид:

$$\omega_{\max}^{(l=1)} \approx 1.04 \frac{c}{R} \sqrt{\beta_0 (1 - 0.25\beta_0 + 0.1\beta_0^2)}, \quad (1)$$

$$\Delta\omega^{(l=1)} \approx \frac{1}{\tau} (1 - 0.5\beta_0 + 0.1\beta_0^2) + 0.2 \frac{c}{R} \beta_0. \quad (2)$$

Из (2) хорошо видно, что в ширину линии вносят вклад два механизма: друдевские и радиационные потери. Причем, доля друдевских потерь может быть уменьшена подбором параметров системы. Используя найденные выражения, можно найти добротность плазменных резонансов и подобрать оптимальные параметры системы для ее увеличения.

Работа выполнена в рамках государственного задания.

#### *Список литературы*

1. J.C. Maxwell-Garnet // Philos. Trans. R. Soc. London, Vol. 203, 385 (1904).
2. S. J. Allen, H. L. Störmer, J.C.M. Hwang // Physical Review B, Vol. 28, 4875 (1983).
3. I.V. Kukushkin et al. // Phys. Rev. Lett., Vol. 90, 156801 (2003).
4. P.A. Gusikhin, V.M. Muravev, A.A. Zagitova, I.V. Kukushkin // Phys. Rev. Lett., Vol. 121, 176804 (2018).
5. I.V. Zagorodnev, D.A. Rodionov, A.A. Zabolotnykh, V.A. Volkov // Semiconductors, Vol. 53, 1873 (2019).

О.Б. ЗАЙНУЛЛИН, В.А. КОМОРНИКОВ, И.С. ТИМАКОВ  
*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

## **МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ВОДОРАСТВОРИМЫХ СОЛЕЙ КОБАЛЬТА И НИКЕЛЯ**

Получены монокристаллы гексагидрата хлорида никеля ( $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), гексагидрата хлорида кобальта ( $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), а также  $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  путем изотермического упаривания и методом управляемого снижения температуры из водного насыщенного раствора с применением модифицированной кристаллизационной установки. Исследованы параметры спектра пропускания, термическая устойчивость полученных монокристаллов. Получены образцы кристаллов гексагидратов хлоридов никеля и кобальта в ряду твердых растворов  $\text{Ni}_x\text{Co}_{1-x}\text{Cl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  в широком интервале значений параметра  $x$ .

O.B. ZAINULLIN, V.A. KOMORNIKOV, I.S. TIMAKOV

*FSRC "Crystallography and Photonics" RAS (Federal Research Centre 'Crystallography and Photonics', Russian Academy of Sciences), Moscow, Russia*

## **SYNTHESIS METHODS OF CRYSTALS OF CABALT AND NICKEL WATER-SOLUBLE SALTS**

Single crystals of nickel chloride hexahydrate ( $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), cobalt chloride hexahydrate ( $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), and  $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  were obtained by isothermal evaporation and by the method of controlled temperature reduction from an aqueous saturated solution by using modified crystallizator. The transmission spectrum parameters and thermal stability of the obtained single crystals are studied. Crystal samples of nickel and cobalt chloride hexahydrates were obtained in a series of  $\text{Ni}_x\text{Co}_{(1-x)}\text{Cl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  solid solutions in a wide range of  $x$  parameter.

В современном приборостроении оптические фильтры являются важной составляющей. В Институте кристаллографии разрабатываются методики выращивания кристаллов с узкой полосой оптического пропускания в различных областях оптического спектра.

Фильтры с узкой полосой пропускания в УФ диапазоне применяют в приборах "солнечно-слепой технологии" [1]. Данные работы ведутся с использованием двойных сульфатов переходных элементов, так называемых солей Туттона [2]. При этом оптические фильтры, полученные из кристаллов данных веществ, имеют оптическую область пропускания в видимой зоне, что негативно сказывается на технических характеристиках произведенных с их использованием приборов.

Настоящая работа посвящена определению условий получения кристаллов водорастворимых солей кобальта и никеля с необходимыми спектральными характеристиками. Хлориды кобальта и никеля привлекают внимание схожими

оптическими свойствами и перспективами увеличения температурного диапазона эксплуатации.

Выращены кристаллы из насыщенных растворов систем  $\text{NiCl}_2\text{-CoCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{NiCl}_2\text{-HCl-H}_2\text{O}$ , определены области кристаллизации твердых растворов. Также разрабатывается методика получения монокристалла  $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Исследованы оптические спектры пропускания растворов данных соединений с близкой к насыщенным растворам концентрацией.

Был спроектирован и изготовлен модифицированный герметичный магнитный узел кристаллизационной установки малого размера. При этом многие детали и узлы данной установки изготавливались с применением технологии 3D-печати. С помощью разработанной установки удалось реализовать рост кристаллов из водно-органических или неводных насыщенных растворов, что позволяет значительно расширить возможности для выращивания кристаллов.

Полученные результаты позволили оптимизировать условия получения кристаллических образцов соединений  $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NiCl}_2\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ni}_x\text{Co}_{(1-x)}\text{Cl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{en})_3]\text{Cl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ .

Кристаллические образцы исследованы методами РФА, ДСК/ТГА, определены их спектральные характеристики.

Данные, полученные в результате исследований, позволяют разработать методики выращивания крупных монокристаллов из водных растворов, пригодных для практического применения в оптике.

Работа проведена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН. В работе использовано оборудование ЦКП ИК РАН.

#### *Список литературы*

1. А.Э. Волошин, Е.Б. Руднева и др. Патент на изобретение RU 2417388 от 24.11.2006
2. В.Л. Маноменова, Е.Б. Руднева и др. Ж. Кристаллография, 2005, 50, 937-942.

Б.В. ИВАНОВ<sup>1</sup>, Т.А. АНФИМОВА<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>НИИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия  
<sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

## **СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДИК ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ИССЛЕДОВАНИЮ ГИДРИДООБРАЗУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ**

Хранение водорода в виде гидридов в настоящее время является основным методом обращения с тритием (изотопом водорода) в различных процессах; метод также рассматривается для использования в водородной энергетике и топливном цикле термоядерных установок для хранения всех изотопов водорода. Для исследования гидридообразующих материалов используются различные экспериментальные методы определения сорбционной емкости и других свойств материалов. В настоящее время повсеместно используют метод порционной подачи газа в объем с исследуемым образцом сорбента. Альтернативным методом является непрерывная подача водорода через калиброванную течь с известной проводимостью. Сравнительный анализ двух методов является предметом настоящего доклада.

B.V. IVANOV<sup>1</sup>, T.A. ANFIMOVA<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>National Research Centre Kurchatov Institute, Moscow, Russia  
<sup>2</sup>D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

## **COMPARATIVE ANALYSIS OF EXPERIMENTAL TECHNIQUES FOR THE STUDY OF HYDRID-FORMING MATERIALS**

Hydrogen storage in hydrides is currently the main method for handling tritium (a hydrogen isotope) in various processes; the method is also considered for usage in hydrogen energy and the fuel cycle of thermonuclear plants for storing all hydrogen isotopes. To study hydride-forming materials various experimental methods are used to determine the sorption capacity and other properties of materials. The commonly used method is portioned supply of gas to a sorbent sample. An alternative method is the continuous hydrogen supply through a calibrated leak with known flow rate of hydrogen. Comparative analysis of two method is the subject of this report.

В настоящее время основным способом хранения водорода являются компримирование водорода в различных емкостях (баллонах, газгольдерах, специальных емкостях). Помимо этого, используют способы, которые позволяют хранить водород в жидком состоянии, в адсорбированном виде, в капиллярных структурах, в химически связанном виде и в форме гидридов. Хранение водорода в форме гидридов, имея ряд преимуществ, является достаточно перспективным методом, в настоящий момент он является основным методом обращения с тритием (изотоп водорода) в различных процессах. Также метод рассматривается для использования в водородной энергетике и

топливном цикле термоядерных установок для хранения всех изотопов водорода [1]. Основные применяемые сорбенты для хранения трития (обедненный уран, интерметаллид ZrCo) обладают удовлетворительными свойствами, однако возможность для совершенствования и поиска новых сорбционных материалов с улучшенными свойствами остается [2]. Новые материалы для хранения водорода получают при помощи структурирования и активации поверхности, легирования, добавления частиц катализаторов и др. [3]. Для исследования гидридообразующих материалов применяют различные экспериментальные методы, направленные на определение сорбционной емкости, кинетики взаимодействия с водородом и других свойств материалов.

Доклад посвящен сравнению методик изучения сорбционной емкости гидридообразующих материалов. В работе рассмотрены порционный и непрерывный способы напуска и откачки водорода в экспериментальной установке. На сегодняшний день наиболее широко известен способ порционного подвода газа к образцу сорбента. Альтернативным способом является непрерывная подача водорода через калиброванную течь, поток водорода через которую известен. Таким образом, в работе проанализированы конструкционные особенности экспериментальных установок, а также возможности их применения.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (14.08.2019 №1805).

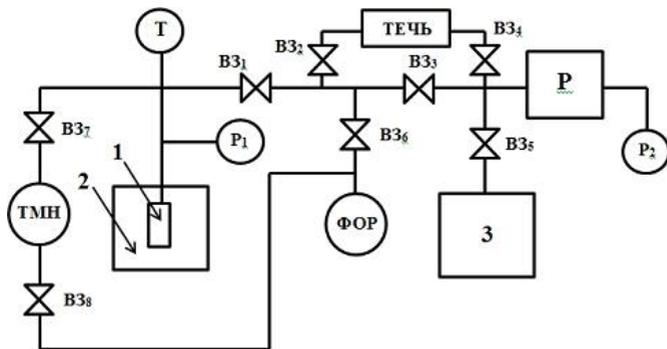


Рис.1.  
Принципиальная схема установки. 1 – образец ИМС; 2 – нагревательный элемент; 3 – баллон с водородом; ТМН – турбомолекулярный насос; ФОР – форвакуумный насос; P1, P2 – датчики давления; T – регулятор температуры; V31-V36 – вентили; ТЕЧЬ – измерительная диафрагма; P – ресивер.

#### Список литературы

1. А.Н. Перевезенцев и др., Физика элементарных частиц и атомного ядра. 19(6) (1988) 1386
2. Hayashi T., Suzuki T., Journal Fusion Engineering and Design V. 83. (2008) P. 1429
3. Fateev, V. N., Alexeeva, et al.. Chemical Problems, 16(4) (2018) 453–483.

М.В. ИЛЬИНА, О.И. ИЛЬИН, А.В. ГУРЬЯНОВ, Н.Н. РУДЫК  
*Южный Федеральный Университет, Таганрог, Россия*

## **ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ РОСТА НА АДГЕЗИЮ ОРИЕНТИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК**

Проведены исследования влияния температуры роста вертикально ориентированных углеродных нанотрубок на силу адгезии. Установлено, что увеличение температуры приводит к нелинейному росту адгезии УНТ, выращенных на подслое Ti, и нелинейному уменьшению адгезии УНТ, выращенных на подслое TiN. Данные зависимости связаны с изменением диаметра УНТ и структуры массива.

M. V. IL'INA, O. I. IL'IN, A. V. GURYANOV, N. N. RUDYK

*Southern Federal University, Taganrog, Russia*

## **INFLUENCE OF GROWTH TEMPERATURE ON ADHESION OF ALIGNED CARBON NANOTUBES**

Investigations are made of the effect of temperature of aligned carbon nanotubes on the adhesion force. It was found that an increase in temperature leads to the appearance of CNT grown on a titanium sublayer, and CNT, growing on a titanium dioxide sublayer. These dependences are associated with a change in the diameter of the CNTs and the structure of the array.

Покрyтия с эффектом “сухого клея” являются перспективным направлением для исследований. Одним из основных материалов для формирования таких покрытий являются углеродные нанотрубки (УНТ) [1]. Основными параметрами, влияющими на величину адгезии, являются ориентация УНТ к подложке и геометрические размеры нанотрубок [2]. При этом метод плазмохимического осаждения из газовой фазы (PECVD) позволяет управлять размерами и ориентацией УНТ. Целью данной работы является исследование зависимости силы адгезии УНТ от температуры роста, на подложках, с различным материалом подслоя.

В качестве исследуемых образцов использовались массивы УНТ, выращенные на Si подложках с подслоями Ti и TiN при температуре роста 630, 645, 660 и 675 °C. Изображения массивов УНТ, полученные с использованием растрового электронного микроскопа (РЭМ), представлены на рисунке 1. Исследования силы адгезии УНТ проводились методом силовой спектроскопии атомно-силового микроскопа с использованием методики, описанной в работе [2]. В качестве зонда использовался коллоидный зонд марки ScanSens с радиусом  $20 \pm 3$  мкм коэффициентом жесткости 0.3 Н/м. Полученные зависимости сил адгезии УНТ от температуры представлены на рисунке 2.

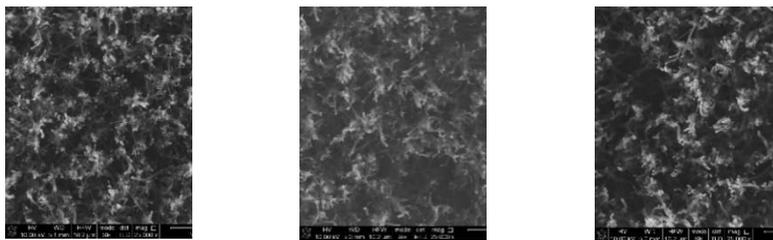


Рис. 1. РЭМ-изображения массивов УНТ, выращенных на TiN подслое при температурах 630, 660 и 675 °С

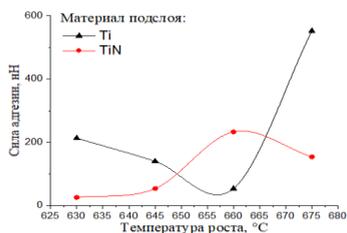


Рис. 2. Зависимость силы адгезии УНТ от температуры роста

Установлено, что увеличение температуры роста оказывает нелинейное влияние на силу адгезии УНТ. Для УНТ, выращенных на подслое Ti, значение силы адгезии при повышении температуры от 630 до 660 °С уменьшалось с 213 до 54 нН, что может быть связано с уменьшением диаметра УНТ от  $160 \pm 50$  до  $120 \pm 35$  нм. При 675 °С значение силы адгезии резко возрастает до 552 нН, что связано с увеличением ветвистости структуры массива УНТ и увеличением диаметра УНТ до  $150 \pm 20$  нм.

Для УНТ, выращенных на подслое TiN, значение силы адгезии с ростом температуры от 630 до 660 °С возрастает от 26 до 233 нН, что связано с увеличением диаметра УНТ от  $70 \pm 20$  до  $130 \pm 35$  нм несмотря на небольшое снижение плотности УНТ с 45 до 38  $\mu\text{м}^{-1}$ . Дальнейшее увеличение температуры приводит к уменьшению адгезии до 154 нН, что вызвано уменьшением диаметра УНТ до 120 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект No.18-32-00652 мол\_a).

#### Список литературы

1. Qu L., Dai L., Stone M., Xia Z. and others// Science 2008. Vol. 322, P. 238.
2. Il'ina M.V., Konshin A.A., Il'in O.I. and others// Journal of Physics: Conference Series 2018. Vol. 55, P. 993, 012025.

З.А. ИСАХАНОВ<sup>1</sup>, Р.М. ЁРКУЛОВ<sup>1</sup>, Ш.А. ТУЛЯГАНОВА<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, Ташкент, Узбекистан.

<sup>2</sup>Ташкентский университет информационных технологий Республики Узбекистан

## ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР СОЗДАНЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ СВОБОДНОЙ ПЛЕНОЧНОЙ СИСТЕМЫ Si/Cu

Методом низкоэнергетической ( $E_0=1-5$  кэВ) имплантации ионов  $O_2^+$ ,  $Ba^+$ ,  $Cu^+$  и  $Co^+$  с последующим отжигом на поверхности свободной нанопленочной системы Si/Cu(100) получены нанофазы и пленки  $SiO_2$  и силицидов металлов. Определены их морфология поверхности, состав, параметры энергетических зон, максимальное значение коэффициента вторичной электронной эмиссии, квантовый выход фотоэлектронов. В частности показано, что ширина запрещенной зоны силицидов металлов составляет 0.3-0.4 эВ, а их удельное сопротивление - 100-500 мкОм·см.

Z.A. ISAKHANOV<sup>1</sup>, R.M. YORQULOV<sup>1</sup>, SH.A. TULYAGANOVA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Ion-Plasma and laser technologies, AS RUz, Tashkent, Uzbekistan,

<sup>2</sup>Tashkent University of Information Technologies of the Republic of Uzbekistan

## STUDYING THE PROPERTIES OF NANOSIZED STRUCTURES CREATED ON THE SURFACE OF A FREE Si/Cu FILM SYSTEM

The low-energy ( $E_0=1-5$  keV) implantation of  $O_2^+$ ,  $Ba^+$ ,  $Cu^+$  and  $Co^+$  ions followed by annealing on the surface of a free Si/Cu (100) nanofilms system yielded nanophases and films of  $SiO_2$  and metal silicides. Their surface morphology, composition, parameters, of energy zones, the maximum value of the secondary electron emission coefficient and the quantum yield of photoelectrons are determined. In particular, it was shown that the band gap of metal silicides is 0.3–0.4 eV, and their resistivity is 100–500  $\mu\text{Om}\cdot\text{cm}$ .

Работа посвящена изучению электронной структуры, эмиссионных, электрофизических и оптических свойств тонких ( $d \leq 30-40$  Å) оксидных пленок и силицидов металлов, сформированных на поверхности свободной пленки Si/Cu при ионной имплантации в сочетании с отжигом. Аморфные пленки  $SiO_2$ , с  $d=20-25$  Å созданы имплантацией ионов  $O_2^+$  в Si/Cu(100) с энергией  $E_0=1$  кэВ с вариацией дозы облучения от  $D=5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> до  $D=6 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup> с последующим прогревом при температуре  $T=700$  К. Увеличение дозы ионов  $O_2^+$  до  $D \approx 8 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup> приводит к полному перекрытию кластеров и в приповерхностной области формируется аморфный слой  $SiO_2$ . Последнее подтверждается установлением на электронограмме вместо серии колец одного диффузного кольца - аморфное «галло».

На рис.1 приведены спектры ХПЭЭ для пленки Si/Cu(100) с наноразмерной оксидной пленкой. Видно, что на спектре Si/Cu(100) обнаруживаются интенсивные пики при энергиях  $\Delta E_1=3.4$ ;  $\Delta E_2=6.7$  и  $\Delta E_4=14$  эВ обусловленные межзонными переходами и пики при  $\Delta E_3=10.4$  ( $\hbar\omega_s$ ),  $\Delta E_5=17$  ( $\hbar\omega_v$ ) и  $\Delta E_6=21$  ( $2\hbar\omega_s$ ) эВ обусловленные плазменными колебаниями. В спектре нанопленки SiO<sub>2</sub> обнаруживаются 2 максимума, межзонных переходов  $\Delta E_1=9,1$ ;  $\Delta E_3=19$  эВ и два максимума плазменных колебаний  $\Delta E_2=15$  ( $\hbar\omega_s$ ) и  $\Delta E_4=23$  ( $\hbar\omega_v$ ) эВ. Отметим, что энергия плазменных колебаний и межзонных переходов в свободной нанопленке SiO<sub>2</sub>/Si отличается от таковых, для толстой пленки SiO<sub>2</sub>. Природа смещения максимумов, обусловленных межзонными электронными переходами, по нашему мнению, связана с деформацией функций электронных состояний при уменьшении толщины пленки SiO<sub>2</sub> и увеличении влияния подложки.

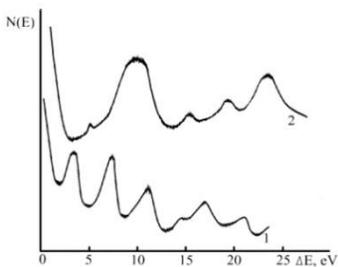


Рис.1. Спектры ХПЭЭ для пленки Si/Cu(100) до (кривая 1) и после формирования пленки SiO<sub>2</sub> (кривая 2).  $E_p=1000$  эВ.

свободной нанопленочной системы Si/Cu. Установлено, что  $E_g$  пленок SiO<sub>2</sub>, полученных на поверхностях тонких и массивных пленок Si отличается примерно два раза.

В случае имплантации ионов металлов после прогрева на поверхность Si в зависимости от дозы облучения образовались нанофазные слои силицидов металлов. Нами получены нанокластерные фазы и пленки ( $d=20-50$  Å) силицидов типа Cu<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>, BaSi<sub>2</sub> и CoSi<sub>2</sub>.

Таким образом после ионной имплантации ионов O<sub>2</sub><sup>+</sup> и Ва<sup>+</sup> и последующего прогрева формируется трехслойная система SiO<sub>2</sub>/Si/Cu и BaSi<sub>2</sub>/Si/Cu. Впервые изучены морфология поверхности, параметры энергетических зон, эмиссионные и оптические свойства наноразмерных фаз и пленок SiO<sub>2</sub>, Cu<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>, BaSi<sub>2</sub> и CoSi<sub>2</sub>, созданных на поверхности

Н. КАНТАЙ<sup>1</sup>, Б.К. РАХАДИЛОВ<sup>2</sup>, Д.Н. КАКИМЖАНОВ<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева, Усть-Каменогорск, Казахстан*

*<sup>2</sup>Восточно-Казахстанский государственный университет им. С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан*

## **ПОЛУЧЕНИЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИРКОНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫМ МЕТОДОМ**

Покрытие порошка  $ZrO_2$  толщиной 500  $\mu m$  и 1100  $\mu m$  было напылено на поверхность стали детонационным методом. Проведена термическая обработка при температурах от 900 до 1100 $^{\circ}C$  в течение 1 часа. Изучено влияние термообработки на покрытие стали, а также структура поперечного сечения, микротвердость и фазовые изменения.

N. KANTAY<sup>1</sup>, B.K. RAKHADILOV<sup>2</sup>, D.N. KAKIMZHANOV<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>D. Serikbayev East Kazakhstan state technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan*

*<sup>2</sup>S. Amanzholov East Kazakhstan state technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan*

## **OBTAINING ZIRCONIUM OXIDE COATING BY DETONATION METHOD**

The coating of  $ZrO_2$  powder with a thickness of 500  $\mu m$  and 1100  $\mu m$  was sprayed onto the surface of the steel by the detonation method. Heat treatment was carried out at temperatures from 900 to 1100  $^{\circ}C$  for 1 hour. The effect of heat treatment on the steel coating, as well as the cross-sectional structure, microhardness, and phase changes were studied.

Термическое напыление является эффективным и недорогим методом нанесения толстых покрытий для изменения свойств поверхности детали. Покрытия широко используются в автомобильных системах, компонентах котлов и оборудовании для производства электроэнергии, химическом технологическом оборудовании, авиационных двигателях, роликах и т.д. [1-2]. Среди коммерчески доступных методов термического напыления покрытий, детонационное распыление (DS) и высокоскоростное напыление оксидного топлива (HVOF) являются лучшим выбором для получения твердых, плотных и износостойких покрытий [3].

Целью работы является получение и изучение адгезионно прочных, низкопористых покрытий на основе оксида циркония детонационным методом.

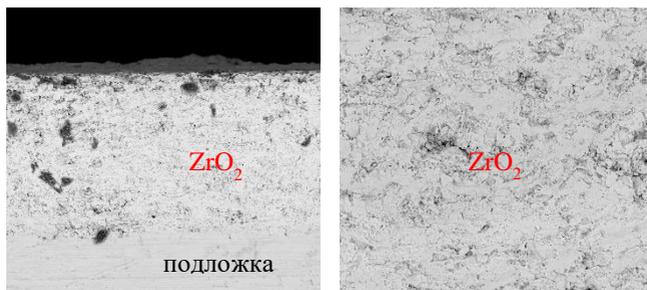


Рисунок 1. Микроструктура поперечного сечения

На снимках поперечного сечения видно, что металл и покрытие перекрываются друг с другом, а покрытие обладает однородной структурой. Также наблюдается низкая пористость структуры покрытия. Проведена термическая обработка образца  $ZrO_2$  (500 $\mu$ m) при 900 °C, 1000 °C и 1100 °C (1 час) в вакууме. Микротвердость стали, покрытой порошком  $ZrO_2$  толщиной 500 и 1100  $\mu$ m, уменьшилась с 8,75 ГПа до 7,10 ГПа. С повышением толщины покрытия микротвердость уменьшается, однако при нагревании образца до 900 °C в течение 1 часа микротвердость достигла максимального значения 13 ГПа, т.е. увеличилась в 1,5 раза по сравнению с покрытием без термической обработки. Под воздействием температуры частицы  $ZrO_2$  растут, объединяются и заполняют поры, что приводит к повышению микротвердости. Это можно наблюдать по изменению интенсивности полос на дифрактограммах, полученных рентгенофазовым анализом.

*Список литературы*

1. Chawla Vikas, Sidhu Buta Singh, Puri D. and Prakash S.; “performance of plasma sprayed Nanostructured and Conventional Coatings”, Journal of the Australian Ceramic Society, Volume 44, Number 2, (2008), 56-62.
2. Lakhwinder Singh, Vikas Chawla, J.S. Grewal “A Review on Detonation Gun Sprayed Coatings”, Journal of Minerals & Materials Characterization & Engineering, Vol. 11, No.3 (2012), 243-265.
3. Goyal Rakesh, Sidhu Buta Singh, Grewal J.S.; “Surface Engineering and Detonation Gun Spray Coating”, International Journal of Engineering Studies, Volume 2, Number 3 (2010), 351-357.

П.Ф. КАРЦЕВ<sup>1</sup>, Д.С. КОРЧАГИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия  
<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВИХРЕВОГО ПИННИНГА В РАМКАХ ТЕОРИИ ГИНЗБУРГА-ЛАНДАУ

Представлен эффективный численный подход для моделирования системы вихрей Абрикосова в сверхпроводнике при помощи решения уравнений Гинзбурга-Ландау со специальной параметризацией. Обсуждается расчёт потенциала пиннинга на отверстии и энергии взаимодействия вихря с искривленной поверхностью. Приводится подробное описание используемого численного алгоритма.

P.F. KARTSEV<sup>1</sup>, D.S. KORCHAGIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*  
<sup>2</sup>*Joint Institute For High Temperatures RAS, Moscow, Russia*

## DETERMINATION OF VORTEX PINNING PARAMETERS IN THE FRAMEWORK OF GINZBURG-LANDAU THEORY

The efficient numerical approach to simulate the system of Abrikosov vortices in the superconductor is presented, using the solution of Ginzburg-Landau equations with a special parametrization. The calculation of pinning potential on the hole and interaction of the vortex with curved surface is discussed. The details of the numerical algorithm used in the study are presented.

Одной из наиболее серьезных проблем, встающих на пути улучшения токонесущих характеристик современных сверхпроводниковых материалов, является движение вихревых токов внутри образца, разрушающее сверхпроводящее состояние. Для решения этой проблемы к настоящему моменту разработаны различные подходы к пиннингу вихрей, наиболее употребительными из которых является использование в качестве точек фиксации различных структурных дефектов сверхпроводникового образца и магнитных частиц [1, 2]. В данной работе приведены результаты численного расчёта энергии пиннинга вихрей Абрикосова в различных геометриях в рамках теории Гинзбурга-Ландау.

С точки зрения реализации решение данной задачи сводится к решению системы нелинейных уравнений в частных производных. При этом получение практически значимой точности расчетов приводит к значительному увеличению объема необходимых вычислений [3-6]. Особенностью данной работы является использование эффективного численного алгоритма, основанного на выделении в общем решении системы уравнений Гинзбурга-

Ландау быстро меняющейся части, обусловленной наличием вихрей. Данная процедура позволяет значительно сократить время проведения расчетов.

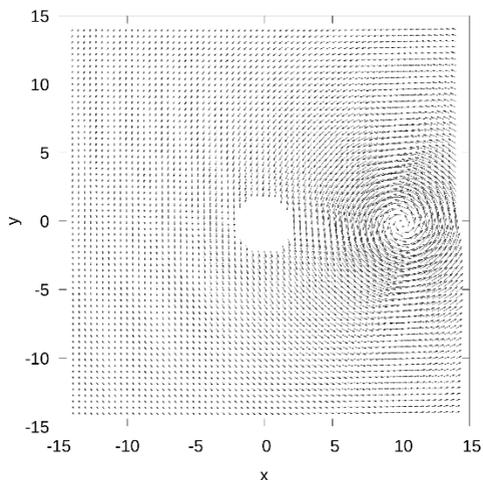


Рис. 1. Геометрия задачи. Вихрь Абрикосова вблизи цилиндрического отверстия. Показан рассчитанный векторный потенциал магнитного поля.

Доклад содержит подробное описание используемого численного алгоритма, а также результаты расчётов для вихревых систем вблизи цилиндрического отверстия [7], как показано на рис. 1, и сравнение с имеющимися результатами [8].

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-02-00278.

#### *Список литературы*

1. V.A. Kashurnikov, A.N. Maksimova and I.A. Rudnev// J. Phys.: Conf. Ser. 507, 022017 (2014)
2. A. Snezhko, T. Prozorov and R. Prozorov // Phys. Rev. B 71, 024527 (2005)
3. M.P. Sørensen, N.F. Pedersen, M. Ögren, Physica C 533, 40 (2017)
4. I.G. de Oliveira // J Supercond Nov Magn 31, 1287 (2018)
5. A. Ardelea *et al.* // Int. J. for Num. Met. Eng. 59(9), 1251 (2004)
6. I. Sadvovskyy *et al.* // J. Comput. Phys. 294, 639 (2015).
7. P.F. Kartsev, D.S. Korchagin // Proceedings of IWOCCL'19, 22 (2019)
8. S.M. Maurer, N.-C. Yeh, and T.A. Tombrello // Phys. Rev. B 54 (21), 15372 (1996)

П.Ф. КАРЦЕВ, И.О. КУЗНЕЦОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **УЧЕТ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КИНЕТИКИ РЕЛАКСАЦИИ СВЕРХПРОВОДНИКА ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ УЛЬТРАКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ**

Рассмотрена кинетика возбужденных состояний в сверхпроводнике при возбуждении ультракоротким лазерным импульсом с учетом электрон-электронного взаимодействия. Проведены оценки времени релаксации, максимальной концентрации квазичастиц и минимальной ширины энергетической щели при различных параметрах лазерного импульса.

P.F. KARTSEV, I.O. KUZNETSOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **TAKING INTO ACCOUNT THE ELECTRON—ELECTRON INTERACTION IN STUDY OF SUPERCONDUCTOR RELAXATION KINETICS EXCITED BY ULTRASHORT LASER PULSE**

The kinetics of excited states in a superconductor excited by ultrashort laser pulse, taking into account the electron-interaction, is studied. Relaxation time, maximal quasiparticle concentration and minimal width of energy gap at various laser pulse parameters, are estimated.

В данной работе рассмотрены особенности распределения неравновесных частиц в сверхпроводнике после воздействия сверхкороткого лазерного импульса. При поглощении оптических квантов сверхпроводником происходит распад куперовских пар, приводящий к появлению элементарных возбуждений – квазичастиц Боголюбова. При высокой интенсивности воздействия число квазичастиц достаточно велико, из-за чего при описании кинетики релаксации системы необходимо учитывать кулоновское электрон-электронное взаимодействие.

Исследование ведется с помощью численного решения квантового уравнения Больцмана (QBE) для концентраций квазичастиц  $n_{k\sigma}$  и акустических фононов  $n_p^{(ph)}$ .

$$\frac{dn_{k\sigma}}{dt} = J_{k\sigma}^{(opt)} + J_{k\sigma}^{(e-ph)} + J_{k\sigma}^{(decay)} + J_{k\sigma}^{(e-e)}$$

$$\frac{dn_p^{(ph)}}{dt} = K_p^{(e-ph)} + K_p^{(decay)}$$

Параметр порядка в теории БКШ удовлетворяет уравнению

$$\Delta = U_0 \sum u_k v_k$$

где  $U_0$  – параметр парного взаимодействия электронов в модели БКШ, а коэффициенты  $u_k, v_k$  даются формулами:

$$u_k^2 = \frac{1}{2} (1 - n_{k\uparrow} - n_{-k\downarrow}) \left( 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right),$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} (1 - n_{k\uparrow} - n_{-k\downarrow}) \left( 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right),$$

$$\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F,$$

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}.$$

При появлении избыточных квазичастиц  $n_{k\uparrow}, n_{-k\downarrow}$  ширина энергетической щели  $\Delta$  подстраивается так, чтобы удовлетворять этому уравнению, и коэффициенты  $u_k, v_k$  пересчитываются. Для расчёта числа куперовских пар используется формула  $n_c = \sum u_k^2 v_k^2$ .

В докладе приведены результаты численного решения квантового уравнения Больцмана. Обсуждается влияние параметров лазерного импульса на характерные времена релаксационных процессов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 17-29-10024.

#### *Список литературы*

1. Anischenko I.V. *et al.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1293. P. 012064
2. Ovchinnikov Yu.N., Kresin V.Z. // Phys. Rev. B 1998. V. 58. № 18. P. 12416.
3. Kartsev P.F. // IWOC'2017, ACM International Conference Proceeding Series 2017. Part F127755. article № 3078185.
4. Kartsev P.F., Kuznetsov I.O. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 936. № 1. P. 012055

О.В. КАШУРНИКОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **АНАЛИЗ EXAFS-СПЕКТРОВ НАНОПОРОШКОВ $Gd_2Hf_2O_7$ МЕТОДОМ ОБРАТНОГО МОНТЕ-КАРЛО**

Методом обратного Монте-Карло проанализированы EXAFS-спектры наносистем  $Gd_2Hf_2O_7$ , полученных при температурах отжига 800 и 1200°C, с предполагаемой структурой флюорита и пирохлора соответственно. Получены характеристики структурного и термального беспорядка в этих системах.

O.V. KASHURNIKOVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

## **REVERSE MONTE-CARLO ANALYSIS OF $Gd_2Hf_2O_7$ NANOPOWDER EXAFS SPECTRA**

The EXAFS spectra of  $Gd_2Hf_2O_7$  nanopowders are modelled by reverse Monte-Carlo method. Spectra synthesized at annealing temperatures 800 и 1200°C were supposed to be of fluorite and pyrochlore structures correspondingly. The features of structure and thermal disorder in these systems are studied.

Задача определения структурной информации по спектрам тонкой структуры рентгеновского поглощения (XAFS-спектрам) затруднена в случаях, связанных со структурным беспорядком, например, в легированных соединениях, таких как флюорит, где катионы в ГЦК-подрешетке распределены случайным образом. В этом случае приходится взвешивать процентное содержание кластеров разного типа, что значительно усложняет стандартную структурную модель и затрудняет определение тонких деталей. Особенно затруднен анализ катионного окружения по сравнению с ближайшим кислородом, кроме того, в этой области увеличен вклад путей многократного рассеяния. Метод обратного Монте-Карло [1] применительно к EXAFS-спектрам, при поддержании связи с оригинальной околорешеточной структурой предназначен как раз для установления меры структурного и термального беспорядка атомов.

Использованы спектры, полученные и исследованные с участием автора в работе [2]. Нанопорошки  $Gd_2Hf_2O_7$  были получены с помощью соосаждения  $Gd(NO_3)_3$  и  $HfOCl_2$  и подвергнуты отжигу при температурах 700-1200°C, при этом получались размеры нанокристаллитов от 6 до 50 нм. Согласно обычному EXAFS-анализу, при температуре 800°C должна была сформироваться чистая структура флюорита, а при 1200°C – пирохлора, также имеет смысл и изучение аморфного прекурсора. В фазе флюорита межатомные расстояния Gd-O и Hf-O различались почти на 0.3 Å, в соответствии с различием ионных радиусов, что

говорит о некотором локальном искажении структуры. Фаза пирохлора, возможно, имеет вид примеси нанокристаллитов меньшего размера[2,3].

EXAFS-спектры изучались с применением программы EvAX [1]. Были получены парные функции распределения атомов в диапазоне до 6 Å. По расщеплению кислородной сферы Gd возможно определить долю фаз пирохлора и флюорита. Стало возможно точнее воспроизвести катионное окружение. Определена мера термального беспорядка различных типов атомов и их смещения из положений равновесия в разных типах окружения. Это позволяет уточнять структурную модель систем типа флюорит-пирохлор и определять долю различных фаз в нанопорошках.

*Список литературы.*

1. J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans // J. Phys.: Condens. Matter 2004. Vol.26, p.055401.
2. В.В. Попов и др. // Физика и химия стекла 2011. Т.37, №5, с.51.
3. В.В. Попов и др. // Журнал неорганической химии 2011. Т.56, №10, с.1617.

Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ, П. ЛОГИНОВ, Е.А. ЛЕВАШОВ  
*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

## **IN-SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПОКРЫТИЯ Zr-Mo-Si-B ПРИ НАГРЕВЕ ДО 1000°C В КОЛОННЕ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО МИКРОСКОПА**

В работе проведено комплексное исследование покрытий, полученных путём магнетронного распыления катода  $ZrB_2$ -20%MoSiB в среде Ar. Особое внимание уделено жаростойкости и термической стабильности структуры покрытий. Проведены эксперименты по in-situ наблюдению фазовых превращений в процессе ступенчатого нагрева тонких фольг из покрытий в колонне просвечивающего электронного микроскопа.

PH.V. KIRYUKHANTSEV-KORNEEV, P. LOGINOV,  
E.A. LEVASHOV

*NUST «MISiS», Moscow, Russia*

## **IN-SITU STUDY OF Zr-Mo-Si-B COATING DURING HEATING UP TO 1000°C IN COLUMN OF TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPE**

In this work, a comprehensive study of coatings obtained by magnetron sputtering of the  $ZrB_2$ -20%MoSiB cathode in the Ar medium was carried out. Special attention is paid to the heat resistance and thermal stability of the coating structure. Experiments on in-situ observation of phase transformations during step-by-step heating of thin foils from coatings in a column of a transmission electron microscope were carried out.

Целью данной работы является исследование структуры, механических свойств, жаростойкости и термической стабильности покрытий Zr-Mo-Si-B, включая in-situ исследования структуры при нагреве в колонне электронного микроскопа.

Покрытия осаждались с использованием метода магнетронного распыления. Керамические функционально-градиентные мишени ( $90MoSi_2$ -10MoB) + 80% $ZrB_2$  с нижним несущим слоем из Mo, диаметром 120 мм и толщиной 10 мм были получены методом горячего прессования. Композиционный порошок для прессования производился путём измельчения продуктов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), выполненного с использованием порошков циркония, молибдена и бора. Распыление мишеней проводилось с помощью вакуумной установки на базе откачивающей системы УВН-2М при следующих условиях: ток 2 А, напряжение 500 В,

атмосфера Ar (99,9995%), азот (99,9995%), и газовые смеси Ar-N<sub>2</sub>, рабочее давление в вакуумной камере 0,1–0,2 Па. В качестве подложек использовались пластины из поликора ПК-100-1 (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Перед нанесением покрытий подложки подвергались очистке в вакууме с использованием ионного источника щелевого (ионы Ar<sup>+</sup>, 2-3 кэВ, 60-80 мА) в течение 20-40 мин.

Исследование структуры и фазового покрытий проводилось с помощью просвечивающего электронного микроскопа JEM-2100 JEOL, оборудованного модулем для нагрева образцов и энерго-дисперсионным спектрометром. При анализе в режиме in-situ проводилась съёмка образцов при нагреве и охлаждении в колонне микроскопа с шагом 200°C в диапазоне температур 20-1000°C. Полученные данные анализировались также в сравнении с результатами исследований в стационарных условиях для термически-обработанных при аналогичных температурах образцов.

Также определялась морфология покрытий с использованием сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-3400N (Япония), оснащённого ЭДС приставкой (Thermo). Химический состав покрытий и их толщина определялись с помощью метода оптической эмиссионной спектроскопии тлеющего разряда (ОЭСТР) на приборе Profiler 2 (Horiba Jobin Yvon, Франция). Рентгеноструктурный анализ выполнялся на дифрактометре D8 Advance (Bruker, Германия) с использованием CuK $\alpha$ -излучения. Исследования методом Рамановской спектроскопии были проведены на приборе LabRam-HR800 (Horiba Jobin Yvon) при использовании лазера с длиной волны 633 нм. Исходные образцы покрытий были подвергнуты продолжительным отжигам при температурах 20-1100°C и кратковременным при 1500°C. Далее для отожженных образцов покрытий были проведены исследования с использованием выше перечисленных методов изучения структуры. Твердость, модуль упругости и упругое восстановление определялись с помощью нанотвердомера Nano Hardness Tester (CSM Instruments, Швейцария), оснащенного индентором Берковича. Для обсчета кривых индентирования использовался метод Оливера и Фарра. Установлено, что разрабатываемые покрытия имеют высокие термическую стабильность структуры и жаростойкость при температурах 1000-1500°C.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного задания 0718-2020-0034.

Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ, А.Д. СЫТЧЕНКО, Е.А. ЛЕВАШОВ  
НИТУ «МИСиС», Москва, Россия

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОКРЫТИЙ Ta-Zr-Si-B-C-N,  
ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ МАГНЕТРОННОМ РАСПЫЛЕНИИ  
МИШЕНИ TaZrSiB В СРЕДЕ Ar, N<sub>2</sub> И C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>**

В работе проведено комплексное исследование покрытий, полученных путём магнетронного распыления катода TaSi<sub>2</sub>-ZrSiB в среде аргона, азота и этилена. Проведено исследование фазового и элементного состава, морфологии и топографии поверхности, твёрдости, модуля упругости, упругого восстановления, коэффициента трения, износостойкости и жаростойкости. Установлено влияние на характеристики получаемого тонкоплёночного материала состава используемых газовых сред.

Ph.V. KIRYUKHANTSEV-KORNEEV, A. SYTCHENKO,  
E.A. LEVASHOV

*NUST «MISiS», Moscow, Russia*

**STRUCTURE AND PROPERTIES OF Ta-Zr-Si-B-N COATINGS  
DEPOSITED BY MAGNETRON SPUTTERING OF TaZrSiB  
TARGET IN Ar, N<sub>2</sub>, AND C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>**

A comprehensive study of coatings obtained by magnetron sputtering of the TaSi<sub>2</sub>-ZrSiB cathode in the medium of argon, nitrogen and ethylene was performed. The phase and element composition, surface morphology and topography, hardness, modulus of elasticity, elastic recovery, coefficient of friction, wear resistance and heat resistance were studied. The influence of the gas media composition on the characteristics of the coatings was established.

Покрyтия были нанесены с помощью метода магнетронного напыления. Распыляемая керамическая мишень TaZrSiB (70,8% Ta, 18,6%Si, 7,4 %Zr, 2,9%B) диаметром 120 мм и толщиной 6 мм была получена по технологии горячего прессования на установке DSP-515 SA («Dr. Fritsch», Германия). В качестве порошков применялись измельчённые продукты взаимодействия порошков Ta, Zr, Si и B в ходе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). В качестве подложек использовались пластины оксида алюминия марки ВК-100-1 (поликор). Подложки перед нанесением покрытия подвергались очистке в изопропиловом спирте на установке УЗДН-2Т с рабочей частотой 22 кГц в течение 5 мин. Перед началом осаждения покрытий также производилась очистка подложек в вакууме с помощью ионного источника щелевого типа (ионы Ag<sup>+</sup>, 2 кэВ) в течение 20 минут. Покрyтия осаждались при следующих условиях: расстояние между подложкой и мишенью 80 мм, остаточное давление 10<sup>-3</sup> Па, рабочее

давление в вакуумной камере 0,1-0,2 Па. В качестве рабочего газа использовался Ar (99,9995%), N<sub>2</sub> (99,999%), и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> (99,95%). Мощность на магнетроне с помощью источника питания Pinnacle+ (Advanced Energy, USA) поддерживались постоянными на уровне 1 кВт, время осаждения составляло 40 минут.

Элементный состав и структуру покрытий изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа S-3400 («Hitachi», Япония) с ЭДС-приставкой Noran-7 Thermo. Рентгенофазовый анализ (РФА) проводили на дифрактометре Phaser Bruker с использованием CuK $\alpha$  монохроматизированного излучения. Механические свойства были определены с помощью прецизионного нанотвердомера Nano-hardness tester (CSM Instruments, Швейцария). Трибологические испытания проводились на машине трения Tribometer (CSM Instruments). Для оценки жаростойкости покрытий проводились их отжиги на воздухе в муфельной печи SNOL 3.3.2/1200 при температурах до 1100 °С. Также проводилось эксперименты по термоциклированию. Отожженные образцы покрытий были исследованы с применением перечисленных выше методов.

Согласно данным РФА, основу нереакционных покрытий составляла фаза TaSi<sub>2</sub> с гексагональной структурой, тогда как образцы, полученные в азоте и этилене, были рентгеноаморфными. Переход к реакционному распылению сопровождался значительным снижением скорости роста покрытий. Наиболее высокие значения твёрдости на уровне 30 ГПа и упругого восстановления на уровне 79% были достигнуты для образцов, осажденных в аргоне. Покрытия Ta-Zr-Si-B-N и Ta-Zr-Si-B-C уступали покрытиям Ta-Zr-Si-B по таким параметрам, как: твёрдость, упругое восстановление, стойкость материала к упругой деформации разрушения и сопротивление пластической деформации. Нереакционные покрытия обладали высокой жаростойкостью при 1000°С, что может быть связано с положительным влиянием образующейся на поверхности покрытий защитной плёнки из стеклофазы и оксида тантала. Введение в состав Ta-Zr-Si-B азота или углерода приводило к значительному снижению жаростойкости, однако добавка азота положительно сказывалась на трибологических свойствах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 19-19-00117.

А.Н. КИРЯКОВ<sup>1</sup>, А.Ф. ЗАЦЕПИН<sup>1</sup>, Т.В. ДЬЯЧКОВА<sup>2</sup>, А.П.  
ТЮТЮННИК<sup>2</sup>, Ю.Г. ЗАЙНУЛИН<sup>2</sup>, А.В. ФОКИН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

## ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ ПРОЗРАЧНЫХ НАНОКЕРАМИК $MgAl_2O_4$ ЛЕГИРОВАННЫХ МАРГАНЦЕМ

Методом закалки под давлением получены прозрачные нанокерамики широкозонного сложного оксида  $MgAl_2O_4$  легированного марганцем. Выполнен комплекс работ по аттестации полученных образцов. Проведена оценка спектроскопических особенностей собственных и примесных дефектов, формирующих оптически-активные центры. Обнаружен эффект стабилизации трехвалентного марганца в нанокерамике алюмомагниевого шпинели.

A.N. KIRYAKOV<sup>1</sup>, A.F. ZATSEPIN<sup>1</sup>, T.V. DYACHKOVA<sup>2</sup>,  
A.P. TUTUNNIK<sup>2</sup>, J.G. ZAINULIN<sup>2</sup>, A.V. FOKIN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>Institute of solid state chemistry UB RAS, Yekaterinburg, Russia

## POINT DEFECTS OF $MgAl_2O_4$ TRANSPARENT NANOCERAMICS DOPED WITH MANGANESE

By pressure quenching, transparent nanoceramics of a wide-gap complex  $MgAl_2O_4$  oxide doped with manganese were obtained. A set of work was carried out to certify the samples obtained. The spectroscopic features of intrinsic and impurity defects forming optically active centers are estimated. The stabilization effect of trivalent manganese in aluminum magnesium spinel nanoceramics was observed.

Функциональные оксидные керамики активно исследуются как материалы устройств фотоники и оптоэлектроники. Особое место занимают керамики на основе алюмомагниевого шпинели ввиду их высокой радиационной, механической, а также термической и химической стойкости. Такие керамики могут быть использованы в качестве окон ядерных реакторов, куполов ракет самонаведения, сред твердотельных лазеров. Не смотря на значительное количество работ по исследованию электронно-оптических свойств монокристаллической модификации шпинели информация о влиянии наносостояния на энергетическую структуру собственных и примесных дефектов практически отсутствует. Цель настоящей работы заключалась в изучении электронно-оптических свойств прозрачных нанокерамик  $MgAl_2O_4$  легированных марганцем.

В качестве исходного материала для прессования использован нанопорошок  $Mg_{(1-x)}Mn_xAl_2O_4$  ( $x = 0.05, 0.0005$  Мол%). Прозрачные нанокерамики получены в тороидальной камере при давлениях от 2 до

9 ГПа, температуре синтеза 600 °С и времени выдержки 10 мин. Оптическая спектроскопия (возбуждение, люминесценция, кинетика затухания) сняты на спектрофлюорометре Horiba Fluorolog 3. Спектры электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) записаны с помощью спектрометра Bruker EMX plus X-band.

По результатам рентгеновского фазового анализа определены области когерентного рассеяния, величина микронапряжений, а также постоянная решетки керамик, полученных при разных давлениях и концентрации примеси марганца.

Установлено, что в результате синтеза прозрачных нанокерамик примесь марганца локализуется в двух структурно неэквивалентных октаэдрически- и тетраэдрически- координированных позициях, с характерной красной и зеленой фотолюминесценцией соответственно. Помимо этого, обнаружено, что октаэдрические и тетраэдрические ионы марганца характеризуются не связанными абсорбционно-релаксационными каналами. Таким образом, показано, что заселенностью указанных позиций примесного иона марганца можно управлять, регулируя величину приложенное давления.

ЭПР спектроскопия нанокерамик, синтезированных при 2 и 4 ГПа, свидетельствует о присутствии сигнала от примесных  $Mn^{2+}$  центров. Увеличение давления синтеза ведет к падению отмеченного сигнала в ЭПР спектре нанокерамик. На основании наблюдаемых закономерностей между ЭПР и люминесцентной спектроскопией сделан вывод о формировании красной люминесценции преимущественно за счет октаэдрически-координированного  $Mn^{3+}$ .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Свердловской области в рамках научного проекта № 20-42-660012, а также проекта «Новые функциональные материалы для перспективных технологий» № АААА-А19-119031890025-9.

Ю.В. КИСЛИНСКИЙ<sup>1</sup>, К.И. КОНСТАНТИНЯН<sup>1</sup>, А.М. ПЕТРЖИК<sup>1</sup>, А.В. ЗАЙЦЕВ<sup>1</sup>, А.В. ШАДРИН<sup>1,2</sup>, Г.А. ОВСЯННИКОВ<sup>1</sup>, G. CRISTIANI<sup>3</sup>, G. LOGVENOV<sup>3</sup>

<sup>1</sup> ИРЭ имени В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> Московский физико-технический Институт, Долгопрудный, Россия

<sup>3</sup> Институт Макса Планка Физики Твердого Тела, Штутгарт, Германия

## ДЖОЗЕФСОНОВСКИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С ПРОСЛОЙКОЙ ИЗ МАТЕРИАЛА С СИЛЬНЫМ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Экспериментально обнаружен дальнедействующий эффект близости и нетривиальная ток-фазовая зависимость сверхпроводящего тока в джозефсоновских гетероструктурах Nb/Au/Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>/YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> с барьерной прослойкой толщиной  $d=7$  нм из материала Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> с высокой энергией спин-орбитального взаимодействия  $E_{SO}=0.4$  эВ. На гетероструктурах с  $d=5$  нм обнаружены резонансные ступени Фиске при напряжениях смещения  $V$ , асимметричных относительно  $V=0$ .

YU.V. KISLINSKI<sup>1</sup>, K.Y. CONSTANTINIAN<sup>1</sup>,  
A.M. PETRZHİK<sup>1</sup>, A.V. ZAITSEV<sup>1</sup>, A.V. SHADRIN<sup>1,2</sup>,  
G.A. OVSYANNIKOV<sup>1</sup>, G. CRISTIANI<sup>3</sup>, G. LOGVENOV<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Kotel'nikov IRE RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

<sup>3</sup> Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany

## JOSEPHSON HETEROSTRUCTURES WITH AN INTERLAYER WITH STRONG SPIN-ORBIT INTERACTION

A long-range proximity effect and the unusual current-phase relation superconducting current were experimentally observed in Nb/Au/Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>/YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> Josephson heterostructures with a barrier interlayer with thickness  $d=7$  nm made of Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>, material with spin-orbit interaction energy  $E_{SO}=0.4$  eV. For heterostructures with  $d=5$  nm Fiske resonance steps appeared at voltages  $V$  with asymmetric positions relative  $V=0$ .

Многослойные сверхпроводниковые структуры с прослойкой, обладающей сильным спин-орбитальным взаимодействием (СОВ) привлекают в последнее время повышенный интерес. Нами были изготовлены и экспериментально исследованы Nb/Au/Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>/YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> гетероструктуры (ГС) с размерами от 10×10 до 50×50 мкм<sup>2</sup> (5 на одном чипе) с толщиной слоя Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>  $d= 5$  или 7 нм. На рис.1 схематически показана ГС и контакты для измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ). В результате проведенных исследований был экспериментально обнаружен сверхпроводящий ток. ГС демонстрировали пик

проводимости при малых напряжениях (ZBCP – zero bias conductance peak), что указывает на возникновение состояний с малой энергией на границе  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4/\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ .

Характер изменения проводимости  $G(V)$  в интервале  $V > 20$  мВ отличался от  $G(V)$  при напряжениях  $V < 6$  мВ. В области высоких напряжений происходит рост проводимости, что присуще туннельным переходам. В области малых напряжений наблюдается пик проводимости  $G$  при  $V=0$  мВ, что присуще уже S/N контактам. Модель транспорта носителей которая объясняет эффект Джозефсона в гетероструктурах, изготовленных по методике [1], учитывающая свойства  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  [2] показана на рис. 1.

При воздействии на ГС с  $d=7$  нм магнитным полем  $H$  в диапазоне до  $2 \text{ Э}$  на зависимости критического тока от магнитного поля  $I_c(H)$  наблюдался зауженный (примерно в 1.5 раза) центральный пик по сравнению с теоретическим, ожидаемым из фраунгоферовой зависимости, рассчитанной для джозефсоновского туннельного перехода с аналогичной геометрией. На ГС с  $d=5$  нм были обнаружены резонансные ступени тока при напряжениях смещения  $V$ , асимметрично расположенных по полярности относительно  $V=0$ . В отличие от эквидистантных ступеней Фиске, интервалы напряжения между ступенями не совпадали, но сохраняли свои позиции по  $V$  при изменении магнитного поля.

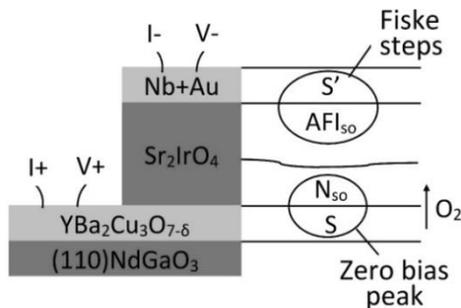


Рис. 1. Модель транспорта носителей и схема измерений ВАХ.

Работа частично поддержана проектом РФФИ 19-07-00274.

*Список литературы*

1. A. M. Petrzhhik, K. Y. Constantinian, G.A. Ovsyannikov et al.// Phys. Rev. B 2019. Vol. 100, 024501.
2. G. Cao, and P. Schlottmann // Rep. Progress in Phys. 2018. Vol. 81, 042502.

В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, Т.А. ЗУБОВА

*Южный федеральный университет, Таганрог, Россия*

## **ЭЛЕМЕНТЫ ГАЗОВОЙ НАНОСЕНСОРИКИ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ**

Рассмотрено применение наносистемы состоящей из массива наноразмерных вискерсов никеля с нанесенным на них углеродным слоем. Определено, что разработанная структура обладает теми же параметрами, что и углеродные нанотрубки с точки зрения чувствительности. Был проведен анализ данной чувствительности, определены соответствующие значения.

V.S. KLIMIN, A.A. REZVAN, T.A. ZUBOVA

*Southern federal university, Taganrog, Russia*

## **ELEMETS OF GAS NANOSENSORIC BASED CARBON NANOMATERIALS**

The application of a nanosystem consisting of an array of nanoscale nickel whiskers with a carbon layer deposited on them is considered. It was determined that the developed structure has the same parameters as carbon nanotubes in terms of sensitivity. An analysis of this sensitivity was carried out, the corresponding values were determined.

Существующие технологии предполагают использование углеродных нанотрубок, формирование данных структур характеризуется несколькими этапами: нанесение каталитических центров, активации, роста и ряда других. Данные этапы направлены на получение массива углеродных наноструктур с высокой степенью вертикальности для лучшего взаимодействия с исследуемым веществом [1]. Однако, при соблюдении данного подхода затрачивается большое количество материала и времени. Преимуществами разрабатываемой технологии являются относительная простота технологии формирования за счет использования стандартных операций микро- и нанoeлектроники; малые габаритные размеры, экологичность и низкая себестоимость устройства за счет применения современных наноматериалов; низкий порог чувствительности за счет использования процесса ионизации; способность интегрироваться в современные системы контроля и мониторинга окружающей и рабочей среды [2].

Экспериментальная модель представляет собой небольшую подложку, на которой измерительные электроды и чувствительный элемент расположены на противоположных сторонах подложки. Для формирования газового сенсора в качестве подложки использовался Si с кристаллографической структурой (100) [3]. Напыление пленки материала слоя Ni производилось на установке AUTO

500, методом магнетронного распыления. При этом производится параллельное формирование верхнего контакта. Формирование боковой изоляции и каркаса сенсора производилось обратной фотолитографией. В качестве диэлектрика наносился слой  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Осаждение проводилось в установке STE ICPd 47 плазмохимическим методом. Далее производится создание области формирования массива вертикально ориентированных никелевых вискерсов с применением позитивного плазмостойкого резиста SPR220-1,5 и плазмохимического травления через полученную маску. Для изготовления основной части чувствительной ячейки, которой является углеродная наноструктура, применяется метод плазмохимического осаждения из газовой фазы. Углеродная наноструктура была сформирована путем плазменного химического осаждения из паровой фазы. После этого над чувствительным слоем формировались электрические контакты, которые подключались к устройству обработки сигналов.

В результате было установлено, что изготовленная модель газочувствительной ячейки на основе углеродной наносистемы, чувствительна к молекулам акцепторного газа  $\text{NO}_2$  и молекулам донора газа  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ , парам  $\text{H}_2\text{O}$  с различной степенью зависимости от концентрации.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации № МК-3512.2019.8. Результаты получены с использованием оборудования Научно-образовательного центра и Центра коллективного пользования «Нанотехнологии» Южного федерального университета.

*Список литературы*

1. Modi, A., Koratkar, N., Lass, E., Wei, B., Ajayan, P.M. (2003) Nature, 424 (6945), pp. 171-174.
2. Jitschin, W., Ludwig, S. (2004) Vacuum, 75 (2), pp. 169-176.
3. Rezvan A.A., Klimin V.S. Investigation of plasma enhanced chemical vapor deposition as the method of obtaining graphene films // Physics and mechanics of new materials and their applications (PHENMA 2017) Jabalpur, India. 2017. P. 198

В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, И.Н. КОЦ, О.А. АГЕЕВ  
*Южный федеральный университет, Таганрог, Россия*

## **НАНОРАЗМЕРНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ ЭМИССИОННЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ SiC**

Рассмотрено использование комбинации методов фокусированных ионных пучков и плазмохимического атомного слоевого травления для получения функциональных элементов автоэмиссионных элементов на основе наноразмерного углеродного слоя на поверхности SiC. Реализация технологических операций по профилированию наноразмерного карбида осуществлялась с использованием фокусированных ионных пучков и сканирующего электронного микроскопа Nova NanoLab 600. Проведена оценка параметров сформированных элементов.

V.S. KLIMIN, A.A. REZVAN, I.N. KOTS, O.A. AGEEV

*Southern federal university, Taganrog, Russia*

## **NANOSIZED CARBON EMISSION STRUCTURES BASED ON SiC**

The use of a combination of methods of focused ion beams and plasma-chemical atomic layer etching to obtain functional elements of field emission elements based on a nanoscale carbon layer on the surface of SiC is considered. The technological operations for profiling nanosized carbide were carried out using focused ion beams and a Nova NanoLab 600 scanning electron microscope. The parameters of the formed elements were evaluated.

Карбид кремния SiC является перспективным материалом силовой микро- и наноэлектроники [1-3]. Основная проблема формирования функциональных элементов на основе SiC является низкая производительность существующих технологий и методов обработки, из-за чего получаемые наноразмерные углеродные структуры на поверхности обладают низким качеством по отношению к геометрическим, электрофизическим и электрическим параметрам аналогичных структур с применением методики осаждения [4]. В связи с чем, данная экспериментальная работа направлена на рассмотрение использования комбинации методов фокусированных ионных пучков и плазмохимического травления для получения полевых эмиссионных структур на основе наноразмерного углеродного слоя на поверхности SiC.

Серия экспериментов проводилась на пластинах SiC, предварительно прошедшего химическую очистку. Данные пластины помещали в вакуумную камеру модуля фокусирующих ионных пучков и ориентировали так, чтобы поток ускоренных ионов попадал на подложку в направлении нормали. Благодаря этому процессу на поверхности исследуемых образцов был сформирован массив из элементов, представляющих собой заостренные катоды.

Наноразмерный углеродный слой был получен методом плазмохимического атомного слоевого травления.  $\text{SF}_6$  использовался в качестве фторсодержащего газа, благодаря чему была получена возможность травления приповерхностного слоя SiC. В то же время их кристаллическая решетка удаляла только Si и образовывала тонкий углеродный слой на поверхности образцов.

Для проведения контроля параметров получаемых структур осуществлялся контроль топологии поверхности на каждой итерации при помощи метода сканирующей электронной микроскопии.

По окончании экспериментальной серии была проведена оценка ряда параметров полученных структур. Тем самым было определено, что геометрия массива соответствует заданным параметрам и были получены структуры с глубиной 900 нм и минимальным размером структуры 280 нм. Кроме этого было показано, что эти структуры имеют одинаковые электрические параметры углеродных нанотрубок, однако полученная технология позволяет формировать эмиссионные структуры при более низких температурах и более коротких временах подготовки.

Эта технология может применяться для формирования современных вакуумных микроэлектронных устройств, а также для формирования датчиков давления и газа.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации № МК-3512.2019.8. Результаты получены с использованием оборудования Научно-образовательного центра и Центра коллективного пользования «Нанотехнологии» Южного федерального университета.

#### *Список литературы*

1. Murdick D A, Wadley H N G and Zhou X W 2007 Phys. Rev. B 75 125318
2. Amrani A, Djafari Rouhani M and Mraoufel A 2011 Appl. Nanosci. 1 59
3. Kley A, Ruggerone P and Scheffler M 1997 Phys. Rev. Lett. 79 5278
4. Резван А.А., Климин В.С. Исследование получения графеновых плёнок методом плазменного ХОГФ // Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика: тезисы докладов Всероссийской конференции. Саратов, 2017. С. 216.

В.С. КЛИМИН, А.А. РЕЗВАН, В.В. ПРОКОФЬЕВА, Ю.В. МОРОЗОВА,  
О.А. АГЕЕВ

*Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения ЮФУ, Таганрог, Россия*

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ АТОМНО-СЛОЕВОГО ТРАВЛЕНИЯ И ФОКУСИРОВАННЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ**

Проведены экспериментальные исследования по формированию элементов устройств силовой микроэлектроники и наносенсорики на основе комбинации последовательности методов фокусированных ионных пучков и атомно-слоевого травления. Формировался массив наноразмерных вертикально ориентированных вискерсов, состоящих из сочетания SiC и тонкой пленки углерода. Получено, что сформированная ячейка при изменении электрических параметров цепи, когда напряжение увеличивается от 5 до 20 В, ток увеличивается от  $0,15 \pm 0,03$  нА до  $6,3 \pm 0,4$  нА, а когда электрическое поле увеличивается от 60 до 180 МВ/см, плотность тока увеличивается с  $96,32 \pm 8,81$  А/см.

V.S. KLIMIN, A.A. REZVAN, V.V. PROKOFIEVA,  
Y.V. MOROZOVA, O.A. AGEEV

*Institute of Nanotechnology, Electronics and Equipment Engineering of SFEDU,  
Taganrog, Russia*

## **USE OF ATOMIC-LAYER ETCHING METHODS AND FOCUSED ION BEAMS FOR THE FORMATION OF FUNCTIONAL ELEMENTS OF MICROELECTRONICS DEVICES**

Experimental studies have been carried out on the formation of elements of power microelectronics and nanosensorics devices based on a combination of a sequence of methods of focused ion beams and atomic layer etching. An array of nanoscale vertically oriented whiskers was formed, consisting of a combination of SiC and a thin carbon film. It was found that the formed cell when the electrical parameters of the circuit change, when the voltage increases from 5 to 20 V, the current increases from  $0.15 \pm 0.03$  nA to  $6.3 \pm 0.4$  nA, and when the electric field increases from 60 to 180 MV/cm, the current density increases from  $96.32 \pm 8.81$  A/cm.

С развитием науки и техники, каждым годом идёт усовершенствование существующих технологических режимов производство устройств микро- и нанoeлектроники, что неизбежно ведёт к снижению размеров структурных элементов [1-4]. Однако, данное уменьшение создаёт ряд требований к применяемым методам и материалам в производственном цикле. В связи с чем актуален поиск и усовершенствование новых способов изготовления. Так, в данной работе представлено использование комбинации методов

фокусированных ионных пучков и атомно-слоевого травления для формирования функциональных элементов устройств микроэлектроники.

Предлагаемая технология представлена на примере формирования автоэмиссионной ячейки и заключается в следующем. На начальном этапе фокусированным ионным пучком на поверхности SiC формируется массив в виде остроконечных вертикально ориентированных вискеров. Затем с помощью атомно-слоевого травления, удаляются верхние дефектные слои, для более качественного формирования слоя графена. Углеродный наноразмерный слой формируется методом травления атомного слоя во фторидной плазме. В качестве фторсодержащего газа используется гексофторид серы, благодаря чему удается травить приповерхностный слой SiC. В то же время из их кристаллической решетки удаляется только Si и формируется тонкий углеродный слой на поверхности образцов.

По результатам экспериментальной сессии были сформированы структуры с высотой 900 нм и минимальным размером структуры 280 нм.

При исследовании характеристик эмиссионной ячейки было показано, что использование углеродных наноструктур в качестве активного элемента эмиссионной ячейки позволяет увеличить автоэмиссионный ток и плотность тока. Получено, что сформированная ячейка при изменении электрических параметров цепи, когда напряжение увеличивается от 5 до 20 В, ток увеличивается от  $0,15 \pm 0,03$  нА до  $6,3 \pm 0,4$  нА, а когда электрическое поле увеличивается от 60 до 180 МВ/см, плотность тока увеличивается с  $96,32 \pm 8,81$  А/с.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации № МК-3512.2019.8. Результаты получены с использованием оборудования Научно-образовательного центра и Центра коллективного пользования «Нанотехнологии» Южного федерального университета.

#### *Список литературы*

1. Murdick D A, Wadley H N G and Zhou X W 2007 Phys. Rev. B 75 125318
2. Amrani A, Djafari Rouhani M and Mraoufel A 2011 Appl. Nanosci. 1 59
3. Kley A, Ruggerone P and Scheffler M 1997 Phys. Rev. Lett. 79 5278
4. Резван А.А., Климин В.С. Исследование получения графеновых плёнок методом плазменного ХОГФ // Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика: тезисы докладов Всероссийской конференции. Саратов, 2017. С. 216.

В.А. КОМОРНИКОВ, И.С. ТИМАКОВ, О.Б. ЗАЙНУЛЛИН,  
В.В. ГРЕБЕНЕВ, И.П. МАКАРОВА, Е.В. СЕЛЕЗНЕВА  
*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ВОДНО - СОЛЕВЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОТОНООБМЕННЫХ КОМПОЗИТНЫХ МЕМБРАН**

Представлены результаты исследования фазовых равновесий в водно-солевых многокомпонентных системах  $K_2SO_4-(NH_4)_2SO_4-H_2SO_4-H_2O$  и  $CsHSO_4-CsH_2PO_4-NH_4H_2PO_4-H_2O$ . На примере цезиевых кристаллов-суперпротононов продемонстрированы результаты получения композитных протонобменных мембран с применением алюмофосфатного армирующего компонента, пригодных для использования в водородно-воздушных топливных элементах.

V.A. KOMORNIKOV, I.S. TIMAKOV, O.B. ZAINULLIN,  
V.V. GREBENEV, I.P. MAKAROVA, E.V. SELEZNEVA

*FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*

## **RESEARCH OF PHASE EQUILIBRIUM IN WATER - SALT SYSTEMS FOR PRODUCING PROTONEXCHANGE COMPOSITE MEMBRANES**

The results of investigation of phase equilibria in  $K_2SO_4-(NH_4)_2SO_4-H_2SO_4-H_2O$  and  $CsHSO_4-CsH_2PO_4-NH_4H_2PO_4-H_2O$  systems are presented. Using cesium superprotonics as an example, the results of the preparation of composite proton-exchange membranes using an aluminophosphate reinforcing component suitable for use in hydrogen-air fuel cells are demonstrated.

Перспективными для разработки топливных элементов на водороде (водородная энергетика) материалами являются соединения семейства с общей формулой  $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$  ( $M=K, Rb, Cs, NH_4$ ;  $XO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4$ ). Одним из уникальных свойств кристаллов этого семейства, названного суперпротононами, является аномально высокая протонная проводимость при относительно невысокой температуре, проявляющаяся в следствие фазового перехода. При этом суперпротонная проводимость в них связана только со структурными особенностями данных соединений и не зависит от влажности, дефектов реальной структуры или влияния легирующих добавок.

Технологически важным является вопрос о получении и исследовании новых кристаллов, структурной обусловленности их уникальных свойств, возможности расширения температурного диапазона существования суперпротонной фазы.

Для получения новых соединений семейства  $M_mH_n(XO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$  были изучены фазовые равновесия в водно-солевых многокомпонентных системах

$K_2SO_4-(NH_4)_2SO_4-H_2SO_4-H_2O$  и  $CsHSO_4-CsH_2PO_4-NH_4H_2PO_4-H_2O$ . Были определены области кристаллизации и условия воспроизводимого получения ряда кристаллов:  $(K,NH_4)_3H(SO_4)_2$ ,  $(K,NH_4)_9H_7(SO_4)_8 \cdot 0.5H_2O$ ,  $(K,NH_4)HSO_4$ , и впервые получены соединения  $NH_4Cs_3(HSO_4)_3(H_2PO_4)$ ,  $NH_4Cs(HSO_4)(H_2PO_4)$  и твердые растворы на основе этих фаз.

На примере соединений этого же класса кристаллов-суперпротонов составов  $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$  и  $Cs_6(HSO_4)_3(H_2PO_4)_4$  была отработана методика препаративного синтеза композитных материалов с использованием алюмофосфатного армирующего компонента.

Для проведения испытаний функциональных возможностей синтезированных композитных материалов была спроектирована и создана оригинальная водородно-воздушная топливная ячейка. Проведенные испытания выявили принципиальную применимость как самих композиционных материалов так и методики их получения для водородной энергетики.

Работа выполнена при поддержке Гранта 18-32-20050. Характеризация физико-химических свойств кристаллов проведена при Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН. В работе использовано оборудование ЦКП ИК РАН.

П.В. КОНАРЕВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

## **МЕТОДЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ В БЕЛКОВЫХ И ЛИПИДНЫХ СМЕСЯХ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ**

Представлены алгоритмы моделирования многокомпонентных систем по данным малоуглового рентгеновского рассеяния. Они позволяют оценивать объемные доли компонент, средние размеры и ширину распределения частиц в приближении простых геометрических тел, восстанавливать форму промежуточных компонент в процессе образования фибрилл, определять мульти-ламеллярную организацию липидных смесей и электронную плотность липидного бислоя, разделять профили рассеяния отдельных компонент в белковых смесях в условиях малоуглового эксперимента с онлайн использованием хроматографической колонки. Возможности данных алгоритмов проиллюстрированы на ряде теоретических и экспериментальных данных.

P.V. KONAREV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>NRC "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

## **APPROACHES FOR RESTORING INDIVIDUAL COMPONENTS IN PROTEIN AND LIPID MIXTURES USING SMALL-ANGLE X-RAY SCATTERING DATA**

Algorithms for modeling multicomponent systems using small-angle X-ray scattering (SAXS) data are presented. They enable to estimate the volume fractions of the components, the average size and width of the particle distribution in the approximation of simple geometric bodies, restore the shape of the intermediate components during the formation of fibrils, determine the multi-lamellar organization of lipid mixtures and the electron density of the lipid bilayer, and separate the scattering profiles of individual components in protein mixtures using SAXS setup with online size-exclusion chromatography. The capabilities of these algorithms are illustrated by a number of theoretical and experimental data sets.

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) является эффективным структурным методом исследования нанобъектов. В частности, метод МУРР позволяет изучать структуру биологических макромолекул в растворе в их естественных физиологических условиях и исследовать реакцию системы на изменения условий среды, такие как температура, рН, концентрация белка, состав буферного раствора, и другие.

Если для анализа монодисперсных систем, содержащих ансамбль идентичных друг другу частиц, разработаны эффективные *ab initio* методы

восстановления формы частиц по МУРР данным с разрешением 1-2 нм, то многокомпонентные системы, состоящие из частиц разного типа и размера, требуют более сложного моделирования и их анализ остается нетривиальной задачей.

В последнее время был развит ряд новых алгоритмов, позволивших получить ценную структурную информацию о таких системах. Среди них особого внимания заслуживают следующие подходы: нахождение объемных долей компонент в белковых смесях и параметризация компонент в виде простых геометрических тел (сфер, цилиндров, эллипсоидов), имеющих полидисперсность по размерам и взаимодействующих между собой [1]; восстановление формы неизвестной промежуточной компоненты при эволюции системы [2]; оценка структурных параметров липидных смесей, таких как распределение электронной плотности в липидном бислое, размеры и полидисперсность липидных везикул, а также их мультисамельная организация [3]; разделение профилей рассеяния отдельных компонент белковых смесей в условиях МУРР эксперимента с онлайн хроматографией.

Указанные выше методы моделирования многокомпонентных систем позволили количественно оценить олигомерный состав белковых смесей [1], определить форму промежуточной компоненты в процессе образования фибрилл [2] и восстановить структурные параметры липидных смесей [3].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант КОМФИ № 17-00-00487).

#### *Список литературы*

1. Konarev P.V., Volkov V.V., Sokolova A.V. and others// J. Appl. Cryst. 2003, Vol. 36, P. 1277-1282.
2. Konarev P.V. and D.I. Svergun// IUCr J. 2018, Vol. 5, P. 402-409.
3. Konarev P.V., Petoukhov M.V., Dadinova L.A. and others// J. Appl. Cryst. 2020, Vol. 53, <https://doi.org/10.1107/S1600576719015656>

А.Е. КРЮКОВА<sup>1,2</sup>, П.В. КОНАРЕВ<sup>1,2</sup>, В.В. ВОЛКОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

## **СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РЕШЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ РЯДОМ ИТЕРАТИВНЫХ АЛГОРИТМОВ ПРИ АНАЛИЗЕ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ОТ РАСТВОРА КРЕМНЕЗОЛЯ**

Приведено сравнение границ устойчивости восстановления решения задачи определения объемных распределений частиц по размерам на примере данных малоуглового рассеяния от раствора кремнезоля для ряда итеративных алгоритмов с использованием градиентного метода минимизации, метода симулированного отжига, их комбинации, а также метода Нелдера-Мида. В результате сравнения методы выстроены в порядке возрастания их эффективности.

A.E. KRYUKOVA<sup>1,2</sup>, P.V. KONAREV<sup>1,2</sup>, V.V. VOLKOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>NRC "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

## **COMPARISON OF SOLUTION EFFICIENCY OBTAINED BY A NUMBER OF ITERATIVE ALGORITHMS FOR SMALL-ANGLE SCATTERING DATA FROM A SILICASOL SOLUTION**

The comparison of the stability ranges for the solutions of the volume size particle distributions derived from the small-angle scattering data of a silicasol solution is given for a number of iterative algorithms based on the gradient minimization method, the simulated annealing method, their combination, and the Nelder-Mead method. As a result of the comparison, these methods are arranged in an increasing order of their efficiency.

Метод малоуглового рассеяния (МУР) – один из наиболее информативных структурных методов для анализа полидисперсных систем в наноразмерном диапазоне. Для исследования такого рода объектов был выбран раствор кремнезоля [1, 2].

Ранее нами рассматривалась возможность восстановления функции распределения частиц по размерам для данных МУР от кремнезоля с помощью программы MIXTURE [3] (из пакета программ ATSAS [4]), в алгоритме которой реализованы следующие методы минимизации: метод переменной метрики в варианте Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно (BFGS) с простыми ограничениями на параметры [5], метод симулированного отжига (SA) [6], а также комбинация этих методов. Помимо этого исследовались возможности алгоритма с применением симплекс метода Нелдера-Мида (NM). В результате

анализа были построены контурные графики устойчивости (рис.1) при варьировании радиусов обеих сферических частиц раствора кремнезоля ( $R_1, R_2$ ).

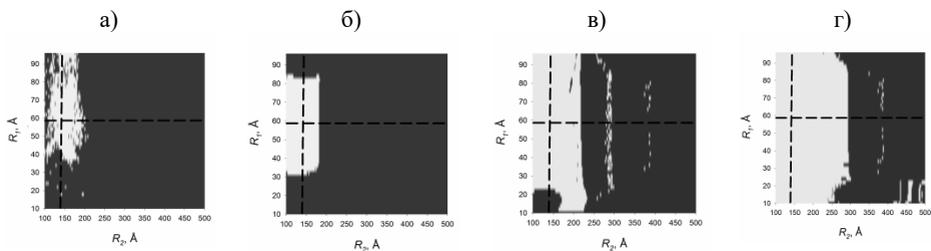


Рис.1. Контурные графики устойчивости восстановления решения в зависимости от стартовых значений радиусов сферических частиц кремнезоля ( $R_1, R_2$ ). Пересечение пунктирных линий соответствует точным (заданным) значениям параметров. Темные области – “неудача” (отличие от заданных параметров более чем на 5%), светлые области – “успешное” нахождение решения (найденные параметры – в пределах 5% от заданных). Используемые алгоритмы: (а) NM, (б) SA, (в) BFGS, (г) BFGS+SA.

Таким образом, можно выстроить ряд методов в порядке возрастания их эффективности восстановления решений: NM, SA, BFGS, комбинация BFGS и SA. Установлено, что самые широкие границы устойчивости у комбинации методов BFGS и SA. Это предположение в дальнейшем будет проверено при варьировании стартовых значений других параметров (полидисперсностей и объемных долей компонентов раствора кремнезоля).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, а также при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-32-90190 Аспиранты).

#### Список литературы

1. Asadchikov V.E., Volkov V.V. and others// JETP Letters. 2011. Vol. 94, №7, P. 585-587.
2. Tikhonov A.M., Asadchikov V.E., Volkov Yu.O. and others// JETP Letters. 2016, Vol. 104, №12, P. 873-879.
3. Konarev P.V., Volkov V.V. and others// J. Appl. Cryst. 2003, Vol. 36, P. 1277-1282.
4. Petoukhov M.V., Franke D. and others// J. Appl. Cryst.. 2012, Vol. 45, P. 342-350.
5. Kryukova A.E., Kozlova A.S., Konarev P.V. and others// Cryst. Reports. 2018, Vol. 63, № 4, P. 531-535.
6. Kryukova A.E., Konarev P.V., Volkov V.V.// J. Mol. Liq.. 2019, Vol. 283, P. 221-224.

М.Ш. КУРБАНОВ, Б.М. АБДУРАХМАНОВ, У.М. НУРАЛИЕВ, С.А.  
ТУЛАГАНОВ

*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук  
Республики Узбекистан, г. Ташкент, Узбекистан*

## **ВЫПЛАВКА ТЕХНИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ И ФЕРРОСИЛИЦИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАЗООБРАЗНОГО УГЛЕРОДИСТОГО ВОССТАНОВИТЕЛЯ**

Углеродистый восстановитель (УВ), являясь обязательным реагентом при выплавке технического кремния (ТК) или ферросилиция (ФС) определяет энергоемкость процесса, полноту реакции и качество продукта. Дефицит и дороговизна древесного ретортного угля, вплоть до отсутствия его производства в безлесных регионах мира обуславливают поиск других УВ, в том числе, газообразных, типа метана, водорода или пропана. Однако их применение сопряжено с необходимостью предварительной частичной ионизации. Нами предлагается делать это непосредственно на тракте подачи УВ в зону горения электрической дуги.

M.SH. KURBANOV, B.M. ABDURAKHMANOV,  
U.M. NURALIEV, S.A. TULAGANOV

*Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences  
of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan*

## **SILKING OF TECHNICAL SILICON AND FERROSILICIUM USING A GAS-CARBON-CARBON REDUCER**

Carbon reducing agent, being an obligatory reagent in the smelting of technical silicon or ferrosilicon, determines the energy capacity of the process, the completeness of the reaction, and the quality of the product. The shortage and high cost of charcoal retort coal, up to the lack of its production in treeless regions of the world, determine the search for other hydrocarbons, including gaseous ones, such as methane, hydrogen or propane. However, their use is associated with the need for preliminary partial ionization. We propose to do this directly on the path of supplying the hydrocarbons to the combustion zone of the electric arc.

Проблема оптимального выбора УВ для процессов электродуговой выплавки ТК или ФС сопряжена с необходимостью удовлетворением ряда требований, связанных с обеспечением высокой реакционной способности УВ, минимальным содержанием в нем примесей, и отсутствием склонности к шлакообразованию. Не менее важны и экономические аспекты, которые вызваны необходимостью обеспечения доступности УВ и минимизации его цены. С этих позиций широкое применение древесного угля, отличающегося наилучшими показателями по реакционной способности и зольности, но имеющего высокую стоимость заставляет вести поиск других УВ типа,

полукоксов, лигнина, нефтяного кокса и их смесей. Особняком стоит вопрос о применении газообразных УВ типа метана, пропана, водорода или их смесей, хотя последний из них является известным восстановителем, широко применяемым в технологии полупроводниковых материалов, а  $\text{CH}_4$  и  $\text{H}_2$  возникают в больших количествах в полости самой электродуговой печи при выплавке как ТК, так и ФС. По-видимому, интерес к этим газам не велик из-за того, что их образование в стандартном процессе происходит вне горна печи и по этой причине их вклад в восстановление Si из  $\text{SiO}_2$  или SiO несоизмеримо мал по сравнению с углеродом. Нами предложена и успешно опробована технология выплавки ТК и ферросилиция с частичной или полной заменой твердого УВ, газообразным, на основе природного газа, добываемого в Республике Узбекистан и состоящего на 94% из метана при минимальном содержании примесей.

Суть приема состоит в том, что природный газ подается непосредственно в горн электродуговой печи через центральное отверстие в графитовом электроде. Подача метана непосредственно в зону горения электрической дуги сопровождается, во-первых, развалом молекулы метана на углерод и водород, а во-вторых, частичной ионизацией молекул этих полученных веществ излучением электрической дуги с образованием  $\text{H}_2$  и C, если в не ионизованном, то в атомарном состоянии.

Для интенсификации этого процесса нами предложено устанавливать в полости графитового электрода, то есть на тракте подачи метана, никелевый катализатор, с разогреваемой тепловым излучением самой дуги, поверхностью до 900-1100 К. В результате удастся снизить энергоемкость процесса, повысить стабильность качества продукта и обеспечить высокие экономические показатели процесса выплавки ТК.

М.Ш. КУРБАНОВ, И.Д. ЯДГАРОВ, В.Г. СТЕЛЬМАХ,  
А.Н. УЛУКМУРАДОВ, У.Б. УЛЖАЕВ

*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент,  
Узбекистан*

## **ПРОЦЕССЫ АДсорбЦИИ ФуЛЛЕРЕНа C<sub>60</sub> ГРАФЕНОМ И ЕГО КРАЕМ**

Рассмотрены процессы адсорбции фуллерена графеном, имеющих большое разнообразие. Эти процессы определяются как числом атомов фуллерена, через которое устанавливаются химические связи с атомами графена, так пространственным расположением адсорбированного фуллерена (в частном случае, адсорбцией фуллерена краем графенового листа).

M.SH. KURBANOV, I.D.YADGAROV, V.G.STELMAKH,  
A.N.ULUKMURADOV, U.B.ULJAEV

*Ion-plasmous and Laser Technologies Institute after Arifov, Tashkent, Uzbekistan*

## **PROCESSES OF ADSORPTION OF FULLERENE C<sub>60</sub> ON GRAPHENE AND ITS EDGE**

The processes of fullerene adsorption by graphene, have a great variety, are considered. These processes are determined both by the number of fullerene atoms through which chemical bonds with graphene atoms are established, by the spatial arrangement of adsorbed fullerene (in the particular case, adsorption of fullerene by the edge of a graphene sheet).

Сначала методом минимизации энергии с использованием потенциала Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные структуры [1], была построена компьютерная модель одиночного бездефектного фуллерена C<sub>60</sub> и было получено, что энергия когезии E<sub>f</sub> каждого атома углерода в фуллерене равна 6.8 электрон-вольт (эВ). Затем строилась компьютерная модель «бесконечного» бездефектного графена, которая предназначена для рассмотрения вопроса адсорбции фуллерена на поверхности графена. Для этого был выбран прямоугольный участок графена, состоящий из 112 атомов углерода (подробности и обоснования такой модели см. [2]).

После того как были получены компьютерные модели одиночных бездефектных объектов: фуллерена C<sub>60</sub>, «бесконечного» графена и нанографена изучалась адсорбция фуллерена сначала на графене, а после на его краях. Рассмотрены следующие «краевые» случаи (рис.1).

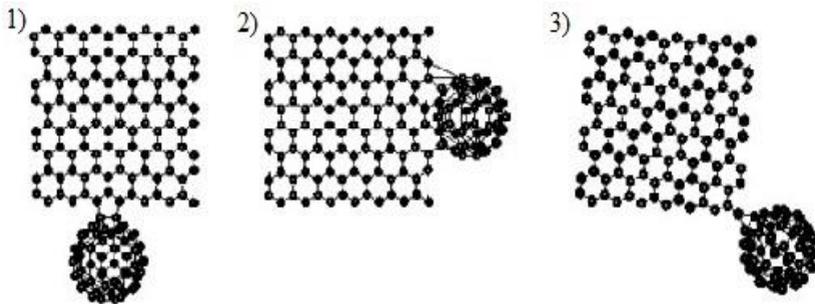


Рисунок 1 – Графеновый лист с адсорбированной молекулой фуллерена (слева направо: 1) на середине zigzag края нанографена, 2) на середине armchair края и 3) на крайнем «угловом» атоме графена).

Для изучения адсорбции фуллерена на графене компьютерные модели фуллерена и «бесконечного» графена приближались на необходимое расстояние с разным набором геометрического расположения фуллерена по отношению к поверхности графена с последующим применением метода минимизации энергии в рамках потенциала Бреннера и периодических граничных условий на краевые атомы графена. Было получено, что адсорбция фуллерена  $C_{60}$  на поверхности графена может осуществляться разными способами. В результате адсорбции нарушается сферическая симметрия фуллерена  $C_{60}$  и это нарушение симметрии зависит от способа адсорбции на поверхности графена.

*Список литературы*

1. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys: Condens. Matter. 14, 783 (2002).
2. A.A. Dzhurakhalov, F.M. Peeters, Carbon 49, 3258 (2011).

А.Е. ЛУКЬЯНОВ, В.Д. НЕВЕРОВ, А.В. КРАСАВИН,  
А.П. МЕНУШЕНКОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ОЦЕНКА КОНСТАНТЫ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СОЕДИНЕНИЯХ $Ba_{1-x}K_xBiO_3$**

Соединения на основе  $BaBiO_3$  кристаллизуются в перовскитную структуру, которая в данных соединениях сильно искажена, что дает повод говорить о наличии в данных материалах сильного электрон-фононного взаимодействия. Для оценки значения параметра данного взаимодействия в структуре ВВО и дочернего соединения ВКВО была применена модель Холстейна.

A.E. LUKYANOV, V.D. NEVEROV, A.V. KRASAVIN,  
A.P. MENUSHENKOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

## **ESTIMATION OF ELECTRON-PHONON COUPLING CONSTANT IN $Ba_{1-x}K_xBiO_3$**

Compounds based on  $BaBiO_3$  crystallize into a perovskite structure, which is strongly distorted in these materials indicating the presence of strong electron-phonon coupling. The Holstein model is applied to evaluate the value of electron-phonon coupling in the ВКВО and parent compound ВВО.

Хорошо известно, что соединение ВВО, допированное Рb и К, является сверхпроводником при температуре в 13 К и 34 К, соответственно. На сегодняшний день нет единого мнения о природе этого явления в данных материалах. Одной из теорий, пытающейся объяснить это явление, является теория, выдвинутая в [1], сутью которой является существование в данных соединениях пространственно-разделенной Бозе-Ферми жидкости. Важной частью этого предположения является наличие в ВКВО и ВРВО сильного электрон-фононного взаимодействия. Целью данной работы является расчет значения константы электрон-фононного взаимодействия.

Для того, чтобы оценить данную величину, необходима модель, способная учесть данный вид взаимодействия. Простейшей моделью для решения такой задачи является модель Холстейна, гамильтониан которой имеет вид:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + g \sum_i (b_i^+ + b_i)(n_i - 1) + \omega_0 \sum_i b_i^+ b_i + \mu \sum_i n_i \quad (1)$$

где  $c_{i,\sigma}^+$  ( $c_{i,\sigma}$ ) – операторы рождения (уничтожения) электрона со спином  $\sigma$ , находящимся на узле  $i$ ;  $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$  – оператор числа частиц;  $b_i^+$  ( $b_i$ ) – бозонные операторы рождения (уничтожения);  $t_{i,j}$  определяет амплитуду перескоков между решеточными узлами  $i$  и  $j$ ;  $g$  задает величину константы электрон-фононного взаимодействия;  $\omega_0$  – фононная частота.

Напрямую решить задачу (1) довольно трудоемко. Задача может быть решена с использованием DMFT метода, основанного на открытии Метцнера и Фолхарда [2], что в случае большой размерности пространства собственно энергетическая часть электрона не зависит от импульса  $\mathbf{k}$ , но только от частоты  $i\omega_n$ .

В основе метода DMFT лежит учет локальных взаимодействий и корреляций, поэтому исходная система может быть преобразована к совокупности небольшой системы, для которой все виды взаимодействия учитываются точно, и «ванны», представляющей остальную часть системы в виде некоторого эффективного среднего. Полученная система по своей сути представляет собой однопримесную модель Андерсона (SIAM), которую уже удается разрешить.

После выполнения цикла DMFT мы имеем собственно энергетическую составляющую и функцию Грина, отражающую нашу исходную систему, ее можно использовать для нахождения восприимчивости и некоторых других свойств. Например, константа электрон-фононного взаимодействия может быть определена по следующей формуле:

$$\lambda_{eff} = - \left. \frac{\partial \Sigma(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0}.$$

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 18-02-40001 мега).

#### *Список литературы*

1. A.P. Menushenkov, A.V. Kuznetsov, K.V. Klementiev, M. Yu. Kagan // J. Supercond. Nov. Magn. 2016. Vol. 29. P. 701-705.
2. W. Metzner and D. Vollhardt Correlated Lattice Fermions in  $d \rightarrow \infty$  Dimensions // Phys. Rev. Lett. 1989 Vol. 62. P. 324.

И.В. МАЛИКОВ<sup>1</sup>, В.А. БЕРЕЗИН<sup>1</sup>, Л.А. ФОМИН<sup>1</sup>,  
Ю.А. ПЕРЕВОЗЧИКОВА<sup>2</sup>, Н.С. БАННИКОВА<sup>2</sup>, Е.И. ПАТРАКОВ<sup>2</sup>,  
Л.И. НАУМОВА<sup>2</sup>, А.А. СЕМЯННИКОВА<sup>2</sup>, М.А. МИЛЯЕВ<sup>2</sup>,  
В.В. МАРЧЕНКОВ.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>ИПТМ РАН - Черноголовка, Россия  
<sup>2</sup>ИФМ УрО РАН Екатеринбург, Россия  
<sup>3</sup>УрФУ, г.Екатеринбург, Россия

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА $\text{Co}_2\text{FeAl}$ , $\text{Co}_2\text{CrSi}$ и $\text{Co}_2\text{NiSi}$ ДЛЯ СПИН-ИНЖЕКЦИОННОЙ ТГц-ФОТОНИКИ

Были исследованы структурные и магнитные свойства (полевые зависимости намагниченности в полях до 6 кЭ) тонкопленочных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{FeAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrSi}$  и  $\text{Co}_2\text{NiSi}$ , выращенных на стекле и монокристаллической подложке  $\text{Al}_2\text{O}_3$  R-плоскости при различных температурах роста (20, 150, 280, 420 °С) методом импульсного лазерного осаждения. Найдено, что стехиометрический состав пленок зависит от температуры подложки в процессе роста, и повторяет состав мишени при низких температурах. Использование данных пленок в магнитных переходах может увеличить интенсивность спин-инжекционного ТГц излучения при протекании через них тока.

I.V. MALIKOV<sup>1</sup>, V.A. BEREZIN<sup>1</sup>, L.A. FOMIN<sup>1</sup>,  
Yu.A. PEREVOZCHIKOVA<sup>2</sup>, N.S. BANNIKOVA<sup>2</sup>,  
E.I. PATRAKOV<sup>2</sup>, L.I. NAUMOVA<sup>2</sup>, A.A. SEMIANNIKOVA<sup>2</sup>,  
M.A. MILYAEV<sup>2</sup>, V.V. MARCHENKOV.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>IMT RAS - Chernogolovka, Russia  
<sup>2</sup>M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ekaterinburg, Russia  
<sup>3</sup>Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

## STUDY OF A STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE $\text{Co}_2\text{FeAl}$ , $\text{Co}_2\text{CrSi}$ и $\text{Co}_2\text{NiSi}$ HEUSLER ALLOY FILMS FOR SPIN-INJECTION THZ PHOTONICS

The structural and magnetic properties (field dependences of the magnetization in magnetic fields of up to 6 kOe) of thin-film  $\text{Co}_2\text{FeAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrSi}$  and  $\text{Co}_2\text{NiSi}$  Heusler alloys grown by pulsed laser deposition on glass and a single-crystal  $\text{Al}_2\text{O}_3$  R-plane substrate at different growth temperatures (20, 150, 280, 420 °C) were studied. It was found that the stoichiometric composition of the films depends on the substrate temperature during growth and repeats the composition of the target at low temperatures. The use of these films in magnetic transitions can increase the intensity of spin-injection THz radiation when current flows through them.

Известно, что многие сплавы Гейслера,  $\text{Co}_2\text{YSi}$  и  $\text{Co}_2\text{YAl}$  ( $Y = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$ ) являются полуметаллическими ферромагнетиками [1, 2], в которых может быть реализована 100% -ная поляризация по спину электронов

проводимости на уровне Ферми. По этой причине представляет интерес использовать данные сплавы в качестве инжектора спин-поляризованных электронов в магнитных переходах, где как было показано, спиновая неравновесность электронов проводимости вследствие инжекции приводит к излучательным электронным переходам между спиновыми подзонами [3]. Тем самым можно создать лазер, работающий в ТГц диапазоне при комнатной температуре. Такое устройство может быть создано по планарной (пленочной) технологии. В данной работе проведены исследования структурных и магнитных свойств (полевые зависимости намагниченности в полях до 6 кЭ) тонкопленочных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{FeAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrSi}$  и  $\text{Co}_2\text{NiSi}$ . Пленки были выращены на стекле и монокристаллической подложке  $\text{Al}_2\text{O}_3$  R-плоскости при различных температурах роста (20, 150, 280, 420 °С) методом импульсного лазерного осаждения. Как оказалось, стехиометрический состав пленок зависит от температуры подложки в процессе роста, и повторяет состав мишени при низких температурах.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», № АААА-А18-118020290104-2) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 18-32-00686, № 18-02-00739) и Правительства РФ (постановление № 211, контракт № 02.А03.21.0006).

#### *Список литературы*

1. H. Schneider et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 40, pp. 1548–1551, 2007.
2. V.V. Marchenkov et al., Phys. Met. Metallog., 119, p. 64, 2018.
3. V. Korenivski et al., Europhysics Letters 104 p. 27011, 2013.

Б.П. МИХАЙЛОВ<sup>1</sup>, А.Б. МИХАЙЛОВА<sup>1</sup>, В.Я. НИКУЛИН<sup>2</sup>, И.В.  
БОРОВИЦКАЯ<sup>1</sup>, П.В.СИЛИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

## **ВЛИЯНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА MgB<sub>2</sub> – КЕРНА В ОБОЛОЧКАХ ИЗ МЕДИ И АЛЮМИНИЯ**

В докладе представлены результаты исследований структуры и свойств MgB<sub>2</sub> –керна в оболочках из меди и алюминия после холодной прокатки и последующего ударно-волнового воздействия. Ударно-волновое воздействие осуществлялось с использованием установки типа плазменный фокус (ПФ). Показано, что на сверхпроводящие свойства и микроструктуру сверхпроводников влияют температура и степень деформации исходной композиционной заготовки, в том числе при приложении ударно-волновых воздействий на заключительных этапах изготовления ленты.

В.Р. МИХАЙЛОВ<sup>1</sup>, А.В. МИХАЙЛОВА<sup>1</sup>, V. Ya. NIKULIN<sup>2</sup>, I.V.  
BOROVITSKAYA<sup>1</sup>, P.V. SILIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>A.A.Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Lebedev Physical Institute RAS, Moscow, Russia

## **INFLUENCE OF SHOCK WAVE ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF MgB<sub>2</sub> - CORE IN SHELLS OF COPPER AND ALUMINUM**

The report presents the results of studies of the structure and properties of MgB<sub>2</sub> core in shells made of copper and aluminum after cold rolling and subsequent shock-wave action. The shock-wave action was carried out using a plasma focus (PF) type setup. It is shown that the superconducting properties and microstructure of superconductors are affected by the temperature and the degree of deformation of the initial composite billet, including the application of shock-wave effects at the final stages of tape manufacturing.

Целью работы является изучение влияния ударно-волнового воздействия на свойства MgB<sub>2</sub> – керна в оболочках из меди и алюминия, Сверхпроводящий порошок был помещен в трубчатые оболочки из указанных металлов. Диаметр оболочек составил 3 - 4 мм снаружи и 2-3 мм внутри. После заполнения порошком MgB<sub>2</sub> концы оболочек опрессовывались и далее выполнялась прокатка.

В процессе прокатки композиционной заготовки получалась плоская лента толщиной 0,2 – 0,3 мм. Далее полученные образцы подвергали ударно-волновому воздействию на различном расстоянии от плазменного анода. Количество воздействий плазменного импульса составило  $n = 5$ . Для защиты образцов от прямого воздействия плазмы и их перегрева была использована

прокладка из титана толщиной 100 мкм. Интенсивность ударно-волнового воздействия в относительных единицах и контролировалась посредством регистрации амплитуды особенности на производной разрядного тока, характеризующей эффективность трансформации энергии магнитного поля, создаваемого разрядным током, в энергию плазменных потоков и пучков ионов и электронов. На рис. 1. показаны ленты толщиной 0,3 мм и шириной – 5 мм после прокатки в медной и алюминиевой оболочках и после обработки на установке ПФ. На защитных прокладках видны пятна от воздействия плазмы, поверхность образцов остается без заметных изменений.



Рис.1. Фотография образцов лент  $MgB_2$  в оболочках из меди (а) и алюминия (б) после холодной прокатки и последующего ударно-волнового воздействия плазмы на расстоянии 30 мм от анода, количество импульсов равно =5. На фото представлены также изображения поверхности защитных прокладок из титана.

На лентах проведены исследования сверхпроводящих свойств, изучена микротвердость и микроструктура зерна, проведены рентгенофазовые исследования. Показано, что на сверхпроводящие свойства и микроструктуру сверхпроводников влияют температура и степень деформации исходной композиционной заготовки, а также интенсивность УВВ на заключительных этапах изготовления ленты [1].

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 16-12-10351-П в части обработки образцов на установке Плазменный фокус и в рамках Госзадания № 075-00746-19-00 в части проведения структурных исследований.

#### *Список литературы*

1. В.Р.Михайлов, А.В.Михайлова, В.Я. Nikulin, I.V. Borovitskaya, P.V. Silin , Journal of Physics: Conference Series 2019 г. XV International Russian-Chinese Symposium «New materials and Technologies. Journal of Physics: Conference Series 1347(2019) 012038

Т.И. МОГИЛЮК<sup>1</sup>, П.Д. ГРИГОРЬЕВ<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>НИИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия  
<sup>2</sup>Институт им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия

## **О ВЛИЯНИИ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОЙ ЧАСТИ СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ НА МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ НАМАГНИЧЕННОСТИ И СОПРОТИВЛЕНИЯ В СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛАХ**

Рассмотрено влияние магнитных осцилляций действительной части собственно-энергетической функции электронов на форму квантовых осцилляций намагниченности и магнитосопротивления слоистых проводников.

T.I. MOGILYUK<sup>1</sup>, P.D. GRIGORIEV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*NRC Kurchatov Institute, Moscow, Russia*  
<sup>2</sup>*Landau Institute for Theoretical Physics RAS, Moscow, Russia*

## **ABOUT THE INFLUENCE OF THE REAL PART OF THE SELF - ENERGY FUNCTION ON MAGNETIC QUANTUM OSCILLATIONS OF MAGNETIZATION AND RESISTANCE IN LAYERED METALS**

The effect of magnetic oscillations of the real part of the self-energy function of electrons on the shape of quantum oscillations of the magnetization and magnetoresistance of layered conductors is considered.

Нашей целью было проанализировать влияние учёта магнитных осцилляций действительной части собственно-энергетической части электронов  $Re\Sigma$  на форму квантовых осцилляций намагниченности и магнитосопротивление слоистых проводников. В пределе сильных квантовых осцилляций, возможном только в двумерных или квазидвумерных слоистых материалах, действительная часть собственно-энергетической части электронов  $Re\Sigma$  также сильно осциллирует. Обычно ей пренебрегают, учитывая только её мнимую часть  $Im\Sigma$ , так как предполагается, что  $Re\Sigma$  лишь сдвигает химический потенциал и не влияет на наблюдаемые свойства. Однако как показывают наши расчёты, осцилляции  $Re\Sigma$  влияют на наблюдаемые свойства, поскольку сдвигают химический потенциал относительно уровня Ландау даже в среднем по периоду квантовых осцилляций. Осцилляции  $Re\Sigma$  влияют на форму квантовых осцилляций намагниченности [1,2], которая используется для экспериментального определения режима квантовых осцилляций: при постоянном химическом потенциале или при постоянной плотности электронов. Также данные осцилляции изменяют монотонную часть в сильном поле на

коэффициент порядка 2 [3,4], угловую зависимость и форму квантовых осцилляций магнитосопротивления [5,6]. Возможно, поэтому, несмотря на попытки в органических металлах добиться режима постоянной плотности электронов, форма осцилляций намагниченности оставалась соответствующей постоянному химическому потенциалу. Этот вопрос имеет не только большое практическое значение для анализа многочисленных экспериментов, но и существенный интерес для развития теории магнитных квантовых осцилляций.

Т.И.М. благодарит финансовую поддержку РФФИ (гранты 18-02-01022, 18-02-00280, 18-32-00205, 19-02-01000).

*Список литературы*

1. Grigoriev P.D. // JETP 92, 1090 (2001).
2. Champel T. and Mineev V. P. // Phys. Rev. B 66, 195111 (2002).
3. Grigoriev A.D., Grigoriev P.D. // Low Temp. Phys. 40, 367 (2014).
4. Grigoriev P.D., Mogilyuk T.I. // Phys. Rev. B 90, 115138 (2014).
5. Mogilyuk T.I., Grigoriev P.D. // Phys. Rev. B 95, 165120 (2017).
6. Grigoriev P.D., Mogilyuk T.I. // J. Phys.: Conf. Ser. 1038, 012123 (2018).

А.Ю. МОЛОКОВА<sup>1</sup>, В.В. ПОПОВ<sup>1,2</sup>, А.П.МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, А.А.  
ЯСТРЕБЦЕВ<sup>1</sup>, Е.В. ХРАМОВ<sup>2</sup>, Р.Д. СВЕТОГОРОВ<sup>2</sup>, В.Ю. МУРЗИН<sup>3</sup>,  
А.Б. КАЛИНКО<sup>3</sup>, В.В. КУРИЛКИН<sup>4</sup>

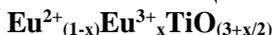
<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИИ Курчатовский Институт, Москва, Россия

<sup>3</sup>DESY, Photon Science, Гамбург, Германия

<sup>4</sup>Российский университет дружбы народов (РУДН), Москва, Россия

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТИТАНАТОВ



Исследовано влияние условий синтеза на кристаллическую, локальную и электронную структуру титанатов  $\text{Eu}^{2+}_{(1-x)}\text{Eu}^{3+}_x\text{TiO}_{(3+x/2)}$  с помощью s-XRD, XANES и EXAFS (измерения выполнены на станциях «РСА» (s-XRD) и «СТМ» (Eu L<sub>3</sub>- XAFS). Курчатовского источника СИ и на станции P64 (Ti K- XAFS) источника СИ PETRA III). В диапазоне 10–300 К получены температурные зависимости длин межатомных связей Eu–O, Ti–O и факторов Дебая–Валлера ( $\sigma^2$ ), характеризующих локальное статическое и динамическое разупорядочение связей. Из зависимостей  $\sigma^2(T)$  определены жесткости связей металл-кислород и параметры локального разупорядочения структуры.

A. Yu. MOLOKOVA<sup>1</sup>, V. V. POPOV<sup>1,2</sup>, A. P. MENU SHENKOV<sup>1</sup>,  
A. A. YASTREBTSEV<sup>1</sup>, E. V. KHRAMOV<sup>2</sup>, R. D. SVETOGOROV<sup>2</sup>, V. YU.  
MURZIN<sup>3</sup>, A. B. KALINKO<sup>3</sup>, V. V. KURILKIN<sup>4</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Center Kurchatov Institute, Moscow, Russia

<sup>3</sup>DESY, Photon Science, Hamburg, Germany

<sup>4</sup>Peoples Friendship University of Russia (RUDN), Moscow, Russia

## TEMPERATURE DEPENDENCES OF X-RAY ABSORPTION SPECTRA OF TITANATE $\text{Eu}^{2+}_{(1-x)}\text{Eu}^{3+}_x\text{TiO}_{(3+x/2)}$

The influence of the synthesis conditions on the crystal, local, and electronic structure of  $\text{Eu}^{2+}_{(1-x)}\text{Eu}^{3+}_x\text{TiO}_{(3+x/2)}$  titanates was investigated by using the combination of synchrotron X-ray diffraction (s-XRD) and X-ray absorption spectroscopy (XANES and EXAFS). The experiments have been carried out at NRC Kurchatov Institute synchrotron radiation source (Eu L<sub>3</sub>-edge XAFS at ‘Structural Materials Science’ end-station and s-XRD at ‘X-Ray Structural Analysis’ end-station) and at PETRA-III, DESY (Ti K-edge XAFS at P64 beamline). The temperature dependences of the Ln–O and Ti–O interatomic bond lengths and Debye–Waller factors ( $\sigma^2$ ) characterizing the local static and dynamic disordering of bonds have been obtained in the temperature range of 10–300 K. The stiffnesses of metal–oxygen bonds and the parameters of local disordering of the structure have been determined from the dependences  $\sigma^2(T)$ .

Сложные оксиды европия  $\text{Eu}^{2+(1-x)}\text{Eu}^{3+x}\text{TiO}_{(3+x/2)}$  ( $0 < x < 1$ ) интересны как с научной, так и с практической точки зрения благодаря их уникальным магнитным, электрическим и каталитическим свойствам, а также наблюдаемым в них фазовым переходам. Вопросы изучения кристаллической, локальной и электронной структуры этих соединений важны для более глубокого понимания их физико-химических свойств и успешного использования в различных практических приложениях.

Порошки титанатов европия были синтезированы с помощью золь-гель метода и соосаждения с последующей термообработкой прекурсоров в восстановительной и окислительной атмосфере. Анализ XANES-спектров на  $L_3$ -Eu крае поглощения показал возможность эффективного определения соотношения катионов  $\text{Eu}^{2+}/\text{Eu}^{3+}$  в исследованных образцах. Использование комбинации s-XRD и XANES позволило установить, что прокалывание на воздухе ранее восстановленных порошков  $\text{Eu}^{2+}\text{TiO}_3$  приводит к окислению катионов  $\text{Eu}^{2+}$  до  $\text{Eu}^{3+}$  и сопровождается фазовыми переходами  $\text{Eu}^{2+}\text{TiO}_3$  (кубический перовскит, Pm-3m)  $\rightarrow$   $\text{Eu}^{3+}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  (слоистый перовскит, P2<sub>1</sub>)  $\rightarrow$   $\text{Eu}^{3+}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  (пироклор, Fd-3m). Данные s-XRD для образцов  $\text{Eu}^{3+}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ , полученных при температуре отжига 750 и 800°C, указывают на кристаллическую структуру слоистого перовскита, однако анализ XANES- и EXAFS-спектров на K-Ti крае поглощения позволил установить, что эти соединения имеют сильно разупорядоченную локальную структуру, указывающую на частичную аморфизацию образцов. С целью изучения локального статического и динамического беспорядка получены температурные зависимости спектров рентгеновского поглощения в диапазоне 10 - 300 К для полностью восстановленного  $\text{Eu}^{2+}\text{TiO}_3$  и порошка, окисленного при 800°C. Обнаружено, что в исследованных образцах XANES-спектры, снятые вблизи краев поглощения  $L_3$ -Eu и K-Ti практически не изменялись с температурой, что указывает на отсутствие заметного влияния температуры на локальную электронную структуру исследованных оксидов. В результате моделирования экспериментальных EXAFS-спектров были извлечены температурные зависимости радиусов ближайших координационных сфер «металл-кислород» и их факторов Дебая–Валлера ( $\sigma^2$ ). Температурные зависимости  $\sigma^2(T)$  связей Eu-O моделировались в рамках гармонической модели Эйнштейна. Установлено, что значения жесткостей связей Eu-O, характеризуемые температурой Эйнштейна, практически не зависят от типа термической обработки и валентного состояния европия в исследованных образцах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00133).

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИХРЕВОЙ ДИНАМИКИ ВТСП В ИМПУЛЬСНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

Методом Монте-Карло проведено численное исследование поведения вихревой системы ВТСП в условиях импульсного намагничивания при разных температурах. Рассмотрены различные амплитуды, формы и длительности импульсов, а также различные дефектные структуры образцов. Продемонстрировано проникновение магнитного потока и его распределение по образцу со временем в зависимости от параметров образца и импульсов, а также температуры.

A.N. MOROZ, A.N. MAKSIMOVA, V.A. KASHURNIKOV,  
I.A. RUDNEV

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## **MODELING OF HTS VORTEX DYNAMICS IN PULSED MAGNETIC FIELDS**

By using the Monte Carlo method, a numerical study of the behavior of the vortex system of a HTSC under pulsed magnetization has been conducted for different temperatures. Various pulse amplitudes, shapes and durations have been considered, as well as different defect structures of samples. The penetration of magnetic flux and its distribution over the sample with time has been demonstrated depending on the sample and pulse parameters, as well as temperature.

Перспективность использования современных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в качестве магнитов с захваченным потоком привела к большому количеству задач, направленных на исследование поведения ВТСП в процессе намагничивания и поиск способов оптимизации захвата потока. Особое значение имеют импульсные методы намагничивания, обладающие большей компактностью и скоростью намагничивания, чем статические методы, при меньшей стоимости.

В настоящей работе проведена серия расчетов временных зависимостей магнитного поля внутри образцов сверхпроводника  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  (Bi-2212) под действием импульсов магнитного поля различных форм (трапециевидных, треугольных и экспоненциальных) и амплитуд при различных скоростях нарастания и убывания поля. Рассмотренные образцы содержали разное число дефектов в двух пространственных конфигурациях: случайное распределение и треугольная решетка. Пример полученных зависимостей приведен на рис. 1 (а) для случая треугольных импульсов амплитудой 900 Э. Также были рассчитаны усредненные по высоте образца профили распределения магнитного поля

внутри образцов в разные моменты времени – пример приведен на рис. 1 (b) для случайного и треугольного распределения 1000 дефектов после окончания действия экспоненциальных импульсов. Все расчеты проводились континуальным методом Монте-Карло в рамках модели слоистого ВТСП.

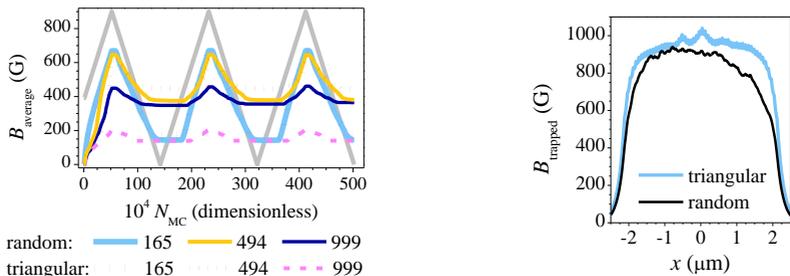


Рис. 1. Временные зависимости магнитного поля внутри различных образцов под действием треугольных импульсов (а). Усредненные профили магнитного поля в образцах с треугольной решеткой и случайным распределением дефектов после выключения внешнего поля (b).

Полученные мгновенные распределения вихревой плотности в различные моменты времени действия импульсов продемонстрировали особенности проникновения магнитного потока в виде скачков величины магнитного поля внутри образца, зависящие от количества и типа распределения дефектов, амплитуды импульсов, а также температуры. Профили распределения захваченного поля по образцу после окончания действия импульсов качественно совпадают с результатами работы [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-02-00278-а).

#### Список литературы

1. Arnaud J., Fernandes J.F.P., Branco P.J.C. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2018. Vol. 28, P. 6801604.

Р.А. МУМИНОВ, С.А. РАДЖАПОВ, Б.С.РАДЖАПОВ, В.И.  
ЧЕПУРНОВ, А.В. ГУРСКАЯ, М.В. ДОЛГОПОЛОВ  
*Физико-технический институт НПО «Физика-Солнце» АН РУз,  
ООО «БетаВольтаика», Самара, Россия  
Самарский государственный технический университет, Россия*

## **КРЕМНИЕВЫЕ ДЕТЕКТОРЫ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С НЕБОЛЬШИМИ УТЕЧКАМИ, ИЗМЕРЕНИЕ БЕТА-СПЕКТРОВ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ**

Представлены кремниевые детекторы заряженных частиц с малыми токами утечки для ядерной спектроскопии, активационного анализа, дозиметрии, медицины, биологии, высокоэнергетической астрофизики, мониторинга ядерных отходов, археологии, экологических задач, диагностики высокотемпературной плазмы и др. Проведены исследования бета-спектра для полупроводниковых преобразователей энергии.

R.A. MUMINOV, S.A. RADZHAPOV, B.S. RADZHAPOV,  
V.I. CHEPURNOV, A.V. GURSKAYA, M.V. DOLGOPOLOV

*Physical-Technical Institute of SPA "Physics-Sun", Tashkent, Uzbekistan  
BetaVoltaics LLC, Samara, Russia  
Samara POLYTECH, Russia*

## **SILICON CHARGED PARTICLE DETECTORS WITH SMALL LEAKS. MEASURING BETA SPECTRA OF ENERGY TRANSDUCERS**

Silicon detectors of charged particles with low leakage tones are presented for nuclear spectroscopy, activation analysis, dosimetry, medicine, biology, high-energy astrophysics, monitoring of nuclear waste, archaeology, environmental problems, diagnostics of high-temperature plasma, etc. Beta-spectrum researches for semiconductor energy converters are considered.

В данной работе речь идет о представлении результатов исследований спектра бета-электронов энергопреобразователей с помощью кремниевых детекторов Физико-технического института НПО «Физика-Солнце» АН РУз [1, 2]. Тестовые образцы для детекторов на основе полупроводниковых структур SiC с радиоизотопом C14 были исследованы с бета-датчиком, полученный спектр позволил идентифицировать интенсивность электронного облака на поверхности, что представляет интерес для определения концентрации легирующей примеси радионуклида в зависимости от глубины слоя карбида кремния. Представлены также кремниевые диффузионно-дрейфовые детекторы, предназначение для спектрометрии и регистрации заряженных частиц (электронов, протонов,  $\alpha$ -частиц и др.), а также мягкого рентгеновского и гамма-

излучения, могут быть использованы при создании спектрометров для решения различных ядерно-космических задач. Диаметр чувствительной области  $\phi_i$  (5-24) мм, толщина  $W_i=(1-5)$  мм. Энергетические разрешение по  $\alpha$ -частицам  $^{238}\text{Pu}$  ( $E_\alpha \sim 5,5$  МэВ),  $R_\alpha \sim (15-30)$  кэВ,  $\beta$ -частицам  $^{207}\text{Bi}$  ( $E_\beta \sim 1$  МэВ),  $R_\beta \sim (12-25)$  кэВ.

Также представлены токовый детектор ультрамягкого рентгеновского излучения, тонкий детектор пролетного типа, кремний-литиевые детекторы большой площади, используются в низкофоновых детектирующих системах и предназначены для регистрации и спектрометрии слабоинтенсивных потоков заряженных частиц. Все детекторы могут поставляться в бескорпусном исполнении, в металлических и диэлектрических корпусах (пролетный и непролетный вариант):



*Список литературы*

1. Oleg Kuznetsov, Viktor Chepurnov, Albina Gurskaya, Mikhail Dolgoplov and Sali Radzhapov // EPJ Web Conf., 222 (2019) 02012
2. Alina Kuznetsova, Mikhail Dolgoplov, Albina Gurskaya, Viktor Chepurnov, Galina Puzyrnaya and Sali Radzhapov // EPJ Web Conf., 222 (2019) 02013

Ж.Х. МУРЛИЕВА<sup>1,2</sup>, Д.К. ПАЛЧАЕВ<sup>1</sup>, М.Э. ИСХАКОВ<sup>1</sup>, Р.М.  
ЭМИРОВ<sup>1</sup>, С.Х.ГАДЖИМАГОМЕДОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

<sup>2</sup>Дагестанский государственный университет народного хозяйства, Махачкала, Россия

## ФОРМИРОВАНИЕ И РЕЛАКСАЦИЯ ЗАРЯДОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub>

Приведены результаты одновременных исследований электросопротивления ( $\rho$ ) и коэффициента теплового расширения ( $\alpha$ ) интерметаллида Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> до и после термообработки. Предложена интерпретация конкуренции металлического и полупроводникового типов проводимости Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> в интервале 300-1000К.

Zh.Kh. MURLIEVA<sup>1,2</sup>, DK. PALCHAEV<sup>1</sup>, M.E. ISKHAQOV<sup>1</sup>,  
R.E. EMIROV<sup>1</sup>, S.Kh. GADZHIMAGOMEDOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Dagestan State University, Makhachkala, Russia

<sup>2</sup>Dagestan State University of National Economy, Makhachkala, Russia

## FORMATION AND RELAXATION OF CHARGE EXCITATIONS IN Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub>

The results of simultaneous studies of electrical resistance ( $\rho$ ) and coefficient of thermal expansion ( $\alpha$ ) of the Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> intermetallic compound before and after heat treatments are presented. An interpretation of the competition between metallic and semiconductor types of conductivity Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> in the range of 300-1000K is proposed.

В интерметаллидах со структурой Ti<sub>3</sub>Al наблюдаются диффузионные фазовые переходы, связанные с перераспределением атомов по узлам ячейки при неизменной структуре. Образование химического соединения из твердого раствора сопровождается упорядочением позиций атомов Al в элементарной ячейке, благодаря возникновению дисперсионных сил, дополнительно к силам, обеспечивающим металлическую связь.

Нами исследованы (*in situ*) зависимости  $\rho(T)$  и  $\alpha(T)$  в Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> [1]. Для интерпретации конкуренции металлического и полупроводникового (рис.1) характеров зависимости  $\rho=f(T)$  в Ti<sub>67</sub>Al<sub>33</sub> необходимо понимание сценариев формирования и релаксации зарядовых возбуждений. Это возможно осуществить на основе анализа корреляции коэффициентов  $\rho$  и  $\beta$  ( $\beta=3\alpha$  – определяет работу решетки по изменению объема). Такая корреляция нами установлена для обычных металлов и сплавов [2, 3]:

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho^* \beta(T)T, (1)$$

где  $\rho_0$  и  $\rho^*$  – остаточное (экстраполированное в 0К) и характеристическое (константа для каждой фазы) сопротивления.

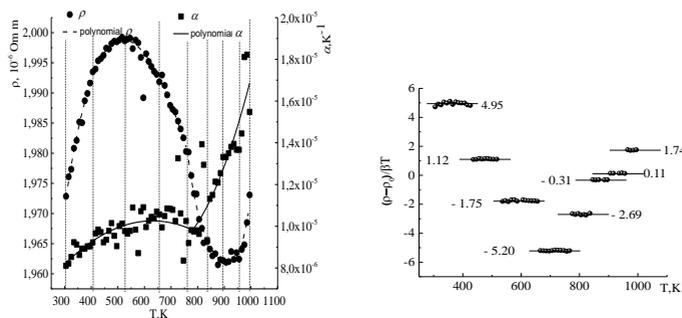


Рис. 1. Зависимости  $\rho(T)$  и  $\alpha(T)$  – а); результаты корреляционного анализа – б).

Наблюдаемая прямая корреляция зависимостей  $\rho(T)$  и  $\alpha(T)$  для  $\text{Ti}_{67}\text{Al}_{33}$  свидетельствует о том, что любые изменения концентрации зарядовых возбуждений и их релаксация сопровождаются изменениями параметров структуры, связанных с особенностями изменения межатомных расстояний. Корреляционный анализ проводился для участков температуры (рис.1), где доминирует один из механизмов проводимости, поскольку, в отличие от чистых металлов [2] и обычных сплавов, у интерметаллидов с высокой степенью статического беспорядка  $\rho_0$  зависит от температуры. Инверсия знака и изменение абсолютных значений  $\rho^*$  с ростом температуры указывают на релаксацию закаленной системы с относительно высоким статическим беспорядком к равновесному состоянию, в результате термической активации и процессов локальной переполаризации атомов в элементарных ячейках.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ № 3.5982.2017/8.9

#### Список литературы

1. Мурлиева Ж. Х., Палчаев Д. К., Исаков М. Э., Рабаданов М. Х. и др.// ТВТ. 2019. Т. 57. № 2. С 203-206.
2. Abdulgatov I.M., Murlieva Zh. Kh., Palchaev D.K. et al.//J. of Physics and Chemistry of Solids. 2007. V. 68. P. 1713-1720.
3. Мурлиева Ж.Х., Исаков М.Э., Палчаев Д.К. и др.//ТВТ. 2012. Т. 50. № 4. С.1-10.

В.Д. НЕВЕРОВ, А.Е. ЛУКЪЯНОВ, А.В. КРАСАВИН

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯРОННЫХ ЭФФЕКТОВ В ФОСФОРЕНЕ**

В работе исследована SSH-модель, учитывающая электрон-фононное взаимодействие, в геометрии фосфорена. Показана возможность реализации автолокализованных поляронов малого радиуса при константах электрон-решеточного взаимодействия, значения которых больше критического значения. Определена величина электрон-фононного взаимодействия в монослое черного фосфора, сделан вывод об отсутствии в нем автолокализованных носителей.

V.D. NEVEROV, A.E. LUKYANOV, A.V. KRASAVIN

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia*

## **STUDY OF POLARONIC EFFECTS IN PHOSPHORENE**

The SSH model, which takes into account the electron-phonon interaction, is studied in the phosphorene geometry. The possibility of realizing of self-trapped small polarons at electron-lattice interaction constants greater than the critical value is shown. The magnitude of the electron-phonon interaction in the monolayer of black phosphorus is determined; it is concluded that there are no self-trapped carriers in this material.

В последнее десятилетие двумерные материалы, такие как графен, дисульфид молибдена, германен и другие, находятся в центре научного внимания. Исследования показывают [1], что свойства представителей этого класса значительно меняются при переходе от объемных трехмерных образцов к двумерным.

Фосфорен – монослой черного фосфора, обладающий высокой подвижностью носителей, высоким оптическим поглощением, значительной шириной запрещенной зоны и другими уникальными свойствами, которые представляют интерес для оптоэлектроники.

Несмотря на серьезные теоретические и экспериментальные исследования фосфорена [2], на сегодняшний день слабо изучено влияние поляронных эффектов на свойства данного материала, кроме того, остается открытым вопрос о возможности автолокализации носителей заряда в результате электрон-фононного взаимодействия.

Таким образом, актуальной задачей является оценка электрон-решеточного взаимодействия фосфорена и ответ на вопрос о существовании автолокализованных поляронов малого радиуса в данном материале. Эта задача может быть решена посредством исследования микроскопической модели,

учитывающей движение электрона проводимости в потенциале решетки монослоя черного фосфора.

В работе для учета электрон-фононного взаимодействия использовалась модель Су-Шрифера-Хигера (SSH-модель). Существуют два ключевых отличия SSH-модели от общепринятой модели Холстейна. Во-первых, в модели Холстейна учитываются лишь оптические фононные моды, тогда как в SSH-модели включены акустические. Так как часто поляронные эффекты связаны именно с низкочастотными фононами, их учет необходим в используемой модели. Во-вторых, электрон-фононное взаимодействие в SSH-модели моделирует перескоковый интеграл, а не энергию на узле, как это происходит в модели Холстейна. Соответственно, электрон-фононное взаимодействие здесь связано именно с движением электрона, а не с потенциалом взаимодействия электрона с зарядом смещенного иона. Все это делает модель SSH технически более сложной, но позволяет корректнее описать физику системы.

Для определения возможности существования автолокализованных состояний необходимо минимизировать энергии электрона проводимости и решетки как функцию положений ионов. В работе используется адиабатическое приближение – пренебрегается кинетической энергией ионов, а их смещения рассматриваются лишь как входные параметры гамильтониана SSH-модели.

Задача минимизации решается при помощи алгоритма дифференциальной эволюции, который хорошо справляется с поиском глобального минимума многомерных функций. На каждом шаге работы алгоритма для моментального положения ионов рассчитываются энергия электрона проводимости с помощью точной диагонализации матрицы  $H_{el-ph}$  и величина фононного потенциала  $H_{ph}$ , сумма которых и минимизируется.

*Список литературы*

1. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. // Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 2005. V. 102. P. 10451.
2. H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, D. Tomanek, and P. D. Ye. // ACS Nano. 2014. V. 4133. P. 4033–4041.

Н.Н. НИЁЗБЕКОВ, И.В. САЙКОВ, А.Ю. МАЛАХОВ, И.В. ДЕНИСОВ  
*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г.  
Мержанова РАН, Черногловка, Россия*

## **ПОЛУЧЕНИЕ СВАРКОЙ ВЗРЫВОМ ДВУХСЛОЙНЫХ ЛИСТОВ С ПЛАКИРУЮЩИМ СЛОЕМ ИЗ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМГ6**

В работе приведены результаты экспериментов по сварке взрывом сплава АМг6 со следующими материалами: коррозионнотойкая сталь 08Х18Н10Т, медь М1, латунь Л63 и титан ВТ1-0. Разработаны режимы и схема сварки взрывом, а также получены значения прочности на отрыв плакирующего слоя для каждой пары. Ультразвуковой контроль показал удовлетворительную сплошность сварного соединения.

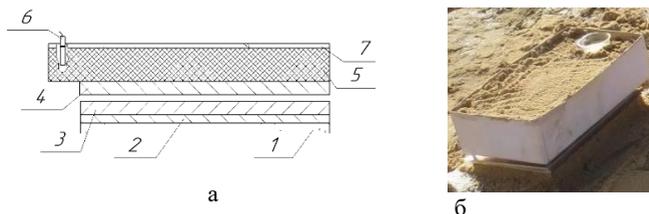
N.N. NIEZBEKOV, I.V. SAIKOV, A.YU. MALAKHOV,  
I.V. DENISOV

*Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Scienc, RAS, Chernogolovka,  
Russia*

## **OBTAINING BIMETALLIC SHEETS BY EXPLOSIVE WELDING WITH CLAD LAYER OF ALUMINUM ALLOY AMG6**

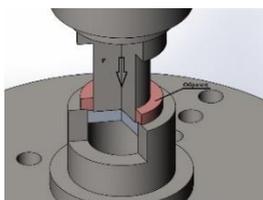
The research presented the results of experiments on explosion welding of AMg6 alloy with the materials: stainless steel 08Cr18Ni10Ti, copper M1, brass (copper 63% and zinc 37%) and titanium VT1-0. The modes and scheme of explosion welding were developed, and tensile strength of the clad layer was obtained for bimetals Ultrasonic testing showed satisfactory continuity of the welded joint.

Известно, что главным препятствием при соединении сталей с алюминиевыми сплавами является малая (0,025 ат. %) растворимость железа в алюминии. Также из-за значительной разницы коэффициента термического расширения велика вероятность появления значительных внутренних напряжений в биметалле [1]. Для экспериментальных исследований по сварке взрывом использовались следующие материалы: сплав АМг6 (без алюминиевой «рубашки»), коррозионнотойкая сталь 08Х18Н10Т, медь М1, латунь Л63 и титан ВТ1-0. Сварка взрывом осуществлялась по схеме, указанной на рисунке 1 а. В качестве взрывчатого вещества использовалась смесь микропористой аммиачной селитры с дизельным топливом. Толщина взрывчатого вещества варьировалась от 25 мм до 40 мм. Собранный пакет устанавливался на песчаную опору (рисунок 1 б).



**Рис. 1** – Разработка экспериментальной схемы: а) схема сварки взрывом: 1 – песчаная опора, 2 – стальная пластина, 3 – основа, 4 – метаемая пластина, 5 – взрывчатое вещество, 6 – детонатор, 7 – забойка из песка; б) внешний вид сборки на полигоне.

Сплошность сцепления слоев контролировалась методом ультразвукового контроля прибором УД2В-П45. Прочность на отрыв плакирующего слоя определялась на кольцевых образцах по схеме, приведенной на рисунке 2. Для частичной релаксации внутренних напряжений после сварки взрывом проводилась термическая обработка (ТО) всех образцов при температуре  $T=200$  °С с выдержкой 1 час.



**Рис. 2** – Схема испытания на отрыв плакирующего слоя

В результате проведения экспериментов по сварке взрывом были получены образцы биметаллов с плакирующим слоем из сплава АМг6. После прохождения ультразвукового контроля листы резались с использованием охлаждающей жидкости пополам вдоль направления процесса сварки. Затем одна из двух частей подвергалась ТО. После нее из начальных и конечных участков листов вырезались образцы для определения прочности на отрыв. Было выявлено, что прочность начальных участков не превышала 20 МПа из-за наличия локальных несплошностей на границе соединения. Прочность на отрыв плакирующего слоя образцов взятых из конечных участков составила для пары АМг6+М1 – 70 МПа, для АМг6+Л63 – 60 МПа, для АМг6+ВТ1-0 – 105 МПа, АМг6+08Х18Н10Т – 61 МПа. Прочность после ТО изменилась незначительно. Полученные данные показали, что прочность соединений существенно ниже прочности исходных слоев. Данное явление требует дальнейшего исследования.

#### *Список литературы*

1. Калеко Д.М. // Автоматическая сварка. 2010. №10. С. 29-36.

Д.К. ПАЛЧАЕВ<sup>1</sup>, Ж.Х. МУРЛИЕВА<sup>1,2</sup>, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ<sup>1</sup>,  
М.Х. РАБАДАНОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Дагестанский государственный университет, г. Махачкала, Россия

<sup>2</sup>Дагестанский государственный университет народного хозяйства,  
г. Махачкала, Россия.

## **СВЯЗЬ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ОБЪЕМА И ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ДЛЯ КЕРАМИК НА ОСНОВЕ YBCO**

Показано, что в керамике YBCO объем элементарной ячейки и площадь плоскостей CuO<sub>2</sub>, в среднем по решетке, ниже 170К уменьшаются вплоть до  $T_c$  с тенденцией стремления объема ниже  $T_c$  к постоянной величине. Показана, так же непосредственная связь относительных изменений объема и электросопротивления для керамик YBCO.

D.K. PALCHAEV<sup>1</sup>, Zh.Kh. MURLIEVA<sup>1,2</sup>,  
S.Kh. GADZHIMAGOMEDOV<sup>1</sup>, M.KH.RABADANOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Dagestan State University, Makhachkala, Russia

<sup>2</sup>Dagestan State University of National Economy, Makhachkala, Russia

## **RELATIONSHIP OF RELATIVE CHANGES OF VOLUME AND ELECTRIC RESISTANCE FOR CERAMICS BASED ON YBCO**

It was shown that, in YBCO ceramics, the unit cell volume and the area of CuO<sub>2</sub> planes, on average over the lattice, decrease below 170 K down to  $T_c$  with a tendency for the volume to tend below  $T_c$  to a constant value. The direct relationship between the relative changes in volume and electrical resistance for YBCO ceramics is also shown.

Допирование YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7- $\delta$</sub>  обуславливает его переход в сверхпроводящее состояние и формирование высоких значений  $T_c$ , что непосредственно связано с особенностями изменения параметров  $c$  и  $b$ . Очевидно, что соответствующие изменения этих параметров могут происходить не только в результате снижения значения  $\delta$ , но и в зависимости от температуры. На особенности температурных зависимостей этих параметров вблизи  $T_c$ , обычно, не обращается внимания. Нами были исследованы структура и комплекс свойств, в том числе температурные зависимости [1] параметров элементарной ячейки, для двух образцов плотной и неплотной наноструктурированных керамик на основе оптимально допированного YBCO.

На рисунке 1 приведены температурные зависимости объема и площади плоскости CuO<sub>2</sub> элементарной ячейки YBCO наших керамик в сравнении с данными для микрокристаллических образцов [2, 3].

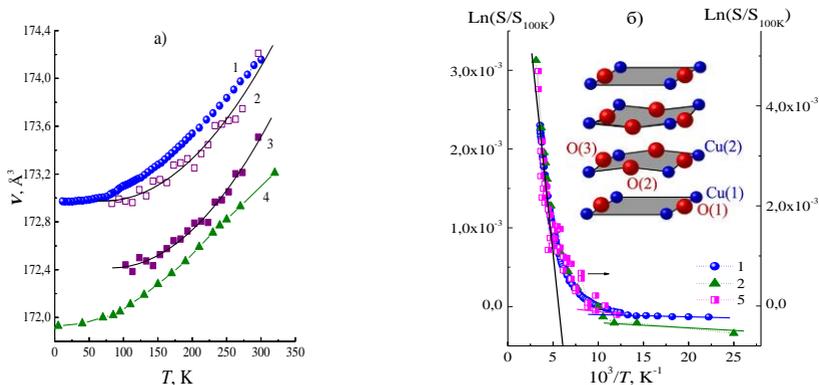


Рис. 1. Температурные зависимости объема – а) и площади – б) элементарной ячейки: 1 - [3], 2 и 3 – наши данные для пористой и плотной керамик ( $\sim 3,0$  г/см<sup>3</sup> и  $\sim 5,7$  г/см<sup>3</sup>), 4 - [2], 5- данные 2 и 3 для плотной и неплотной керамик.

Как видно, ниже температуры  $\sim 70$  K изменения объема и площади плоскостей  $\text{CuO}_2$  резко снижаются, а ниже  $T_c$  стремятся к постоянной величине. Это подтверждает нашу версию [1], основанную на наличии связи перехода в сверхпроводящее состояние с существенным снижением эффекта ангармонизма колебаний атомов, в среднем по решетке. Эта версия частично подтверждается результатами работы [4], где особенность фононов, обуславливающих спаривание электронов, связывается с формированием «фиксированных треугольников» в углах гофрированных плоскостей  $\text{CuO}_2$ , площади которых остаются постоянным.

Работа выполнена при поддержке ГЗ № 3.5982.2017/8.9 и частично гранта РФФИ № 18-08-00092а

#### Список литературы

1. Палчаев Д.К., Гаджимагомедов С.Х., Титова С.Г. и др // Тр. совещ. по физике низких температур (НТ-38). – 2018. – С. 220-223.
2. You H, Welp U., Fang Y. // Physical Review B. – 1991. – V. 43. No.4. – P. 3660– 3663.
3. Francois M., A. Junod, K. Yvon et al. //Solid State Communications. – 1988. – 66. No.10. – P. 1117-1125.
4. Jin W., Hao S., Zhang H. // New Journal of Physics. – 2009. – V.11. – P. 113036.

В.В. ПОПОВ<sup>1,5</sup>, А.П. МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, А.Ю. МОЛОКОВА<sup>1</sup>,  
А.А. ЯСТРЕБЦЕВ<sup>1</sup>, Е.Б. МАРКОВА<sup>2</sup>, А.Г. ЧЕРЕДНИЧЕНКО<sup>2</sup>, Н.А.  
ЦАРЕНКО<sup>3</sup>, И.В. ЩЕТИНИН<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов (РУДН), Москва, Россия

<sup>3</sup>АО Ведущий научно-исследовательский институт химической технологии, Москва,  
Россия

<sup>4</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва,  
Россия

<sup>5</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

## ВЛИЯНИЕ ВИДА РЗЭ НА СТРУКТУРУ И КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ТИТАНАТОВ $Ln_2Ti_2O_7$

Исследовано влияние вида РЗЭ на кристаллическую, локальную структуру и каталитические свойства титанатов  $Ln_2Ti_2O_7$  ( $Ln = Pr, Sm, Gd, Tb, Dy, Yb$ ). Показано, что порошок  $Pr_2Ti_2O_7$  имеет моноклинную структуру слоистого перовскита, а остальные образцы  $Ln_2Ti_2O_7$  ( $Ln = Sm, Gd, Tb, Dy, Yb$ ) – кубического пирохлора. Установлено, что каталитическая активность титанатов РЗЭ в реакции крекинга пропана увеличивается с уменьшением ионного радиуса РЗЭ. Обнаружена аномальная активность  $Gd_2Ti_2O_7$ .

V. V. POPOV<sup>1,5</sup>, A. P. MENUSHENKOV<sup>1</sup>, A. Yu. MOLOKOVA<sup>1</sup>,  
A. A. YASTREBTSEV<sup>1</sup>, E. B. MARKOVA<sup>2</sup>,  
A. G. CHEREDNICHENKO<sup>2</sup>, N. A. TSARENKO<sup>3</sup>, I. V. SHCHETININ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup>Peoples Friendship University of Russia (RUDN), Moscow, Russia

<sup>3</sup>JSC Scientific Research Institute of Chemical Engineering, Moscow, Russia

<sup>4</sup>National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia

<sup>5</sup>National Research Centre Kurchatov Institute, Moscow, Russia

## THE INFLUENCE OF THE $Ln$ TYPE ON THE STRUCTURE AND CATALYTIC ACTIVITY OF TITANATES $Ln_2Ti_2O_7$

The influence of the  $Ln$  type on the crystal, local structure, and catalytic properties of  $Ln_2Ti_2O_7$  titanates ( $Ln = Pr, Sm, Gd, Tb, Dy, Yb$ ) was studied. It was shown that  $Pr_2Ti_2O_7$  powder has a monoclinic structure of layered perovskite, and the other  $Ln_2Ti_2O_7$  samples ( $Ln = Sm, Gd, Tb, Dy, Yb$ ) have cubic pyrochlore one. It was found that the catalytic activity of  $Ln$  titanates in the reaction of propane cracking increases with a decrease in the  $Ln$  ionic radius. Anomalous activity of  $Gd_2Ti_2O_7$  was detected.

Сложные оксиды РЗЭ интересны как с научной, так и с практической точки зрения благодаря своим уникальным свойствам (высокая химическая, термическая и радиационная стойкость, ионная проводимость и т.д.). Исследование особенностей кристаллической и локальной структуры

соединений является необходимым для более глубокого понимания их физико-химических свойств (в частности, каталитических) и успешного использования в различных практических приложениях.

Порошки  $Ln_2Ti_2O_7$  ( $Ln = Pr, Sm, Gd, Tb, Dy, Yb$ ) были синтезированы с помощью золь-гель метода и соосаждения с последующей термообработкой прекурсоров до получения соответствующих титанатов РЗЭ. Кристаллическая и локальная структура синтезированных образцов исследована с помощью рентгеновской дифракции, ИК- и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР). Установлено, что в случае титанатов РЗЭ ( $Ln = Sm - Yb$ ) кристаллизация аморфных прекурсоров приводит сразу к образованию структуры пирохлора (пр. гр.  $Fd\bar{3}m$ ). Для  $Pr_2Ti_2O_7$  наблюдается образование структуры слоистого перовскита (пр. гр.  $P2_1$ ) (рис. 1).

Было показано, что процесс термического крекинга пропана, катализируемый порошками титанатов РЗЭ, протекает в основном по механизму деструкции. Установлено, что уменьшение ионного радиуса РЗЭ в титанатах приводит к увеличению их каталитической активности (рис. 2). Отмечена аномальная каталитическая активность порошка  $Gd_2Ti_2O_7$ .

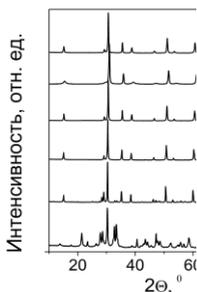


Рис. 1. Дифрактограммы порошков титанатов РЗЭ.

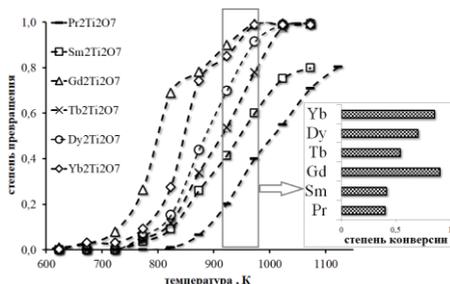


Рис. 2. Каталитические свойства порошков титанатов РЗЭ.

Обнаружено, что для всех титанатов РЗЭ селективность образования этилена остаётся неизменной в течение 5 ч работы катализаторов и колеблется в пределах 60%. Отмечено образование бутена при использовании титанатов РЗЭ, находящихся после Gd. Количество образовавшегося бутена возрастает в ряду  $Tb_2Ti_2O_7 > Dy_2Ti_2O_7 > Yb_2Ti_2O_7$ .

Синтез порошков титанатов РЗЭ и исследование их структуры было выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00133). Исследования каталитических свойств образцов проводилось при поддержке Программы РУДН «5-100».

В.В. ПОПОВ<sup>1,2</sup>, А.П.МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, А.Ю. МОЛОКОВА<sup>1</sup>, А.А.  
ЯСТРЕБЦЕВ<sup>1</sup>, Р.Д. СВЕТОГОРОВ<sup>2</sup>, И.В. ЩЕТИНИН<sup>3</sup>, Н.А. ЦАРЕНКО<sup>4</sup>,  
К.В. ПОНКРАТОВ<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

<sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва,  
Россия

<sup>4</sup>АО Ведущий научно-исследовательский институт химической технологии, Москва,  
Россия

<sup>5</sup>ООО Ренишоу, Москва, Россия

## ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРУ ПОРОШКОВ ВОЛЬФРАМАТОВ РЗЭ

Исследовано влияние вида РЗЭ и температуры отжига на кристаллическую и локальную структуру вольфраматов  $Ln_2(WO_4)_3$  с помощью дифракции и вибрационной спектроскопии (измерения выполнены на экспериментальной станции РСА синхротронного источника НИЦ Курчатовский Институт). Установлено, что кристаллизация аморфных прекурсоров наблюдается в интервале температур 500-700°C и приводит к образованию моноклинной структуры (пр. гр. C2/c (15)) в случае легких РЗЭ ( $Ln = La-Gd$ ). В  $Dy_2(WO_4)_3$  наблюдается появление дополнительной ромбической фазы (пр. гр. R3m(60)), которая становится основной в случае тяжелых РЗЭ ( $Ln = Ho-Yb$ ). Локальная структура вольфраматов РЗЭ ( $Ln = La-Dy$ ) содержит два типа неэквивалентных тетраэдров  $WO_4$ .

V. V. POPOV<sup>1,2</sup>, A. P. MENUSHENKOV<sup>1</sup>, A. Yu. MOLOKOVA<sup>1</sup>,  
A. A. YASTREBTSEV<sup>1</sup>, R. D. SVETOGOROV<sup>2</sup>, I. V. SHCHETININ<sup>3</sup>, N. A.  
TSARENKO<sup>4</sup>, K. V. PONKRATOV<sup>5</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Center Kurchatov Institute, Moscow, Russia

<sup>3</sup>National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia

<sup>4</sup>JSC Scientific Research Institute of Chemical Engineering, Moscow, Russia

<sup>5</sup>Renishaw plc, Moscow, Russia

## INFLUENCE OF SYNTHESIS CONDITIONS ON THE STRUCTURE OF REE TUNGSTATES POWDERS

The influence of the REE type and annealing temperature on the crystalline and local structure of  $Ln_2(WO_4)_3$  tungstates was studied using diffraction and spectroscopic methods (the measurements carried out at 'X-Ray Structural Analysis' end-station of NRC Kurchatov Institute synchrotron light source). It was established that crystallization of amorphous precursors is observed in the temperature range 500–700°C and leads to the formation of a monoclinic structure (sp. gr. C2/c(15)) in the case of light REE ( $Ln = La-Gd$ ). The transition to  $Dy_2(WO_4)_3$  is accompanied by appearance of the additional orthorhombic phase (sp. gr.

*Pcna(60)*), which becomes the main one in the case of heavy REE ( $Ln = Ho-Yb$ ). The local structure of *Ln tungstates* ( $Ln = La-Dy$ ) are superposition of two non-equivalent  $WO_4$  units.

В настоящее время особый интерес, как с научной, так и практической точек зрения имеют твердотельные активные материалы, обладающие полифункциональными свойствами. Одними из перспективных материалов данного класса являются вольфраматы РЗЭ, служащиеся основой новых люминофоров, лазерных сред, сегнетоэлектриков и катализаторов.

Порошки вольфраматов РЗЭ были синтезированы путем осаждения водных растворов нитратов РЗЭ  $Ln(NO_3)_3$  вольфраматом натрия  $Na_2WO_4$  с последующей прокалкой прекурсоров на воздухе при  $500-1000^\circ C$ . Было установлено, что кристаллизация первоначально аморфных прекурсоров происходит в интервале температур  $500-700^\circ C$  и приводит к образованию моноклинной структуры (пр. гр.  $C2/c$  (15)) в случае легких РЗЭ ( $Ln = La-Gd$ ). В  $Dy_2(WO_4)_3$  наблюдается появление дополнительной ромбической фазы (пр. гр. *Pcna(60)*, 43 %), которая становится основной в случае тяжелых РЗЭ ( $Ln = Ho$  и  $Yb$ ) (рис. 1а).

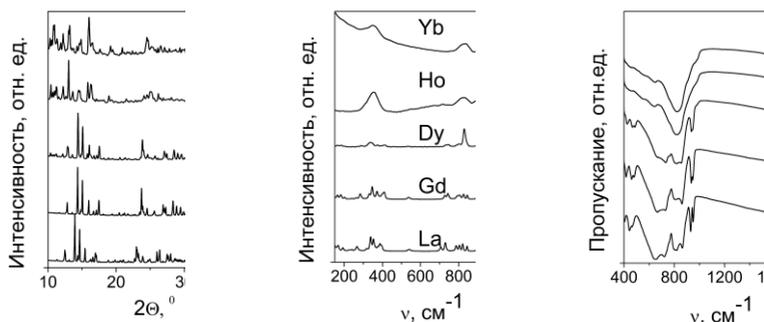


Рис. 1. Дифрактограммы (а), спектры КР(б) и ИК (в) порошков вольфраматов РЗЭ, синтезированных прокаливанием прекурсоров при  $1000^\circ C/3$  ч.

Использование колебательной спектроскопии: комбинационного рассеяния (КР) (рис. 1б) и ИК (рис. 1в) позволило сделать вывод о том, что локальная структура *Ln* вольфраматов ( $Ln = La-Dy$ ) представляет собой суперпозицию двух типов неэквивалентных вольфраматных тетраэдров:  $W^I O_4$  ( $C_2$  тип симметрии) и  $W^{II} O_4$  ( $C_1$  тип симметрии). Отмечено наличие гидроксильных групп в структуре *Ln* вольфраматов ( $Ln = Dy-Yb$ ) (рис. 1в).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00133).

В.В. ПОПОВ<sup>1,5</sup>, А.П. МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, А.А. ЯСТРЕБЦЕВ<sup>1</sup>, Б.Р. ГАЙНАНОВ<sup>1</sup>, Г.Р. КАСТРО<sup>2</sup>, В.Ю. МУРЗИН<sup>3</sup>, А.Б. КАЛИНКО<sup>3</sup>, И.В. ЩЕТИНИН<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

<sup>3</sup>DESY, Photon Science, Гамбург, Германия

<sup>4</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

<sup>5</sup>НИИ Курчатовский Институт, Москва, Россия

## ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$ ( $0 < x < 1$ , $0 < y < 1$ )

Впервые с помощью комплекса методов рентгеновской дифракции и XAFS спектроскопии исследованы особенности образования и эволюции кристаллической и локальной структуры сложных оксидов  $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$  ( $0 < x < 1$ ,  $0 < y < 1$ ) при полностью обратимом фазовом переходе «порядок-беспорядок-порядок». Проведен экспериментальный анализ XAFS-спектров и теоретическое моделирование локальной структуры синтезированных соединений.

V.V. POPOV<sup>1,5</sup>, A.P. MENUHENKOV<sup>1</sup>, A.A. YASTREBTSEV<sup>1</sup>,  
B.R. GAYNANOV<sup>1</sup>, G.R. CASTRO<sup>2</sup>, V.YU. MURZIN<sup>3</sup>,  
A.B. KALINKO<sup>3</sup>, I.V. SHCHETININ<sup>4</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MPhI, Moscow, Russia

<sup>2</sup>European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France

<sup>3</sup>DESY, Photon Science, Hamburg, Germany

<sup>4</sup>National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia

<sup>5</sup>National Research Centre Kurchatov Institute, Moscow, Russia

## PECULIARITIES OF PHASE TRANSITIONS IN COMPLEX OXIDES $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$ ( $0 < x < 1$ , $0 < y < 1$ )

We have implemented a combined study of formation and evolution of the crystal and local structure of complex oxides  $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$  ( $0 < x < 1$ ,  $0 < y < 1$ ) upon completely reversible “order-disorder-order” phase transition using XRD and XAFS methods. An experimental analysis of the XAFS spectra and theoretical modeling of the local structure of the synthesized compounds were carried out.

Сложные оксиды РЗЭ с общей формулой  $A_2^{(3+)}B_2^{(4+)}O_7$  ( $A = \text{РЗЭ}$ ;  $B = \text{Ti, Zr, Hf}$ ) являются уникальными системами для исследования фазовых переходов «порядок-беспорядок». Одним из основных факторов, определяющих кристаллическую и локальную структуру этих соединений, является отношение радиусов катионов  $\gamma = r_{A(3+)} / r_{B(4+)}$ .

В работе были исследованы фазовые переходы в соединениях  $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$  ( $0 < x < 1$ ,  $0 < y < 1$ ), при последовательном замещении *f*- и *d*-элементов (рис. 1). Показано, что в сложных оксидах РЗЭ замещение катионов  $(1) \rightarrow (3) \rightarrow (5)$ , приводит к реализации обратимого фазового перехода «пирохлор – флюорит – пирохлор» с одновременным сосуществованием в соединениях (2) и (4) двух кубических структур с разными параметрами элементарной ячейки. При замещении катионов согласно процессу  $(5) \rightarrow (7) \rightarrow (1)$ , происходит переход «пирохлор – слоистый перовскит – пирохлор», с образованием дополнительных низко симметричных фаз в промежуточных соединениях (6) и (8).

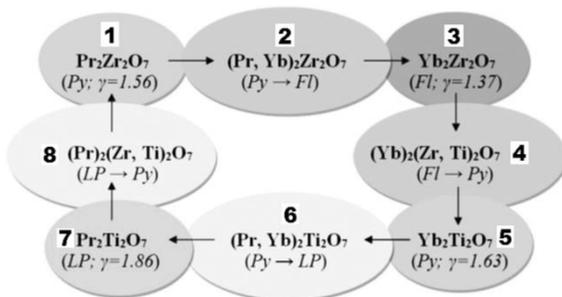


Рисунок 1. Схема полностью обратимого фазового перехода «порядок-беспорядок-порядок» в системе сложных оксидов  $(Yb_xPr_{1-x})_2(Ti_yZr_{1-y})_2O_7$ .

Проведён анализ экспериментальных данных EXAFS- и XANES-спектров, а также моделирование XANES-спектров [1] по уточнённым структурным параметрам для соединений (1), (3), (5) и (7). Анализ EXAFS-спектров показал, что наиболее чувствительным к изменению локальной и кристаллической структуры является вид FT-модуля EXAFS-функции  $\chi(k)$  на Pr  $L_3$ -крае. Были установлены тонкие особенности поведения предкраевой области Ti К-края от симметрии локального окружения атома титана. Для соединений (1) и (5) со структурой пирохлора, было показано, что экспериментальные XANES-спектры К-краёв атомов Zr и Ti, наиболее точно описываются моделью с двумя заполненными кислородными вакансиями и четырьмя антиструктурными дефектами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00133).

#### Список литературы

1. Bunau O. and Joly Y. // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V.21. P. 345501.

А.Р. ПРИЩЕПА<sup>1,2</sup>, А.В. САДАКОВ<sup>2</sup>, С.Ю. ГАВРИЛКИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩЕГО СВЕРХПРОВОДНИКА KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Была измерена теплоёмкость монокристалла железосодержащего сверхпроводника KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>. Измерения проводились методом релаксационной калориметрии при температурах 0,4-20 К в магнитных полях величиной 0-7 Тл параллельных оси *c* кристалла. В результате обработки электронной теплоёмкости в низких температурах было выявлено наличие двух сверхпроводящих щелей. Также была получена зависимость  $H_{c2}(T)$ .

A.R. PRISHCHENPA<sup>1,2</sup>, A.V. SADAKOV<sup>2</sup>, S.Y. GAVRILKIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup>P. N. Lebedev Physical Institute RAS, Moscow, Russia

## THERMODYNAMIC MEASUREMENTS OF THE IRON-BASED SUPERCONDUCTOR KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> IN A MAGNETIC FIELD

The single crystal specific heat (SH) of iron-based superconductor KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> was measured. Experiment was carried out by the method of relaxation calorimetry in magnetic fields 0-7 T applied along the *c*-axis of the crystal. As a result of electronic SH analysis at low temperature, presence of two superconducting gaps was revealed. Also temperature dependence of upper critical field  $H_{c2}(T)$  was obtained.

Со времени своего открытия в 2008 году железосодержащие сверхпроводники [1] вызывают большой интерес у научного сообщества. Это связано с нетривиальным механизмом спаривания, который неизвестен до сих пор, и разнообразной структурой сверхпроводящих щелей. Например, в Fe(Se<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub>) было обнаружено две щели с *s*- и *d*- симметриями [2], а в соединении BKFA две щели с *s*-симметрией [3]. Поэтому для исследования подобных материалов необходимо проведение различных экспериментов по извлечению щелевой структуры, а так же привлечение многощелевых теоретических моделей.

В данной работе проводилось исследование монокристаллов KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, которые были выращены по раствор-расплавному методу [4]. Соотношение между компонентами K:Fe:As было 1:5:5. KFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> является

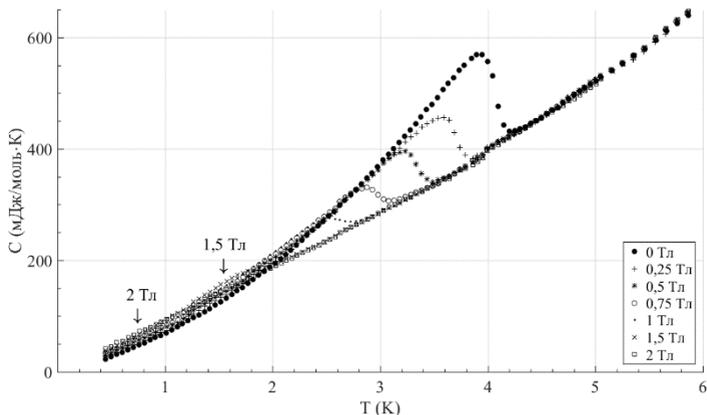


Рис. 1. Зависимость молярной теплоёмкости  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  в зависимости от температуры в разных магнитных полях.

перодопированным соединением типа  $\text{A}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$  (A – щелочно-земельный металл,  $x = 1$ ). Даже после полного замещения калием соединение остаётся сверхпроводником.

Измерения теплоёмкости проводились методом релаксационной калориметрии в установке Physical Property Measurement System (PPMS) при температурах 0,4–20 К без поля и 0,4–8 К в магнитных полях до 7 Тл, приложенных вдоль оси с кристалла (Рис. 1).

Критическая температура перехода составила  $T_c \approx 4,06$  К, что несколько выше той, которая была получена в более раннем исследовании [4]. В ходе разделения электронного и фононного вкладов в теплоёмкость были уставлены постоянная Зоммерфельда  $\gamma_N = 87,6$  мДж/моль  $\cdot$  К<sup>2</sup> нормальной электронной фазы и решёточный коэффициент  $\beta = 0,635$  мДж/моль  $\cdot$  К<sup>4</sup>. Из решёточного коэффициента была определена температура Дебая  $\theta_D = 248$  К. Второе критическое  $H_{c2}$  для оси с составляет около 1,9 Тл, оно было получено путём экстраполяции зависимости  $H_{c2}(T)$ . Из обработки электронной теплоёмкости сверхпроводящей фазы было выявлено, что  $\text{KFe}_2\text{As}_2$  имеет две изотропные сверхпроводящие щели.

#### Список литературы

1. Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, J. Am.Chem. Soc. 130, 3296 (2008).
2. L. Wang, F. Hardy, T. Wolf et. al., Phys.Status Solidi (b) 254 (1) (2017).
3. P. Popovich, A. V. Boris, O. V. Dolgov et.al., Phys. Rev. Lett. 105, 027003 (2010).
4. M. Abdel-Hafiez, S. Aswartham, S. Wurmehl, Phys. Rev. B 85, 134533 (2012).

А.Э. РАБАДАНОВА, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, Д.К. ПАЛЧАЕВ,  
Ш.П. ФАРАДЖЕВ, П.М. САЙПУЛАЕВ

*Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

## **ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИК $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ , ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ**

Методом искрового плазменного спекания получены наноструктурированные керамические материалы  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$  с  $x = 0 \div 0.2$ . Проведены исследования диэлектрической проницаемости и потерь этих материалов в зависимости от степени замещения ионов  $\text{Bi}^{3+}$  на  $\text{La}^{3+}$ .

A.E. RABADANOVA, S.KH. GADZHIMAGOMEDOV,  
D.K. PALCHAEV, SH.P. FARADZHEV, P.M. SAYPULAEV

*Dagestan State University, Makhachkala, Russia*

## **DIELECTRIC PROPERTIES OF CERAMICS $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$ , PREPARED BY METHOD OF SPARK PLASMA SINTERING**

By the method of spark plasma sintering, nanostructured ceramic materials  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$  with  $x = 0 \div 0.2$  were obtained. The dielectric permittivity and loss of these materials were studied depending on the degree of substitution of  $\text{Bi}^{3+}$  ions for  $\text{La}^{3+}$ .

Практическое применение материалов на основе феррита висмута (BFO) с высокими значениями температур антиферромагнитного ( $T_N = 370^\circ\text{C}$ ) и сегнетоэлектрического ( $T_C = 827^\circ\text{C}$ ) переходов, ограничивается высокими значениями токов утечки, что обусловлено наличием примесных фаз в структуре BFO, возникающих при синтезе. Поэтому, для уменьшения количества примесных фаз и плотности тока утечки, а также снижения диэлектрических потерь, обычно, используют [1,2] частичное замещение  $\text{La}^{3+}$  на  $\text{Bi}^{3+}$  в структуре BFO. Для изучения влияния таких замещений на структуру и свойства BFO, необходимо было решить проблему стабилизации структуры BFO с минимальным содержанием примесных фаз. Способ решения проблемы был разработан в [3]. Нанопорошки состава  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$  (BLFO) с  $x = 0 \div 0.2$  были получены согласно рекомендациям [3], путем сжигания нитрат-органических прекурсоров. Из этих нанопорошков методом искрового плазменного спекания были изготовлены керамические образцы [4].

Исследования частотных и температурных зависимостей диэлектрических свойств этих керамик проводились на автоматизированной установке с использованием измерителя LCR-78110G. Наблюдается заметное (см. рис.1.) повышение диэлектрической проницаемости у образцов BLFO относительно

ВFO. Максимальное ее значение при  $x = 0.10$  выше, чем у чистого ВFO, более чем в 6 раз.

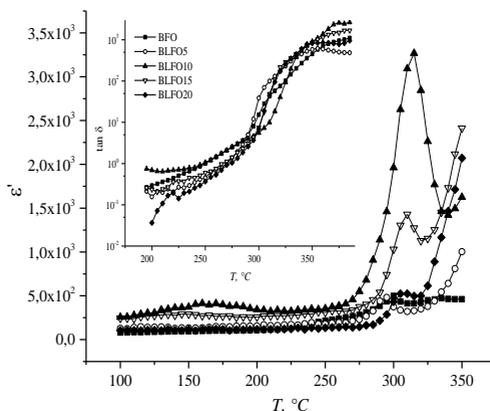


Рис. 1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  и диэлектрических потерь  $\text{tg } \delta$  (вставка) для  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_3$  на частоте 1кГц.

На вставке (см. рис.1) приведены зависимости диэлектрических потерь от температуры на той же частоте. Имеет место незначительное снижение  $\text{tg } \delta$  у допированных образцов ( $x = 0.05, 0.15$  и  $0.2$ ) относительно ВFO.

Работа поддержана частично грантом «УМНИК» № 0046411.

#### Список литературы

1. Cai W., Gao R., Fu C., Yao L., Chen G., Deng X. and et al. // Journal of Alloys and Compounds. 2019. Vol. 774, P. 61-68.
2. Singh J., Agarwal A., Sanghi S., Bhasin T., Yadav M., Bhakar U. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2019. Vol. 487, P. 165337.
3. Алиханов Н.М., Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х. и др. Способ получения нанопорошка феррита висмута // Патент № 2641203 от 16.01.2018.
4. Садыков С.А., Палчаев Д.К., Мурлиева Ж.Х., Алиханов Н.М.-Р. и др. // Физика твердого тела. 2017. Том 59, №. 9, С. 174- 175.

Р.И. РОМАНОВ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, О.В. РУБИНКОВСКАЯ, В.Н.  
НЕВОЛИН, В.Ю. ФОМИНСКИЙ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МИКРО-, НАНО- И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПЛЕНОК WSe<sub>2</sub> ДЛЯ ФОТОКАТОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ**

Приведены результаты всестороннего исследования нанопленок WSe<sub>2</sub>, сформированных различными методами для создания полупроводниковых гетероструктур, перспективных для получения H<sub>2</sub> фото-активированным расщеплением воды. Выявлены факторы, влияющие на оптические свойства и зонную структуру пленок, показана возможность применения этих нанопленок для создания гетероструктур MoS<sub>x</sub>/WSe<sub>2</sub>, обеспечивающих эффективное выделение водорода в кислотном растворе при реализации Z-схемы разделения электронов и дырок, образующихся под световым потоком.

R.I. ROMANOV, D.V. FOMINSKI, O.V. RUBINKOVSKAYA, V.N.  
NEVOLIN, V.YU. FOMINSKI

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## **MICRO-, NANO- AND ELECTRONIC STRUCTURE OF WSe<sub>2</sub> FILMS FOR PHOTOCATHODS OF WATER SPLITTING**

The results of a comprehensive study of WSe<sub>2</sub> nanofilms formed by various methods for semiconductor heterostructures that are promising for H<sub>2</sub> evolution by photo-activated water splitting are presented. Factors affecting the optical properties and band structure of the films are revealed; the possibility of using these nanofilms to obtain MoS<sub>x</sub>/WSe<sub>2</sub> heterostructures that provide efficient hydrogen production in an acid solution by implementing the Z-scheme for the separation of electrons and holes formed under a light flux is shown.

Полупроводниковые наноматериалы на основе халькогенидов переходных металлов являются перспективным компонентами для создания каталитически активных гетероструктур, обеспечивающих эффективное расщепление воды под солнечным светом. Диселенид вольфрама интересен оптимальной шириной запрещенной зоны и удачным расположением энергетических уровней относительно равновесного потенциала H<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>. Поэтому вопрос о получении нанопленок WSe<sub>2</sub> с заданными характеристиками крайне актуален на сегодняшний день. Для получения этих пленок использовались методы физического осаждения и термохимического синтеза при повышенных температурах.

На рис. 1(а,б) показана характерная морфология пленок WSe<sub>2</sub>, а также упаковка атомов в формируемых пленках WSe<sub>2</sub>. Видно, что удается создавать

нано-кристаллическую структуру, в которой формируется достаточно совершенная упаковка атомов, характерная для фазы 2H-WSe<sub>2</sub>.

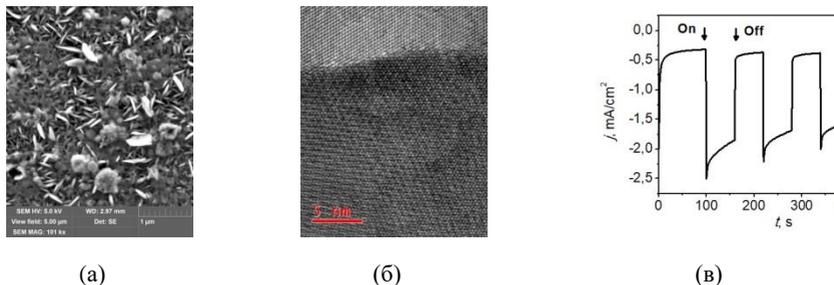


Рис. 1. (а) Электронное изображение поверхности пленки WSe<sub>2</sub>; (б) просвечивающая электронная микроскопия пленки WSe<sub>2</sub>; (в) фото-генерация импульсов тока от выделения H<sub>2</sub> в кислотном растворе при включении/выключении освещения ксеноновой лампы образца MoS<sub>3</sub>/WSe<sub>2</sub>/BC<sub>3</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (потенциал образца близок к 0).

Исследования рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией и оптической спектрометрией показали, что при оптимизации режимов получения пленки WSe<sub>2</sub> обладали удачным расположением зоны проводимости относительно потенциала H<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>, однако для повышения эффективности фото-электрокатализа с на электродах с этой пленкой приходилось наносить аморфную нанопленку р-MoS<sub>x</sub> с более высокой каталитической активностью [1]. Фото-генерация электронов в пленке MoS<sub>x</sub> обеспечивала достаточно высокую эффективность выделения H<sub>2</sub> (рис. 1(в)), что указывало на высокую возможность рекомбинации дырок в MoS<sub>x</sub> с электронами, образующимися при освещении WSe<sub>2</sub>.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 19-19-00081).

*Список литературы*

1. Fominski V.Yu., Romanov R.I., Fominski D.V. et al.// Opt. Laser Technol. 2018. Vol. 102. P. 74-84.

О.В. РУБИНКОВСКАЯ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, Р.И. РОМАНОВ, В.Ю.  
ФОМИНСКИЙ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

**ИМПУЛЬСНОЕ ЛАЗЕРНОЕ ОСАЖДЕНИЕ  
НАНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ СЛОЕВ Mo-S-P ИЗ  
КОМПОЗИТНОЙ МИШЕНИ MoS<sub>2</sub>/P И ИХ  
ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРИ  
РАСЩЕПЛЕНИИ ВОДЫ**

Приведены результаты структурных и электрохимических исследований двухслойных пленок Mo-S-P/WO<sub>3</sub>, в которых каталитический слой получен методом импульсной лазерной абляции мишени из смеси порошков MoS<sub>2</sub> и P. Показано, что легирование фосфором вызывало значительное улучшение электрокаталитических свойств пленок сульфида молибдена в реакции выделения H<sub>2</sub> в кислотном растворе. Также обнаружено влияние фосфора на каталитическую активность тонкопленочных оксидов Mo, образующихся при анодном окислении пленок MoS<sub>x</sub>P<sub>y</sub>, что проявилось в повышении эффективности выделения O<sub>2</sub>. Проведен анализ синергетического влияния фосфора по теории функционала плотности.

O.V. RUBINKOVSKAYA, D.V. FOMINSKI, R.I. ROMANOV, V.Y.  
FOMINSKI

*<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

**PULSE LASER DEPOSITION OF NANO-STRUCTURED Mo-S-P  
LAYERS FROM THE MoS<sub>2</sub>/P COMPOSITE TARGET AND THEIR  
ELECTROCATALYTIC PROPERTIES AT OVERALL WATER  
SPLITTING**

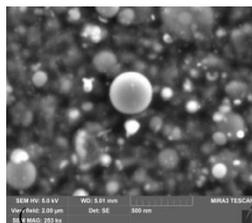
The results of structural and electrochemical studies of two-layer Mo-S-P/WO<sub>3</sub> films in which the catalytic layer was obtained by pulsed laser ablation of a target from a mixture of MoS<sub>2</sub> and P powders are presented. It is shown that doping with P caused a significant improvement in the electrocatalytic properties of molybdenum sulfide films in the reaction of H<sub>2</sub> evolution in an acid solution. The effect of P on the catalytic activity of thin-film Mo oxides formed during the anodic oxidation of the MoS<sub>x</sub>P<sub>y</sub> films was also detected. It was manifested in an increase in the efficiency of O<sub>2</sub> evolution. The analysis of the synergistic effect of phosphorus is carried out using the density functional theory.

Осаждение тонких пленок MoS<sub>x</sub>P<sub>y</sub> позволяет значительно повысить каталитическую активность поверхности металлооксидных электродов в реакции выделения H<sub>2</sub> при расщеплении воды [1]. Однако, проблема улучшения каталитических свойств сульфидов металлов сохраняет свою актуальность.

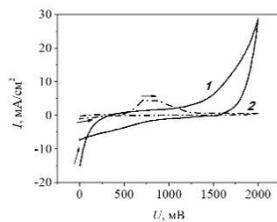
Одно из возможных направлений решения этой проблемы связывается с модифицированием этих материалов за счет легирования фосфором.

На рис. 1 представлены результаты исследования морфологии и электрохимических свойств пленок Mo-S-P, полученных при абляции композитной мишени MoS<sub>2</sub>/P. Пленки Mo-S-P осаждались на пленки WO<sub>3</sub>, предварительно нанесенные на стеклянные подложки с проводящим слоем SnO<sub>2</sub>(F). Для сравнения приведены характеристики пленок MoS<sub>3</sub>. Пленки осаждались при комнатной температуре подложки и имели аморфную структуру.

И  
спо  
льзо  
ван  
ван  
лазе  
рно  
й  
абля  
ции  
позв



а)



б)

Рис. 1. (а) Электронное изображение пленки Mo-S-P; (б) линейные вольтамперограммы для пленок Mo-S-P (1) и MoS<sub>3</sub> (2) в растворе 0,5M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

оляло формировать nano-структурированный слой Mo-S-P, который значительно увеличивал токи, обусловленные выделением H<sub>2</sub> по сравнению с эффектом от пленки MoS<sub>3</sub>. Состав этого слоя описывался формулой MoS<sub>1,3</sub>P<sub>0,5</sub>. Добавление фосфора в мишень оказывало влияние на соотношение S/Mo в пленке, заметно уменьшая его. При потенциале более +500 мВ протекало окислирование пленки Mo-S-P, в результате которого формировался тонкий слой MoO<sub>2</sub>(S,P), который значительно повышал эффективность выделения O<sub>2</sub>.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-2-00191а).

#### Список литературы

1. Fominski V., Gnedovets A., Fominski D. et al. // *Nanomaterials*. 2019, 9(10), 1395.

**А.И. САВВАТИМСКИЙ**

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **КРИВАЯ ПЛАВЛЕНИЯ ГРАФИТА (ОБ ОШИБОЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЯХ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ)**

В работе [1] тонкая пластинка анизотропного графита зажималась между двух стеклянных пластин (а также с боков) – образец типа «сэндвич» и нагревалась импульсом ток за время  $\approx 1$  мкс. Получено расширение графита (интерферометрической методикой) перпендикулярно пластинам в условиях высокого давления. Давление рассчитывалось по уравнению состояния (с учетом измеренного расширения). Температура, измеренная до 8000 К, калибровалась только в одной точке для твердой фазы (4000 К). Получена кривая плавления  $P(T)$  при давлениях 3-18 кбар, (соответствующие температуры плавления 6300 - 7000 К). Эта кривая лежит далеко от всех известных экспериментальных результатов.

В другой работе той же группы [2] утверждается, что плавление графита является переходом металл-неметалл, что не согласуется с результатами всех известных экспериментов. Данная аналитическая работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093.

**A.I. SAVVATIMSKIY**

*Joint Institute for High Temperature RAS, Moscow, Russia*

## **GRAPHITE MELTING CURVE (ON ERRONEOUS PUBLICATIONS IN PULSE HEATING)**

In [1] a thin plate of anisotropic graphite was clamped between two glass plates (and from both sides also) - a sample of the sandwich type and heated by a current pulse for a time of  $\approx 1$   $\mu$ s. The expansion of graphite was obtained (by interferometric method) perpendicular to the plates under high pressure. Pressure was calculated by the equation of state (taking into account the measured expansion). The temperature, measured up to 8000 K, was calibrated only for one point at the solid phase (4000 K). A melting curve  $P(T)$  was obtained at pressures of 3-18 kbar (corresponding temperatures 6300-7000 K). This curve is far from all known experimental results.

In another work of the same group [2] it is stated that the melting of graphite is a metal-nonmetal transition, which is not consistent with the results of all known experiments.

The analytical study was carried out under the financial support of RFBR grant No. 19-08-00093.

В данной аналитической работе указаны возможные ошибки измерения расширения в [1], которые привели к недостоверным данным для кривой плавления графита и тройной точки углерода.

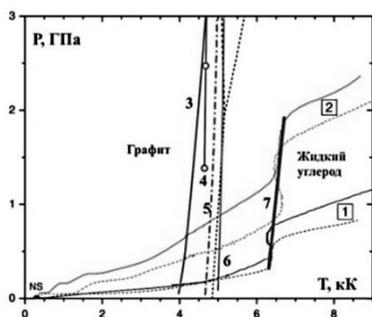


Рис. 1. Кривая плавления графита. Приведена основная часть рисунка из [1] для демонстрации отклонения результатов [1] от известных данных, (в основном экспериментальных) о кривой плавления графита.

6 – Результат F. Bundy

7 – Недостоверные данные [1].

В [2] на основании анализа производных ( $T$  не измерялась) утверждается, что в точке плавления графита происходит переход металл – неметалл, и приводится вывод: изохорная производная электросопротивления ( $d\rho/dT$ )  $< 0$  для жидкого углерода. Во-первых, электросопротивление жидкого углерода имеет сравнительно низкие значения (рис.2). Во-вторых, температурный коэффициент сопротивления жидкого углерода ( $d\rho/dT$ )  $\geq 0$ , как показывает наш эксперимент (рис.3). В-третьих, ртуть имеет слабый отрицательный  $d\rho/dT$ , что не мешает ей быть металлом.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093

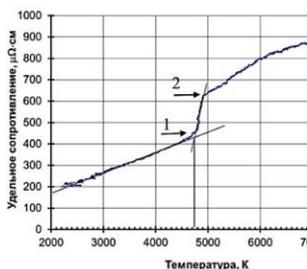


Рис. 2.

Электросопротивление  $R$  графита HAPG, зажатого между тонкими кварцевыми стеклами. 1 – начало плавления; 2 – окончание плавления.

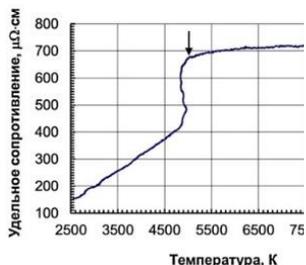


Рис.3

Электросопротивление  $R$  графита HOPG, зажатого между толстыми стеклами ТФ-5 для создания изохорного нагрева. Стрелка – начало жидкого состояния.

#### Список литературы

1. Kondratyev A M Rakhel A D, Physical review letters 122 (2019) 175702
2. Kondratyev A M Korobenko V N Rakhel A D, J. Phys.: Condens. Matter 28(2016) 265501

А.И. САВВАТИМСКИЙ, С.В. ОНУФРИЕВ, Г.Е. ВАЛЬЯНО

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ КАРБИДОВ ZrC, HfC, TaHfC В ОБЛАСТИ ПЛАВЛЕНИЯ ПРИ БЫСТРОМ (МИКРОСЕКУНДНОМ) НАГРЕВЕ ТОКОМ**

Впервые в эксперименте получено электросопротивление R карбидов в области плавления и в жидкой фазе (вплоть до 5000 К). Причем получена зависимость R не только от температуры, но и от удельной введенной энергии (энтальпии). Температура измерялась от 2000 до 5000 К при нагреве тонкой пластинки карбида однократным импульсом тока за время 5-8 микросекунд. Рассмотрено влияние размеров кристаллитов в карбидах на качество фиксации температурного плато при плавлении карбидов. Данная публикация выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№ 19-79-30086, руководитель Г.А. Месяц).

A.I. SAVVATIMSKIY, S.V. ONUFRIEV, G.E. VALYANO

*<sup>1</sup>Joint Institute for High Temperature RAS, Moscow, Russia*

## **ELECTRICAL RESISTANCE OF CARBIDES ZrC, HfC, TaHfC IN THE MELTING REGION DURING RAPID (MICROSECOND) CURRENT HEATING**

The electrical resistance R for carbides in the melting region and in the liquid phase (up to 5000 K) was obtained for the first time in the experiment. Moreover, the dependence of R is obtained not only on the temperature, but also on the specific energy input (enthalpy). The temperature was measured from 2000 to 5000 K under heating a thin carbide plate by a single current pulse over a time of 5-8 microseconds. The influence of the size of carbides crystallites on the quality of fixing temperature plateau during melting is considered. This publication was made with the financial support of the RNF grant (no. 19-79-30086, headed by G. A. Mesyats).

Исходная мишень карбидов нарезалась на пластинки толщиной 50-150 микрон, которые размещались между двумя пластинами кварцевого стекла (упаковка типа «сэндвич»), - для устранения возможной сублимации, с нарушением стехиометрии соединения, и предотвращения возможного разряда по поверхности. Температура измерялась пирометром на основе быстродействующего фотодетектора PDA-10A (Thorlabs). За  $\approx 300$  К до начала плавления для всех карбидов наблюдался крутой рост теплоемкости, возможно связанный с образованием неравновесных дефектов Френкеля, в условиях невозможности тепловой диффузии обеспечить насыщение объема равновесными вакансиями.

Получены электросопротивления для всех трех карбидов. Кроме того выяснена роль величины исходных кристаллитов в надежной фиксации области плавления при быстром (мкс) нагреве током.

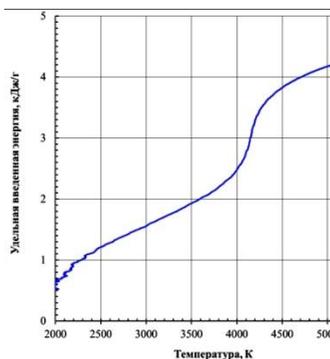


Рис. 1. Зависимость удельной введенной энергии (энтальпии) для карбида гафния HfC от температуры.

В связи с крупными кристаллитами и коротким временем нагрева область плавления нечетко выражена. Необходимо изготавливать карбиды в виде более тонких структур.

Размер кристаллитов 10-20 микрон

В отличие от плавных изгибов на рис.1, электросопротивление (в зависимости от энтальпии) для HfC показывает четкое изменение хода кривой при фазовом переходе твердое – жидкое.

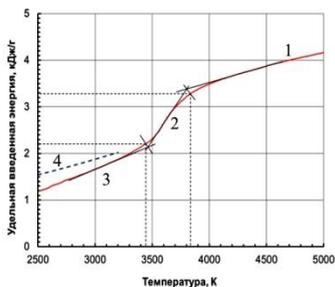


Рис. 2. Удельная введенная энергия карбида циркония ZrC – от температуры. 1 – жидкое состояние; 2 – область фазового перехода; 3 – твердое состояние; 4 – литературные данные - расчет.

Размер кристаллитов - 2-10 микрон

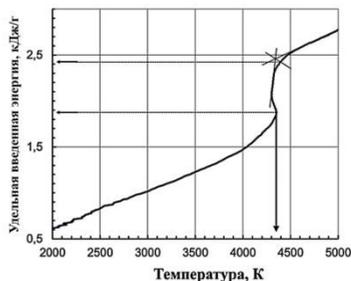


Рис.3. Удельная введенная энергия для смешанного карбида (TaHfC5). Во время плавления  $\approx 4300$  К излучательная способность падает (и, якобы, падает температура).

Размер кристаллитов - 35-170 нанометров

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№ 19-79-30086, руководитель Г.А. Месяц).

А.И. САВВАТИМСКИЙ<sup>1</sup>, С.В. ОНУФРИЕВ<sup>1</sup>, Г.Е. ВАЛЬЯНО<sup>1</sup>, С.А.  
МУБОЯДЖЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Всероссийский институт авиационных материалов, Москва, Россия

## **ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КАРБИДА ГАФНИЯ (HfC) В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ 2000 – 5000 К**

Впервые в эксперименте получены теплофизические свойства: введенная удельная энергия (энтальпия), удельная теплоемкость  $C_p$ , электросопротивление, - для тугоплавкого карбида гафния HfC. Температуры измерялись от 2000 до 5000 К при нагреве тонкой пластинки спеченного карбида однократным импульсом тока (около 25 кА) за время 5-8 микросекунд. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093.

A.I. SAVVATIMSKIY<sup>1</sup>, S.V. ONUFRIEV<sup>1</sup>, G.E. VALYANO<sup>1</sup>,  
S.A. MUBOYADZHANYAN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Joint Institute for High Temperature RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>All-Russian Institute for Aviation Materials, Moscow, Russia

## **THERMOPHYSICAL PROPERTIES FOR CARBIDE (HfC) IN SOLID AND LIQUID STATES UNDER THE TEMPERATURES 2000 – 5000 K**

For the first time in the experiment, thermophysical properties were obtained: the input specific energy (enthalpy), specific heat  $C_p$ , electrical resistance, - for refractory hafnium carbide HfC. Temperatures 2000 – 5000 K were measured under the heating of thin plate of sintered carbide by a single current pulse ( $\approx 25$  kA) for a time of 5-8 microseconds. The experimental study was carried out under the financial support of RFBR grant No. 19-08-00093.

Исходная мишень HfC (43ат.% углерода и размер кристаллитов 5-10 микрон) нарезалась на пластинки толщиной 100-150 микрон (рис.1), которые размещались между двумя пластинами кварцевого стекла (упаковка типа «сэндвич»), - для устранения возможной сублимации, с нарушением стехиометрии соединения, и предотвращения возможного разряда по поверхности. Температура (рис.2) измерялась пирометром на основе быстродействующего фотодетектора PDA-10A (Thorlabs). За  $\approx 300$  К до начала плавления наблюдался крутой рост теплоемкости (рис.3), возможно связанный с образованием неравновесных дефектов Френкеля, в условиях невозможности тепловой диффузии обеспечить насыщение объема равновесными вакансиями. После плавления аномалия теплоемкости также быстро спадала к обычным величинам теплоемкости ( $\approx 0.5-0.6$  Дж/г·К).

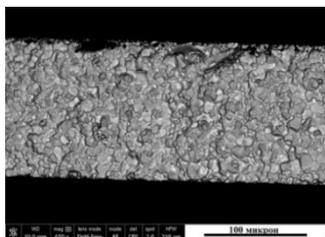


Рис. 1. Вид сечения образца (в изломе). Толщина 130 микрон. Размер кристаллитов -5-10 микрон. Размер штриха – 100 микрон.

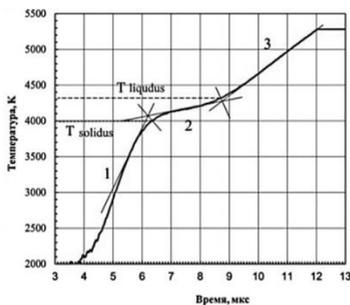


Рис. 2. Зависимость температуры от времени нагрева карбида гафния (для одного из образцов).

1 – Твердое состояние; 2 – Область фазового перехода ( $T_{sol} \approx 4000-4100$  К;  $T_{liq} \approx 4200-4300$  К); 3 – Жидкое состояние (до температуры  $T = 5300$  К).

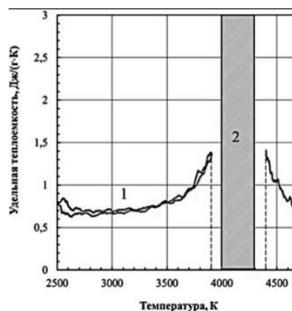


Рис.3. Зависимость удельной теплоемкости карбида гафния от  $T$  вблизи фазового перехода. 1 – твердая фаза; 2 – плавление; 3 – жидкая фаза. Для твердой фазы представлены результаты нагрева двух образцов. Заштрихована область плавления.

Температура плавления  $HfC$  для данного состава равна:  $T_{solidus} \approx 4000-4100$  К;  $T_{liquidus} \approx 4200-4300$  К; теплота плавления  $\Delta H \approx 0.8$  кДж/г. Электросопротивление (в зависимости от энтальпии) показывает четкое изменение хода кривой при фазовом переходе твердое – жидкое.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, № 19-08-00093.

С.В. САВУШКИНА<sup>1,2</sup>, Л.Е. АГУРЕЕВ<sup>1</sup>, А.А. АШМАРИН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша», Москва, Россия,

<sup>2</sup>Московский авиационный институт, Москва, Россия

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СПЛАВА Al-Zr-Cr, ПОЛУЧЕННОГО ИСКРОВЫМ ПЛАЗМЕННЫМ СПЕКАНИЕМ**

С помощью механического легирования и искрового плазменного спекания получены алюминиевые сплавы системы Al-Cr-Zr. Исследованы структура и свойства сплавов методами электронной растровой и просвечивающей микроскопии, рентгенофазового анализа и трехточечного изгиба.

S.V. SAVUSHKINA<sup>1,2</sup>, L.E. AGUREEV, A.A. ASHMARIN

<sup>1</sup>Keldysh Research Center, Moscow, Russia,

<sup>2</sup>Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia

### **STUDY OF Al-Zr-Cr ALLOY PRODUCED BY SPARK PLASMA SINTERING**

Aluminum alloys Al-Cr-Zr were obtained by mechanical alloying and spark plasma sintering. The structure and the properties of alloys were studied by scanning and transmission electron microscopy, XRD analysis, and three-point bending.

Известно, что при высоких температурах алюминиевые сплавы теряют термическую стабильность, происходит рост зерна, рост первичных кристаллов, рост и превращения примесей, рост интерметаллидных грубых фаз и сфероидизация [1]. Всё это ухудшает высокотемпературные механические и функциональные свойства алюминия. Однако, ввод переходных металлов в матрицу может нивелировать эти отрицательные эффекты. В основном хром, цирконий и молибден эффективны для стабилизации микроструктуры и механических свойств. Для улучшения микротвердости, износостойкости и коррозионной стойкости спеченного материала перспективным является формирование керамикоподобного покрытия методом микродугового оксидирования [2].

В данной работе методом искрового плазменного спекания в вакууме формировали сплав системы Al-Cr-Zr. В качестве порошков использовали АД-4, ПХ-1С, ПЦРК-1. Механолегирование алюминия проводили в планетарной мельнице, где для помола использовали шары из закалённой стали диаметром 5 мм в соотношении П:Ш=1:10. В качестве смазки добавляли 0,1% масс. гексаметилдисилазана. Смешение проводили в течение 30 мин в среде аргона. Получали сплавы Al-0,3%Zr -(0,25; 0,5; 1%Cr). Структуру сплавов исследовали помощью растровой электронной (РЭМ), просвечивающей электронной

микроскопии (ПЭМ) и рентгенофазового анализа. Исследование прочностных свойств проводили методом трехточечного изгиба.

Структура сплавов представляет собой частично пересыщенный твердый раствор Zr и Cr в Al. Средний размер зерен сплава составляет около 5 мкм. Хромосодержащая фаза Al<sub>7</sub>Cr, представлена в виде кристаллов пластинчатой формы размером до 5 мкм. Первичные кристаллы Al<sub>3</sub>Zr в виде игл длиной до 20 нм также присутствуют в алюминиевой матрице (рис. 1).

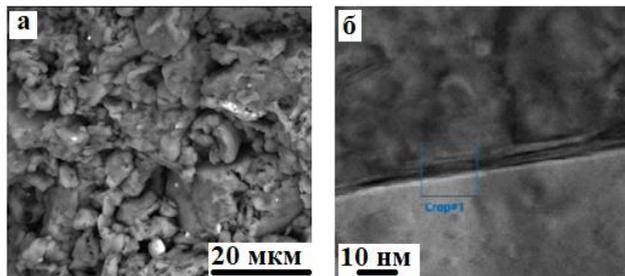


Рис. 1. РЭМ изображение структуры сплава Al-Cr-Zr в области излома (а) и ПЭМ изображение границы зерна (б).

Предел прочности на изгиб для сплавов, содержащих 0,25; 0,5; 1%Cr составил ~ 300, 360 и 156 МПа при комнатной температуре и ~ 300, 358 и 165 МПа при 300 °С. Наименьшей пористостью обладают образцы, содержащие 0.5% Cr. Увеличение содержания Cr в композите до 1% приводит к увеличению пористости до 12% и формированию крупных хромосодержащих включений по границам зерен композита, что приводит к ухудшению механических свойств материала. Рентгенофазовый анализ показал, что параметр кристаллической решетки уменьшается с увеличением содержания хрома, как и область когерентного рассеяния, что можно объяснить диспергирующим воздействием хрома.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект №18-33-00841).

#### *Список литературы*

1. Vojtech D., Michalcova A., Verner J. et al. Structure and properties of PM nano-crystalline Al-Cr based alloys//Materials Science Forum Vols 567-568 (2008) P. 197-200.
2. Савушкина С. В., Агуреев Л.Е., Ашмарин А.А., Иванов Б.С., Эпельфельд А.В., Виноградов А.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2017. – № 12. С. 34–39.

П.С. САВЧЕНКОВ, П.А. АЛЕКСЕЕВ

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## ОСОБЕННОСТИ ПРОМЕЖУТОЧНО-ВАЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ Eu В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ 1-2-2: $\text{EuCu}_2(\text{Si},\text{Ge})_2$

В работе проведён совокупный анализ экспериментальных данных по неупругому магнитному рассеянию нейтронов для промежуточновалентных систем на основе Sm ( $\text{SmB}_6$ ,  $\text{Sm}(\text{Y})\text{S}$ ) и Eu (типа  $\text{EuCu}_2\text{Si}_2$ ) с точки зрения применимости обобщенного подхода на основе теоретической модели экситона конечного радиуса.

P.S. SAVCHENKOV<sup>1,2</sup>, P.A. ALEKSEEV<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI, Moscow, Russia

## FEATURES OF THE INTERMEDIATE-VALENT STATE OF Eu IN 1- 2-2 INTERMETALLIDES $\text{EuCu}_2(\text{Si},\text{Ge})_2$

In this work, we performed a combined analysis of experimental data on inelastic magnetic neutron scattering for intermediate valence systems based on Sm ( $\text{SmB}_6$ ,  $\text{Sm}(\text{Y})\text{S}$ ) and Eu (type  $\text{EuCu}_2\text{Si}_2$ ) from the point of view of applicability of a generalized approach based on a theoretical model of a finite radius exciton .

Модель экситона конечного радиуса, предложенная для описания свойств  $\text{SmB}_6$ , была развита и расширена для правильного понимания существенных деталей спектра неупругого магнитного рассеяния нейтронов в представленных системах. Основой нового подхода является представление о гибридизации, как о движущей силе формирования промежуточновалентно состояния для Eu. Впервые предложен и проанализирован дырочный аналог модели экситона конечного радиуса позволяющий адекватно описать свойства ПВ состояния Eu опираясь на единый (для Eu и Sm) подход к представлению структуры волновой функции основного состояния.

В частности, объяснена квадратичная перенормировка энергии резонансной моды в соединениях европия по отношению к энергии атомного межмультиплетного перехода при изменении валентности Eu.

Обсуждается применимость данной модели для описанию сосуществования магнетизма и промежуточной валентности.

Г.В.СИВЦОВА<sup>1,2</sup>, С.В.САВУШКИНА<sup>1,2</sup>, А.А. АШМАРИН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша», Москва, Россия,

<sup>2</sup>Московский авиационный институт, Россия

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ДИОКСИД ЦИРКОНИЕВЫХ ПОКРЫТИЙ, ФОРМИРУЕМЫХ МИКРОДУГОВЫМ ОКСИДИРОВАНИЕМ С ДОБАВЛЕНИЕМ В ЭЛЕКТРОЛИТ НАНОПОРОШКА ОКСИДА ИТТРИЯ**

Покрытия были сформированы с помощью метода микродугового оксидирования (МДО) на циркониевом сплаве Э110 (1% Nb) с добавлением в электролит нанопорошка оксида иттрия. Исследование покрытий проводили с помощью методов растровой электронной микроскопии, рентгенофазового анализа и скретч-тестирования. Показано, что добавки нанопорошка оксида иттрия в электролит способствуют стабилизации тетрагональной фазы в МДО-покрытии.

G.V. SIVTSOVA<sup>1,2</sup>, S.V. SAVUSHKINA<sup>1,2</sup>, A.A. ASHMARIN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Keldysh Research Center, Moscow, Russia,

<sup>2</sup>Moscow Aviation Institute (National Research University), Russia

## **STUDY OF ZIRCONIA COATINGS FORMED BY MICRO-ARC OXIDATION WITH THE ADDITION OF YTTRIUM OXIDE NANOPOWDER TO THE ELECTROLYTE**

The coatings were formed using the micro-arc oxidation method (MAO) on the zirconium alloy E110 (1% NB) with the addition of yttrium oxide nanopowder to the electrolyte. The coatings were studied using the methods of scanning electron microscopy, x-ray diffraction analysis and scratch testing. It was shown that additives of yttria nanopowder to the electrolyte stabilize the tetragonal phase in the MAO coating.

Микродуговое оксидирование (МДО) является одним из перспективных методов получения диоксид циркониевых покрытий. МДО-покрытия из диоксида циркония обладают низкой теплопроводностью, которая может достигать 0.2 Вт/м•К [1]. Благодаря своим свойствам керамические покрытия из диоксида циркония, получаемые методом МДО, могут быть использованы в качестве теплозащитных покрытий. Для улучшения функциональных свойств МДО-покрытия применяют стабилизацию его тетрагональной фазы, что достигается путём добавки в электролит нанопорошка оксида иттрия [2, 3].

В данной работе были исследованы структура и свойства керамикоподобных диоксид циркониевых покрытий, сформированных методом МДО с добавкой в электролит нанопорошка оксида иттрия. МДО-обработку проводили на дисковых образцах сплава Э110 (Zr – 99%, Nb – 1%) в водном растворе гипофосфита натрия (5 г/л) и жидкого стекла (9 г/л), добавка нанопорошка оксида иттрия составляла 6 г/л. Покрытия формировали в течение 60 минут в

анодно-катодном режиме с соотношением токов 1:1 и средней плотности тока 20 и 30 А/дм<sup>2</sup>.

Структуру покрытий исследовали на растровом электронном микроскопе Quanta 600. Рентгенофазовый анализ покрытий проводили в медном  $\lambda\text{K}\alpha_{1,2}$  излучении на рентгеновском дифрактометре Empyrean PANalytical. Определение адгезии покрытия проводили методом скретч-тестирования.

Полученные при плотностях тока 20 и 30 А/дм<sup>2</sup> покрытия имели толщину ~ 100 и 120 мкм. Структура верхнего слоя покрытий характеризуется кратерами с порами в центре и конгломератами наночастиц, а внутренний слой - поликристаллической структурой. В результате рентгенофазового анализа было выявлено, что добавка нанопорошка оксида иттрия в электролит, позволяет добиться полной стабилизации тетрагональной фазы диоксида циркония как при плотности тока МДО 20 А/дм<sup>2</sup>, так и при 30 А/дм<sup>2</sup>. Формирование тетрагональной фазы должно быть связано с образованием твердого раствора  $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$  в покрытии, поскольку при обработке в тех же условиях без добавления  $\text{Y}_2\text{O}_3$  в электролит, МДО-покрытия характеризуются только моноклинной модификацией. Увеличение плотности тока приводит к возрастанию шероховатости покрытия и плотности адсорбированных на поверхности наночастиц. В результате скретч-тестирования алмазным индентором диоксид циркониевого покрытия, сформированного при плотности тока МДО 20 А/дм<sup>2</sup>, было установлено, что критическая нагрузка разрушения покрытия составляет ~ 180 Н, при этом, разрушение верхнего слоя происходит при ~ 20 Н.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (грант № МК 54.2019.8.).

#### *Список литературы*

3. Савушкина С.В., Полянский М.Н., Борисов А.М., Виноградов А.В., Людин В.Б., Данькова Т.Е., Агуреев Л.Е.// Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования. 2016. №4. С. 45-50
4. Savushkina S.V., Ashmarin A.A., Apelfeld A.V., Borisov A.M., Vinogradov A.V., Polyansky M.N., Bogdashkina N.L.// Journal of Physics: Conference Series. 2017. V. 857. № 1. P. 012037.
5. Apelfeld A.V., Ashmarin A.A., Borisov A.M., Vinogradov A.V., Savushkina S.V., Shmytkova E.A.// 2017 Surf. Coat. Technol. V. 328. P.513–517

Н.Н. СИТНИКОВ<sup>1,2</sup>, И.А. ХАБИБУЛЛИНА<sup>1</sup>, А.В. ШЕЛЯКОВ<sup>2</sup>,  
Г.В. СИВЦОВА<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ ФГУП «Центр Келдыша», Москва, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## **БЫСТРОЗАКАЛЁННЫЕ СЛОИСТЫЕ АМОРФНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЛЕНТЫ ИЗ СПЛАВА Ti<sub>50</sub>Ni<sub>25</sub>Cu<sub>25</sub> С ОБРАТИМЫМ ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ**

Методом сверхбыстрой закалки из расплава получены аморфно-кристаллические ленты из сплава Ti<sub>50</sub>Ni<sub>25</sub>Cu<sub>25</sub> (ат.%) толщиной 40-45 мкм и шириной около 1,2 мм. Установлено, что ленты состоят из аморфного и кристаллического слоёв. Показано, что слоистый аморфно-кристаллический композит проявляет обратимый эффект памяти формы с деформацией изгибом без дополнительной термомеханической обработки.

N.N. SITNIKOV<sup>1,2</sup>, I.A. KHABIBULLINA<sup>1</sup>, A.V. SHELYAKOV<sup>2</sup>,  
G.V. SIVTSOVA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>FSUE "Keldysh Research Center", Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia

## **MELT-SPUN LAMINATED AMORPHOUS-CRYSTALLINE RIBBONS OF Ti<sub>50</sub>Ni<sub>25</sub>Cu<sub>25</sub> ALLOY WITH TWO-WAY SHAPE MEMORY EFFECT**

Amorphous-crystalline ribbons of the Ti<sub>50</sub>Ni<sub>25</sub>Cu<sub>25</sub> (at.%) alloy of 40-45 μm thick and 1,2 mm wide are produced by the method of rapid quenching from the melt. It is established that the ribbons consist of amorphous and crystalline layers. It is shown that the laminated amorphous-crystalline composite exhibits a two-way shape memory effect with bending strain without additional thermomechanical treatment.

В последнее время показана эффективность использования сплавов, обладающих эффектом памяти формы (ЭПФ), для создания микроустройств в различных областях техники, в частности, в приборостроении, медицине, энергетике, космических технологиях, робототехнике [1]. Для миниатюризации устройств, создания микро- и, возможно, наноустройств становится актуальным получение тонкомерных материалов с эффектом обратимой памяти формы (ЭОПФ). Поэтому целью данной работы было исследование свойств быстрозакалённых аморфно-кристаллических тонких лент из сплава системы TiNi-TiCu, обладающих ЭОПФ, для создания на их основе микромеханических устройств различного назначения.

В качестве объекта исследований был выбран сплав квазибинарной системы TiNi-TiCu с 25 ат. % Cu, полученный методом сверхбыстрой закалки из расплава (метод спиннингования расплава). В результате этого процесса, происходящего

со скоростью охлаждения расплава  $10^5 \div 10^6$  К/с, получали тонкие ленты толщиной  $30 \div 50$  мкм и шириной от 1 до 2 мм в аморфном и аморфно-кристаллическом состояниях [2]. В зависимости от скорости охлаждения расплава в процессе спиннингования формируется аморфное или аморфно-кристаллическое состояние ленты. При скоростях охлаждения расплава около  $10^6$  К/с лента аморфизуется. Более низкие скорости охлаждения расплава (до  $10^5$  К/с) приводят к образованию кристаллического слоя толщиной  $2 \div 10$  мкм на неконтактной поверхности ленты. Во всех полученных образцах слоистых аморфно-кристаллических лент проявляется ОЭПФ с деформацией изгибом при нагреве выше температуры  $A_k$  и возврату к исходной (прямолинейной форме) при остывании ниже температуры  $M_k$  без каких-либо дополнительных термообработок.

Для детальных исследований быстрозакалённой слоистой аморфно-кристаллической ленты был выбран образец с общей толщиной около 40 мкм и толщиной кристаллического слоя 10 мкм. Были проведены следующие исследования: сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом; рентгеноструктурный анализ; измерение микротвёрдости; дифференциальная сканирующая калориметрия; измерения температурной зависимости формоизменения при реализации ЭПФ; оценено быстроедействие и количество циклов реализации ЭОПФ и др.

Показано, что формоизменение слоистого аморфно-кристаллического композита происходит за счет протекания мартенситного превращения В2-В19 в кристаллическом слое и сопутствующего ему ЭПФ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (19-72-00145).

*Список литературы*

1. J.M. Jani, M. Leary, A. Subic A // Material Desing. 2014. V. 56. P. 1078–1113.
2. А.В. Шеляков, Н.Н. Ситников, А.П. Менушенков и др // Известия РАН. Серия физическая. 2015, том 79. № 9. С. 1281–1287.

Н.И. СНЕГИРЁВ<sup>1</sup>, И. С. ЛЮБУТИН<sup>1</sup>, А.Г. КУЛИКОВ<sup>1</sup>, Ю.А.  
МОГИЛЕНЕЦ<sup>2</sup>, К.А. СЕЛЕЗНЕВА<sup>2</sup>, С.В. ЯГУПОВ<sup>2</sup>, М.Б.  
СТРУГАЦКИЙ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт кристаллографии им А.В. Шубникова, Москва, Россия*

*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Физико-технический институт, ФГАОУ ВО «КФУ имени В.И. Вернадского»,  
Симферополь, Россия*

## **ВЛИЯНИЕ ИЗОМОРФНОЙ ПРИМЕСИ НА СТРУКТУРНУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ТРИГОНАЛЬНЫХ БОРАТОВ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОТЖИГЕ**

Проведена серия экспериментов по отжигу монокристаллов  $\text{FeBO}_3$ ,  $\text{GaBO}_3$  и  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ . Изучен характер структурных трансформаций «чистых» фаз ( $\text{FeBO}_3$ ,  $\text{GaBO}_3$ ) и кристаллов смешанного состава ( $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ ) при воздействии высоких температур.

N.I. SNEGIREV<sup>1</sup>, I.S. LYUBUTIN<sup>1</sup>, A.G. KULIKOV<sup>1</sup>,  
Y. A. MOGILENEC<sup>2</sup>, K.A. SELEZNYOVA<sup>2</sup>,  
S.V. YAGUPOV<sup>2</sup>, M.B. STRUGATSKY<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Shubnikov Institute of Crystallography, Moscow, Russia*

*FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Physics and Technology Institute, V.I. Vernadsky Crimean Federal University,  
Simferopol, Russia*

## **INFLUENCE OF ISOMORPHIC IMPURITY ON THE STRUCTURAL STABILITY OF TRIGONAL BORATE CRYSTALS UNDER HIGH TEMPERATURE ANNEALING**

A series of experiments on annealing of  $\text{FeBO}_3$ ,  $\text{GaBO}_3$  and  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$  single crystals were carried out. It was studied the structural transformations of “pure” phases ( $\text{FeBO}_3$ ,  $\text{GaBO}_3$ ) and mixed composition ( $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ ) under high temperatures.

Кристаллы тригональных боратов  $\text{FeBO}_3$  и  $\text{GaBO}_3$  (структура кальцита), а также изоструктурные им твердые растворы  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$  представляют большой интерес в качестве модельных объектов для фундаментальных исследований в области физики твердого тела и магнетизма [1]. Кроме того, на их основе могут быть созданы монохроматоры синхротронного излучения, магнитооптические и магнитоакустические преобразователи, приборы для измерения сверхслабых магнитных полей, температуры и давления [2,3].

Значительный интерес представляет изучение структурной стабильности таких образцов при воздействии высоких температур, а также влияния отжига на фазовый состав монокристаллов серии  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$ . В настоящей работе образцы  $\text{FeBO}_3$  и  $\text{GaBO}_3$ , а также кристаллы со смешанным составом  $\text{Fe}_{1-x}$

$x\text{Ga}_x\text{VO}_3$  были синтезированы методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве по технологии, развитой нами в работе [3].

Монокристаллы отжигались в воздушной среде на корундовой подложке в температурном диапазоне 800-1000°C с постоянным временем изотермической выдержки 4 часа. Фазовый состав образцов контролировался с помощью рентгеновского анализа. Экспериментальные дифрактограммы обрабатывались методом Ритвельда.

В результате исследований установлено, что в кристаллах  $\text{FeVO}_3$  и  $\text{GaVO}_3$  воздействие высоких температур приводит к структурным изменениям, связанным с образованием фаз  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  и  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , соответственно. Отжиг образцов  $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{VO}_3$  приводит к их трансформации в новые фазы  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  и  $(\text{Fe,Ga})_2\text{O}_3$ . Установлена большая устойчивость кристаллов смешанного состава к воздействию высоких температур по сравнению с кристаллами «чистых» фаз. Так, после отжига при температуре 1000°C в образце  $\text{Fe}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{VO}_3$  содержится 60,4 масс. % исходной фазы, в то время как отжиг кристаллов  $\text{FeVO}_3$  и  $\text{GaVO}_3$  при аналогичных режимах приводит к их полной трансформации в другие кристаллические фазы.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект №19-29-12016-мк, в части синтеза экспериментальных образцов, и проект №18-32-00210 «мол-а», в части экспериментов по отжигу монокристаллов. Рентгеновские исследования проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект RFMEFI62119X0035), и с использованием оборудования ФГАОУ ВО «КФУ имени В.И.Вернадского» (Программа развития КФУ на 2015-2024 г.).

#### *Список литературы*

1. Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K., Maksimova E., Nauhatsky I. et. al. // Applied Physics A. 2015. V.121. P.179
2. Diehl R., Jantz W., Nolang B.I., Wettling W. // Current Topics in Material Science. 1984. V. 11. P. 241.
3. Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K., Mogilenec Y., Snegirev N. et.al. // Crystal Growth & Design. 2018. V.18. P.7435

Ж.Ш. СОДИКЖАНОВ<sup>1</sup>, Б.Е. УМИРЗАКОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, Ташкент, Узбекистан.

<sup>2</sup>ТГТУ, Ташкент, Узбекистан

## ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ И ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ CdS ИМПЛАНТАЦИЕЙ ИОНАМИ Ba<sup>+</sup>

В работе имплантацией ионов Ba<sup>+</sup> с последующим прогревом на поверхности и в приповерхностной области пленок CdS получены наноструктуры Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S. Определены их параметры энергетических зон, плотности состояния электронов валентной зоны. Показано, что при уменьшении поверхностных размеров нанокристаллических фаз Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S от 30 до 15 нм, ширина запрещенной зоны  $E_g$  увеличивается от 2.3 до 2.6 эВ.  $E_g$  нанопленок и нанослоев Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S составляет 2.1 эВ.

J.SH. SODIKJANOV, B.E. UMIRZAKOV

<sup>1</sup>Institute of Ion Plasma and Laser Technologies, AS of the RUz, Tashkent, Uzbekistan.

<sup>2</sup>Tashkent state technical university, Tashkent, Uzbekistan

## STUDYING SURFACE OF AND SUBSURFACE REGIONS OF CDS WITH IMPLANTATION OF THE BA<sup>+</sup> IONS

In this work, implantation of Ba<sup>+</sup> ions followed by heating on the surface and in the subsurface region of CdS films produced Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S nanostructures. Their parameters of energy bands and the density of state of electrons of the valence band are determined. It was shown that with a decrease in the surface dimensions of the Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S nanocrystalline phases from 30 to 15 nm, the band gap of  $E_g$  increases from 2.3 to 2.6 eV.  $E_g$  of nanofilms and nanolayers of Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S is 2.1 eV.

Представляемая работа посвящена получению трехкомпонентных нанокристаллов и пленок CdBaS на поверхности и в различных глубинах приповерхностного слоя CdS, имплантацией ионов Ba<sup>+</sup> в сочетании с отжигом и изучению их состава, размеров, глубины формирования и электронную структуру.

Сначала наши исследования были направлены к получению наноразмерных фаз и слоев Cd-Ba-S в различных глубинах CdS. Для этого имплантация ионов проводилась с  $E > 10$  кэВ. На рисунке 1 приведены профили распределения атомов по глубине для CdS имплантированного ионами Ba<sup>+</sup> с  $E_0 = 20$  кэВ при  $D = D_{\text{нас}} = 10^{17}$  см<sup>-2</sup> до и после прогрева при  $T = 850$  К. Видно, что постимплантационный отжиг приводит к увеличению концентрации Ba в максимуме ( $d \approx 16 - 18$  нм), сужению ширины максимума. При этом разупорядоченные слои полностью кристаллизуются, в приповерхностном слое образуется слой Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S с толщиной 8 – 10 нм, в целом формируется нанопленочная система CdS/Cd<sub>0.6</sub>Ba<sub>0.4</sub>S/CdS. На границах раздела образуются переходные слои с толщиной 5 – 6 нм.

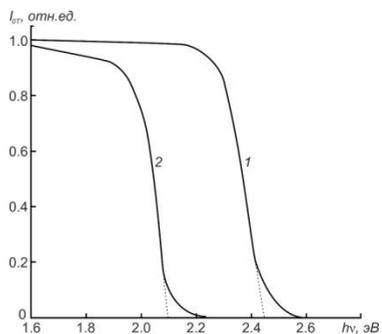
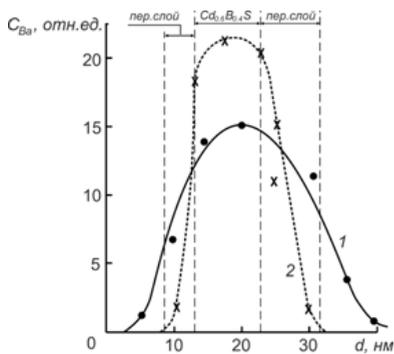


Рис. 2. Зависимость интенсивности проходящего света от энергии фотонов для: 1 – CdS; 2 – CdS с пленкой  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$

Рис.1. Профили распределения атомов Ва по глубине для CdS, имплантированного ионами  $\text{Ba}^+$  с  $E_0=20$  кэВ при  $D=10^{17}$   $\text{см}^{-2}$ . 1– до прогрева; 2–после прогрева при  $T=850\text{K}$  в течении 30 мин.

Из рисунка видно, что в обоих случаях до определенной энергии значения интенсивности  $I$  заметно не меняется, а затем с ростом  $h\nu$  резко уменьшается до нуля. Резкое уменьшение  $I$  для CdS наблюдается начиная с  $h\nu \approx 2.3 - 2.4$  эВ, а для  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$  –  $1.9 - 2$  эВ. Измеренное значение  $E_g$  для CdS равно 2.42 эВ, а для  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$  – 2.1 эВ.

Для определения  $E_g$  были измерены зависимости интенсивности проходящего через образец света от энергии фотонов в области  $h\nu \approx 1.1 - 6.5$  эВ ( $\lambda = 1100 - 190$  нм) для CdS и CdS с внутренним слоем  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$  (рис.2). Из

Таким образом, впервые методом имплантации ионов  $\text{Ba}^+$  в CdS в сочетании с отжигом получены наноструктуры типа  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$ . Показано что, при  $E_0 = 20$  кэВ и  $D = 2 \cdot 10^{17}$   $\text{см}^{-2}$  после отжига с  $T=850$  К на глубине  $\sim 18$  нм формируется нанослой  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$  с толщиной 8-10 нм. Определены параметры энергетических зон и плотности состояния системы валентных электронов нанофаз и нанопленок  $\text{Cd}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{S}$ .

А. СОЛОВЬЕВ, Д.В. ФОМИНСКИЙ, Р.И. РОМАНОВ, В.Ю.  
ФОМИНСКИЙ, В.Н. НЕВОЛИН

*<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМОВ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ ПЛЕНОК WO<sub>3</sub> ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФОТОЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ**

Приведены результаты структурно-фазовых исследований тонких пленок WO<sub>x</sub>, полученных в варьируемых условиях методом реакционного импульсного лазерного осаждения (РИЛО) на стеклянных подложках с проводящим покрытием из фторированного оксида олова (FTO). Установлены характеристики пленок WO<sub>x</sub>, обеспечивающих наиболее высокую эффективность расщепления воды под воздействие светового потока при использовании этих пленок для получения полупроводниковых электродов со структурами WO<sub>3</sub>/FTO и MoS<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>/FTO.

A. SOLOVIEV, D.V. FOMINSKI, R.I. ROMANOV,  
V.YU. FOMINSKI, V.N. NEVOLIN

*<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## **OPTIMIZATION OF PULSE LASER DEPOSITION CONDITIONS OF WO<sub>3</sub> FILMS FOR PREPARATION OF EFFECTIVE NANOSTRUCTURED PHOTO-ELECTROCATALYSTS OF WATER SPLITTING**

The results of structural and phase studies of thin WO<sub>x</sub> films obtained under varying conditions by the method of reactive pulsed laser deposition (RPLD) on glass substrates with a conductive coating of fluorinated tin oxide (FTO) are presented. The characteristics of WO<sub>x</sub> films that provide the highest efficiency of water splitting under the irradiation with light flux when using these films to obtain semiconductor electrodes with WO<sub>3</sub>/FTO and MoS<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>/FTO structures are established.

Гибридные (гетеро)структуры, содержащие халькогениды и оксиды переходных металлов, представляют собой комбинацию полупроводниковых материалов, перспективных с точки зрения формирования фото- и электрокаталитических слоев для расщепления воды [1]. Для получения новых наноматериалов для этих катализаторов необходимы знания факторов, оказывающих важное влияние на функциональные характеристики многокомпонентных систем. В работе исследованы фотоэлектрокаталитические свойства электродов, содержащих пленки WO<sub>x</sub>, полученных в варьируемых условиях РИЛО.

На рис. 1(а,б) представлены электронно-микроскопические изображения пленок  $\text{WO}_3$ , полученных методом РИЛО при  $450^\circ\text{C}$  при разных давлениях сухого воздуха. Видно, что повышение давления усиливало эффект наноструктурирования, хотя скорость роста пленок заметно уменьшалась. Рис. 1(в) иллюстрирует эффект влияния структурного состояния пленки  $\text{WO}_3$  на фото-электрокаталитические свойства структуры  $\text{MoS}_2/\text{WO}_3/\text{FTO}$ , для получения которой после осаждения пленки  $\text{WO}_3$  методом ИЛО наносилась нанопленка аморфного  $\text{MoS}_2$ .

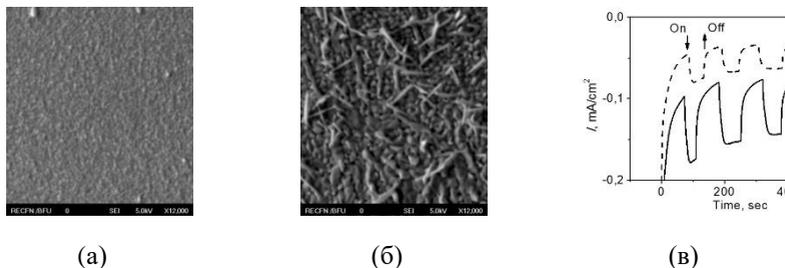


Рис. 1. (а,б) Структура пленок  $\text{WO}_3$ , полученных методом РИЛО при 40 и 60 Па, соответственно; (в) кривые зависимости плотности тока в реакции выделения  $\text{H}_2$  структурой  $\text{MoS}_2/\text{WO}_3/\text{FTO}$  в растворе  $0,5\text{M H}_2\text{SO}_4$  при включении и выключении света ксеноновой лампы.

Наноструктурирование пленки  $\text{WO}_3$ , полученной при повышенном давлении (60 Па), вызывало более интенсивный рост амплитуды тока, определяющего выделение  $\text{H}_2$  под воздействием света (при потенциале близком к нулю). Аналогичный эффект обнаружен при использовании пленок  $\text{WO}_3$  для активирования выделения  $\text{O}_2$ . При потенциале +2 В плотность тока возрастала примерно в два раза при повышении давления газа в случае РИЛО пленок металлооксида.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 19-19-00081).

#### Список литературы

1. Fominski V., Gnedovets A., Fominski D. and others// *Nanomaterials*. 2019, 9(10), 1395.

К.Л. СТАНКЕВИЧ, Г.А. ОВСЯННИКОВ, В.В. ДЕМИДОВ, Т.А.  
ШАЙХУЛОВ

*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

**СПИНОВЫЙ ТОК НА ГРАНИЦЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР  
ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МАНГАНИТ/ИРИДАТ, МАТЕРИАЛ С  
СИЛЬНОМ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

Гетероструктуры ферромагнитный манганит/иридат ( $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrIrO}_3$ ) были получены методом магнетронном распыления на подложку  $(110)\text{NdGaO}_3$  при температуре  $T = 700\text{-}800$  С. В режиме ферромагнитного резонанса исследовалось электрическое напряжение в гетероструктуре, возникающее на пленке из иридата, которое вызвано протеканием чисто спинового тока поперек границы и обратным спиновым эффектом Холла в плёнке иридата.

K.L. STANKEVICH, G.A. OVSYANNIKOV, V.V. DEMIDOV, T.A.  
SHAIKHULOV

*Kotelnikov Institute of Radio Engineering and Electronics RAS, Moscow, Russia*

**SPIN CURRENT AT THE INTERFACE  
HETEROSTRUCTURE FERROMAGNETIC  
MANGANITE/IRIDATE HAVING STRONG  
SPIN-ORBIT COUPLING**

Heterostructures ferromagnetic manganite/semimetal iridate ( $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrIrO}_3$ ) were fabricated by magnetron sputtering on the substrate  $(110)\text{NdGaO}_3$  at  $T = 700\text{-}800$  С. We studied the electric voltage arising on the iridate film of the heterostructure in the ferromagnetic resonance mode, which is caused by the flow of a pure spin current across the boundary and the inverse spin Hall effect.

Материалы с сильным спин-орбитальным взаимодействием играют важную роль в детектировании спинового тока. Чистый спиновый ток, который возбуждается при ферромагнитном резонансе (ФМР) на границе ферромагнетик/нормальный металл, может детектироваться с помощью обратного спинового эффекта Холла (ISHE) в материале с сильным спин-орбитальным взаимодействием путем преобразования в ток проводимости.

Гетероструктуры  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrIrO}_3$  были получены методом магнетронного распыления на плоскость  $(110)\text{NdGaO}_3$  (NGO) при температуре  $T = 820$  °С и давлении кислорода 0.7 мбар для манганита  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  (LSMO) и  $T=770\text{C}$  и давлении 0.3 мбар для иридата  $\text{SrIrO}_3$  (SIO). Толщины пленок манганита варьировались от 5 до20 нм [1].

Перетекание заряда от иридата делает его допированным дырками, в то время как манганит становится электронно допированным. [1, 2]. Предполагая толщину переходного слоя  $d_s \approx 1$  nm, из экспериментальных значений сопротивления получаем удельное сопротивление переходного слоя равное  $\rho_l = 8 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ .

Спектры ферромагнитного резонанса (ФМР) гетероструктуры измерялись на частоте 9.2 ГГц. Из анализа температурной и угловой зависимостей резонансного поля  $H_0$  определялись намагниченность и магнитная анизотропия гетероструктуры [3]. Из сравнения ширины линии ФМР

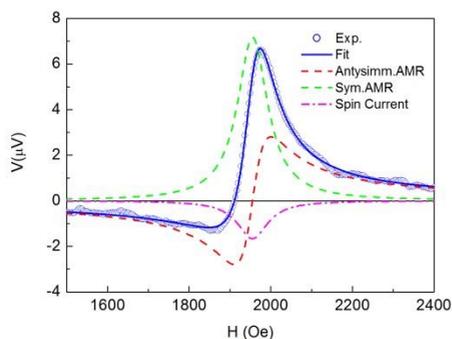


Рис. 1. Зависимость от внешнего магнитного поля напряжения на пленке SIO в гетероструктуре SIO/LSMO при  $T=300$  K.

пленки LSMO и гетероструктуры SIO/LSMO вычислялась проводимость границы для спинового тока.

Работа частично поддерживалась проектами РФФИ 18-57-16001, 19-07-00143

#### Список литературы

1. Шайхулов Т. А., Овсянников Г. А., Демидов В. В., Андреев Н. В. // ЖЭТФ, 2019. Т. 155,135.
2. Crossley S., Swartz A. G., Nishio K., Hikita Y., and Hwang H. Y. // Physical Review 2019, V.100, 115163.
3. Demidov V.V., Andreev N.V., Shaikhulov T.A., Ovsyannikov G.A. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2020 V.497, 165979.

А.С. СТАРИКОВСКИЙ, М.А. ОСИПОВ, И.А. РУДНЕВ  
*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЛЕВИТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАМАГНИЧЕННЫХ СТОПОК ВТСП ЛЕНТ**

Представлены новые результаты исследования силы левитации между постоянным магнитом и предварительно намагниченными стопками ВТСП-лент, содержащими от 20 до 100 лент 12 мм × 12 мм. Получены экспериментальные данные по влиянию бокового смещения на силу левитации для стопок лент с различными величинами захваченного потока и толщины.

A.S. STARIKOVSKII, M.A. OSIPOV, I.A. RUDNEV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## **LEVITATION PROPERTIES OF PRE-MAGNETIZED HTS TAPE STACKS**

The new results of the study of the levitation force between a permanent magnet and pre-magnetized HTS tape stacks containing from 20 to 100 tapes of 12 mm × 12 mm are presented. Experimental data on the effect of lateral displacement on the levitation force for stacks of tapes with different values of the captured flux and thickness have been obtained.

Для разработки и оптимизации левитационного подвеса необходима информация о влиянии различных параметров на силу взаимодействия ВТСП лент с магнитом. Помимо характеристик самих лент, на силу левитации влияют и внешние факторы, такие как температура, переменное магнитное поле, а также предварительное намагничивание ВТСП. Влиянию предварительного намагничивания на величину силы левитации, а так же на ее поведение при смещении магнитов и сверхпроводника друг относительно друга и посвящена данная работа.

Объектом исследования были ВТСП ленты производства SuperOx. Они были разрезаны на квадратные фрагменты 12 мм × 12 мм и уложены в стопки разной высоты с  $n = 20, 40, 50, 60, 80$  и 100 элементами. Был проведен ряд измерений по исследованию влияния предварительного намагничивания стопок таких лент на их левитационные характеристики. Для этого образцы охлаждались жидким азотом в поле сверхпроводящего магнита с величиной магнитной индукции равной 3 Тл, после чего помещались в криостат системы измерения силы левитации. Захваченное лентами поле измерялось при помощи датчика Холла сразу после намагничивания. Подробное описание экспериментальной установки представлено в работе [1]. Сначала образец помещался на расстояние 60 мм над центром стопки цилиндрических магнитов и опускался из этой позиции в конечную, в которой расстояние до магнитов составляло 6 мм, после

чего проводился цикл из 20 последовательных перемещений в поперечном направлении вдоль оси X и обратно в диапазоне  $\pm 20$  мм относительно центра магнитов. В результате были получены зависимости силы левитации от расстояния для стопок ВТСП лент различных толщин. Зависимость максимальной силы левитации от числа лент в стопке показана на рис. 1.

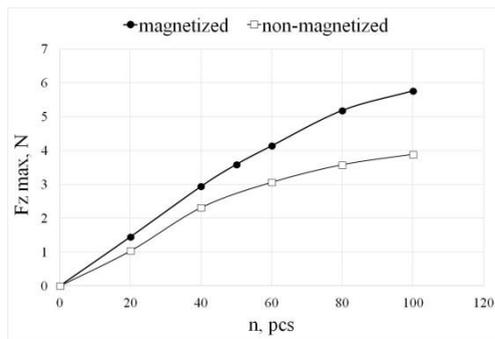


Рис.1. Зависимость максимальной отталкивающей силы от числа лент в стопке для полностью намагниченных и для немагнитных стопок.

Из анализа полученных данных следует, что предварительно намагниченные стопки показывают большие значения отталкивающей силы, чем немагнитные для всех измеренных  $n$  элементов в стопке. В то же время при боковых смещениях происходит затухание силы левитации, скорость которого растет с увеличением захваченного магнитного потока. Таким образом, в системах с поперечными колебаниями немагнитные стопки имеют более высокую стабильность и для повышения силы левитации в таких системах рационально увеличивать толщину стопки, а не использовать предварительное намагничивание.

#### Список литературы

1. Osipov M. et al. Levitation force of magnetized HTS tape stacks //IEEE Transactions on Applied Superconductivity. – 2017. – Т. 27. – №. 4. – С. 1-4.

С.В. СТРИЖОВА, И.А. РУДНЕВ

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СИСТЕМЫ МАЛОГО СФЕРИЧЕСКОГО ТОКАМАКА НИЯУ МИФИ

Приведены результаты расчетов характеристик тороидального магнитного поля магнитной системы малого сферического токамака НИЯУ МИФИ, полученные с использованием программного комплекса COMSOL Multiphysics. Оценено количество сверхпроводящего материала, необходимого для создания магнитной системы с заданными характеристиками.

S.V. STRIZHOVA, I.A. RUDNEV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Russia*

## MODELING OF THE MEPHI SMALL SPHERICAL TOKAMAK MAGNETIC SYSTEM

The modeling results of toroidal magnetic field characteristics of small spherical tokamak, obtained with the use of COMSOL Multiphysics software, are presented. The amount of superconducting material required to create magnetic system with specified characteristics is estimated.

В НИЯУ МИФИ ведется работа по разработке и созданию малого сферического токамака для учебно-демонстрационных и исследовательских целей. На первом этапе предусмотрен импульсный режим работы токамака. Перспективой развития конструкции установки является создание магнитной системы на основе сверхпроводящих материалов, обеспечивающей получение постоянного тороидального магнитного поля, равного 2 Тл.

В настоящей работе проведено моделирование магнитной системы токамака с использованием программного обеспечения COMSOL Multiphysics. В 3D геометрии построена модель, включающая 4 эллиптических соленоида, расположенных вдоль оси тора (Рис. 1). Расчеты показали, что при создании магнитного поля в центре тора, равного 2 Тл, значения магнитной индукции поля  $B_{max}$  вдоль внутреннего обвода тора в 2,4 - 3,6 раз больше в зависимости от длины соленоида.

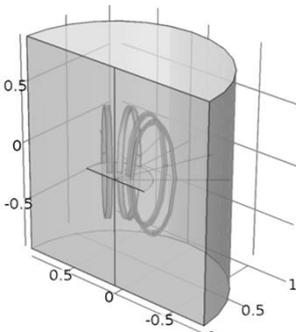


Рис. 1. Расчетная

Это накладывает существенные ограничения на технические характеристики применяемых сверхпроводящих материалов, такие как критическое магнитное поле и критическая плотность тока. В настоящей работе в качестве примера рассмотрена

возможность создания магнитной системы с применением коммерческих проводов на основе NbTi. Определены такие параметры системы как сила тока и число витков, необходимых для создания требуемой величины магнитного поля, равного 2 Тл, а также оценено количество сверхпроводящего материала, необходимого для создания такой системы в зависимости от длины L соленоида. Полученные значения приведены в таблице 1.

Таблица 1. Варианты возможных параметров магнитной системы в зависимости от длины секции

L, м	I <sub>max</sub> , Тл	Сила тока, А	Кол-во витков в секции	Количество сверхпроводника одной секции	
				Объем, м <sup>3</sup>	Масса, кг
0,01	0,7	6,7	444	1,9·10 <sup>-3</sup>	11,6
0,02	0,1	32,4	466	1,2·10 <sup>-3</sup>	7,2
0,03	0,9	12,3	140	7,4·10 <sup>-4</sup>	4,4
0,04	0,7	85,9	591	5,5·10 <sup>-4</sup>	3,3
0,05	0,9	39,1	348	4,6·10 <sup>-4</sup>	2,8

Показано, что система соленоидов обеспечивает следующие характеристики магнитного поля: величина магнитного поля на оси тора составляет 2 Тл, а неоднородность вдоль оси тора не превышает 1,5%. Как видно из таблицы 1, максимальное значение магнитной индукции достигается на внутреннем обводе тора и составляет величину от 4,9 до 8,7 Тл в зависимости от длины секции. По результатам расчетов оценены число витков и масса сверхпроводника, необходимых для создания магнитного поля заданных параметров. Из таблицы 1 следует, что минимальное количество сверхпроводящего материала достигается при использовании соленоидов максимально возможной длины.

А.Д. СЫТЧЕНКО, Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ  
*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

**ВЛИЯНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ПОДЛОЖКИ НА ПОВЕДЕНИЕ ПОКРЫТИЙ Zr-Si-B ПРИ ТРЕНИИ  
СКОЛЬЖЕНИЯ И ВОЗДЕЙСТВИИ  
ЦИКЛИЧЕСКИХ УДАРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗОК**

В работе методом магнетронного распыления были получены покрытия Zr-Si-B на подложках из сплавов ВК6М, Х65НВФТ и МЧ-1. Изучены коэффициент трения и износостойкость при трении в режиме скольжения, а также стойкость покрытий к ударно-динамическим воздействиям. Определены закономерности влияния материала подложки на поведение покрытий.

A.D. SYTCHENKO, Ph.D. KIRYUKHANTSEV-KORNEEV

*NUST «MISIS», Moscow, Russia*

**INFLUENCE OF THE PHYSICAL-MECHANICAL  
PROPERTIES OF SUBSTRATE ON THE TRIBOLOGICAL  
BEHAVIOR OF Zr-Si-B COATINGS UNDER SLIDING  
AND IMPACT LOADING**

In this work, Zr-Si-B coatings on substrates from VK6M, Kh65NVFT and MCH-1 alloys were obtained by magnetron sputtering. The friction coefficient and wear resistance during friction in the sliding mode, as well as the resistance of the coatings to impact loading, were studied. The regularities of the effect of the substrate material on the behavior of the coatings are determined.

Диборид циркония является перспективным материалом для использования в качестве защитных покрытий. В свою очередь покрытия на основе ZrB<sub>2</sub> обладают твердостью на уровне 25 ГПа, высоким коэффициентом трения в диапазоне 0,6-0,75 [1] и стойкостью к окислению до 700 °С. Введение Si увеличивает твердость более чем в 1,5 раза [2] и улучшает стойкость покрытий к окислению до 1500 °С [3,4]. Для практического применения важно установить закономерности влияния характеристик подложки на поведение покрытий в условиях эксплуатации. Целью данной работы является исследование покрытий Zr-Si-B, полученных на подложках ВК6М, Х65НВФТ и МЧ-1, при трении скольжения и воздействии ударно-динамических нагрузок.

Покрытия получали методом магнетронного распыления. Керамические мишени ZrSiB (25 ат.% Zr, 25 ат.% Si, 50 ат.% B) диаметром 120 мм и толщиной 6 мм были получены методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Распыление проводилось с помощью установки на базе откачивающей системы УВН-2М при следующих условиях: ток 2 А, напряжение

500 В, атмосфера Ar (99,9995%), рабочее давление в вакуумной камере 0,1–0,2 Па. В качестве подложек использовались диски из твердого сплава ВК6М размером  $\text{Ø}30 \times 5$  мм, диски из МЧ-1 размером  $\text{Ø}18 \times 14$  мм и диски из сплава Х65НВФТ размером  $\text{Ø}25 \times 5$  мм. Перед нанесением покрытий подложки подвергались очистке в вакууме с использованием ионного источника щелевого (ионы  $\text{Ar}^+$ , 2 кВ) в течение 20–25 мин.

Трибологические испытания по определению коэффициента трения покрытий проводили на высокотемпературном трибометре CSM Instruments (Швейцария) по схеме «стержень-диск». Образцы были испытаны в контакте с шариком из  $\text{Al}_2\text{O}_3$  диаметром 6 мм при нагрузке 1Н с линейной скоростью 10 см/с. Испытание на динамическое воздействие осуществляли с помощью прибора Impact Tester (CemeCon, Германия, Греция). Исследуемые покрытия подвергались ряду ударов ( $10^5$ ) с постоянной частотой 50 Гц с использованием шарика из твердого сплава WC-Co диаметром 5 мм. Нагрузки составляли 100, 300 и 500 Н. Для определения параметров и дорожек износа использовали оптический профилометр WYKO-NT1100.

Покрытия, полученные на подложках из сплава Х65НВФТ и МЧ-1, показали схожие значения установившегося коэффициента трения ( $f$ ) на уровне 0,69–0,72. Образец, осажденный на твердый сплав ВК6М, обладал низким  $f$  (до 0,2) на протяжении 10 м дистанции. На дистанции 10–100 м  $f$  возрос до 0,72. Испытания на стойкость к ударно-динамическим нагрузкам показали, что глубина кратера покрытия, полученного на ВК6М, при максимальной нагрузке в 14 и 53 раза меньше значений, полученных для Х65НВФТ и МЧ-1 соответственно. Проведено сопоставление физико-механических свойств подложек и характера разрушения покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 19-08-00187)

#### *Список литературы*

1. Y. Dong, T.-G. Wang, B. Yan et al.// Procedia Manufacturing. 2018. Vol. 26. P. 806–817.
2. H. Choi, J. Jang, T. Zhang et al.// Surf. Coat. Technol. Vol. 259. 2014. P. 707–713.
3. X. Ren, H. Shi, W. Wang et al.// J. Eur. Ceram. Soc. 2020. Vol. 40. P. 203–211.
4. F.V. Kiryukhantsev-Korneev, M.V. Lemesheva, N.V. Shvyndina et al.// Prot. Met. Phys. Chem. +. 2018. Vol. 54. P. 1147–1156.

А.Д. СЫТЧЕНКО, Ф.В. КИРЮХАНЦЕВ-КОРНЕЕВ  
*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОКРЫТИЙ MoSiB, MoHfSiB, MoZrSiB**

Методом магнетронного распыления были получены покрытия MoSiB, MoHfSiB, MoZrSiB на подложках из Mo. Изучены трибологические характеристики покрытий, такие как коэффициент трения, стойкость к ударно-динамическим нагрузкам и стойкость к абразивному износу. Определено влияние добавок Zr и Hf на свойства базового покрытия.

A.D. SYTCHENKO, PH. V. KIRYUKHANTSEV-KORNEEV

*NUST «MISiS», Moscow, Russia*

## **STUDY OF TRIBOLOGICAL CHARACTERISTICS OF MoSiB, MoHfSiB, AND MoZrSiB COATINGS**

MoSiB, MoHfSiB, MoZrSiB coatings on Mo substrates were obtained by magnetron sputtering. The tribological characteristics of the coatings, such as the friction coefficient, resistance to impact loads, and abrasion resistance, were studied. The effect of Zr and Hf additives on the properties of the base coat is determined.

Молибден и сплавы на основе Mo считаются одними из наиболее привлекательных материалов для высокотемпературных применений в авиационной, космической и других промышленности. Однако такие сплавы обладают низкой стойкостью к окислению при температурах выше 600 °С, поэтому на поверхность Mo и сплавов на его основе наносят покрытия, стойкие к высоким температурам. Одними из наиболее эффективных считаются покрытия MoSiB [1-6]. Существуют работы, в которых были исследованы жаростойкость, а также механические, трибологические и коррозионные свойства покрытий MoSiB [2, 3]. В тоже время для практического применения важна стойкость покрытий к абразивному износу и к циклическим ударно-динамическим воздействиям. Данная работа посвящена исследованию стойкости к ударно-динамическим нагрузкам и эрозионной стойкости покрытий MoSiB, MoZrSiB и MoHfSiB, полученных методом магнетронного распыления.

Покрытия были получены методом магнетронного распыления (MS) в режиме постоянного тока (DC). Мишени-катоды состава MoSiB (37,5 ат.% Mo, 50,0 ат.% Si, 12,5 ат.% В), MoZrSiB (26,1 ат.% Mo, 44,8 ат.% Si, 20,6 ат.% В, 8,5 ат.% Zr) и MoHfSiB (29,4 ат.% Mo, 50,4 ат.% Si, 14,9 ат.% В, 5,3 ат.% Hf) диаметром 120 мм и толщиной 10 мм были изготовлены методом горячего прессования с использованием измельчённых продуктов СВС-реакции.

Распыление проводилось при токе 2 А и напряжении 500 В в Ag (99,9995%) с использованием вакуумной установки на базе откачивающей системы УВН-2М. В качестве материала подложки использовались пластины из Мо размером  $10 \times 10 \times 5$  мм.

Испытания по определению коэффициента трения покрытий проводили на трибометре CSM Instruments (Швейцария) по схеме «стержень-диск». Испытание на динамическое воздействие осуществляли с помощью прибора Impact Tester (CemeCon, Германия, Греция). Исследуемые покрытия подвергались ряду ударов ( $10^5$ ) с постоянной частотой 50 Гц и нагрузке 1000 Н. Для определения параметров и дорожек износа использовали оптический профилометр WYKO-NT1100. Исследование абразивной стойкости покрытий проводили на ультразвуковом диспергаторе УЗДН-2Т. В качестве абразивного материала использовали  $\text{SiO}_2$ , WC,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{B}_4\text{C}$

В результате испытаний по определению коэффициента трения (f) образцы MoSiB и MoHfSiB показали схожие значения на уровне 0,7-0,8, а покрытие MoZrSiB полностью изнашивалось за первые 30 сек. Несмотря на это, образец MoZrSiB обладал неплохой стойкостью к циклическим ударно-динамическим воздействиям. В то же время потеря массы для покрытия MoZrSiB при абразивном воздействии частицами WC,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{B}_4\text{C}$  составила 0,3-0,5 мг, при использовании  $\text{SiO}_2$   $\Delta m$  составила 3,4 мг. Базовое покрытие MoSiB показало наибольшую потерю массы при абразивном воздействии  $\text{SiO}_2$ , равную 4,7 мг. Лучшими показателями абразивной износостойкости к  $\text{SiO}_2$  обладало покрытие MoHfSiB ( $\Delta m=2,2$  мг).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 19-19-00117.

#### *Список литературы*

1. X. Deng, G. Zhang, T. Wang and others// Ceram. Int. 2019. Vol. 45. P. 415–423.
2. P. Ritt, R. Sakidja, J.H. Perepezko// Surf. Coat. Technol. 2012. Vol. 206. P. 4166–4172.
3. H. Riedl, A. Vieweg, A. Limbeck and others// Surf. Coat. Technol. 2015. Vol. 280. P. 282–290.
4. Ph.V. Kiryukhantsev-Korneev, I.V. Iatsyuk, N.V. Shvindina and others// Corr. Sci. 2017. Vol. 123. P. 319-327
5. Ph.V. Kiryukhantsev-Korneev, S.O. Andreev, N.V. Shvindina and others// Russ. J. Nererr. Met. +. 2014. Vol. 55. P. 645–651.
6. Ph.V. Kiryukhantsev-Korneev, A.V. Bondarev, D.V. Shtansky and others// Prot Met Phys Chem. +. 2015. Vol. 51. P. 794–802.

А.В. ФРОЛОВ<sup>1</sup>, А.П. ОРЛОВ<sup>1</sup>, А.А. СИНЧЕНКО<sup>1,2</sup>, П. МОНСО<sup>3</sup>

*1 Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

*2 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия*

*3 Институт Нееля НЦНИ, Гренобль, Франция*

## **КОЛЛЕКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ, ИНИЦИИРОВАННЫЙ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ**

Продемонстрирована возможность коллективного движения волны зарядовой плотности (ВЗП) в микроостовках на основе  $\text{NbSe}_3$ , ориентированных перпендикулярно цепочкам ВЗП, в магнитном поле. Обнаружен эффект повторного возникновения скольжения ВЗП при повышении температуры от 4 К до 50 К. Тем самым получено прямое доказательство, что данный эффект является эффектом скольжения ВЗП под действием электрического поля Холла, порождаемого нормальным током в направлении поперек цепочек.

A.V. FROLOV<sup>1</sup>, A.P. ORLOV<sup>1</sup>, A.A. SINCHENKO<sup>1,2</sup>,  
P. MONCEAU<sup>3</sup>

*<sup>1</sup>Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*

*<sup>2</sup>M.V. Lomonosov Moscow State University, Russia*

*<sup>3</sup>Institut NEEL, Grenoble, France*

## **CHARGE DENSITY WAVE COLLECTIVE ELECTRON TRANSPORT INITIATED BY MAGNETIC FIELD**

The possibility of collective motion of a charge density wave (CDW) in microbridges based on  $\text{NbSe}_3$  oriented perpendicular to the chains of the CDW in a magnetic field is demonstrated. The effect of the re-occurrence of CDW sliding with an increase in temperature from 4 K to 50 K was found. Thus, direct evidence is obtained that this effect is the CDW sliding under the action of the Hall electric field generated by a normal current in the direction across the chains.

Коллективное движение (скольжение) волн зарядовой плотности (ВЗП) в квазиодномерных соединениях проявляется в резком возрастании проводимости в электрических полях, превышающих некоторое пороговое поле  $E > E_c$ , определяемое пиннингом [1]. В обычной геометрии проникновение электрического поля обеспечивается приложением внешнего напряжения, сопровождаемым током нормальных носителей. В результате, эффект скольжения возникает при большом нормальном токе протекающем в том же направлении, приводящему к эффектам трения ВЗП и к существенному джоулеву разогреву.

Недавно было обнаружено, что при низких температурах в геометрии пропускания тока в направлении поперек цепочек ВЗП в микроструктурах на основе  $\text{NbSe}_3$  в перпендикулярном магнитном поле возникает сильная пороговая нелинейность [2]. Выше некоторого порогового значения тока проводимость

микромостиков резко уменьшается почти на порядок. Данный нелинейный режим сопровождается генерацией когерентного высокочастотного электромагнитного излучения, проявляющегося на вольт-амперных характеристиках структур при одновременном наложении постоянного и переменного высокочастотного электрических полей в виде токовых ступеней Шапиро, эквидистантных по напряжению, также как и при нестационарном эффекте Джозефсона в сверхпроводниках. Мы показываем, что данный эффект является результатом скольжением ВЗП под действием электрического поля Холла, порождаемого током нормальных носителей в направлении поперек цепочек [3]. При этом величина тока ВЗП почти на два порядка превосходит порождающий его ток нормальных носителей. Ток ВЗП полностью компенсируется обратным прототоком нормальных носителей, который, в свою очередь, приводит к появлению напряжения Холла уже в направлении поперек цепочек ВЗП, которое и измеряется в эксперименте. Петля с нулевой суммой этих двух токов замкнута периодическими процессами преобразования заряда посредством проскальзывания фазы, порождая спонтанные когерентные осцилляции. В данной сценарии коллективное движение ВЗП начинается при полном отсутствии тока нормальных носителей в направлении вдоль цепочек ВЗП. Коллективный транспорт ВЗП в такой геометрии во многих аспектах отличается от скольжения ВЗП в обычной геометрии под действием приложенного внешнего напряжения. Так, в отличие от обычной геометрии, проводимость ВЗП резко возрастает при понижении температуры. Обнаружен необычный размерный эффект: в узких, шириной менее 2 мкм, микромостиках, наблюдается сильная зависимость порогового электрического поля инициации движения ВЗП от магнитного поля, полностью отсутствующая в обычной геометрии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 18-02-00295.

#### *Список литературы*

1. P. Monceau, *Advances in Physics* 61, 325 (2012).
2. Andrey P. Orlov et al., *npj Quantum Materials* 61 (2017).
3. A. V. Frolov, et al., *Phys. Rev. B*, 100, 245126 (2019)

А.В. ФРОЛОВ<sup>1</sup>, А. ОЛЕЙНИЧАК<sup>2,3</sup>, П.А. ЗЛИЩЕВА<sup>2,4</sup>,  
Н.А. НЕБОГАТИКОВА<sup>5,6</sup>, И.В. АНТОНОВА<sup>5,6,7</sup>, В.А. СКУРАТОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

<sup>3</sup>*Университет Николая Коперника, Торунь, Польша*

<sup>4</sup>*Казанский федеральный университет, Россия*

<sup>5</sup>*Институт физики полупроводников им. Ржанова, Новосибирск, Россия*

<sup>6</sup>*Новосибирский государственный университет, Россия*

<sup>7</sup>*Новосибирский государственный технический университет, Россия*

## **ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА И ОКСИДА ГРАФЕНА, ОБЛУЧЕННОГО ТЯЖЕЛЫМИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОНАМИ**

Изучено влияние облучения тяжёлыми высокоэнергетическими ионами на транспортные свойства графена и оксида графена. Облучение производилось ионами разных элементов, также варьировалась их энергия и плотность потока (флюенс). Обнаружено, что свойства облучённого графена сильно зависят от типа, энергии и флюенса ионов, и определяются взаимодействием иона с графеном и подложкой. При облучении транспортные свойства графена с разным количеством слоёв изменяются схожим образом. При облучении оксида графена происходит его локальное восстановление в виде пятен нанометрового размера. Его проводимость сильно и нелинейно возрастает с увеличением флюенса ионов. Размером и плотностью пятен можно контролировать, меняя параметры облучения. Полученные структуры можно считать графеновыми квантовыми точками, встроенными в непроводящую матрицу.

A.V. FROLOV<sup>1</sup>, A. OLEJNICZAK<sup>2,3</sup>, P.A. ZLISHCHEVA<sup>2,4</sup>,  
N.A. NEBOGATIKOVA<sup>5,6</sup>, I.V. ANTONOVA<sup>5,6,7</sup>, V.A. SKURATOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

<sup>3</sup>*Nicolaus Copernicus University, Torun, Poland*

<sup>4</sup>*Kazan (Volga region) Federal University, Russia*

<sup>5</sup>*Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Russia*

<sup>6</sup>*Novosibirsk State University, Russia*

<sup>7</sup>*Novosibirsk State Technical University, Russia*

## **TRANSPORT PROPERTIES OF GRAPHENE AND GRAPHENE OXIDE IRRADIATED BY SWIFT HEAVY IONS**

The effect of irradiation with swift heavy ions on the transport properties of graphene and graphene oxide was studied. Irradiation was carried out by ions of different elements, varying their energy and flux density (fluence). It was found that the properties of irradiated graphene strongly depend on the type, energy, and fluence of the ions, and are determined by the interaction of the ion with graphene and the substrate. Upon irradiation, the transport properties of graphene with a different number of layers change in a similar way. Upon irradiation of graphene oxide, its local reduction occurs in the form of spots of nanometer size. Its

conductivity increases strongly and nonlinearly with increasing ion fluence. The size and density of the spots can be controlled by changing the exposure parameters. The resulting structures can be considered graphene quantum dots embedded in a non-conducting matrix.

Облучение двумерных материалов тяжёлыми высокоэнергетическими ионами позволяет создавать в них дефекты нанометровых размеров, отличные по свойствам от исходного материала. В работе исследовались плёнки одно-, двух- и трёхслойного графена, выращенного методом химического осаждения из газовой фазы (CVD), и перенесённого на подложку с 300-нм слоем SiO<sub>2</sub> на кремнии. Плёнки графена облучались ионами ванадия и висмута с энергиями 64 и 700 МэВ соответственно, с флюенсами 10<sup>10</sup> и 10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>. Измерялись эффект Холла и эффект поля образцов при 300К. Обнаружено, что после облучения ионами ванадия подвижность образцов практически не изменялась, тогда как после облучения ионами висмута наблюдалось значительное уменьшение проводимости и подвижности графена. Величина эффекта была близкой для плёнок с разным количеством слоёв.

В плёнках оксида графена при облучении ионами Ar, Kr, Xe с энергиями 46-167 МэВ проводимость, наоборот, возрастала: при флюенсах выше 10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup> сопротивление плёнок становилось на порядки ниже исходной. Возрастание проводимости связано с образованием при облучении областей восстановленного оксида графена нанометрового размера, что подтверждается данными атомно-силовой и электронной микроскопии, рамановской и фотоэлектронной спектроскопии, а также результатами транспортных измерений.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ (проекты № СП-5416.2018.2 и СП-3332.2019.2.

*Список литературы*

1. Olejniczak A., Nebogatikova N. A., Frolov A. V. et al. //Carbon. – 2019. – Vol. 141. – p. 390-399.

Л.В. ФУРОВ

*Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, Владимир, Россия*

## **О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПЫТАНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ТЕПЛОВОЙ УДАР**

В работе рассматриваются результаты испытаний поверхности диэлектрических и керамических материалов на кратковременное термическое воздействие – тепловой удар при электровзрыве проводящей диафрагмы.

L.V. FUROV

*Vladimir State University, Vladimir, Russia*

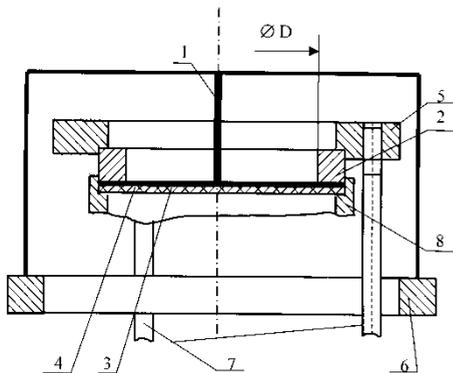
## **ON THE POSSIBILITY OF TESTING DIELECTRIC MATERIALS FOR HEAT SHOCK**

The paper considers the results of testing the surface of dielectric and ceramic materials for short-term thermal effects – heat shock in the event of an electrical explosion of a conducting diaphragm.

Испытания диэлектрических материалов, в том числе композитных, тепловым воздействием (термический удар) является важным и актуальным при определении их термических свойств. Однако, при проведении этих исследований нагрев образца проходит в течение длительного времени (30 с и более), если это проводится, например, плазмотроном. В некоторых случаях требуется испытание образца на разовое поверхностное термическое воздействие.

В данной работе предлагаются результаты экспериментов по испытанию диэлектрических материалов на кратковременный (не более 100 мс) термический удар с помощью электровзрыва проводящей диафрагмы в свободной атмосфере [1]. Опыты проводились при атмосферном давлении электровзрывом проводящей диафрагмы импульсом тока до 16 кА, длительностью от 70 до 100 мс и подводимой энергией 50 кДж [1].

На рисунке представлено устройство [2] для испытания диэлектрических материалов. Инициатором разряда является проводящая диафрагма 4 в форме круга, составленная из нескольких слоёв алюминиевой фольги (толщина одного слоя 8 мкм). Она располагается на диэлектрической подложке 3 (испытываемый материал) и прижимается к ней кольцевым токоподводом 2. Его внутренний диаметр изменялся от 60 до 150 мм. Тем самым варьировалась площадь воздействия на испытываемый материал. В центр диафрагмы устанавливается токоподвод 1 из скрученных проволочек диаметром 1,0 - 2,4 мм, количество которых, в зависимости от условий опыта, может изменяться от 2 до 8. Другой



конец проволочек крепится по кругу на токоподвод 6. Вся конструкция крепится на стойке 8. Импульс электрической энергии, генерируемый индуктивным накопителем, переводит материал проводящей диафрагмы в форме круга в состояние низкотемпературной плазмы, которая воздействует на испытываемый материал. Испытания были как разовыми, так и многократными (1 - 10 раз). В

качестве испытываемых образцов использовались диэлектрики: текстолит, ситалл, стекло, плексиглас и др.

Опыты показали, что кратковременное поверхностное воздействие электроразрядной плазмы (яркостная температура доходила до 4500 К) приводит к частичному отслоению материала. Площадь воздействия  $\approx 300 \text{ см}^2$  и более. Толщина образца варьировалась от 3 до 10 мм. Возникающие тепловые градиенты на стадии нагрева и охлаждения также, в зависимости от условий эксперимента, приводят к оплавлению и частичному расслоению образца. Опыты показали, что наибольший эффект достигался при испытаниях ситалла и стекла. В зависимости от условий эксперимента (подводимой энергии, времени воздействия), в некоторых опытах происходило разрушение образца.

Результаты проведенных исследований позволяют говорить о перспективности поверхностного кратковременного теплового воздействия (удара) на теплонагруженные диэлектрические материалы.

#### *Список литературы*

1. Кунин В.Н., Конопасов Н.Г., Плешивцев В.С. Индукционный накопитель электрической энергии // Приборы и техника эксперимента, 1988. №3, С.103-104.
2. Фуров Л.В. Устройство кумуляции плазменных сгустков // Патент на изобретение №2692689, 26.06.2019, Бюл. №18.

В.И. ЧЕПУРНОВ, А.В. ГУРСКАЯ, О.В. КУЗНЕЦОВ, М.В.  
ДОЛГОПОЛОВ

*ООО «БетаВольтаика», Самара, Россия*  
*Самарский государственный технический университет, Россия*  
*Самарский университет, Россия*

## **ОПТИМИЗАЦИЯ БЕТА-ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ C-14 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО И GEANT4**

Для построения бета-преобразователей с максимальной эффективностью необходимо провести теоретический расчет с целью определения их оптимальных параметров - геометрии конструкции, толщины осаждаемого радиоизотопного слоя, глубины и ширины p-n перехода и др. К настоящему времени было предложено много различных теоретических моделей и методов расчетов. Существуют достаточно простые теоретические модели, основанные на формуле Бете-Блоха и расчете скорости генерации электронно-дырочных пар, а также на расчетах по эквивалентным схемам. Кроме того, метод Монте-Карло используется для теоретического моделирования бета-преобразователей. В данной работе рассматривается оптимизация бета-преобразователя с использованием метода Монте-Карло. Цель исследования - провести моделирование методом Монте-Карло с использованием GEANT4 бета-преобразователя с введенным на уровне легирования углеродом-14 для определения его оптимальных параметров.

O.V. KUZNETSOV, V.I. CHEPURNOV, A.V. GURSKAYA,  
M.V. DOLGOPOLOV

*BetaVoltaics LLC, Samara, Russia*

*Samara POLYTECH, Russia*

*Samara University, Russia*

## **OPTIMIZING THE C-14 BETA CONVERTER USING THE MONTE CARLO METHOD AND GEANT4**

To develop betaconverters devices with maximum efficiency, it is necessary to perform the theoretical calculation in order to determine their optimal parameters - the geometry of the structure, the thickness of the deposited radioisotope layer, the depth and width of the p-n junction, etc. Many different theoretical models and calculation methods have been proposed so far. There are fairly simple theoretical models based on the Bethe-Bloch formula and the calculation of the generation rate of electron-hole pairs, as well as calculations using equivalent schemes. In addition, the Monte-Carlo method is used for theoretical modeling of betaconverters. In this paper, we consider optimization of the betaconverter using the Monte-Carlo method. The aim of this research is to conduct Monte-Carlo simulation using a GEANT4 model of the betaconverter with Carbon-14 introduced at the doping level and to determine its optimal parameters.

В данной работе речь идет о предварительном формировании образцов с пленкой карбида кремния в кремниевой подложке методом эндотаксии - процесс роста одной фазы кристаллической структуры за счет объема другой фазы. Образец с кремниевой подложкой подвергается воздействию потока метана  $\text{CH}_4$  в газовой камере при температуре  $1360 \pm 1380^\circ\text{C}$  и нормальном давлении. Кроме того, газ содержит как стабильный изотоп углерода  $\text{C}_{12}$ , так и радиоактивный изотоп углерода  $\text{C}_{14}$ , а водород  $\text{H}_2$  в газе выступает в качестве носителя углерода [1, 2]. Процесс длится несколько минут, в течение этого времени молекулы метана химически взаимодействуют с атомами кремния, образуя карбид кремния и водород. В результате образования новой фазы на поверхности кремния несоответствие параметров решетки кристаллических фаз приводит к механическим напряжениям сопрягаемых фаз. Релаксация напряжений осуществляется сеткой дислокаций, формирующейся в кремниевой фазе и движущейся перед фронтом роста фазы карбида кремния. Сетка дислокаций выступает в роли скрытого геттера, т.е. поверхности дислокации рассматриваются как вакантные места для адсорбции атомов легирующей и неконтролируемой примеси, в данном случае включая атомы радиоуглерода. Как правило, геттерируемые примеси выделяются в виде преципитатов, в нашем случае выделяющаяся фаза радиоуглерода провзаимодействует при температуре  $1360^\circ$  с кремнием с образованием карбида кремния. Растворенный в решетках кремния и карбида кремния углерод выступает как изоэлектронная легирующая примесь.

Для расчета эффективности бета-преобразователя и определения его оптимальных параметров, в частности, ширины и глубины залегания p-n перехода было проведено моделирование методом Монте-Карло в программе GEANT4 [3, 4]. Для моделирования были использованы экспериментальные данные о концентрации углерода в бета-преобразователе и спектре C-14 [4, 5]. По результатам моделирования была получена скорость генерации электронно-дырочных пар в области объемного пространственного заряда p-n перехода и определены оптимальные параметры p-n перехода.

#### *Список литературы*

1. Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И.// Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48. № 6, С. 901-909
2. Долгополов М.В., и др. Способ получения пористого слоя гетероструктуры карбида кремния на подложке кремния. Патент №2653398 опубл. 24.01.2018 Бюл. № 3
3. GEANT4 Documentation URL: <https://geant4.web.cern.ch>
4. Oleg Kuznetsov, et al. // EPJ Web Conf., 222 (2019) 02012
5. Чепурнов В.И., Пузырная Г.В., Гурская А.В. и др.// Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Т. 22. № 3. С. 55-67

В.И. ЧЕПУРНОВ, Г.В. ПУЗЫРНАЯ, Д.А. ЕЛХИМОВ, А.В. ГУРСКАЯ,  
А.А. КУЗНЕЦОВА, О.В. КУЗНЕЦОВ  
*ООО «БетаВольтаика», Самара, Россия*  
*Самарский университет, Россия*  
*Самарский государственный технический университет, Россия*

## **АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ БЕТА-РАСПАДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ SiC/Si**

В работе представлен анализ факторов, снижающих эффективность энергопреобразования бета-излучения радиоизотопов в полупроводниковых структурах. Анализ строится на экспериментальных данных для бета-легированной структуры SiC/Si атомами С-14 и на основе моделирования прохождения излучения через структуру полупроводника с р-п-переходом.

V.I. CHEPURNOV, G.V. PUZYRNAYA, D.A. ELKHIMOV,  
A.V. GURSKAYA, A.A. KUZNETSOVA, O.V. KUZNETSOV

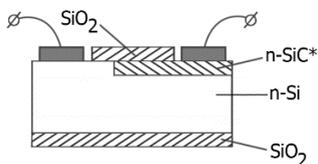
*BetaVoltaics LLC, Samara, Russia*  
*Samara University, Samara, Russia*  
*Samara POLYTECH, Samara, Russia*

## **ANALYSIS OF THE BETA-DECAY ENERGY CONVERSION EFFICIENCY IN SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURAL SiC/Si**

This paper presents the most complete and comprehensive analysis of factors that reduce the energy conversion efficiency of beta radioisotopes radiation in semiconductor structures. The analysis is based on extensive experimental data for the beta-doped structure of SiC/Si by C-14 molecules, as well as on the simulation of radiation passing through the structure of a semiconductor with the p-n transition.

Проблема недостаточной эффективности преобразования энергии в бетавольтаке [1] является одной из причин, сдерживающих широкое распространение бета-преобразователей как элементов питания маломощных электронных устройств в различных областях техники, промышленности и в быту. В данной работе рассмотрены факторы, которые однозначно приводят к ухудшению энергопреобразования: избирательное поглощение излучения полупроводником (в определенной части спектра, приемлемой для данного полупроводника), технология легирования и положение р-п-перехода (глубина залегания), процессы дефектообразования в структуре, диффузионная длина пробега собственных генерированных вторичных электронно-дырочных пар носителей, геометрические особенности готовых образцов и металлизации, самопоглощение радиоизотопа [2] и его активность, период полураспада, способ

внедрения радиоизотопа в материал полупроводника. Последний вопрос принципиален, так как в Самарском университете разработан бета-преобразователь энергии бета-излучения углерода-14, который не имеет аналогов в мире [3]. Имеющиеся конструкции и технологии бета-преобразователей на Ni-63 и H-3 представляют из себя полупроводниковые структуры с радиоизотопом, который располагается на поверхностном слое или в заранее стравленных ямках и колодцах на поверхности. Технология же Самарского университета представляет бета-преобразователь на радиоизотопе углерода, где C-14 входит в состав структуры полупроводника как легированная примесь, таким образом облучая структуру изнутри. Полученный бета-легированный преобразователь имеет преимущества перед другими энергопреобразователями, в частности, за счет периода полураспада C-14 в 5730 лет, а также радиационной стойкости используемого в разработке SiC. Отдельно отметим стойкость к дефектообразованию (пороговая энергия дефектообразования 0,17МэВ в кремниевых структурах выше максимальной энергии бета-излучения 0,156МэВ) и «очистку» при эндотаксии структуры во время легирования от дефектов, при прорастании новой фазы внутрь структуры движется сетка дислокаций, которая играет роль внутреннего геттера. Другие факторы, влияющие на эффективность энергопреобразования, рассмотрены с привлечением программного приложения GEANT [4]. Схема бета-преобразователя, представлена на рисунке.



#### Список литературы

1. Гурская А.В., Долгополов М.В., Чепурнов В.И.// Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2017. Т. 48. № 6, С. 901-909
2. Нагорнов Ю.С. // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. N3(27). С.136-145
3. Чепурнов В.И., Пузырная Г.В., Гурская А.В. и др.// Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Т. 22. № 3. С. 55-67
4. Geant4 Collaboration Geant4—a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. №506. С. 250-303.

М.Б. ШАВЕЛКИНА, Б.В. КЛЕЙМЕНОВ, Г.Е. ВАЛЬЯНО, Р.Х. АМИРОВ  
*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ГРАФЕН ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГЕТИКИ: ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ КОМПОЗИТА N-ГРАФЕН - ПОЛИМЕР**

В плазменных струях плазматрона постоянного тока синтезирован азотсодержащий графен. Проведены электронномикроскопические исследования влияния морфологии N-графена на структуру гидрофобизатора.

M.B. SHAVELKINA, B.V. KLEIMENOV, G.E. VALYANO,  
R.H. AMIROV

*Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia*

## **GRAPHENE FOR ELECTROCHEMICAL POWER ENGINEERING: ELECTRONIC MICROSCOPY OF COMPOSITE N-GRAPHENE - POLYMER**

Nitrogen-containing graphene in the plasma jets of a DC plasma torch was synthesized. Electron microscopic studies of the influence of the morphology of N-graphene on the structure of the water-repellent substance were carried out in comparison with the morphology of activated carbon, which was also used to make the cathode.

В настоящее время электрохимические накопители, в которых энергия химических связей напрямую конвертируется в электрическую энергию, могут запасать ГВтч энергии и используют огромное разнообразие химических систем. Кислород из окружающей среды, широко используется в качестве компонента для электрохимических преобразователей. Поэтому окислительно-восстановительные реакции кислорода представляют огромное значение для таких электрохимических устройств, как топливные элементы и металл-воздушные батареи. В этих системах гетерогенный перенос электрона к/от кислорода происходит на поверхности электрода. Различные углероды демонстрируют разную эффективность при их использовании в качестве катализаторов электровосстановления кислорода. Для интенсификации процессов активный слой катода [1] гидрофобизируется фторопластом, по поверхности агломератов которого воздух диффундирует к зоне реакции. Исследованиями моделей гидрофобизированных активных слоев катодов показано, что их активность возрастает с уменьшением размеров агломератов гидрофобизатора [2].

Для исследований влияния геометрии частиц углерода на структуру активных слоев катодов использовали синтезированный в плазменных струях

азотсодержащий графен [3] и высокодисперсный активированный уголь марки УАФ (ТУ 6-16-2409-80).

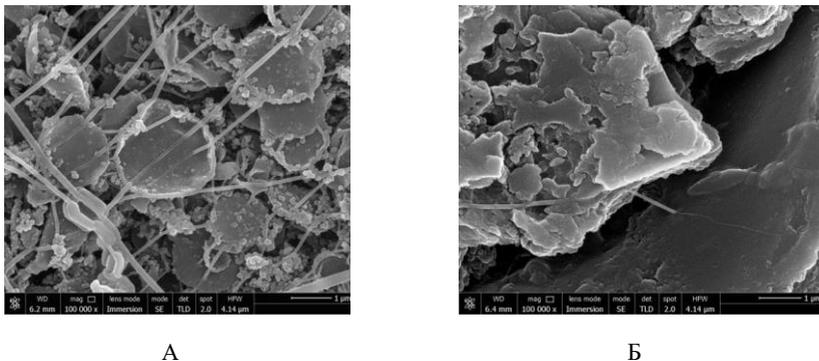


Рис. 1. Электронномикроскопические снимки поверхности композиций катодов «N-графен-фторопласт» (А), «АУ-фторопласт» (Б).

Анализ электронно-микроскопических снимков показал, что N-графен представляет собой тонкие пластины куполообразной формы диаметрами от ~200 до 1000 нм (рисунок 1А). В смеси с фторопластом пластины N-графена объединены сетью нанометровых фторопластовых волокон связанных с фторопластовыми агрегатами.

Образцы композита УАФ-фторопласт состоят из частиц угля имеющих в поперечнике размеры, лежащие в основном в диапазоне ~ 0,5 - 40 микрометров. Поверхность частиц, в той или иной степени, покрыта агрегатами фторопласта (рисунок 1Б), соединенными волокнами толщиной в несколько десятков нанометров.

Таким образом, структурированный послойно электрод на основе графена имеет больше преимуществ для диффузии реагента.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантом РФФИ № 18-08-00040.

#### *Список литературы*

1. Тарасевич М. Р. Электрохимия углеродных материалов. М.: Наука, 1984.
2. Дрибинский А.В. Тарасевич М.Р. Бурштейн Р.Х.. Электрохимия. 1971. Т. 7. С. 1826
3. Shavelkina M. B., Filimonova E. A., Amirov R. Kh., Isakaev E. Kh. J. Phys. D: Appl. Phys. 2018. V. 51. 294005

Г.Ш. ШАПИЕВ, С.Х. ГАДЖИМАГОМЕДОВ, Д.К. ПАЛЧАЕВ, М.Х.  
РАБАДАНОВ, Ж.Х. МУРЛИЕВА, П.М. САЙПУЛАЕВ  
*Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия*

## **ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ** **$Y(Be_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}$**

При технологическом замещении бериллия барием, методом твёрдофазного спекания, получены полупроводниковые керамические материалы составов  $Y(Be_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}$  ( $x=0\div 0,2$ ), пригодные для создания терморезисторов. Образцы керамик спекались в течение 20 часов в 7 этапов, начиная с температуры 920°C и с последующим увеличением температуры на 5°C.

G.SH. SHAPIEV, S.KH. GADZHIMAGOMEDOV,  
D.K. PALCHAEV, M.KH. RABADANOV, ZH.KH. MURLIEVA, P.M.  
SAYPULAEV

*Dagestan State University, Makhachkala, Russia*

## **SEMICONDUCTOR CERAMIC MATERIALS** **$Y(Be_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}$**

During the technological replacement of beryllium with barium, by the method of solid-phase sintering, semiconductor ceramic materials of the compositions  $Y(Be_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}$  ( $x = 0 \div 0.2$ ) suitable for creating thermistors were obtained. Samples were sintered for 20 hours, in 7 stages, starting from a temperature of 920°C and followed by a temperature increase of 5°C.

Разработка и создание новых полупроводниковых керамических материалов с заданными характеристиками представляет одно из приоритетных направлений программы фундаментальных исследований. Полупроводниковые материалы с удельным электросопротивлением ( $\rho$ ) до ~10 МОм эффективно используются для изготовления терморезисторов [1,2].

В работе приведены результаты исследований керамических материалов состава  $Y(Be_{1-x}Ba_x)_2Cu_3O_{7-d}$  ( $x=0\div 0,2$ ), полученных методом твёрдофазного спекания при технологическом замещении бериллия барием. Исходные оксиды  $Y_2O_3$ ,  $BaCO_3$ ,  $BeO$  и  $CuO$  тщательно перемешивались с добавлением этилового спирта и прессовались под давлением не более 100 МПа.

Синтез керамических образцов осуществлялся в течение 20 часов при температуре 915°C (скорость подъема до температуры ~ 0,7 °C/мин). Процесс спекания проводили в течение 20 часов в 7 этапов, начиная с 920°C, с последующим увеличением температуры на 5°C для каждого этапа. Измерения (рис. 1) истинной плотности керамик ( $\gamma$ ) осуществлялись методом гидростатического взвешивания (максимальная погрешность не более ~ 0,2%) в

бутиловом спирте. Для этого образцы предварительно насыщались бутиловым спиртом при давлении ниже атмосферного.

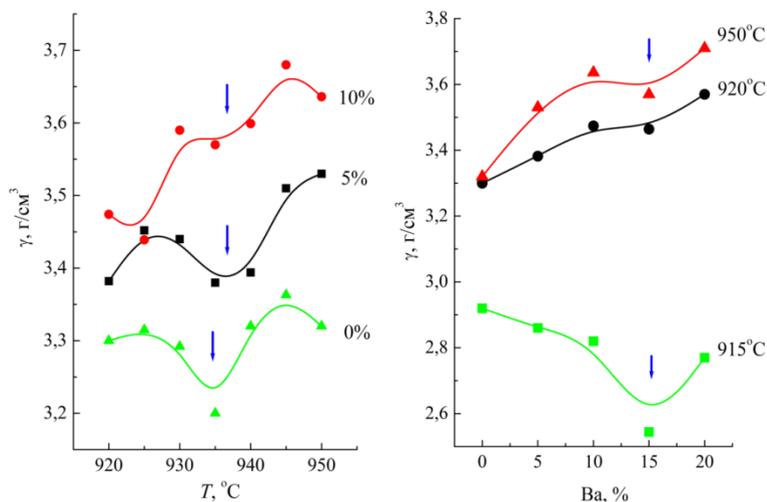


Рис. 1. Зависимости плотности образцов от температуры спекания (слева) и содержания Ва (справа).

Наблюдаемая тенденция к повышению плотности керамик с ростом содержания бария связана со структурными изменениями решетки. Кроме того, с ростом содержания Ва, оптимальная температура спекания понижается.

Работа была поддержана грантом «УМНИК» №14045ГУ/2019

#### Список литературы

1. Шапиев Г.Ш., Рабаданова А.Э., Гаджимагомедов С.Х. // Перспектива – 2019. Материалы международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных, Нальчик, 2019, с. 129-131.
2. Палчаев Д.К., Рабаданов М.Х., Мурлиева Ж.Х. и др. // Перспективные материалы. 2009. № 3. С. 57-64.

А.В. ШЕЛЯКОВ, О.Н. СЕВРЮКОВ, Н.Н. СИТНИКОВ, К.А.  
БОРОДАКО, И.А. ХАБИБУЛЛИНА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ TiNiCu С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ МЕДИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ МЕТОДОМ ПЛАНАРНОГО ЛИТЬЯ**

Исследована структура сплавов квазибинарной системы TiNi – TiCu с содержанием меди от 25 до 40 ат.%, закаленных из жидкого состояния методом планарного литья при скорости охлаждения расплава около  $10^6$  К/с. Показано, что с контактной к закалочному диску стороны все сплавы являются аморфными, в то время как на неконтактной стороне сплавов 25Cu и 35Cu наблюдается тонкий поверхностный кристаллический слой со структурой B19. Установлено, что содержание компонентов сплава в аморфной и кристаллической фазах совпадает.

A.V. SHELYAKOV, O.V. SEVRYUKOV, N.N. SITNIKOV,  
K.A. BORODAKO, I.A. KHABIBULLINA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **FORMATION OF STRUCTURE OF TiNiCu ALLOYS WITH HIGH COPPER CONTENT WHEN PRODUCING BY PLANAR FLOW CASTING**

The structure of alloys of the quasibinary system TiNi - TiCu with a copper content of 25 to 40 at.% quenched from the liquid state by planar flow casting at a melt cooling rate of about  $10^6$  K/s was investigated. It was shown that from the side contacting the quenching disk, all alloys are amorphous, while on the non-contact side of the 25Cu and 35Cu alloys, a thin surface crystalline layer with a B19 structure is observed. It was established that the content of alloy components in the amorphous and crystalline phases coincides.

Быстрозакаленные сплавы квазибинарной интерметаллической системы TiNi – TiCu с высоким содержанием меди (более 25 ат.%) представляют большой интерес в качестве материалов с памятью формы благодаря возможности значительного уменьшения величины температурного и деформационного гистерезиса по сравнению с бинарным сплавом TiNi. Для получения сплавов использовалась методика планарного литья (planar flow casting, PFL), которая включала в себя расплавление слитка в кварцевом тигле в атмосфере гелия и экструзию расплава через узкое щелевое сопло в тигле на поверхность быстро вращающегося медного диска. Скорость охлаждения расплава около  $10^6$  К/с поддерживалась одинаковой для всех сплавов. Методом планарного литья были изготовлены сплавы системы TiNi–TiCu с содержанием меди 25, 30, 35 и 40

ат.% (в дальнейшем обозначенные 25Cu, 30Cu, 35Cu и 40Cu, соответственно) в виде лент толщиной 30–50 мкм и шириной в диапазоне от 7 до 20 мм.

Микроструктура исходного состояния сплавов определялась на дифрактометре PANalytical Empyrean в Cu-K $\alpha$  излучении как с контактной (обращенной к закалочному диску) поверхности лент, так и с неконтактной (свободной) стороны лент. На дифрактограммах свободной поверхности лент из сплавов 25Cu и 30Cu при комнатной температуре наблюдаются ярко выраженные дифракционные пики аустенитной фазы B2 (типа CsCl), интенсивность которых резко снижается при увеличении содержания меди до 40 ат.%. Как показали исследования поперечного сечения лент на сканирующем электронном микроскопе FEI Quanta 600 FEG, это связано с образованием поверхностного кристаллического слоя на свободной стороне лент из сплавов 25Cu и 30Cu (толщиной около 3.5 и 1.5 мкм, соответственно), в то время как в лентах из сплавов 35Cu и 40Cu кристаллический слой не наблюдается. На дифрактограммах контактной стороны лент во всех PFL образцах наблюдается размытое аморфное гало вблизи  $2\theta=42$  градуса, что свидетельствует о рентгеноаморфном состоянии сплавов.

Исследование тонкой структуры с помощью ПЭМ JEOL JEM 2100 позволило выявить во всех образцах сплавов типичный для аморфной фазы ультрадисперсный абсорбционный контраст. На соответствующих дифракционных картинах наблюдался ряд диффузных колец с убывающей интенсивностью по мере возрастания угла вектора дифракции.

Для элементного анализа сплавов использовался метод энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDS) в СЭМ-исследованиях поперечного сечения лент. Было установлено, что в области аморфного состояния элементный состав для всех исследуемых сплавов соответствует составу исходного слитка в пределах точности метода.

Особое внимание уделялось сравнению химического состава аморфной матрицы, поверхностного кристаллического слоя и отдельных кристаллитов в объеме ленты там, где они присутствуют. Установлено, что содержание компонентов сплава в аморфной и кристаллической фазах совпадает, а вдоль линии, проходящей через слои аморфной и кристаллической фаз, не претерпевает каких либо заметных изменений.

Работа выполнена за счет гранта РФФИ (проект №19-12-00327).

И.В. ЩЕТИНИН<sup>1</sup>, Р.В. СУНДЕЕВ<sup>2</sup>, А.В. КАМЫНИН<sup>1,3</sup>, В.Н.  
ВЕРБЕЦКИЙ<sup>4</sup>, В.П. МЕНУШЕНКОВ<sup>1</sup>, А.Г. САВЧЕНКО<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва,  
Россия

<sup>2</sup>Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия

<sup>3</sup>АО «СПЕЦМАГНИТ», Москва, Россия

<sup>4</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Россия

## **ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЯ $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ , ПОЛУЧЕННЫХ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ ПРИ РАЗНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

В работе методами рентгеноструктурного анализа, измерения магнитных свойств, мёсбауэровской спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии исследованы фазовые превращения, протекающие в сплавах на основе соединения  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ , полученных кручением под высоким давлением (КВД) при температурах 77 и 300 К. Обнаружено, что КВД при 300 К приводит к распаду  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  и формированию нанокompозитной структуры. КВД при 77 К не приводило к распаду фазы  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ . Сделан вывод о влиянии температуры на процессы деформации.

I. V. SHCHETININ<sup>1</sup>, R. V. SUNDEEV<sup>2</sup>, A. V. KAMYININ<sup>1,3</sup>,  
V. N. VERBETSKY<sup>4</sup>, V. P. MENUSHENKOV<sup>1</sup>, A. G. SAVCHENKO<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russia

<sup>2</sup>Russian Technological University "MIREA", Moscow, Russia

<sup>3</sup>JSC "SPETSMAGNIT", Moscow, Russia

<sup>4</sup>Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

## **PHASE TRANSFORMATIONS IN ALLOYS BASED ON THE $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ COMPOUND UNDER HIGH PRESSURE TORSION AT DIFFERENT TEMPERATURES**

Structural transformations and magnetic properties in alloys based on  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  produced by high pressure torsion (HPT) at different temperatures has been investigated by X-ray diffraction, Mossbauer spectroscopy, magnetic properties measurements and scanning electron microscopy. It was found that HPT at 300 K leads to the decomposition of  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  compound and the formation of a nanocomposite structure. The HPT at 77 K did not lead to the decomposition of the  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  phase. The conclusion is drawn about the effect of temperature on deformation processes. The influence of temperature on the deformation processes is determined.

В настоящее время нитриды на основе соединения  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$  являются наиболее перспективными системами для получения постоянных магнитов с более высокими гистерезисными характеристиками, чем сплавы системы Nd-Fe-В за счет более высокой температурой Кюри, высокой константы

магнитокристаллической анизотропии, лучшей стойкостью к окислению, более низким содержанием РЗМ и более низкой стоимости Sm по сравнению с другими РЗМ-металлами. В связи с этим исследование изменения магнитных свойств методами экстремальных воздействий с целью получения объемных материалов с высокими значениями коэрцитивной силы является актуальной задачей.

Кручение под высоким давлением (КВД) проводили в камере Бриджмена с давлением 6 ГПа и количеством оборотов  $N = 3$  и  $5$  при температурах  $77$  и  $300$  К. В данной работе исследования фазового состава проводили на многофункциональном дифрактометре Rigaku Ultima IV, химический состав определялся методом рентгенофлуоресцентного анализа на спектрометре Rigaku Primus II, магнитные свойства измеряли на вибромагнетометре VSM-250 и установке измерения физических величин PPMS в полях до  $90$  кЭ.

По данным фазового анализа КВД при  $300$  К приводило к распаду фазы  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  на нитрид самария и  $\alpha\text{-Fe}$ , при этом объемная доля продуктов распада увеличивалась до  $35\%$  (при  $N = 5$ ). По данным сканирующей электронной микроскопии распад приводил к измельчению структуры и формированием нанокompозитной структуры с высокими гистерезисными характеристиками ( $H_c$  до  $6.5$  кЭ при  $N=3$ ). За счет малого размера зерен фаз ( $\sim 10$  нм) фазы  $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$  и  $\alpha\text{-Fe}$  находились в обменносвязанном состоянии. КВД при  $77$  К не приводило к образованию  $\alpha\text{-Fe}$ , а лишь к измельчению структуры, что вызывало монотонный рост коэрцитивной силы до  $7.7$  кЭ.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РНФ), соглашение №18-72-00249.

Д.С. ЯШКИН, П.А. БРАЖНИК, И.В. КУЛИКОВ, А.А. КАРТАМЫШЕВ  
*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

## **ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТОКОНЕСУЩУЮ СПОСОБНОСТЬ ЗАХВАТЫВАЮЩИХ ВИТКОВ**

Исследована зависимость параметров релаксации тока захватывающих витков, помещенных в магнитное поле различных конфигураций. Показано, что в поле, перпендикулярном плоскости витка, ток меньше падает в витках из лент на основе YBCO с добавлением 8% фазы 211, а в собственном поле магнита токонесящая способность выше у витков из лент на основе GdBCO.

D.S. YASHKIN, P.A. BRAZHNİK, I.V. KULIKOV,  
A.A. KARTAMYSHEV

*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*

## **MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON THE CRITICAL CURRENT IN SHORT-CIRCUIT SUPERCONDUCTING LOOP**

The field dependence of the current relaxation parameters of tape-slit turn made of different tapes in various magnetic field was researched. Turns made of GdBCO HTSC-2g tapes were better in self-field measurement and turns made of YBCO+211 tape were better in external field orthogonal to turn plane.

Работа посвящена исследованию влияния конфигурации магнитного поля на снижение токонесящей способности различных ВТСП-2 лент, составляющих магнит, работающий в режиме замороженного магнитного потока, с целью определить предпочтительные материалы для изготовления такого магнита.

В работе исследовались витки, изготовленные из ленты производства НИЦ «Курчатовский институт» со сверхпроводящим слоем  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с добавлением  $\text{Y}_2\text{BaCuO}_5$  (8% вес.) с критическим током порядка 400 А, и витки из ленты производства компании SuperOx, со сверхпроводящим слоем  $\text{GdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , с критическим током порядка 530 А.

Измерения проводились в магнитных полях двух конфигураций. Измерения во внешнем поле проводились для одиночных витков, помещенных во внешнее магнитное поле, перпендикулярное к плоскости витка (параллельное поверхности ленты). Ток в витке при этом считался пропорциональным собственному полю ленты, определяемому как разность поля, измеренного в центре витка, и поля внешних катушек. Зависимость построена от величины внешнего магнитного поля.

Измерения для второй конфигурации магнитного поля (собственного поля) проводились для сборок захватывающих витков, в которых при увеличении

количества лент в сборке уменьшался средний ток лент. Зависимость построена от величины магнитного поля в центре сборки.

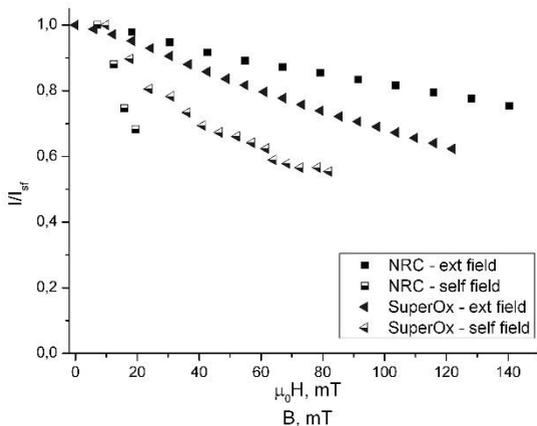


Рис. 1. Графики зависимости нормированной величины замкнутого тока в захватывающем витке от внешнего магнитного поля (ext field) и от величины собственного поля, создаваемого сборкой (self field) для витков из лент производства НИЦ КИ и SuperOx

Из результатов следует вывод что при проектировании многосекционного магнита, работающего в режиме замороженного магнитного потока, на основе захватывающих витков эффективным будет центральные секции выполнять из ленты на основе  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  с добавлением  $Y_2BaCuO_5$ , лучше сохраняющей токонесущую способность во внешнем магнитном поле, параллельном поверхности ленты. Внешние же секции эффективнее делать из ленты на основе  $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ , витки из которой более устойчивы к влиянию собственного поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 17-29-10023офи\_м).

**Секция  
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ  
ФИЗИКИ**

Руководитель секции	– д.ф.-м.н., Попруженко Васильевич	профессор Сергей
Секретарь секции	– д.ф.-м.н., Городничев Евгеньевич	профессор Евгений

Тел./факс.: 8 (495) 788-56-99, доб. 9377

E-mail: [gorodn@theor.mephi.ru](mailto:gorodn@theor.mephi.ru)

Н.Н. АРСЕНЬЕВ<sup>1</sup>, А.П. СЕВЕРЮХИН<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ, Дубна, Россия;

<sup>2</sup>Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

## СВОЙСТВА НИЗКОЛЕЖАЩИХ 2<sup>+</sup> СОСТОЯНИЙ В <sup>132,136</sup>Te

Изучено влияние двух-фононных компонент волновой функции на M1-переходы между квадрупольными низколежащими состояниями в нейтронно-избыточных изотопах Te. Используется сепарабельное приближение для эффективных сил Скирма f. С одним набор параметров, мы описываем имеющиеся экспериментальные данные и демонстрируем влияние парных корреляций сверхпроводящего типа на свойства квадрупольных возбуждений в ядре <sup>136</sup>Te.

N.N. ARSENYEV<sup>1</sup>, A.P. SEVERYUKHIN<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics JINR, Dubna, Russia;

<sup>2</sup>Dubna State University, Dubna, Russia

## STRUCTURE OF THE LOW-LYING 2<sup>+</sup> STATES IN <sup>132,136</sup>Te

Высокая разрешающая способность, достигнутая в экспериментах по неупругому рассеянию электронов, в реакциях однонуклонной передачи и других реакций позволила обнаружить в области энергий до 4 МэВ изовекторные квадрупольные возбуждения [1]. Существование таких низколежащих коллективных состояний, обладающих смешанной протон-нейтронной симметрией, предсказано в модели взаимодействующих бозонов [2,3], в которой эти состояния обязаны своим происхождением движению нуклонов только в валентных подоболочках. При этом в этой же области энергий большой интерес у экспериментаторов вызывает так же исследование структуры изоскалярного 2<sub>1</sub><sup>+</sup> возбуждения [4]. У всех перечисленных выше квадрупольных возбуждений есть общие особенности: во-первых, их существование является прямым следствием оболочечной структуры ядра и, во-вторых, эти коллективные возбуждения связаны с большим числом малоквазичастичных компонент. Таким образом, исследование спектра низколежащих 2<sup>+</sup> состояний служит ключом для понимания свойств ядерных возбуждений при наличии парных корреляций сверхпроводящего типа. Для современной экспериментальной и теоретической ядерной физики свойства ядерных возбуждений в ядрах около дважды магического ядра <sup>132</sup>Sn важны для понимания проблем нуклеосинтеза [5]. С другой стороны, получаемые новые экспериментальные данные [4,6], в частности приведенные вероятности переходов с низколежащих 2<sup>+</sup> состояний в таких ядра, требуют теоретической интерпретации и развития соответствующих теоретических подходов.

Одним из популярных подходов описания ядерных возбуждений является квазичастичное приближение случайных фаз, с самосогласованным средним

полем, полученным с эффективными силами Скирма [7]. Изучение распределения квадрупольной силы в низкоэнергетической области, требует учета связи простых частично-дырочных конфигураций с более сложными (двух-фоннными) конфигурациями [8]. Это делает необходимым расчет в большом конфигурационном пространстве. Сепарабеллизация остаточного взаимодействия Скирма позволяет обойти эту трудность и проводить вычисления независимо от конфигурационного пространства [9]. Такие расчеты не требуют введения новых параметров.

В данном докладе мы применяем изложенный формализм для описания свойств низколежащих  $2^+$  состояний в ядрах  $^{132,134,136}\text{Te}$  [10]. При этом мы анализируем влияние как связи между одно- и двух-фоннными компонентами волновых функций, так и парных корреляций на характеристики низкоэнергетического спектра квадрупольных возбуждений.

#### *Список литературы*

1. Pietralla N., von Brentano P., Lisetskiy A. F. // Prog. Part. Nucl. Phys. 2008. Vol. 60. P. 225–282.
2. Arima A., Otsuka T., Iachello F., Talmi I. // Phys. Lett. B. 1977. Vol. 66. P. 205–208.
3. Otsuka T., Arima A., Iachello F. // Nucl. Phys. A. 1978. Vol. 309. P. 1–33.
4. Pritychenko B., Birch M., Singh B., Horoi M. // At. Data Nucl. Data Tables. 2016. Vol. K.107. P. 1–139.
5. Arnould M., Gorieli S., Takahashi K. // Phys. Rep. 2007. Vol. 450. P. 97–213. (2007).
6. Allmond J.M., Stuchbery A.E., Baktash C., et al. // Phys. Rev. Lett. 2017. Vol. 118, P.092503.
7. Paar N., Vretenar D., Khan E., Colò G. // Rep. Prog. Phys. 2007. Vol. 70. P. 691–793.
8. Soloviev V.G. Theory of Atomic Nuclei: Quasiparticles and Phonons. 1992. Bristol/Philadelphia.
9. Giai N.V., Stoyanov Ch., Voronov V.V. // Phys. Rev. C. 1998. Vol. 57. P. 1204–1209.
10. Severyukhin A.P., Arsenyev N.N., Pietralla N., Werner V. // in preparation.

И.Н. БОРЗОВ

*Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия и  
Лаборатория Теоретической Физики, им. Н.Н.Боголюбова, Объединенный Институт  
Ядерных Исследований, Дубна, Россия*

## **САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД К БЕТА-РАСПАДУ НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ ЯДЕР**

В модели DF3 + QQRPA, основанной на самосогласованном описании основных состояний, оценена точность глобальных расчетов периодов  $\beta$ -распада и вероятностей эмиссии запаздывающих нейтронов для более 200 (квази)сферических ядер с  $Z=18-51$  и  $T_{1/2} < 5c$ . Выполнено сравнение с экспериментом и результатами современных самосогласованных моделей. Рассмотрены основные механизмы обнаруженного в экспериментах RIKEN ускорения бета-распада в изотопах Ni после пересечения главной нейтронной оболочки  $N=50$

I.N. BORZOV

*National Research Centre Kurchatov Institute, Moscow, Russia; Bogolubov  
Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia*

## **SELF-CONSISTENT APPROACH TO BETA-DECAY OF NEUTRON-RICH NUCLEI**

Accuracy of global DF3 + QQRPA calculations of the half-lives and probabilities of delayed neutron emission for more than 200 (quasi) spherical nuclei with  $Z = 18-51$  and  $T_{1/2} < 5c$  is analyzed and compared with the experiment and results of modern self-consistent models. The mechanisms of beta-decay acceleration found in RIKEN in the Ni isotopes crossing the major neutron shell at  $N=50$  are addressed.

Для надежного анализа экспериментов на «фабриках редких изотопов» требуются самосогласованные модели, дающие обоснованную экстраполяцию спин-изоспинового отклика нейтронно-избыточных ядер в область экстремальных отношений  $N/Z$ . Представлено DF3+континуум QRPA приближение [1] к полностью самосогласованному описанию характеристик  $\beta$ -распада в рамках теории конечных ферми-систем. Оно базируется на расчетах свойств основных состояний, с энергетическим функционалом плотности (ЭФП), предложенным Фаянсом и др. (DF3, [2]).

Глобальные DF3+QQRPA расчеты для более 200 (квази)сферических ядер с  $Z=18-51$  и  $T_{1/2} < 5c$  описывают экспериментальные времена жизни с точностью до фактора 2 и вероятности эмиссии запаздывающих нейтронов жизни с точностью до фактора 3 (Рис.1а). Проведено сравнение с результатами современных самосогласованных моделей: сферического RHB + RQRPA [3], деформированных FAM [4] и HFB + QRPA [5]. Обсуждаются модели, выходящие за рамки QRPA: DF3+spreading (настоящая работа), QFRSA+PPC [6],

HFB+QPVC [7], QTBA [8], NUSHELLX+DF3 [9]. Анализируются причины «внезапного ускорения»  $\beta$ -распада, найденного в RIKEN [10] для изотопов Ni тяжелее дважды-магического  $^{78}\text{Ni}$  (Рис.16). Это вклады запрещенных переходов и многофононных конфигураций, возможная деформация и спиновая инверсия основных состояний.

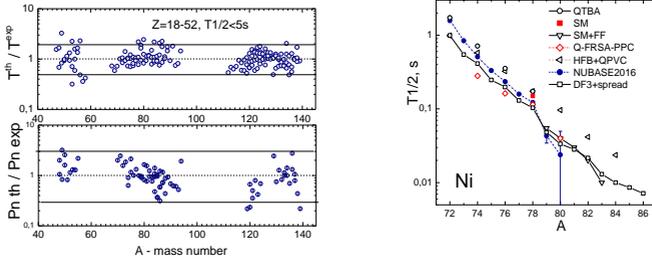


Рис. 1а. Отношения теоретических и экспериментальных времен жизни  $T_{1/2}$  и вероятностей запаздывающей нейтронной эмиссии  $P_n$  в зависимости от массового числа. Рис.1б . Экспериментальные времена жизни изотопов Ni в сравнении с различными моделями (см. текст).

#### Список литературы

- [1] I.N. Borzov., Phys. Rev. **C67**, 025802 (2003).
- [2] S.A. Fayans, S.V. Tolokonnikov, EL. Trykov, D. Zawischa., Nucl.Phys. **A676**, 49 (2000).
- [3] T. Marketin, L. Huther, and G. Martinez-Pinedo, Phys. Rev. C **93**,025805 (2016).
- [4] M. T. Mustonen, T. Shafer, Z. Zenginerler, and J. Engel., Phys. Rev. C **90**, 024308 (2014)
- [5] K. Yoshida., Phys.Rev. **C99**, 025805 (2019).
- [6] A. P. Severyukhin, V. V. Voronov, I. N. Borzov, N. N. Arsenyev, and Nguyen Van Giai, Phys. Rev. **C90**, 044320 (2014).
- [7] Y.F. Niu, Z.M. Niu, G. Colo, E. Vigezzi., Phys. Lett. **B780**, 325 (2018).
- [8] C. Robin and E. Litvinova, Eur. Phys. J. **A52**, 205 (2016).
- [9]. M. F. Alshudifat, R. Grzywacz, M. Madurga, et al., Phys. Rev. C **93**, 044325 (2016)
- [10] Z. Y. Xu et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 032505 (2014).

Р.Р. ГАЛЛЯМОВ, А.М. ФЕДОТОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ВЫЧИСЛЕНИЕ АМПЛИТУД КЭД ПРОЦЕССОВ В ПОЛЕ ПЛОСКОЙ ВОЛНЫ ПО ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ**

Рассмотрены процессы упругого рассеяния электрона, излучения фотона электроном и фоторождения пары во внешнем поле бегущей плоской волны. Показано, как известные амплитуды этих процессов получаются путем непосредственного суммирования рядов теории возмущений по внешнему полю.

R.R.GALLYAMOV, A.M. FEDOTOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **CALCULATING THE AMPLITUDES OF QED PROCESSES IN A PLANE WAVE FIELD BY THE PERTURBATION THEORY**

The processes of elastic electron scattering, emission of a photon by an electron, and pair photoproduction in an external field of a traveling plane wave are considered. It is shown how the known amplitudes of these processes are obtained by directly summing the perturbation theory series over an external field.

Как правило, при практических расчетах амплитуд и вероятностей КЭД процессов ряд теории возмущений обрывают. Однако в сильных (например, лазерных) электромагнитных полях требуется учесть взаимодействие с внешним полем во всех порядках. В работе на конкретных примерах явно продемонстрировано, что суммирование ряда теории возмущений по внешнему полю эквивалентно стандартному методу расчета в представлении Фарри [1]. Как известно, уравнение Дирака в поле бегущей плоской волны решается точно [1]. В терминах его точных решений (функций Волкова) амплитуду процесса упругого рассеяния электрона на плоской волне можно получить в виде

$$S_{fi} = \langle \psi_{out} | \psi_{in} \rangle = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \exp\left\{-i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e}{(kp)} \left[ (pA) - \frac{e}{2} A^2 \right] d\phi\right\} \quad (1)$$

Здесь  $\delta_{ss'}$  отвечает сохранению проекции спина электрона на ось квантования.

В работе найден вклад диаграммы взаимодействия с внешним полем в произвольном n-м порядке теории возмущений (см. Рис.1, слева). Вычисления проделаны сначала для частных случаев одной и двух вершин, а затем при помощи комбинаторики ответ обобщен на случай произвольного числа взаимодействий с внешним полем и продемонстрировано, как формула (1) получается путем непосредственного суммирования ряда теории возмущений по

внешнему полю плоской волны. А именно, каждый фермионный пропагатор представляется в виде двух слагаемых, отвечающих электрону на и вне массовой поверхности, и затем раскрытие скобок и суммирование по всем перестановкам вершин взаимодействия с внешним полем и по числу взаимодействий с ним, с учетом свойств матриц Дирака, позволяют собрать полученный ряд в экспоненту, входящую в (1). При этом выявлены упрощения, связанные с плосковолновым характером внешнего поля и позволяющие провести суммирование аналитически.

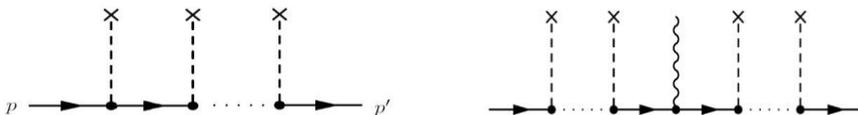


Рис. 1. Диаграммы рассеяния электрона на плоской волне (слева) и излучения фотона (справа)

Аналогично рассмотрены процессы излучения фотона электроном и фоторождения пары в бегущей плоской волне (Рис.1, справа), при этом известные в литературе результаты [2] также удалось воспроизвести путем непосредственного суммирования ряда теории возмущений по внешнему полю. В дальнейшем на основе разработанного подхода планируется найти условия применимости и поправки к приближению локально-постоянного поля [3] в актуальной задаче о спонтанном рождении электрон-позитронных пар из вакуума в поле стоячей плоской волны.

*Список литературы*

1. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Квантовая электродинамика 4-е изд., Москва, 2002
2. В.И. Ритус, Квантовые эффекты взаимодействия элементарных частиц с интенсивным электромагнитным полем, Издательство “Наука”, Москва, 1979
3. N.B. Narozhny, S.S. Bulanov, V.D. Mur, V.S. Popov, Physics Letters A 330 (2004), P. 1-6

Д.А. ГОЖЕВ, С.Г. БОЧКАРЕВ, А.В. БРАНТОВ, В.Ю. БЫЧЕНКОВ

*Физический институт им.П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

## **СТОХАСТИЧЕСКОЕ УСКОРЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МОЩНОГО ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА С МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ МИШЕНЯМИ**

В данной работе с помощью 3D моделирования методом «частица-в-ячейке» (PIC) и метода пробных частиц исследован объемный нагрев микроструктурированных мишеней с пониженной средней плотностью, включая микро-игольчатое покрытие твердой мишени и кластерный газ, под действием фемтосекундного лазерного импульса субрелятивистской интенсивности. Продемонстрирована роль стохастического ускорения электронов в таких мишенях в качестве основного канала генерации надтепловых, «супер-пондеромотонных» частиц.

D.A.GOZHEV, S.G.BOCHKAREV, A.V.BRANTOV,  
V.Yu.BYCHENKOV

*Lebedev Physical Institute of RAS, Moscow, Russia*

## **STOCHASTIC ELECTRON ACCELERATION IN THE INTERACTION OF A POWERFUL FEMTOSECOND LASER PULSE WITH A MICROSTRUCTURED TARGETS**

In this paper, using 3D PIC simulation and test particle method, we studied the volumetric heating of structured targets with a lower average density, such as a micro-wire surface and cluster gas, under the action of a subrelativistic femtosecond laser pulse. The role of stochastic acceleration of electrons in these targets as the main channel for the generation of superthermal (“super-ponderomotive”) particles has been demonstrated.

Исследование лазерно-плазменного взаимодействия с микроструктурированными различным образом мишенями весьма перспективно с точки зрения создания среды для эффективного объемного нагрева, ускорения электронов и ионов, создания компактных источников яркого рентгеновского и гамма-излучения, а также импульсного источника нейтронов.

В работе была проведена серия 3D PIC расчётов взаимодействия фемтосекундного лазерного излучения релятивистской интенсивности  $I = 2 \times 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> ( $a_L = 1.2$ ) и длительностью  $t_{FWHM} = 50$  фс при длине волны  $\lambda = 1$  мкм с микро-игольчатой мишенью. Мишень представляла из себя цилиндры микронного размера, расположенные на поверхности плоской мишени. Было показано, что для реализации эффективного объемного нагрева лазерное излучение должно проникнуть между структурами, отразится от фольги, а на обратном проходе в вакуум должно полностью поглотиться.

Важную роль в генерации суперпандеромоторных электронов (с энергией выше пандеромоторной энергии частицы в ЭМ волне) играет стохастическое ускорение электронов в сложных электрических и магнитных полях, состоящих из падающего и отражённого лазерного излучения, квазистатических электрических и магнитных полей, значения которых сравнимы с амплитудой лазерного поля. В оптимальном случае температура горячих электронов достигает 350 кэВ, а максимальная энергия  $\sim 2 - 3$  МэВ.

Другими перспективными структурированными мишенями с пониженной средней плотностью может служить кластерная плазма микронного размера. Были проведены 3D PIC расчёты по взаимодействию лазерного излучения с кластерной плазмой. Мишень представляла из себя большое число равномерно распределённых по пространству кластеров микронного размера. Анализ траекторий высокоэнергичных частиц в PIC расчётах показал, что частицы набирают высокую энергию блуждая вблизи отдельных кластеров и перескакивая от одного к другому в сложном поле, состоящим из комбинаций кулоновского поля кластера и лазерного поля. Эффективный нагрев электронов имеет место, если значение кулоновского поля на поверхности кластеров оказывается порядка амплитуды лазерного поля. В результате расчётов было получено, что средняя температура горячих электронов достигала температуры 310 кэВ, а энергия отсечки  $2 - 2.5$  МэВ, что значительно больше пандеромоторной энергии электронов. Также за счёт помещения кластерной плазмы в сферическую полость удалось добиться увеличения температуры горячих электронов и поглощения энергии частицами.

Для объяснения механизма генерации суперпандеромоторных электронов в микро-игольчатой и кластерной средах было проведено 3D моделирование динамики электронов методом пробных частиц, который позволяет наглядно продемонстрировать стохастическую динамику и стохастическое ускорение электронов с использованием метода наибольшего показателя Ляпунова.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 18-02-00452 и 18-32-00406, а также стипендией Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (№ 17-21-2106-1) для Д.А. Гожева

А.П. СЕВЕРЮХИН

*Лаборатория Теоретической Физики им. Н.Н. Боголюбова, ОИЯИ, Дубна, Россия*

## **ДВУХФОНОННАЯ СТРУКТУРА НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ АТОМНЫХ ЯДЕР**

Проанализирована роль двухфононных конфигураций при описании свойств бета распада нейтронно-избыточных ядер и распределения силы E1, E2 переходов дочерних ядер в рамках микроскопической модели, построенной на взаимодействии Скирма.

A.P. SEVERYUKHIN

*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, Dubna, Russia*

## **TWO-PHONON STRUCTURE OF NEUTRON-RICH ATOMIC NUCLEI**

An influence of the two-phonon configurations on the  $\beta$ -decay properties of neutron-rich nuclei and the E1, E2 strength distributions of daughter nuclei is analysed within the microscopic model based on the Skyrme interaction.

Развита микроскопическая модель спин-изоспиновых возбуждений, построенная на нуклон-нуклонном взаимодействии Скирма с учетом связи со сложными конфигурациями, центрального и тензорного остаточных взаимодействий в канале частица–дырка, а также в канале частица–частица [1]. Впервые изучено влияние совокупности этих эффектов на вероятность задержанной мультинейтронной эмиссии, сопутствующей ядерный  $\beta$ -распад [2]. Рассчитаны также скорости  $\beta$ -распада четно-четных нейтронно-избыточных изотопов  $^{126-134}\text{Cd}$  вблизи заполненной нейтронной оболочки  $N=82$  [3]. При этом успешно описываются как характеристики основных состояний, так и коллективных квадрупольных возбуждений изотопов Cd. При ослаблении нейтрон-протонной части тензорного взаимодействия относительно нейтрон-нейтронной и протон-протонной составляющих тензорных сил усиливается роль остаточного взаимодействия в канале частица-частица при описании эмиссии запаздывающих нейтронов [4]. Показано, что влияние сложных (двухфононных) конфигураций ведет к заметному перераспределению силы переходов Гамова-Теллера, приводящему к ускорению  $\beta$ -распада. Модель усовершенствована на случай  $\beta$ -распада нечетных-нечетных ядер. На примере  $\beta$ -распада изотопа  $^{134}\text{In}$  продемонстрировано, что знание вероятности мультинейтронной эмиссии позволяет определить распределение силы E1 переходов в дочернем ядре  $^{134}\text{Sn}$  [5].

### *Список литературы*

1. Severyukhin A.P., Voronov V.V., Borzov I. N., Arsenyev N.N., Nguyen Van Giai // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 90, P. 044320-1-7.

2. Severyukhin A.P., Arsenyev N.N., Borzov I. N., Sushenok E. O. // *Phys. Rev. C*. 2017. Vol. 95, P. 034314-1-9.
3. Sushenok E.O., Severyukhin A.P., Arsenyev N.N., Borzov I.N. // *Acta Physica Polonica B*. 2019. Vol. 50, P. 261-267.
4. Сушенок Е.О., Северюхин А.П., Арсеньев Н. Н., Борзов И. Н.// *Ядерная физика*. 2019. Vol. 82, P. 132-140.
5. Severyukhin A.P., Arsenyev N. N., Penionzhkevich Yu. E., Testov D., Ibrahim F., Verney D. // *Proceedings of the International Symposium on Exotic Nuclei EXON-2018*. World Scientific. 2019. P. 345-350.

М. Л. ГОРЕЛИК<sup>1</sup>, Г. В. КОЛОМИЙЦЕВ<sup>2</sup>, М. Г. УРИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московская экономическая школа, Москва, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

## **ЧАСТИЧНО-ДЫРОЧНАЯ ДИСПЕРСИОННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ НЕМАГИЧЕСКИ ЯДЕР. ПРИЛОЖЕНИЕ К ОПИСАНИЮ 0<sup>+</sup> ГИГАНТСКИХ РЕЗОНАНСОВ**

Полумикроскопическая частично-дырочная дисперсионная оптическая модель обобщена на случай приближенного учета спаривания нуклонов в среднетяжелых немагических сферических ядрах. Предложенная версия модели использована для описания основных свойств монополярных гигантских изоскалярного и зарядово-обменных (изовекторных) резонансов в ряде изотопов олова. Результаты расчетов сравниваются с соответствующими экспериментальными данными.

M. L. GORELIK<sup>1</sup>, G. V. KOLOMIYTSSEV<sup>2</sup>, M. H. URIN<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Moscow Economic School, Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow, Russia

## **PARTICLE-HOLE DISPERSIVE OPTICAL MODEL FOR NONMAGIC NUCLEI. APPLICATION TO THE DESCRIPTION 0<sup>+</sup> GIANT RESONANCES**

A semimicroscopic particle-hole dispersive optical model is extended to take approximately into account nucleon pairing in medium-heavy spherical nonmagic nuclei. The proposed model version is implemented for describing main properties of the monopole giant isoscalar and charge-exchange (isovector) resonances in a few tin isotopes. Calculation results are compared with respective experimental data.

Обладающая рядом уникальных возможностей частично-дырочная дисперсионная оптическая модель (ЧДДОМ) сформулирована недавно [1] и успешно применена к описанию основных свойств ряда гигантских резонансов (ГР) в среднетяжелых магических ядрах (см., например [2,3]). Имеющийся большой объем экспериментальной информации относительно свойств ГР в немагических ядрах, в которых имеется развитое спаривание нуклонов, побуждает к соответствующему обобщению ЧДДОМ. Для среднетяжелых сферических ядер предлагается версия ЧДДОМ, в которой ввиду большой энергии возбуждения ГР спаривание нуклонов учитывается только за счет модификации чисел заполнения в базовых уравнениях модели. В модифицированной версии ЧДДОМ сохраняется возможность описания в широком энергетическом интервале силовой функции, переходной плотности, парциальных вероятностей прямого однонуклонного распада ГР. В работе новая версия ЧДДОМ применена к описанию некоторых 0<sup>+</sup>-ГР в ряде изотопов олова, в которых имеет место развитое спаривание в нейтронной подсистеме. В

продолжение работ [2] и [3] предложено описание изоскалярного гигантского монополюсного резонанса (ИСГМР), а также изобарического аналогового и зарядово-обменных (изовекторных) гигантских монополюсных резонансов (ИАР и ИВГМР<sup>(±)</sup>). Интерес к исследованию определяется, в частности, возможностью выяснения изобарической зависимости коэффициента сжимаемости ядерной материи, а также механизма нарушения изоспиновой симметрии в среднетяжелых ядрах. Другим побудительным мотивом является наличие систематики экспериментальных данных относительно свойств ИСГМР [4] и ИАР [5] в изотопах олова. Полученные результаты сравниваются с указанными данными.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 19-02-00660)

*Список литературы*

1. Urin M. H. // Phys. Rev. C. 2013. V. 87. P. 044330.
2. Gorelik M. L., Shlomo S., Tulupov B. A., and Urin M. H. // Nucl. Phys. A. 2016. V. 955. P. 116; Nucl. Phys. A. 2018. V. 970. P. 353.
3. Kolomyitsev G. V., Gorelik M. L. and Urin M. H. // Eur. Phys. J. A. 2018. V. 54. P. 228; Eur. Phys. J. Web of Conf. 2018. V. 194. P. 02010.
4. Garg U. and Colo G. // Prog. Part. Nucl. Phys. 2018. V. 101. P. 55.
5. Гужовский Б. Я., Звенигородский А. Г., Трусилло С. В., Абрамович С. Н. // Я. Ф. 1975. Т. 21. С. 930.

К.Е. ГОРОДНИЧЕВ, С.И. ГЛАЗЫРИН, П.П. ЗАХАРОВ,  
С.Е. КУРАТОВ

*Москва, Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Автоматики им. Н.Л.  
Духова*

## **ВЛИЯНИЕ ШЕРОХОВАТОСТИ НА СЖАТИЕ ГАЗА В МИШЕНЯХ ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА**

В работе анализируется развитие неустойчивости границы между DT льдом и DT газом, вызванной переносом возмущений от шероховатой внешней границы слоя льда. Представлены результаты исследования для различных начальных конфигураций шероховатости. Показано, что рост возмущений может быть значителен: проникание льда в газ на глубину до ~30% от радиуса горячей области на момент максимального сжатия.

K.E. GORODNICHEV, S.I. GLAZYRIN, P.P. ZAKHAROV,  
S.E. KURATOV

*Moscow, Dukhov Research Institute of Automatics*

## **THE EFFECT OF ROUGHNESS ON GAS COMPRESSION IN NIF TARGETS**

The work analyzes the instability of DT ice - DT gas boundary, seeded by perturbations carried from the outer boundary roughness of the ice layer. Various initial roughness configurations are studied. The instability growth could be significant: ice penetrates into gas at the level 30% of hot spot radius at maximum compression.

Получение источника энергии, в основе которого лежит процесс энерговыделения при протекании термоядерных реакций, до сих пор остаётся одной из наиболее актуальных мировых задач. В схемах инерциального удержания наибольший успех достигнут на установке лазерного термоядерного синтеза NIF [1], где эксперименты вплотную подошли к порогу зажигания, но до сих пор не превзошли его. Считается, что отсутствие зажигания связано с неконтролируемым ростом гидродинамических неустойчивостей [2], которые усиливают начальные возмущения поверхности термоядерной капсулы, её креплений, трубки для закачки DT-газа, а также асимметрии облучения, вызываемой развитием лазер-плазменных неустойчивостей.

Сжатие капсулы и рост неустойчивостей описывается в гидродинамическом приближении, которое включает различные плазменные и радиационные процессы. Наиболее подробные расчёты [3] учитывают влияние перечисленных источников возмущений сквозным образом. В них наблюдается значительное усложнение формы газовой полости на момент максимального сжатия, что в итоге приводит к снижению энерговыделения за счёт изменения

гидродинамических характеристик газа в горячей центральной области. При этом отсутствует окончательное понимание, какой из физических процессов или источников возмущений является наиболее критичным для работы мишени.

В настоящей работе детально исследуется один из эффектов: представлен анализ влияния шероховатости внешней поверхности DT льда на итоговый вид газовой полости. Показано, что ударная волна, прошедшая через шероховатую границу, переносит возмущения плотности на следующую границу - газ-лед, что на дальнейшей стадии сжатия приводит к значительному её искривлению. Исследуется влияние параметров шероховатости на итоговую величину искривления границы. Также обсуждаются вопросы влияния возмущённой границы на условия зажигания топлива.

*Список литературы*

1. Kline J. et al. Progress of indirect drive inertial confinement fusion in the Unites States // Nucl. Fusion. 2019. 59. P. 112018.
2. Meezan N.B. et al. Indirect drive ignition at the National Ignition Facility // Plasma Phys. Control. Fusion. 2017. 59. P. 014021.
3. Clark D.S. et al. Three-dimensional simulations of low foot and high foot implosion experiments on the National Ignition Facility. // Phys. of Plasmas. 2016. 23, P. 056302.

С.Е. КУРАТОВ, С.И. БЛИННИКОВ, С.Ю. ИГАШОВ, Д.С.  
ШИДЛОВСКИЙ

*Москва, Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Автоматики им. Н.Л.  
Духова*

## **ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ РАСЧЕТА ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КОНЕЧНОЙ СИСТЕМЕ**

В работе представлена численная реализация метода функций Грина применительно к расчету пространственного распределения макроскопического числа свободных электронов в конечной системе. Полученные результаты сравниваются с результатами, полученными прямым суммированием волновых функций. Демонстрируется их количественное совпадение. Проведено сравнение с аналитическими результатами полученными ранее.

S.E. KURATOV, S. I. BLINNIKOV, S. Yu. IGASHOV, D S  
SHIDLOVSKI

*Dukhov Research Insitute of Automatics (VNIA), Moscow, Russia*

## **APPLICATION OF THE GREEN FUNCTION METHOD FOR CALCULATING THE SPATIAL DISTRIBUTION OF ELECTRONS IN THE FINITE SYSTEM**

The paper presents a numerical implementation of the Green's function method for calculating the spatial distribution of the macroscopic number of free electrons in a finite system. The results obtained are compared with the results obtained by direct summation of the wave functions. Their quantitative coincidence is demonstrated. A comparison is made with the analytical results obtained previously.

В [1] был обнаружен эффект наличия двух масштабов неоднородности в распределении макроскопического числа свободных электронов в сферической яме. Результат был получен аналитически с помощью метода функций Грина и подтвержден численными расчетами.

На примере данной задачи в настоящей работе проводится сравнение двух численных методов: численная реализация метода функций Грина и прямое суммирование волновых функций. Полученные результаты подтверждают наличие данного эффекта. И находятся в количественном согласии между собой.

Приводится подробное описание используемых численных методов.

Полученные численные результаты подтверждают полученные в [1] аналитические зависимости.

*Список литературы*

- [1] Kuratov S E, Shidlovski D S and Blinnikov S I 2018 Journal of Physics: Conference Series **1009** 012013

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ АНИЗОТРОПНОГО МАГНИТОЭКСИТОНА

Исследовано основное состояние анизотропного магнитоэкситона на примере бислоя фосфора, погруженного в гексагональный нитрид бора.

A.M.GRUDININA, N.S.VORONOVA, Yu.E.LOZOVIK

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
 Moscow, Russia*

## GROUND STATE OF ANISOTROPIC MAGNETOEXCITON

This work investigates anisotropic properties of the ground state of magnetoexciton in a two-dimensional (2D) atomically-thin bilayer, with a specific example of black phosphorus bilayer encapsulated in hBN.

Для кристаллов с некубической решеткой зонная структура зависит от направления, что приводит к анизотропным эффективным массам электрона и дырки. Уравнение Шредингера для пространственно разделенного экситона (связанное состояние электрона и дырки) с анизотропной массой во внешнем поперечном магнитном поле имеет вид:

$$\hat{H} = \left\{ \frac{1}{2m_x^e} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_x^e + \frac{e}{c} A_x^e \right)^2 + \frac{1}{2m_x^h} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_x^h + \frac{e}{c} A_x^h \right)^2 + \frac{1}{2m_y^e} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_y^e - \frac{e}{c} A_y^e \right)^2 + \frac{1}{2m_y^h} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_y^h - \frac{e}{c} A_y^h \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{|r_x - r_h|^2 + d^2}} \right\} \Psi = E \Psi$$

где  $m_{x(y)}^{e(h)}$  – эффективная масса электрона (дырки) в направлении оси  $Ox$  ( $Oy$ ),  $A_{e(h)} = \frac{1}{2} [\mathbf{H}, \mathbf{r}_{e(h)}]$  – векторный потенциал электрона (дырки) в приложенном магнитном поле,  $d$  – расстояние между слоями,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость среды между слоями. В пределе больших межслойных расстояний:  $l_H^4 \ll a_B d^3$ , где  $l_H = \sqrt{\frac{c\hbar}{eH}}$  – магнитная длина,  $a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu_x e^2}$  – боровский радиус,  $\mu_{x(y)} = \frac{m_x^e m_x^h}{m_x^e + m_x^h}$  уравнение можно решить аналитически в линейном приближении по массовой анизотропии.

В исследовании получены зависимости профилей волновых функций основного состояния от внешних параметров системы и величины электронной анизотропии (Рис.1).

Исследование поддержано грантом РФФИ, проект № 18-32-20180.

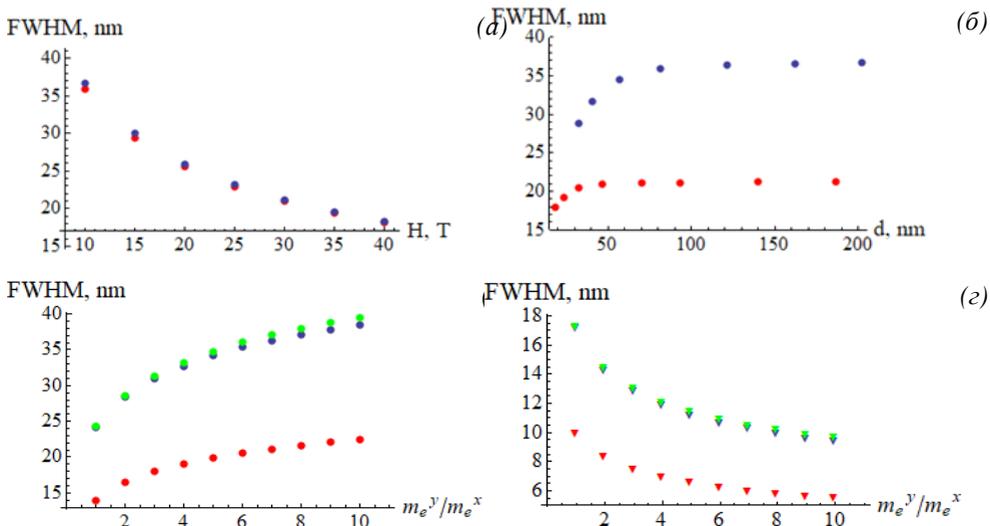


Рис. 1. Зависимость FWHM (полуширины) профиля волновой функции для основного состояния от внешних параметров системы: а) величины поперечного магнитного поля по оси  $Ox$  для фосфорена (синим цветом – для  $d = 20 l_H$ , красным –  $d = 10 l_H$ ), б) межслойного расстояния для фосфорена (синим цветом – для  $H = 30$  Тл, красным –  $H = 10$  Тл); и величины электронной анизотропии: в) по оси  $Ox$ , г) по оси  $Oy$  (синим цветом – для  $H = 10$  Тл,  $d = 10 l_H$ , зеленым цветом – для – для  $H = 10$  Тл,  $d = 20 l_H$ , красным цветом – для – для  $H = 30$  Тл,  $d = 10 l_H$ ; круги – по  $Ox$ , треугольники – по  $Oy$ ).

Список литературы

1. Ю. Е. Лозовик, А. М. Рувинский, Письма в ЖЭТФ 112(5), 11 (1997).
2. A. Laturia, M. L. Van de Put, W. G. Vandenberghe, npj 2D Materials and Applications 2, 6 (2018)

К.С. КРЫЛОВ, В.Д. МУР

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ДРОБНОЕ КВАНТОВАНИЕ ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА В ЗАДАЧАХ КЛАССИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

В рамках двумерного уравнения Гельмгольца в классической теории поля обсуждаются такие физические задачи, для которых существенно наличие нетривиальной топологической фазы Паули, т.е. возможного в двумерии дробного квантования орбитального момента. В качестве примеров рассмотрены «задача о клине» — определение поля, создаваемого точечным зарядом в пространстве между двумя проводящими полуплоскостями — и дифракция Френеля на крае экрана.

K.S. KRYLOV, V.D. MUR

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

## **FRACTIONAL QUANTISATION OF ORBITAL ANGULAR MOMENTUM IN PROBLEMS OF CLASSICAL PHYSICS**

Physical problems of classical field theory for which the presence of a nontrivial topological Pauli phase is essential (i.e. fractional quantization of the orbital angular momentum is possible in two-dimensional case) are discussed within the framework of the two-dimensional Helmholtz equation. As examples, we consider the “wedge problem” — the determination of the field created by a point charge in the space between two conducting half-planes — and the Fresnel diffraction at the edge of the screen.

Дробные значения орбитального момента возникают в задачах классической теории поля с разделяющимися в цилиндрических координатах переменными, таких как «задача о клине» [1, 2] и дифракция Френеля на крае экрана [3]. В этих задачах общее решение для электромагнитного поля, удовлетворяющее двумерному уравнению Гельмгольца, записывается в виде разложения по собственным функциям генератора поворота.

В задаче о клине, см. Рис. 1, компонента Фурье  $u_\mu(\rho, \varphi)$  скалярного потенциала удовлетворяет неоднородному уравнению Гельмгольца с граничными условиями Дирихле. Чтобы удовлетворить граничным условиям, берём интервал углов  $0 \leq \varphi \leq 2\beta$ . При этом углы  $0 \leq \varphi \leq \beta$  отвечают «физическому» пространству, а углы  $\beta \leq \varphi \leq 2\beta$  — «фиктивному» пространству, в котором находятся источники-изображения. Тогда в суперпозицию дают вклад орбитальные моменты  $\mu = (\pi/\beta)m$ ,  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$

Если  $\beta = \pi$ , т.е. клин превращается в проводящую плоскость, то решение отвечает результату метода изображений, когда заряд расположен в полупространстве  $0 \leq \varphi \leq \pi$ , а источник-изображение — в полупространстве  $\pi \leq$

$\varphi \leq 2\pi$ . При этом орбитальные моменты в разложении принимают целые значения  $\mu = m$ ,  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$ . Если же  $\beta = 2\pi$ , то клин превращается в проводящую полуплоскость. Такое значение  $\beta$  соответствует наличию фиктивного пространства  $2\pi \leq \varphi \leq 4\pi$  и вкладу в разложение полуцелых значений углового момента  $\mu = (1/2)m$ ,  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$

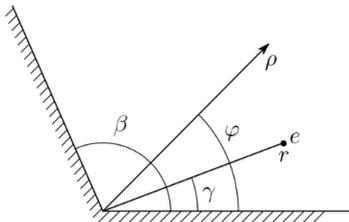


Рис. 1.

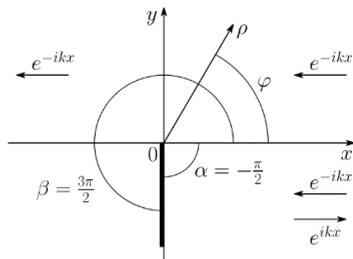


Рис. 2.

В качестве второго примера рассмотрим рассеяние плоской монохроматической волны с частотой  $\omega = ck$  на полубесконечном экране,  $x = 0$ ,  $y < 0$ , удовлетворяющем условиям Неймана, см. Рис. 2. Частное решение  $u(\rho, \varphi)$  однородного уравнения Гельмгольца, асимптотически переходящее в плоскую волну, записывается в виде разложения, содержащее как целые, так и полуцелые значения орбитального момента, поэтому функция  $u(\rho, \varphi)$  имеет период по  $\varphi$ , равный  $4\pi$ , а не  $2\pi$ . Для экрана область  $-\pi/2 < \varphi < 3\pi/2$  является «действительным пространством», а область  $3\pi/2 < \varphi < 7\pi/2$  — «фиктивным». Оно необходимо для того, чтобы разместить вспомогательные источники и удовлетворить краевым условиям Неймана.

Полученное решение отвечает поставленной физической задаче: плоская волна приходит справа и встречает экран. В области  $-\pi/2 < \varphi < 0$  падающая волна отражается от экрана, в области  $0 < \varphi < \pi$  она беспрепятственно распространяется влево, а в области «тени»,  $\pi < \varphi < 3\pi/2$ , плоской волны нет, см. Рис. 2. Однако, в каждой из этих областей имеется рассеянная от края экрана волна, так что он будет казаться светящимся независимо от того, под каким углом  $\varphi$  он будет рассматриваться, за исключением  $\varphi = \pi/2$ .

#### Список литературы

- [1]. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред* (Наука, Москва, 1982).
- [2]. В.В. Батыгин, И.Н. Топтыгин, *Сборник задач по электродинамике* (Физматгиз, Москва, 1962).
- [3]. Ф.М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики*, т. 2 (ИЛ, Москва, 1960).

П.Д. ЛУКЪЯНОВ<sup>1</sup>, Д.Н. ВОСКРЕСЕНСКИЙ<sup>1,2</sup>,  
Е.Э. КОЛОМЕЙЦЕВ<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова, ОИЯИ, Дубна, Россия

<sup>3</sup>Университет Матей Бела, Банска Быстрица, Словакия

## САМОСОГЛАСОВАННЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ АДРОННОГО ГАЗА МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ

Изучается сильно взаимодействующая спин-изоспин-симметричная ядерная материя, составленная из нуклонов,  $\Lambda$ -изобар и пионов при малой барионной плотности и конечной температуре  $T$ . Использован метод  $\Phi$ -функционала Бейма на примере  $\Lambda N$  и  $\Lambda NN$  сэндвич-диаграмм. Явно показано совпадение нулевой компоненты нетеровского барионного тока и тока, получаемого взятием производной термодинамического потенциала по барионному химическому потенциалу  $\mu_B$ . На примере  $\Lambda N \Lambda$  сэндвич-диаграммы  $\Phi$  продемонстрирована эквивалентность результатов, полученных с помощью  $\Phi$ -функционала Бейма и вириального разложения Бес-Уленбека, проведенного до второго порядка по  $\exp(\mu_B/T)$ .

P.D. LUKIANOV<sup>1</sup>, D.N. VOSKRESENSKY<sup>1,2</sup>, E.E. KOLOMEITSEV<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University (MEPhI), Moscow, Russia

<sup>2</sup>Bogoliubov Laboratory for Theoretical Physics, JINR, Dubna, Russia

<sup>3</sup>Matej Bel University, Banska Bystrica, Slovakia

## SELF-CONSISTENT APPROXIMATIONS FOR DESCRIPTION OF HADRON GAS AT LOW-DENSITY

We study strongly interacting spin-isospin symmetric nuclear matter consisted of pions, nucleons and  $\Lambda$ -isobars at low baryon density and finite temperature  $T$ .  $\Phi$ -functional of Baym is employed for the case of sandwich-like  $\Lambda N \Lambda$  and  $\Lambda NN$  diagrams. We explicitly showed coincidence of the zero component of Noether current and the one calculated by taking derivative of the thermodynamic potential over the baryon chemical potential  $\mu_B$ . On example of  $\Lambda N \Lambda$  sandwich diagram of  $\Phi$  we demonstrated equivalence of results obtained with the help of the  $\Phi$ -functional of Baym and those found in the virial Beth-Uhlenbeck expansion performed up to the second order in  $\exp(\mu_B/T)$ .

Установление равновесия в  $\Lambda N \Lambda$  системе в рамках транспортных моделей изучалось в работе [1]. Разные коды дают примерно одинаковые значения множественности пионов, нуклонов и  $\Lambda$ . Представляется необходимым проверить, соответствуют ли используемые в [1] соотношения самосогласованному термодинамическому описанию взаимодействующей  $\Lambda N \Lambda$  системы.

Мы изучаем  $\square N \square \square$  систему, используя термодинамически согласованное  $\Phi$ -выводимое приближение, развитое Латтинжером и Вордом. Пионы считаются релятивистскими, нуклоны и  $\square \square \square \square$  нерелятивистские,  $\square NN$  и  $\square N \square \square$  вершины – нерелятивистские. Используя функционал с  $\square N \square$ ,  $\square NN$  сандвич-диаграммами, мы явным образом показали выполнение соотношения для производной  $\Phi$  по  $\mu_B$ :

$$-\sum_l d_l \cdot \int \frac{d\omega_l}{\pi} \frac{\partial f(\omega_l - \mu_B)}{\partial \mu_B} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} [\text{Re} \Sigma_l^R \text{Im} G_l^R](\omega_l + i0, p) - \frac{1}{V} \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_B} \Big|_{\text{Im} G_l^R} \equiv 0,$$

где  $l=N$ ,  $\square \square \square d_l$ -спин-изоспиновый фактор вырождения,  $G_l^R(p)$  и  $\Sigma_l^R(p)$  – запаздывающая функция Грина и собственная энергия фермиона,  $f(z) = (\exp(z/T) + 1)^{-1}$  – распределение Ферми-Дирака. Ранее, подобный результат был получен [2] для производной  $\Phi$  по  $T$  с учетом только одной двухпетлевой диаграммы  $\Phi$ . Используя это тождество, мы получили

$$n^{BM} \equiv -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_B} = \sum_l d_l \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{A_l(p) \Gamma_l(p) B_l(p)}{2} f(p_0 - \mu_B),$$

где  $A_l(p) = -2\text{Im} G_l^R$  - спектральная функция фермиона  $l$ ,  $\Gamma_l(p)$  его ширина, а  $B_l = A_l + 2\text{Im} \left[ \frac{\partial \text{Re} \Sigma_l^R(p)}{\partial p_0} G_l^R(p) \right]$ . Величина  $n^{BM}$  совпадает с нулевой компонентной барионного тока, полученного работе [3] Ботермансом и Малфлиетом. В свою очередь, в [4] было показано, что кинетическое уравнение, выведенное в приближении Каданова-Бейма, сохраняет барионный нётеровский ток с нулевой компонентой  $\sum_l n_l^{\text{Noth}} = \sum_l d_l \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} A_l(p) f(p_0 - \mu_B)$ . Прямым вычислением мы показали, что для  $\Phi$  функционала с двумя двухпетлевыми диаграммами нётеровский и ботерманс-малфлиетовский токи совпадают. Далее, на примере одной  $\square N \square \square$  сэндвич-диаграммы  $\Phi$  мы показали, что термодинамические величины, полученные с помощью  $\Phi$ -функционала Бейма и вириального разложения Бес-Уленбека, проведенного до второго порядка по  $\exp(\mu_B/T)$  при  $T \ll m_\pi = 140$  MeV, совпадают.

#### Список литературы

1. A. Ono et al. Phys. Rev. C 100 (2019) 044617.
2. B. Vanderheyden, G. Baym, J. Stat. Phys. 93 (1998) 843.
3. W. Botermans, R. Malfliet, Phys. Rept. 198 (1990) 115.
4. Yu.B. Ivanov, J. Knoll, D.N. Voskresnesky, Nucl. Phys. A 672 (2000) 313.

Е.А. ЦЫГАНКОВ,<sup>1</sup> Д.С. ЧУЧЕЛОВ,<sup>1</sup> С.А. ЗИБРОВ,<sup>1</sup> М.И.  
ВАСЬКОВСКАЯ,<sup>1</sup> В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ,<sup>1</sup> С.В. ПЕТРОПАВЛОВСКИЙ,<sup>2</sup>  
В.П. ЯКОВЛЕВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА СВЕТОВОЙ СДВИГ В УСЛОВИЯХ КПН РЕЗОНАНСА**

Целью работы является адаптированное к условиям эксперимента описание КПН-резонанса на переходах D1-линии атомов <sup>87</sup>Rb. Применительно к высокоточным атомным стандартам частоты ключевым вопросом является влияние различных параметров лазера и атомной среды на величину возникающих световых сдвигов. По сравнению со стандартными подходами предлагаемая модель учитывает ряд дополнительных факторов: сверхтонкое расщепление верхнего рабочего уровня и наличие однофотонной отстройки от резонанса, произвольный спектр лазера и учет оптической толщины атомной среды, а также фазовой модуляции светового поля, реализующей петлю обратной связи в схеме стабилизации частоты. Впервые обнаружено, что особую роль в величине и структуре световых сдвигов играет асимметрия спектра лазерного излучения.

Е.А. ЦЫГАНКОВ,<sup>1</sup> Д.С. ЧУЧЕЛОВ,<sup>1</sup> С.А. ЗИБРОВ,<sup>1</sup> М.И.  
ВАСЬКОВСКАЯ,<sup>1</sup> В.Л. ВЕЛИЧАНСКИЙ,<sup>1</sup> С.В. ПЕТРОПАВЛОВСКИЙ,<sup>2</sup>  
В.П. ЯКОВЛЕВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Lebedev Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia*

<sup>3</sup> *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia*

## **STUDY OF FACTORS AFFECTING THE LIGHT SHIFTS IN THE CPT RESONANCE SCHEME**

We present a study of the light shifts arising in the coherent population trapping (CPT) resonance. The focus of the paper is on the influence of experimental factors affecting the magnitude and structure of the light shift. In particular, impact of FM-modulation, spectrum asymmetry, one-photon detuning and optically thick atomic medium are considered. The proposed model can help clarify if a zero light shift can be reached in a specific experimental set-up. The results of simulations and analytical formalism are compared with the experiment performed with a diode laser and <sup>87</sup>Rb atoms.

Одним из основных источников нестабильности атомных часов на эффекте КПН [1] служит световой сдвиг рабочего атомного перехода [2]. Продолжая исследования, начатые в [3], мы рассматриваем расширенную номенклатуру факторов, влияющих на величину этого нежелательного эффекта. Решая

уравнения для атомной матрицы плотности в приближениях, отвечающих реальному эксперименту, получены как точные результаты (требующие, тем не менее, простого численного расчета), так и приближенные аналитические формулы, описывающие форму КПН-резонанса, величину и структуру светового сдвига, а также положение нуля синфазного сигнала, используемого в цепи стабилизации частоты. Показано, что асимметрия спектра лазерного излучения в условиях ненулевой однофотонной отстройки играет существенную, а иногда и определяющую роль в величине светового сдвига. Другой важный результат касается смещения между максимумом пропускания через атомную ячейку и нулем синфазного сигнала, поскольку последний на практике принимается за величину светового сдвига. При несимметричном контуре КПН-резонанса эти две величины не совпадают, и разработанный нами подход позволяет оценить степень этого несовпадения в зависимости от асимметрии спектра лазера. Полученная теоретическая форма КПН-резонанса и значения световых сдвигов сопоставлены с экспериментальными данными для атомов  $^{87}\text{Rb}$  на рис. 1.

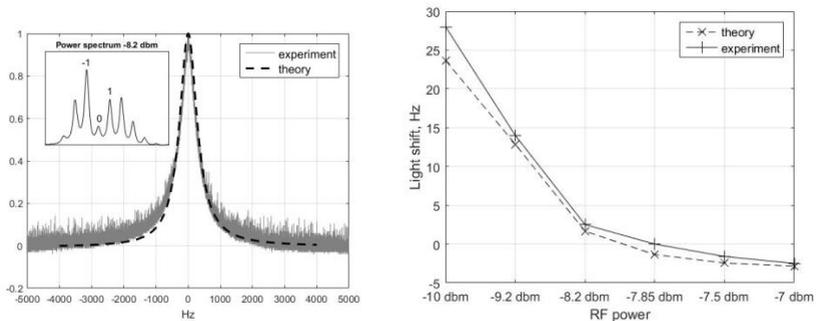


Рис. 1. Сравнение теоретических и экспериментальных кривых КПН-резонанса, а также световых сдвигов для различных спектров лазера

#### Список литературы

1. J. Vanier // Appl. Phys. B. 2005. Vol. 81. №4. P.421-442.
2. Miletic D. et al // Appl. Phys. B. 2012. Vol. 109. №1. P.89-97.
3. Chuchelov D.S. et al // Phys. Scr. 2018. Vol. 93 P. 114002-1-16.

Т.В. ЛИСЕЙКИНА<sup>1</sup>, С.В. ПОПРУЖЕНКО<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Университет Ростока, Германия

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия <sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## НЕИЗЛУЧАЮЩИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

Исследованы динамические конфигурации плазмы, возникающие при ионизации мощным бихроматическим лазерным излучением микрометровых газовых мишеней. Возбуждаемые при этом сильные нестационарные токи приводят к излучению терагерцовых волн высокой интенсивности. Обнаружено, что после быстрого испускания одноциклового терагерцового импульса образуется конфигурация плазмы, которая практически не излучает, хотя при этом распределение зарядов и токов остается нестационарным. Такая безизлучательная токовая конфигурация является аналогом анапольного состояния, известного в нанофотонике.

T. V. LISEYKINA<sup>1</sup>, S. V. POPRUZHENKO<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>University of Rostock, Germany

<sup>2</sup>Prokhorov General Physics Institute RAS, Moscow, Russia

<sup>3</sup>National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia

## NONSTATIONARY NONRADIATING STATES OF LASER PLASMA

We studied dynamical configurations of plasma created through ionization of gas targets of micron-scale size by intense two-color laser radiation. Strong non-stationary currents excited in this interaction led to the emission of high-power terahertz waves. After a quick radiation of a single-cycle terahertz pulse, a specific plasma configuration was formed which emitted practically no radiation despite the fact that the charge and current distributions remained essentially time-dependent. The nonradiating configuration was found similar to the dynamic anapole state recently observed in nanophotonics.

Из классической электродинамики известно, что заряженные частицы, движущиеся с ускорением, излучают электромагнитные волны. Это утверждение, однако, не всегда верно, если речь идет не о точечных зарядах, а о непрерывном распределении, моделирующем заряды и токи в макроскопических системах. При этом может оказаться, что переменное во времени и ограниченное в пространстве распределение зарядов и токов совершенно не излучает электромагнитных волн [1,2]. Долгое время считалось, что на практике такие конфигурации зарядов и токов реализовать невозможно, хотя теоретически их число бесконечно велико. В квантовой физике анапольный момент, введенный Зельдовичем [3] для описания электромагнитного взаимодействия, нарушающего четность, также позволяет сконструировать широкий класс неизлучающих состояний. Аналогом анаполей в классической электродинамике являются тороидальные мультиполи [5,6], экспериментальные

проявления которых были обнаружены недавно при исследовании оптических свойств метаматериалов [7].

Нами исследован схожий эффект образования неизлучающего состояния в сильно отличающейся системе – плазме, возникающей при ионизации атомарных газов с концентрацией  $10^{17}$ - $10^{19}$  см<sup>-3</sup> бихроматическими фемтосекундными лазерными импульсами высокой интенсивности. Туннельная ионизация атомов в поле, состоящем из основной частоты и относительно слабой второй гармоники, приводит к возбуждению ненулевого остаточного фототока, который осциллирует с частотой, близкой к плазменной, и сильно излучает в терагерцовом (ТГц) диапазоне длин волн [8]. Если размер газовой мишени сопоставим с длиной ТГц волны, составляющей десятки мкм, электронная плазма излучает как единая макрочастица, что приводит к возникновению аномально большой силы радиационного трения и, как следствие, к укорочению ТГц импульса. Результатом действия силы радиационного трения является не быстрое затухание плазменных колебаний, а их перестройка, приводящая к образованию динамической неизлучающей конфигурации. Ее свойства исследованы численно при помощи решения системы уравнений Максвелла-Власова методом частиц в ячейках. Показано, что неизлучающая конфигурация представляет собой суперпозицию токов, создающих постоянное магнитное и переменное электрическое поля.

#### *Список литературы*

1. Ehrenfest P. // Z. Physik. 1913. Vol. 11, P. 708–9.
2. Schott G.A. // Phil. Mag. Suppl. 1933. Vol. 15, P. 752–761.
3. Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1958. Т. 33, С. 1531-1533.
4. Yang Y., Bozhevolnyi S. // Nanotechnology. 2019. V. 30. P. 204001.
5. Дубовик В.И., Чешков А.А. // ЖЭТФ. 1967. Т. 51, С. 1369–1373.
6. Гизбург В.Л., Цитович В.Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88, С. 84–95
7. Kaelberer T., Fedotov V.A., Papasimakis N., Tsai D. and Zheludev N.I. // Science. 2010. V. 330, P. 1510.
8. Kim K.Y., Glowina J.H., Taylor A.J., Rodriguez G. // Opt. Exp. 2007. V. 15, P. 4577.

М.А. РАКИТИНА<sup>1</sup>, С.И. ГЛАЗЫРИН<sup>2</sup>, А.В. БРАНТОВ<sup>2</sup>, В.Ю.  
БЫЧЕНКОВ<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

<sup>2</sup> *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия;*

<sup>3</sup> *ЦФПИ ФГУП «ВНИИА», Москва, Россия*

## **ПОРОГ ИОННО-ЗВУКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И АНОМАЛЬНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ**

На основе точных значений для частоты колебаний и декремента затухания звуковых волн найдены пороговые значения градиента температуры, приводящие к возникновению ионно-звуковой неустойчивости обратного тока. С использованием предложенных простых выражений для вычислений порогов неустойчивости проанализировано возникающее дополнительное поглощение лазерного излучения на второй гармонике в постановке, имеющей отношения к схеме прямого зажигания лазерного термоядерного синтеза.

M. RAKITINA<sup>1</sup>, S. GLAZIRIN<sup>2</sup>, A. BRANTOV<sup>2</sup>, V. BYCHENKOV<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *National Research Nuclear University MEPHI, Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, <sup>3</sup>Russia; CFAR*

*Dukhov Research Institute, Moscow, Russia*

## **THRESHOLD OF ION-ACOUSTIC INSTABILITY AND ANOMALOUS ABSORPTION**

Based on the exact values of the ion sound frequency and its damping the threshold values of the temperature gradient that lead to return current instability are found. With use of derived expressions for threshold calculations the anomalous absorption of laser radiation at second harmonic in the setup related to direct drive scheme of inertial confinement has been analyzed.

Хорошо известно, что развитие ионно-звуковой неустойчивости обратного тока приводит к турбулентности плазмы, являющейся причиной дополнительного поглощения падающего света [1]. В данной работе подробно рассмотрены вопросы возникновения ионно-звуковой неустойчивости в горячей плазме, получены выражения для практического вычисления порога возникновения неустойчивости и продемонстрировано их использование при расчетах аномального поглощения [2] в лазерной короне, формируемой при облучении углеродного аблятора лазерным излучением на второй гармонике.

Ионно-звуковая неустойчивость возникает в плазме при увеличении градиента температуры до некоторого порогового значения, который может быть определен исходя из коэффициента затухания (нарастания) ионно-звуковых возмущений, вычисленном, когда функция распределения электронов по скоростям мало отличается от равновесной максвелловской функции [3],

$$\gamma_e = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\omega^4}{(kr_{de})^3} \sqrt{\frac{Zm_e}{m_i}} (P_T - 1), \quad P_T = \sqrt{\frac{m_i}{Zm_e}} \frac{kr_{de}}{\omega} \delta, \quad \delta \sim \frac{d \ln T_e}{d(kr_{de})} - \text{ безразмерный}$$

градиент температуры. С учетом затухания звуковых волн на ионах, т.е.  $\gamma = \gamma_e - \gamma_i$ , возникновение неустойчивости связано с изменением знака  $\gamma$  с ростом параметра  $\delta$ . Для определения порогового значения  $\delta$  была решена система уравнений  $\gamma(kr_{de}, \delta) = 0, \frac{\partial \gamma}{\partial kr_{de}} = 0$ . На основе точного решения можно

предложить следующее выражение для пороговой величины  $\delta$ :  

$$\delta = \frac{1}{(5\mu^{0.5} + 10) \left(\frac{ZT_e}{T_i}\right)^{0.5}}, \quad \frac{ZT_e}{T_i} \geq 30; \quad \mu = \frac{m_i}{Zm_p}$$

Пороговые значения градиента температуры,  $\delta$ , использовались в одномерных гидродинамических расчетах поглощения лазерного излучения. На каждый момент времени на основе текущего профиля плотности разлетающейся короны и ее температуры проверялось условие возникновения неустойчивости и, при его выполнении, в данной точке включалось дополнительное аномальное поглощение света, вызываемое ионно-звуковой турбулентностью. Была проведена серия расчетов с различными значениями максимума интенсивности лазерного импульса. На основе приведенных расчетов было обнаружено, что неустойчивость возникает только при интенсивностях падающего излучения выше  $7 \times 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup>. При этом возникающая турбулентность увеличивает поглощение на 10%, что приводит к росту температуры электронов (см. Рис.1)

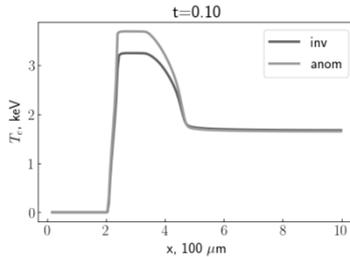


Рис. 1. Температура электронов при формировании короны (0.1 нс) с учетом аномального поглощения (серая кривая) и без учета (темная кривая) для  $10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>.

*Список литературы*

1. С. Мах, Theory of the coronal plasma in laser fusion targets, Physics of Laser Fusion.
2. V. Y. Bychenkov, W. Rozmus // Physics of Plasmas 2017, V. 24 P.012701.
3. А.Б. Михайловский. Теория плазменных неустойчивостей, 2 изд., т. 1-2 М. (1975)

Е.С. СОЗИНОВ, А.М. ФЕДОТОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ФОРМАЛИЗМ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО МИРОВЫМ ЛИНИЯМ В СКАЛЯРНОЙ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ**

На примере скалярной КЭД обсуждаются основы формализма интегрирования по мировым линиям. Выведены мастер-формулы для однопетлевых эффективных пропагаторов и вершин. Их применение проиллюстрировано выводом фейнмановских правил диаграммной техники и расчетом поляризационного оператора.

E. S. SOZINOV, A.M. FEDOTOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **WORLDLINE FORMALISM IN SCALAR QUANTUM ELECTRODYNAMICS**

Using the scalar QED as an example, the foundations of the worldline formalism are discussed. Master formulas for effective one-loop propagators and vertices are derived, and their application are illustrated by derivation of the Feynman rules and by calculation of the polarization operator.

В настоящее время общепринято формулировать квантовую теорию поля (в частности, КЭД) в подходе вторичного квантования, при этом для практических расчетов по теории возмущений, как правило, применяется аппарат континуального интегрирования по взаимодействующим полям [1]. В современной учебной литературе необходимость использования формализма вторичного квантования подчеркивается особо, а концепция квантованного поля трактуется как безальтернативная.

В то же время, исторически одной из первых предлагалась и рассматривалась иная (как теперь понятно, эквивалентная) формулировка, вполне аналогичная первично квантованной нерелятивистской теории, основанная на континуальном интегрировании по мировым линиям реальных и виртуальных частиц [2]. Интерес к такому альтернативному подходу в последнее время повысился по двум причинам: отсутствие аналога вторичного квантования в теории струн [3] и, неожиданно, довольно существенное упрощение в нем расчетов радиационных поправок при наличии сильных внешних полей [4]. Практическое применение формализма интегрирования по мировым линиям основано на предварительном выводе мастер-формул для одетых пропагаторов и эффективных вершин.

Оказывается, что в сильных внешних полях спиновые эффекты малы и асимптотики радиационных поправок достаточно вычислять в эффективной

скалярной КЭД. Типичная мастер-формула для эффективной однопетлевой  $N$ -фотонной вершины в скалярной КЭД, имеет вид [4]:

$$\Gamma[\{k_i, \varepsilon_i\}] = (-ie)^N (2\pi)^D \delta\left(\sum_{i=1}^N k_i\right) \int_0^\infty \frac{dT}{T} (4\pi T)^{-\frac{D}{2}} e^{-m^2 T} \times \\ \times \prod_{l=1}^N \int_0^T d\tau_l \exp\left(\sum_{i,j=1}^N \frac{1}{2} G_{Bij} k_i \cdot k_j - i \mathcal{G}_{Bij} \varepsilon_i \cdot k_j + \frac{1}{2} \mathcal{G}_{Bij} \varepsilon_i \cdot \varepsilon_j\right) \Big|_{\text{lin}(\varepsilon_i)}, \quad (6)$$

где  $D$  – размерность пространства,  $T$  – параметр Швингера,  $G_B$  – бозонная функция Грина,  $\{k_i, \varepsilon_i\}$  – волновой вектор и вектор поляризации  $i$ -го фотона соответственно. По сравнению со стандартным подходом, одно из упрощений при использовании формулы (1) состоит в том, что в ней одновременно и единообразно учитываются оба (одно- и двухфотонный) типа фундаментальных вершин скалярной КЭД, необходимых для обеспечения калибровочной инвариантности, другое — в том что интегрирование по координатам вершин диаграммы (или импульсам виртуальных частиц) уже проведено в общем виде и результат автоматически представлен в виде интеграла по одним только фейнмановским параметрам. При проведении практических расчетов выделение линейной части в (1) представляет собой громоздкую, но хорошо алгоритмизуемую чисто алгебраическую операцию и может быть реализовано с помощью компьютерной алгебры.

В данной работе обсуждаются основы формализма интегрирования по мировым линиям на примере скалярной КЭД, дается вывод мастер-формул, и на их основе выводятся правила фейнмановской диаграммной техники, что иллюстрирует его эквивалентность стандартному вторично-квантованному подходу. Наконец, на примере расчета однопетлевого поляризационного оператора

$$\Pi_{\mu\nu}(k^2) = -\frac{\alpha}{4\pi} (\delta_{\mu\nu} k^2 - k_\mu k_\nu) \int_0^1 dx (1-2x)^2 \log \left\{ \frac{m^2}{m^2 + x(1-x)k^2} \right\} \quad (7)$$

иллюстрируются особенности применения метода для расчета радиационных поправок в скалярной КЭД. В дальнейшем рассмотренный метод планируется применить для расчета асимптотик радиационных поправок в сильном постоянном скрещенном поле, в частности, с целью проверки гипотезы Ритуса-Нарожного [5].

#### Список литературы

1. Пескин М., Шредер Д. *Введение в квантовую теорию поля*. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.

2. Feynman R.P. //Phys. Rev. 80, 440 (1950).
3. Bern Z., Kosower D.A.//Phys. Rev. D 38, 1888 (1988).
4. Schubert C. //Phys. Rept. 355, 73 (2001).
5. Fedotov A.M.// Journal of Physics: Conf. Series 826, 012027 (2017).

Д. БЛЭКМЭН<sup>1</sup>, Р. НЮТЕР<sup>1</sup>, Ф. КОРНЕЕВ<sup>2,3</sup>, В. ТИХОНЧУК<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Центр применения интенсивных лазеров, Университета Бордо, ИЦНИ, Франция*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

## ПЛАЗМЕННЫЕ ВОЛНЫ С УГЛОВЫМ ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ

В паракиральном приближении рассмотрены решения уравнения Власова для плазменных волн с ненулевым орбитальным моментом. Кинетические эффекты, обуславливающие взаимодействие соседних мод, приводят к модификации дисперсионного соотношения. Полученные решения продемонстрированы с помощью численного моделирования. Определена структура квазистатических полей в такой волне.

D. BLACKMAN<sup>1</sup>, R. NUTER<sup>1</sup>, PH. KORNEEV<sup>2,3</sup>, V. TIKHONCHUK<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *University of Bordeaux, CNRS, CEA, CELIA, 33405 Talence, France*

<sup>2</sup> *National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia*

<sup>3</sup> *P.N. Lebedev Physical Institute of RAS, Moscow, Russia*

## PLASMA WAVES WITH ANGULAR ORBITAL MOMENTUM

In paraxial approximation Vlasov equation is solved for plasma waves with nonzero orbital momentum. Kinetic effects responsible for the neighbor modes coupling result in modification of the dispersion relation. Obtained solutions are demonstrated with numerical simulations. Quasi-static field structure in such waves is defined and analyzed.

Известны решения для электромагнитных волн в паракиральном приближении, показывающие, что такие волны могут обладать собственным угловым орбитальным моментом. В отличие от поляризации, для наличия углового момента необходимо, чтобы напряжённости полей имели зависимость от угловой пространственной переменной. В силу линейности уравнений Максвелла, в вакууме такие решения независимы и образуют ортонормированный базис.

Плазменные колебания, описываемые в кинетической теории с помощью уравнений Власова, могут также быть рассмотрены в паракиральном приближении. Однако, наличие нелинейных членов в уравнении вносит существенные изменения в описание таких волн по сравнению с электромагнитными волнами в вакууме. С помощью разложения по полиномам Лагерра и по гармоникам в зависимости электронной функции распределения от скорости было показано [1], что нелинейные поправки приводят к

взаимодействию и перемешиванию мод. Таким образом, плазменные колебания могут быть описаны с помощью базиса лаггерр-гауссовых мод с учётом взаимодействия между ними. Указанное взаимодействие приводит к изменению дисперсионных соотношений по сравнению со стандартными соотношениями для плоских плазменных колебаний. Изменению подвержена не только вещественная часть, но и мнимая, соответствующая затуханию Ландау таких колебаний.

Полученные решения были получены также в рамках численного моделирования [1]. Был использован код типа частица-в-ячейке, в трёхмерной постановке задачи. Для возбуждения волны использовались полученные аналитические выражения для электрического потенциала. Полученная структура полей и распределений частиц существовала долгое время после выключения возбуждающих полей.

На основе полученных выражений была проанализирована структура полей в рассмотренной плазменной волне с угловым орбитальным моментом. Показано, что, несмотря на то, что волна является потенциальной, в результате взаимодействия мод в системе возбуждаются квазистационарные магнитные поля. Найденная структура полей была подтверждена и в численном моделировании [1].

*Список литературы*

1. Blackman, D. R., Nuter, R., Korneev, P. and Tikhonchuk, V. T. (2019), Physical Review E. 100(1), p. 013204.

С.А. СУББОТИН<sup>1</sup>, Н.С. ВОРОНОВА<sup>1</sup>, И.Л. КУРБАКОВ<sup>2</sup>, Ю.Е.  
ЛОЗОВИК<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

## СТАТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ ЭКСИТОНОГО БОЗЕ-ГАЗА С УТЕЧКОЙ

Рассмотрена система бозонов с утечкой и пространственно-отделенной накачкой. В качестве материальной реализации рассмотрены не прямые экситоны. Получено эффективное уравнение Гейзенберга для системы экситонов с фотонами в окружающем пространстве. Выведено уравнение на параметр порядка конденсата и получена система интегрально-дифференциальных уравнений. Численно получены стационарные профили сверхтекучих плотности и скорости экситонов.

S.A. SUBBOTIN<sup>1</sup>, N.S. VORONOVA<sup>1</sup>, I.L. KURBAKOV<sup>2</sup>,  
Yu.E. LOZOVIK<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia

<sup>2</sup>Institute for Spectroscopy, Russian Academy of Sciences, Troitsk, Moscow, Russia

## STATIC SOLUTION OF THE HYDRODYNAMIC EQUATIONS FOR DISSIPATIVE EXCITON BOSE-GAS

A dissipative boson system with spatially separated pump is considered, with a specific material realization of indirect excitons. We derive the effective Heisenberg equation for the system of excitons and photons in the surrounding space. The equation on the condensate order parameter and the set of the integro-differential equations are obtained. Numerical solution yields the stationary profiles of the superfluid density and velocity of excitons.

Рассмотрен бозе-газ распадающихся частиц (непрямых экситонов) в предположении установившегося равновесия с фотонами в окружающем пространстве. Для описания динамики и спектра возбуждений образовавшейся системы применяется гидродинамическая модель [1], основанная на вариации функционала свободной энергии по возмущениям плотности и скорости жидкости над их равновесными значениями.

В результате вариации свободной энергии была получена система интегрально-дифференциальных уравнений для стационарных профилей плотности и скорости сверхтекучей жидкости с учетом круговой геометрии задачи, а также квадратичный по возмущениям гамильтониан системы. Уравнения на стационарный профиль плотности и скорости имеют вид:

$$\begin{cases} \nabla(\rho_0(r)\mathbf{v}(r)) - \frac{\sigma_0(r)}{\tau(r)} - \rho_0(r)\mathbf{v}(r)\delta(s(r))\nabla s(r) = 0, \\ \frac{\pi}{2}\mathbf{v}^2(r) + \frac{\Lambda^2}{2m}\left(\frac{(\nabla\sigma_0(r))^2}{4\sigma_0^2(r)} - \frac{\nabla^2\sigma_0(r)}{2\sigma_0(r)} + \frac{\nabla\sigma_0(r)}{2\sigma_0(r)}\delta(s(r))\nabla s(r)\right) - \int U(r-r')\rho_0(r')dr' + \mu = 0, \end{cases}$$

(1)

где  $\rho_0(r)$  – равновесная сверхтекучая плотность,  $\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m}\nabla\phi_0$  – скорость течения конденсата,  $s(r)$  – уравнение границы рассматриваемой двумерной области,  $\tau(r)$  – локальное время жизни частиц,  $U(r)$  – парный потенциал взаимодействия не прямых экситонов. Численное решение было проведено для  $\phi(r)$ , где  $\rho_0(r) = n * e^{\phi(r)}$ ,  $n = 10^{11} \frac{1}{\text{cm}^2}$  – параметр обезразмеривания. В результате был получен график (рис. 1).

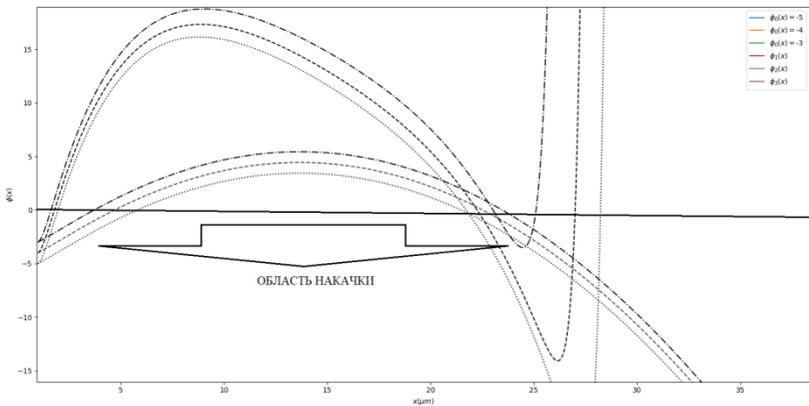


Рис. 1. График параметра плотности  $\phi(r)$  в нулевой аппроксимации (дугообразные линии) и численный (кривые с яркими минимумами).

Диапазон разрешенных значений параметра  $\phi(r)$  напрямую зависит от разрешенных плотностей для рассматриваемой теории. С учетом выше сказанного можно построить графики плотности для областей слева и справа от накачки, что отвечает соответственно течению влево и вправо.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 19-02-00793.

#### Список литературы

1. Wen-Chin Wu and A. Griffin, Phys. Rev. A **54**, 4204 (1996).
2. C.A. Gelmi, H. Jorquera, Computer Physics Communications **185**, 392 (2014).

Б. А. ТУЛУПОВ<sup>1</sup>, М. Л. ГОРЕЛИК<sup>2</sup>, Ш. ШЛОМО<sup>3</sup>, М. Г. УРИН<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Московская экономическая школа, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Циклотронный Институт, Техасский А&М Университет, Колледж Стейшн, США*

<sup>4</sup>*Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», Москва, Россия*

## **СВОЙСТВА ИЗОСКАЛЯРНЫХ ГИГАНТСКИХ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ РЕЗОНАНСОВ В СРЕДНЕ-ТЯЖЕЛЫХ МАГИЧЕСКИХ ЯДРАХ: ПОЛУМИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ**

В рамках полумикроскопической частично-дырочной дисперсионной оптической модели предложено описание основных свойств изоскалярных гигантских мультипольных резонансов в ряде средне-тяжелых магических ядер. Результаты расчетов сравниваются с соответствующими экспериментальными данными.

B. A. TULUPOV<sup>1</sup>, M. L. GORELIK<sup>2</sup>, S. SHLOMO<sup>3</sup>, M. H. URIN<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Institute for Nuclear Research RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Moscow Economic School, Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*Cyclotron Institute, Texas A&M University, College Station, USA*

<sup>4</sup>*National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow, Russia*

## **PROPERTIES OF THE ISOSCALAR GIANT MULTIPOLE RESONANCES IN MEDIUM-HEAVY CLOSED SHELL NUCLEI: SEMIMICROSCOPIC DESCRIPTION**

Main properties of the isoscalar giant multipole resonances in a few medium-heavy closed-shell nuclei are described within the semimicroscopic particle-hole dispersive optical model. Calculation results are compared with corresponding experimental data.

Представленная работа является непосредственным продолжением выполненных в [1-3] исследований, в которых сформулированная ранее в достаточно общем виде полумикроскопическая частично-дырочная дисперсионная оптическая модель (ЧДДОМ) [4] применена к описанию изоскалярных гигантских монопольного ( $L=0$ ) [1,2] и мультипольных ( $L \leq 3$ ) [3] резонансов и реализована в применении к ядру  $^{208}\text{Pb}$ . Основные свойства произвольного гигантского резонанса с «нормальным» изоспином включают соответствующие усредненные по энергии силовую функцию, «проецированную» (однократную) переходную плотность [1], парциальные и полную вероятности прямого одноуклонного распада. Описание основных свойств гигантских резонансов можно получить в рамках ЧДДОМ, поскольку в этой модели совместно учитываются основные моды релаксации соответствующих высоко-энергетических возбуждений типа частица-дырка. Фактически ЧДДОМ представляет собой микроскопически обоснованное обобщение стандартной и нестандартной версий континуумного

приближения случайной фазы на случай учета феноменологически и в среднем по энергии фрагментационного эффекта.

В работе предложено описание изоскалярных гигантских мультипольных ( $L \leq 3$ ) резонансов (включая обертоны  $L=0, 2$ ) в ядрах  $^{40, 48}\text{Ca}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{132}\text{Sn}$  и  $^{208}\text{Pb}$ . Все «микроскопические» параметры модели (параметры среднего поля, интенсивности бесспиновой части сил Ландау-Мигдала) взяты из независимых данных. Только интенсивность мнимой части усредненного по энергии специфического частично-дырочного взаимодействия, ответственного за фрагментационный эффект подбирается для каждого ядра из условия воспроизведения в расчетах наблюдаемой полной ширины монопольного резонанса. Действительная часть указанного взаимодействия определяется через мнимую часть с помощью некоторого дисперсионного соотношения [5].

Сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными позволяет заключить, что ЧДДОМ является достаточно эффективным инструментом исследования свойств гигантских резонансов.

Работа частично поддержана РФФИ (грант 19-02-00660-а).

*Список литературы*

1. Gorelik M. L., et al. // Nucl. Phys. A. 2016. V. 955 . P. 116. 2. Gorelik M. L., et al. // Nucl. Phys. A. 2018. V. 970 . P. 353.
3. Горелик М.Л., Тулупов Б.А., Урин М.Г. // ЯФ 2020. Т. 83. № 2. 4. Urin M. H. // Phys. Rev. C. 2013. V. 87. P. 044330.
5. Тулупов Б. А., М. Г. Урин // ЯФ 2009. Т. 72. С. 780.

## ИЗЛУЧЕНИЕ РАВНОУСКОРЕННО ДВИЖУЩЕЙСЯ ЧАСТИЦЫ

В данной работе приводится новый релятивистский векторный потенциал магнитного диполя. В качестве примера рассчитано угловое распределение мощности излучения прямолинейно и равноускорено движущейся частицы с постоянным магнитным моментом.

S.S. SAUTBEKOV, M.I. PSHIKOV, A.G. ASSYLBEKOVA

*Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan*

## RADIATION FROM A UNIFORMLY ACCELERATED PARTICLE

This paper describes a novel relativistic vector potential of the magnetic dipole. As an example, calculation of the angular distribution of radiation power is shown for a rectilinearly moving and uniformly accelerated particle with constant magnetic moment.

Исходим из выражения для векторного потенциала движущейся со скоростью  $\mathbf{v}$  частицы с постоянным магнитным моментом  $\mathbf{M}[1]$ :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu}{4\pi} \left( \frac{\mathbf{M}}{R^2(1-n\beta)^2} \times \left( \beta - \mathbf{n} \frac{1-\beta^2}{1-n\beta} \right) + \frac{\mathbf{n}}{cR(1-n\beta)^2} \times \left( \dot{\mathbf{M}} + \mathbf{M} \frac{n\dot{\beta}}{1-n\beta} \right) \right)_{\tau},$$

где  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{R}}{R}$ ,  $\mathbf{R}$  – радиус вектор движущейся частицы,  $\beta = \frac{v}{c}$ . Тогда электромагнитное поле движущейся частицы выражается формулами:

$$\mathbf{E}^{Rad}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R c^2 (1-n\beta)^3} \times \left( \dot{\mathbf{M}} + (\beta\dot{\mathbf{n}}) \frac{\mathbf{M}}{1-n\beta} + \frac{\mathfrak{z}(\beta\dot{\mathbf{n}})}{1-n\beta} \left( \mathbf{M} + (\beta\dot{\mathbf{n}}) \frac{\mathbf{M}}{1-n\beta} \right) \right)_{\tau}$$

$$\mathbf{H}^{Rad}(\mathbf{r}, t) = (\mu_0/\epsilon_0)^{-\frac{1}{2}} \mathbf{n} \times \mathbf{E}^{Rad}(\mathbf{r}, t).$$

Несложно получить для углового распределения излучения частицы:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{(1-n\beta)}{\mu_0 c} (R E^{Rad})^2$$

или

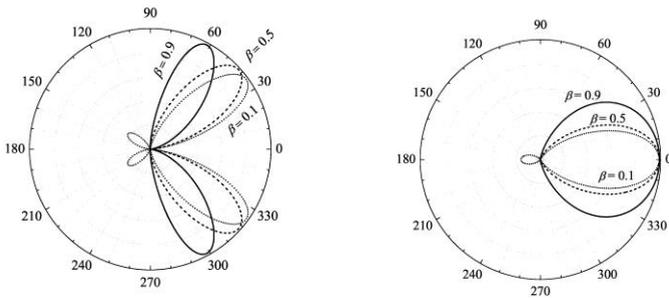
$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{\mu_0}{(4\pi)^2 c^3} \frac{1}{(1-n\beta)^5} \left( \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{M}} + (\beta \dot{\mathbf{n}}) \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{M}}{1-n\beta} + \frac{3(\beta \dot{\mathbf{n}})}{1-n\beta} \left( \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{M}} + (\beta \dot{\mathbf{n}}) \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{M}}{1-n\beta} \right) \right)^2$$

Полагая  $\dot{\mathbf{M}} = 0, \dot{\mathbf{M}} = 0, \dot{\beta} = 0$ , получаем формулу излучения равномерно ускоренной частицы:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{9\mu_0}{(4\pi)^2 c^3} \left( \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{M}^2 (\beta \dot{\mathbf{n}})^4}{(1-n\beta)^9} \right)$$

Если  $\mathbf{v} \parallel \mathbf{M}$ , Тогда для угла наблюдения  $\alpha = \theta - \arcsin(\beta \sin \theta)$ , получим  $\frac{dP}{d\Omega} = \frac{9\mu_0 \beta^4 M^2}{(4\pi)^2 c^3} F(\theta, \beta)$ ,

где  $F(\theta, \beta) = \frac{\sin^2 \alpha \cos^4 \alpha}{(1-\beta \cos \alpha)^9}$ , если  $\mathbf{v} \parallel \mathbf{M}$  или  $F(\theta, \beta) = \frac{\cos^6 \alpha}{(1-\beta \cos \alpha)^9}$ , если  $\mathbf{v} \perp \mathbf{M}$ . На рис.1 приведены нормированные диаграммы углового распределения мощности излучения частицы с магнитным моментом  $\mathbf{M}$ , движущейся прямолинейно с постоянным ускорением.



а) б)

Рис.1. Угловое распределение  $\frac{F(\theta, \beta)}{K(\beta)}$  мощности излучения частицы с магнитным моментом  $\mathbf{M}$ , движущейся прямолинейно с постоянным ускорением: а)  $\mathbf{v} \parallel \mathbf{M}$ ,  $K(0,1) = 0,3, K(0,5) = 28,2, K(0,9) = 0,9 \cdot 10^7$ ; б)  $\mathbf{v} \perp \mathbf{M}$ ,  $K(0,1) = 2,6, K(0,5) = 512, K(0,9) = 10^9$

Поскольку спиновое излучение проявляется при высоких энергиях электронов и фактически может быть измерено в современных электронных ускорителях, предложенная методика может быть использована для расчета мощности излучения релятивистских электронов и резонансных циклотронных

частот. Учет переходного и тормозного излучений от быстрых нейтронов имеет также теоретическую значимость и в физике плазмы.

*Список литературы*

1. S.S Sautbekov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 484(2019), 403-407.

Е.Е. ГОРОДНИЧЕВ, Д.Б. РОГОЗКИН

*Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"*

## **КОГЕРЕНТНОЕ ОБРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ ОТ АНСАМБЛЯ МИ-ЧАСТИЦ, ПОМЕЩЕННОГО В СРЕДУ С МАГНИТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ**

В работе изучается когерентное обратное рассеяние поляризованного света от случайного ансамбля Ми-частиц, помещённого в магнито-активную однородную среду. Показано, что в отсутствие деполяризации света магнитное поле не приводит к подавлению интерференции между многократно рассеянными электромагнитными волнами. Вследствие этого при отражении циркулярно поляризованного света возникает только смещение пика когерентного обратного рассеяния, а в случае линейно-поляризованного света пик расщепляется на две составляющие. Полученные результаты объясняют данные эксперимента на крупных (больше длины волны) Ми-частицах.

E.E.GORODNICHEV, D.B.ROGOZKIN

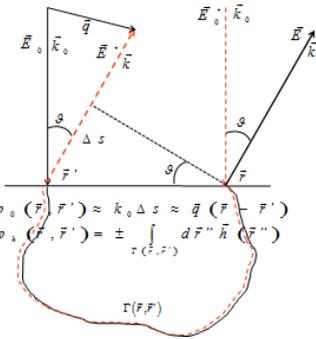
*National Research Nuclear University "MEPhI"*

Coherent backscattering from an ensemble of Mie-particles immersed in a magneto-optically medium

We study coherent backscattering of polarized light from a random ensemble of Mi particles placed in a magnetically active homogeneous medium. It is shown that the magnetic field does not destroy the interference between multiply scattered electromagnetic waves when they retain their polarization. As a result, in reflection of circularly polarized light, the shift of the coherent backscattering peak occurs only, while, for linearly polarized light, the peak splits into two components. The results obtained explain the data of experiment on large (compared to the wavelength) Mie-particles.

Эффект слабой локализации возникает в результате интерференции волн, распространяющихся вдоль одинаковых лучевых траекторий навстречу друг другу, и напрямую связан с  $T$ -инвариантностью процесса многократного рассеяния [1]. Принято считать, что наличие магнитного поля, нарушающего указанную симметрию, приводит к подавлению интерференции. В металлах с примесями это проявляется в уменьшении сопротивления при наложении магнитного поля. В экспериментах по когерентному обратному рассеянию света от среды с рэлеевскими рассеивателями магнитное поле приводит к уменьшению интенсивности отражения точно-назад [1,2], что, на первый взгляд, также подтверждает негативное влияние магнитного поля на конструктивную интерференцию волн. Однако, как показано в настоящей работе, при рассеянии электромагнитных волн возможна ситуация, когда интерференция не разрушается. При определённой ориентации магнитного поля и слабой деполяризации волн в среде (например, при выполнении условий [3]) возникает обусловленный эффектом Фарадея сдвиг фаз, который в зависимости от

поляризации света проявляется только в смещении или расщеплении пика когерентного обратного рассеяния.



В предположении, что случайный ансамбль Ми-частиц помещён в магнито-активную среду (магнитное поле направлено вдоль поверхности образца) и оптические параметры частиц удовлетворяют сформулированным в [3] условиям, так что деполаризацией циркулярно поляризованного света можно пренебречь, интерференция волн при многократном рассеянии происходит независимо в право- и лево-поляризованных модах. В каждой моде интерференция описывается известными соотношениями скалярной теории [1] с

единственным отличием, которое сводится к появлению дополнительного фазового множителя. Из-за эффекта Фарадея между двумя волнами, распространяющимися навстречу друг другу вдоль одной лучевой траектории, возникает разность фаз

$$ik_0 \int_{\Gamma(r, r')} \vec{h}(\vec{r}'') d\vec{r}'' = ik_0 \oint_{\Gamma} \vec{h}(\vec{r}'') d\vec{r}'' + ik_0 \int_{\Gamma'} \vec{h}(\vec{r}'') d\vec{r}'' \quad (1)$$

где  $k_0$  - волновое число,  $\vec{h}$  - вектор гирации,  $\Gamma(\vec{r}, \vec{r}')$  - контур, охватываемый лучевой траекторией. Интегрирование в первом интеграле в правой части (1) проводится по контуру, получающемуся путём замыкания  $\Gamma(\vec{r}, \vec{r}')$  (см. рисунок). Если магнитное поле пространственно однородно, то интеграл по замкнутому контуру в (1) обращается в нуль. Суммируя по всем лучевым траекториям, для интерференционного вклада в интенсивность  $I_{\pm}^{(c)}$  получаем соотношение

$$I_{\pm}^{(c)}(\vec{q}) = I_{scalar}^{(c)}(\vec{q} \pm k_0 \vec{h}) \quad (2)$$

где  $q = k_0 \vartheta$ ,  $I_{scalar}^{(c)}(\vec{q})$  - интерференционный вклад в скалярном случае [1,4]. Из (2) следует, что магнитное поле не приводит к подавлению интерференции. При падении циркулярно поляризованной волны, пик когерентного обратного рассеяния, из-за дополнительного «магнитного» сдвига фаз (1) смещается относительно направления точно-назад на угол  $\vartheta_{max} = \pm k_0 h$ . Поскольку линейно поляризованную волну можно представить как суперпозицию двух полей с противоположными круговыми поляризациями, то результат интерференции можно представить как сумму:

$$I_{P,\perp}^{(c)}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \cdot \left( I_{scalar}^{(c)}(\vec{q} + k_0 \vec{h}) + I_{scalar}^{(c)}(\vec{q} - k_0 \vec{h}) \right) \quad (3)$$

Согласно (3), интенсивности ко- и кросс-поляризованных компонент обратного рассеянного света равны между собой и в их угловом профиле при  $\vec{q} \perp \vec{h}$  должны наблюдаться два максимума при  $q_{max}^{(1,2)} = \pm k_0 h$ . Эти эффекты наблюдались в эксперименте [2].

Деполаризующие столкновения при многократном рассеянии приводят к случайному изменению поляризации волн вдоль траектории распространения и, как результат, разрушению интерференции. Интенсивность в конусе когерентного обратного рассеяния уменьшается. Теория когерентного обратного рассеяния в магнитном поле [5], не учитывающая эффекта медленного затухания циркулярной поляризации, не может объяснить эксперимент [2].

#### *Список литературы*

- [1]. C.M. Aegerter and G. Maret, *Coherent backscattering and Anderson localization of light*, in *Progress in Optics*, **52**, 1 (2009).
- [2]. R. Lenke, R. Lehner, G. Maret, *Europhys. Lett.*, **52**, 620 (2000)
- [3]. Городничев Е.Е., Кузовлев А.И., Рогозкин Д.Б., Письма в ЖЭТФ, **104**, 155 (2016); *Квантовая электроника*, **46**, 947 (2016).
- [4]. Городничев Е.Е., Кузовлев А.И., Рогозкин Д.Б., Письма в ЖЭТФ, **68**, 21 (1998); *ЖЭТФ*, **133**, 839 (2008).
- [5]. Lacoste D, van Tiggelen B. A., *Phys. Rev. E*, **61**, 4556 (2000).

**Секция**  
**ФИЗИКА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ**

Руководитель секции – заведующий кафедрой № 4,  
профессор, д.ф.-м. н. Губин  
Сергей Александрович

Секретарь секции – Маклашова Ирина  
Владимировна

Тел.: 8 (495) 788-56-99, доб. 9917

E-mail: SAGubin@mephi.ru, IVMaklashova@mephi.ru

Э.К. АНДЕРЖАНОВ<sup>1</sup>, С.П. МЕДВЕДЕВ<sup>1</sup>, А.М. ТЕРЕЗА<sup>1</sup>,  
С.В. ХОМИК<sup>1</sup>, Б.Д. ХРИСТОФОРОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН,  
Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт динамики геосфер РАН, Москва, Россия

## УДАРНАЯ ВОЛНА И ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ВЗРЫВЕ ЗАРЯДА КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА В ТРУБЕ С КСЕНОНОМ

Приведены результаты измерения интенсивности излучения, возникающего при взрыве сферических зарядов конденсированных взрывчатых веществ в металлических трубах, наполненных ксеноном. Показана возможность увеличения плотности светового потока за счет использования зеркального покрытия стенки трубы. Проведен анализ результатов трехмерного численного моделирования ударно-волновой картины течения и предложен упрощенный метод оценки интенсивности излучения.

E.K. ANDERZHANOV<sup>1</sup>, S.P. MEDVEDEV<sup>1</sup>, A.M. TEREZA<sup>1</sup>, S.V. KHOMIK<sup>1</sup>,  
B.D. KHRISTOFOROV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of  
Sciences, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Institute of Geospheres Dynamics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

## SHOCK WAVE AND RADIATION AT BURSTING OF HIGH EXPLOSIVE IN A TUBE FILLED WITH XENON

The intensity of radiation was measured at bursting of spherical charges of high explosives in metal tubes filled with xenon. The velocity and radiative characteristics of the shock wave propagating through the tube were determined. The analysis of the results of three-dimensional numerical simulation of the shock-wave flow pattern is carried out and a simplified technique for estimating the radiation intensity is proposed.

Для моделирования воздействия ультрафиолетового и видимого излучения различной природы на вещество возникает необходимость разработки и создания источников с различной длительностью, интенсивностью и формой светового импульса. В частности, представляют интерес, источники с интенсивностью 10 – 50 кВт/см<sup>2</sup> и длительностью около 1 мс. В ряде случаев в качестве компактного взрывного источника излучения целесообразно использовать наполненную благородным газом трубу, в которой осуществляется подрыв заряда конденсированного взрывчатого вещества (КВВ) [1]. Использование такой методики позволяет варьировать плотность потока и длительность излучения в достаточно широких пределах.

В работе представлены результаты измерения интенсивности излучения и скорости ударной волны, генерируемой взрывом сферического заряда КВВ в

металлической трубе, наполненной ксеноном. Заряды из ТЭНа массой 0,8 – 2,5 г помещались в трубку длиной 200 мм радиусом 15 мм. В трубе длиной 1600 мм радиусом 70 мм использовался заряд из смеси тротил-гексоген 50/50 массой 23 г. В ряде опытов внутренние стенки трубы покрывались отражающим материалом, что существенно увеличивало эффективность источника излучения. Радиационные характеристики фронта ударной волны (УВ) измерялись с помощью пирозлектрических приемников, процесс распространения ударной волны регистрировался с помощью скоростной киносъемки.

Для выявления особенностей возникающей сложной картины течения, включающей многократные отражения поперечных волн от стенки и формирование фронта УВ, распространяющейся вдоль трубы, выполнено трехмерное численное моделирование с использованием пакета Gas Dynamics Tool (GDT) [2]. Показано, что плотность потока излучения с поверхности, как плоского, так и искривленного фронта ударной волны можно оценить через параметры ударно сжатого газа в предположении, что он является идеальным и фронт УВ излучает как черное тело.

Установлено, что применение взрывных труб с отражающими стенками позволяет повысить плотность потока энергии, падающей на мишень, более, чем на порядок, по сравнению с потоком, создаваемым непосредственно фронтом УВ, и улучшить форму ее временной зависимости. Согласие результатов экспериментов с расчетными данными, показывает, что пакет газодинамических расчетов GDT может использоваться при проектировании источников излучения на основе взрывных труб.

#### *Список литературы*

1. Цикулин М.А., Попов Е.Г. Излучательные свойства ударных волн в газах. М.: Наука, 1984.
2. Зибаров А.В. Пакет прикладных программ GAS DYNAMICS TOOL и его применение в задачах численного моделирования газодинамических процессов. Дис. ...д-ра физ.-мат. наук: 05.13.16 - Тула, 2000, 307 с.

А.С. АНТРОПОВ, В.В. СТЕГАЙЛОВ

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ДИФфуЗИЯ НАНОПУЗЫРЕЙ В ОЦК-УРАНЕ: ТЕОРИЯ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Атомистическое моделирование является мощным инструментом для детального изучения механизмов движения пузырьков. В данной работе рассмотрено движение пузырей в ОЦК решетке урана со стабильными гранями ориентации [110]. Предложен метод неравновесного моделирования направленного движения пузырьков в градиенте давления, который позволяет рассчитать коэффициент диффузии пузырей нанометрового размера. Показано, что пузырей связана с образованием террас в поверхностном слое устойчивых граней. Полученные результаты подтверждают теорию диффузии фасеточных пузырей через образование террас и объясняют природу энергии активации этого процесса.

A.S. ANTROPOV, V.V. STEGAILOV

*Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

## **NANOBUBBLES DIFFUSION IN BCC URANIUM: THEORY AND ATOMISTIC MODELLING**

Atomistic modelling is a powerful instrument for a detailed study of the mechanisms of bubble motion. In this work, we consider the movement of bubbles in the bcc lattice of uranium with stable facets of [110] orientation. A method of non-equilibrium modelling of the directed motion of bubbles in a pressure gradient is proposed, which allows one to calculate the diffusion coefficient of nanometer-sized bubbles. It is shown that diffusion of facet bubbles is associated with the formation of terraces in a surface layer of stable facets. The results prove the theory of bubble diffusion via terrace nucleation and explain the nature of its activation energy.

Вопросы диффузии пузырей (пустот) в твердых телах имеют большую актуальность. Это связано в первую очередь с задачами ядерной энергетики [1]. Классический подход к рассмотрению подвижности пузырей связывает коэффициент диффузии пузыря с коэффициентами объемной и поверхностной самодиффузии атомов матрицы [2]. Один из механизмов подавления диффузии связан с наличием выраженных граней у пузыря. Существует теоретическая модель, согласно которой скорость диффузии определяется частотой образования новых ступеней в гранях [3]. Методы молекулярной динамики (МД) дают возможность детально изучить механизмы диффузии пузырей, проверить и уточнить существующую теорию.

ОЦК уран в качестве рассматриваемой системы был выбран как первое приближение перспективного ядерного топлива U-Mo. Для моделирования диффузии пузырей использовался предложенный нами метод ускоренной МД, а также прямое моделирование свободной диффузии.

В результате работы установлено, что пузыри радиусом от 9 до 90 Å в равновесном состоянии имеют форму многогранников с выраженными сторонами [110]. Перемещение пузыря происходит скачками. Каждый скачок соответствует перемещению одной из граней типа [110] на одну атомную плоскость. Подтверждены общие положения теории о движении фасеточных пузырей за счет образования ступеней в гранях, дополнена теория, описывающая пороговую энергию процесса. Сравнение результатов прямого метода расчета и ускоренной МД подтверждает возможность применимости данного метода для дальнейшего моделирования диффузии пузырей в твердых телах (рисунок 1). Посчитана энергия активации процесса диффузии и полученное значение сравнивается с теорией [2] и дополненной теорией [3].

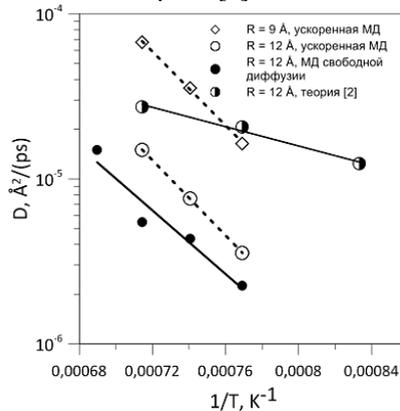


Рис. 1. Коэффициент диффузии пузырей радиусом 9 и 12 Å посчитанные прямым и ускоренным МД, предсказания теории [2].

*Список литературы*

1. M.S. Veshchunov, V.D. Ozrin, et. al. // Nucl. Eng. Des. 236 (2006) 179-200.
2. Я. Е. Гегузин Движение макроскопических включений в твердых телах. Металлургия, 1971.
3. Beere W. // Journal of Nuclear Materials 45.2 (1972): 91-95.

Ю.Б. БАЗАРОВ<sup>1,2</sup>, М.Ю. БАЗАРОВ<sup>2</sup>, В.А. БОРИСЁНОК<sup>2</sup>,  
В.А. БРАГУНЕЦ<sup>1</sup>, М.А. КАРПОВ<sup>1</sup>, Д.А. ПРОНИН<sup>1</sup>, В.Г. СИМАКОВ<sup>1</sup>,  
Е.В. ХАЛДЕЕВ<sup>1</sup>, Е.Е. ШЕСТАКОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, Россия.

<sup>2</sup> Саровский физико-технический институт – филиал Национального  
исследовательского ядерного университета МИФИ, Саров, Россия.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РЕГИСТРАЦИИ СВЕТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ В УДАРНО НАГРУЖЕННОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ КВАРЦА

В докладе приведены результаты применения фотографических методов исследования световых эффектов в образцах х-среза монокристалла кварца при нагружении их плоской ударной волной с давлением во фронте 1,7-1,8 ГПа. Показано, что непосредственно после вхождения ударной волны в образец в нем возникают локальные очаги света, плотность которых увеличивается по мере прохождения ударной волны по образцу.

YU.B. BAZAROV<sup>1,2</sup>, M.YU. BAZAROV<sup>2</sup>, V.A. BORISSEKOK<sup>2</sup>, V.A.  
BRAGUNETS<sup>1</sup>, M.A. KARPOV<sup>1</sup>, D.A. PRONIN<sup>1</sup>, V.G. SIMAKOV<sup>1</sup>, E.V.  
KHALDEEV<sup>1</sup>, E.E. SHESTAKOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup> FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, Russia.

<sup>2</sup> Sarov Physical & Technical Institute - National Research Nuclear University MEPhI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia

## RESULTS OF REGISTRATION OF LIGHT PHENOMENA IN A SHOCK-LOADED QUARTZ SINGLE CRYSTAL

The report presents the results of applying a high-speed photographic method for investigating of light effects in x-cut samples of a quartz single crystal when it loaded with a plane shock wave with a front pressure of 1.7-1.8 GPa. It is shown that immediately after the shock wave enters the sample, local foci of light appear in it, the density of which increases as the shock wave propagates through the sample.

Эксперименты с образцами монокристалла кварца проводились на легкогазовой пушке СарФТИ НИЯУ МИФИ калибром 40 мм. Объекты исследования – образцы х-среза кварца размером  $\varnothing 20 \times 2$  мм и  $\varnothing 20 \times 4$  мм. Нагружение осуществлялось ударником из алюминия толщиной 2 мм со скоростью в диапазоне от 400 до 430 м/с. При такой скорости давление во фронте УВ составляет  $\approx 1,7-1,8$  ГПа.

Механизм возникновения излучения в ударно-нагруженных монокристаллах кварца [1] на сегодняшний день неизвестен. Наиболее физически обоснованная гипотеза предложена в [2-4]: источниками света являются каналы локальных

электрических пробоев. Эта гипотеза требует экспериментального доказательства.

Нами отработаны методы регистрации, обладающие высоким временным и пространственным разрешением:

1. Метод регистрации восьмикладровым КМОП регистратором [6], обеспечивающим получение 8-ми последовательных кадров с временем экспонирования каждого 64 нс с пространственным разрешением  $64 \times 128$  элементов и скоростью съёмки не менее  $10^7$  кадров в секунду (рисунок 1а, 1б).

2. Метод регистрации восьмикладровой фотокамерой Наногейт 22 [7], обеспечивающей беспараллаксный оптический ввод изображений и число элементов разложения изображения  $\sim 1$  Мпкс (рисунок 1в – 1з). Длительность экспонирования кадров составляла 50 нс.

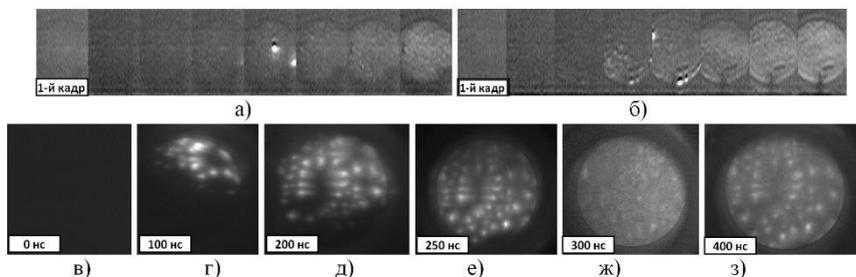


Рисунок 1. Скоростные покадровые фотохронограммы свечения образцов.

#### Список литературы

1. В.И. Веттегренъ, А.В. Воронин, В.С. Куксенко, Р.И. Мамалимов, И.П. Щербаков // ФТТ. 201. Т.56. вып.2. С.315-317.
2. Brooks W.P. // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, N 9. P. 2788.
3. Brannon P.J., Kondrad C., Morris R.W., Jones E.D., Assay J.R. // J. Appl. Phys. 1983. V54. N11. P.6374.
4. Graham R.A., Halpin W.Y. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39, N 11. P. 5077.
5. В.И. Веттегренъ, И.П. Щербаков, А.В. Воронин, В.С. Куксенко, Р.И. Мамалимов // ФТТ. 2014. Т.56. вып.5. с.981-985.
6. ООО "ВИДЕОСКАН" [Электронный ресурс] : [сайт]. - Электрон. дан. - Режим доступа : <http://videoscan.ru/>. - Загл. с экрана.
7. НПП НАНОСКАН [Электронный ресурс] : [сайт]. - Электрон. дан. - Режим доступа : <http://nanoscan.ru/>. - Загл. с экрана.
8. Борисенко В.А. Симаков В.Г. Куропаткин В.Г. и др // ПТЭ. №4 2008. с 113-121.

Ю.А. БОГДАНОВА<sup>1</sup>, И.В. МАКЛАШОВА<sup>1</sup>,  
С.А. ГУБИН<sup>1</sup>, Ж.А. АМИР<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан

## **ЛИЯНИЕ ВИДА ПОТЕНЦИАЛА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ГЕЛИЯ**

Представлена методика расчета транспортных свойств гелия на основе результатов термодинамического моделирования свойств гелия с использованием теоретического уравнения состояния на основе теории возмущений. Показано влияние вида межчастичного потенциала взаимодействия на точность расчета вязкости гелия в сравнении с известными экспериментальными данными.

Yu.A. BOGDANOVA<sup>1</sup>, I.V. MAKLASHOVA<sup>1</sup>,  
S.A. GUBIN<sup>1</sup>, Zh.A. AMIR<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Republic of Kazakhstan*

## **THE INFLUENCE OF THE TYPE OF INTERMOLECULAR INTERACTION POTENTIAL ON HELIUM TRANSPORT PROPERTIES**

A method for calculating the transport properties of helium based on the results of thermodynamic modeling of helium properties is presented using a theoretical equation on the basis of perturbation theory. The influence of the type of intermolecular interaction potential on the accuracy of calculating the helium viscosity is shown in comparison with the known experimental data.

Одной из лучших теорий, позволяющих получать уравнения состояния флюидов в широкой области давлений и температур, является теория возмущений KLRR-T [1, 2]. Теория возмущений применима к любым газообразным или конденсированным системам, в которых имеются взаимодействия, описываемые межатомным потенциалом.

Наряду с термодинамическими параметрами теория возмущений позволяет рассчитывать диаметр частицы в приближении твердых сфер, коэффициент упаковки и радиальную функцию распределения твердых сфер. Знание этих величин дает возможность определить транспортные свойства вещества, такие как вязкость, теплопроводность и диффузия.

Однако вид потенциала взаимодействия между молекулами исследуемого вещества существенно влияет не только на термодинамические параметры, но и на точность рассчитываемых транспортных свойств.

В данной работе на основе УРС [2] были проведены расчеты вязкости гелия Не при нормальных условиях и в области повышенного давления. Для описания взаимодействия между атомами Не использовались три вида сферически-симметричных потенциалов: двухпараметрический Леаннард-Джонса, потенциал Морзе и модифицированный потенциал Букингема вида Ехр-6. Результаты расчетов вязкости в сравнении с известными экспериментальными данными [3, 4, 5] представлены на рисунках 1-2.

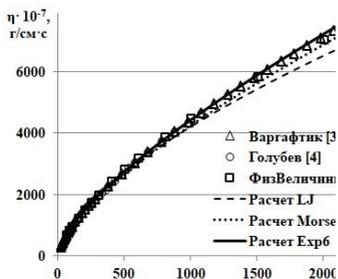


Рис.1 Зависимость вязкости Не от температуры при  $P=1$  атм. Линии – расчеты на основе различных видов потенциала взаимодействия. Символы – экспериментальные данные [3-5]

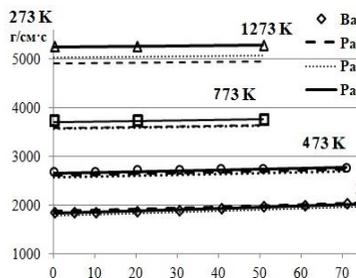


Рис.2 Вязкость Не в зависимости от давления на различных изотермах. Линии – расчеты на основе различных видов потенциала взаимодействия. Символы – экспериментальные данные [3]

Как видно из рисунков, результаты расчета с использования потенциала вида Ехр-6 лучше согласуются с экспериментальными данными как при нормальном давлении, так и в области повышенных давлений и температур.

#### Список литературы

1. Victorov S.B., El-Rabii H., Gubin S.A., Maklashova I.V., Bogdanova Yu.A // Journal of Energetic Materials. 2010. V. 28, P. 35–49.
2. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Victorov S.B., Gubina T.V. //High Temperature. 2015. V.53, P. 481-490.
3. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. Москва: Наука, 1972. 720 стр. 1
4. Голубев И.Ф. Вязкость газов и газовых смесей (Справочное руководство). М.: ГИФМЛ, 1959, 375 с
5. Физические величины: Спр. / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М., Энергоатомиздат, 1991. С. 365.

Ю.А. БОГДАНОВА, С.В. ГОРКУНОВ, С.А. КОЗЛОВА,  
В.А. ШАРГАТОВ

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва  
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЭВОЛЮЦИЯ ФРОНТА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С ИЗМЕНЯЮЩИМСЯ КАПИЛЛЯРНЫМ ДАВЛЕНИЕМ**

Представлены результаты решения задачи о стационарном фронте фазового перехода в горизонтально протяженном слое пористой среды с переменным по пространству капиллярным давлением. В результате расчетов было установлено, что при изменении капиллярного давления внутри вертикальной полосы при ее достаточно большой ширине фронт поверхности фазового перехода выходит на стационарное положение.

Yu.A. BOGDANOVA, S.V. GORKUNOV, S.A.KOZLOVA,  
V.A. SHARGATOV

*Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia  
National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **EVOLUTION OF A LIQUID-VAPOR PHASE TRANSITION FRONT IN INHOMOGENEOUS POROUS MEDIUM**

The results of solving the problem of the stationary front of a phase transition in a horizontally extended layer of a porous medium with a spatially variable capillary pressure are presented. As a result of the calculations, it was found that when the capillary pressure inside the vertical strip changes, the front of the phase transition surface goes to a stationary position.

Рассматриваются вертикальные течения в горизонтально протяженной двумерной области пористой среды при наличии фронта фазового перехода. Исследование проводится для малопроницаемого слоя однородной, изотропной пористой среды, которая имеет постоянную температуру. Этот слой ограничен сверху и снизу двумя горизонтальными высокопроницаемыми слоями. Верхний высокопроницаемый слой заполнен жидкостью. Давление на горизонтальной границе между этими двумя слоями известно и постоянно. Низкопроницаемый слой делится на две области. Верхняя область заполнена жидкостью, а нижняя – смесью воздуха с парами жидкости. Эти области разделены поверхностью фазового перехода, которая считается бесконечно тонкой. Положение поверхности фазового перехода изменяется вследствие процессов фильтрации и испарения жидкости. Поскольку температура среды постоянна, то конденсация пара происходит при одном и том же постоянном значении влажности. То, что тяжелая жидкость находится над легкой, создает возможность для развития неустойчивости поверхности фазового перехода. Предполагается, что в нижнем

горизонтальном высокопроницаемом слое поддерживается постоянное значение влажности воздуха.

Основные уравнения и граничные условия взяты из работ [1, 2]. В начальный момент поверхность фазового перехода задается в виде кривой, соединяющей два устойчивых на бесконечности положения фронта (рис. 1). Капиллярное давление изменяется в вертикальной полосе, которая показана на графике двумя вертикальными линиями и постоянно вне этой полосы.

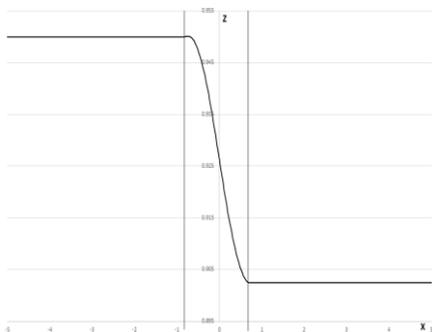


Рис.1. Начальное положение фронта фазового перехода.

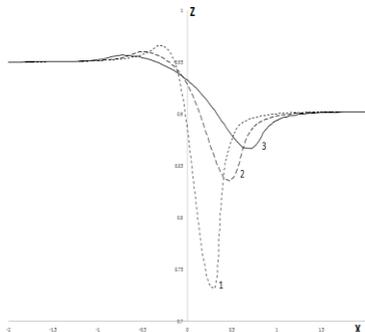


Рис.2. Стационарные положения фронта испарения.

Результаты расчетов показывают, что в этом случае существует стационарное решение задачи и с течением времени фронт поверхности фазового перехода стремится к стационарному положению (линии 1, 2 и 3 на рис.2), профиль которого зависит от ширины полосы с переменным капиллярным давлением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 16-11-10195.

#### *Список литературы*

1. Shargatov V.A., П'ichev A.T., Tsyarkin G.G. //Int. J. Heat and Mass Transfer, 2015, V. 83, P. 552-561.
2. Shargatov V.A. //Fluid Dynamics. 2017. V. 52. № 1. P. 146-157.

А. С. БУРКАЦКИЙ, Ю. Б. КУДАСОВ, Д. А. МАСЛОВ, О. М. СУРДИН,  
В. Н. ПАВЛОВ

*Саровский физико-технический институт — филиал федерального  
государственного автономного образовательного учреждения высшего  
образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Саров,  
Россия*

## **МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ**

Разработана методика самосогласованного расчета распределения частиц на фронте ударной волны, а также, распределений их динамических характеристик. На примере одномерного кристалла с парным потенциалом взаимодействия между частицами в форме Леннард-Джонса показана сходимость алгоритма самосогласования, исследована зависимость параметров фронта ударной волны от его скорости.

Данная методика применима для произвольных кристаллических структур металлов, в том числе и для кристаллического алюминия.

Предложена методика выбора параметров расчета электронной структуры с применением псевдопотенциалов в программном пакете Quantum ESPRESSO, выполнен расчет кривых сжатия гранецентрированной кубической (ГЦК) фазы алюминия. По кривым сжатия определены параметры потенциала в форме Леннард-Джонса для алюминия в рамках приближения ближайших соседей. Для ГЦК решетки алюминия выполнен расчет распределения частиц на фронте ударной волны, распространяющейся в направлении [100]. Построены графики распределения скорости, плотности, равнодействующих сил на фронте, зависимость количества частиц во фронте ударной волны от скорости ударной волны.

A. S. BURKATSKIY, YU. B. KUDASOV, D. A. MASLOV,  
O. M. SURDIN, V. N. PAVLOV

*Sarov State Physics and Technical Institute (Branch of the Moscow Engineering  
Physics Institute), Sarov, Russia*

## **MICROSCOPIC MODELLING OF THE SHOCK WAVE FRONT STRUCTURE**

A self-consistent calculation of particles distribution and dynamic properties distributions on a shock wave front procedure was developed. The convergence of the self-consistent algorithm was demonstrated on the one-dimensional crystal with the particle pair interaction potential in the Lennard-Jones form. The dependence of the parameters of the shock wave front on its velocity was investigated.

The present procedure can be used for different crystal structures of metals, including the fcc phase of aluminium.

A method was proposed for selecting parameters for calculating the electronic structure using pseudopotentials in the Quantum ESPRESSO software package, and compression curves for the face-centered cubic (fcc) phase of aluminum were calculated. Using the compression curves, we determined the parameters of the potential in the Lennard-Jones form for aluminum in the framework of the nearest-neighbor approximation. For the fcc aluminum lattice, the particle distribution on the front of the shock wave propagating in the [100] direction was calculated. Plots of the distribution of velocity, density, resultant forces in the front, the dependence of the number of particles in the shock wave front on the speed of the shock wave were constructed.

В работе представлен метод расчета структуры фронта стационарной ударной волны, сопровождающейся одноосным упругим сжатием кристаллического твердого тела. Упругое одноосное сжатие вполне может быть реализовано в жизни, например, в опытах с фемтосекундным лазером [1].

В основе метода расчета лежит итерационная процедура, позволяющая выбрать межчастичные расстояния в кристалле так, чтобы выполнялись макроскопические законы сохранения массы и импульса, регулирующие перенос вещества через фронт ударной волны. В процессе расчёта возникает необходимость определения сил межчастичного взаимодействия. Расчет сил ведется через потенциал парного взаимодействия, который записан в форме Леннард-Джонса. Необходимые параметры потенциала могут быть получены аппроксимацией кривой одноосного сжатия, построенной благодаря серии проведенных квантово-механических расчетов в Quantum ESPRESSO. Программный пакет QE вычисляет электронную структуру методом псевдопотенциалов [2]. Получены зависимости распределения скорости, плотности, равнодействующих сил на фронте, зависимость количества частиц во фронте ударной волны от скорости ударной волны.

#### *Список литературы*

3. Жаховский В. В., Иногамов Н. А. //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2010. Т. 92. №. 8. С. 574-579.
4. Giannozzi P. et al. //Journal of physics: Condensed matter. 2009. Т. 21. №. 39. Pp. 395502.

Д.А. ВАСИЛЬЕВ<sup>1</sup>, И.О. ШАМШИН<sup>2</sup>, В.С. АКСЁНОВ<sup>2,3</sup>,  
Н.М. КУЗНЕЦОВ<sup>2</sup>, С.М. ФРОЛОВ<sup>2,3</sup>, П.А. СТОРОЖЕНКО<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет), Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова  
Российской академии наук, Москва, Россия

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>4</sup>ГНИИХТЭОС, Москва, Россия

## САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ МИКРОКАПЕЛЬ ПГ-2

Исследование самовоспламенения распыла в воздухе микрокапель ПГ-2 (пускового горючего – смесь 13% триэтилалюминия и 87% триэтилборана) выполнено путем визуализации процесса при помощи высокоскоростной съемки. Впрыск горючего в воздух осуществлялся форсункой в импульсном и непрерывном режимах. В первом случае определена задержка самовоспламенения микрокапель ПГ-2 в воздухе при начальной температуре, а во втором случае при наличии дополнительного теплового потока от факела видимой задержки самовоспламенения не зафиксировано.

D.A. VASILEV<sup>1</sup>, I.O. SHAMSHIN<sup>2</sup>, V.S. AKSENOV<sup>2,3</sup>,  
N.M. KUZNETSOV<sup>2</sup>, S.M. FROLOV<sup>2,3</sup>, P.A. STOROZHENKO<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia, <sup>2</sup>N. N. Semenov Federal  
Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, <sup>3</sup>National  
Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia,

<sup>4</sup>GNIICHTEOS, Moscow, Russia

## SELF-IGNITION OF LF-2 MICRODROPLETS

Self-ignition of a spray in air of LF-2 (launching fuel consisting of 13% triethylaluminum and 87% triethylborane) microdroplets is studied using high-speed video recording. The fuel is injected in air in a pulsed and continuous mode. In the first case, the time delay of self-ignition of LF-2 microdroplets is measured, while in the second case, in the presence of heat flux from the flame torch no visible delay in fuel self-ignition is detected.

Триэтилалюминий (ТЭА)  $(C_2H_5)_3Al$  рассматривают как одно из перспективных топлив для систем реактивного движения: он и его растворы в углеводородных растворителях воспламеняются при контакте с воздухом и бурно реагирует с водой. Смесь ТЭА с триэтилбором (ТЭБ)  $(C_2H_5)_3B$  используется в качестве пускового горючего ПГ-2 в ракетной технике. При распылении жидкого ПГ-2 в воздухе наблюдается его самовоспламенение. В сложном химическом процессе превращения исходных компонент горючего в продукты реакции ( $Al_2O_3$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $B_2O_3$ ), в котором реагирующие компоненты участвуют во многих гетерогенных и газофазных элементарных реакциях, можно выделить две стадии — стадию самовоспламенения и стадию быстрого горения [1]. Стадией самовоспламенения в основном и определяется время всего

процесса, поэтому исследование процесса самовоспламенения имеет большое прикладное значение. В настоящей работе самовоспламенение распыла микрокапель ПГ-2 исследуется при помощи высокоскоростной видео съемки с целью определения задержки самовоспламенения и оценки периода индукции первичной реакции. Горючее ПГ-2 распылялось в воздушную среду топливной форсункой, работающей в двух режимах: импульсном и непрерывном. Предполагалось, что момент воспламенения должен произойти много позже быстрого ввода капель горючего в воздух и что капли успеют затормозиться до их воспламенения так, что воспламенение капель должно происходить в практически неподвижной и пространственно-однородной смеси. В эксперименте скорость вылета капель из форсунки составила  $\sim 20$  м/с, длина пролета капель до остановки 30-40 см, а время торможения – около 20 мс. Воспламенение смеси наблюдалось с задержкой 4-5 мс и происходило в следе струи распыла в облаке микрокапель. При непрерывном истечении топлива из форсунки область горения со временем приближалась к устью струи, т.е. видимая область задержки воспламенения отсутствовала.

Результаты экспериментов имеют прямое отношение к решению обратной кинетической задачи – определению энергии активации реакции инициирования химического превращения горючего. Важно отметить, что знание кинетических параметров первичной реакции позволит решить и другую задачу – задачу о стационарном горении факела в открытом воздушном пространстве при непрерывной подаче капельного горючего через форсунку. В этом случае капли воспламеняются вследствие их обтекания высокотемпературным потоком воздуха. Задержка воспламенения капли определяется временем вхождения капли в зону светящегося факела. Экспериментально оценить эту величину получится, если удастся разглядеть темное пятно перед факелом на выходе из форсунки и оценить его продольный размер.

Работа выполнена за счет субсидии ФИЦ ХФ РАН на выполнение госзадания по теме 0082-2016-0011 (AAAA-A17-117040610346-5).

*Список литературы*

1. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А., Шамшин И. О. // Горение и взрыв. 2019. Т.12, №3, С.91-97 (DOI: 10.30826/CE19120310).

П.А. ВЛАСОВ<sup>1</sup>, В.Н. СМИРНОВ<sup>1</sup>, О.Б. РЯБИКОВ<sup>1</sup>,  
Д.И. МИХАЙЛОВ<sup>1</sup>, В.А. ПОЛЯНСКИЙ<sup>2</sup>, И.Л. ПАНКРАТЬЕВА<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова  
Российской Академии наук, Москва, Россия

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва,  
Россия

## **ХИМИЧЕСКАЯ ИОНИЗАЦИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ УГЛЕВОДОРОДОВ В ОТРАЖЕННЫХ УДАРНЫХ ВОЛНАХ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ И КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Проведены экспериментальные измерения временных зависимостей токов смещения и полных токов (проводимости и смещения) на цилиндрические изолированные и проводящие зонды, находящиеся под отрицательным потенциалом – 9 В, а также сигналов хемилюминесцентного излучения электронно-возбужденных гидроксильных радикалов  $\text{OH}^*$  ( $\lambda = 310 \pm 4$  нм). Из этих измерений получены профили концентрации свободных электронов и определены задержки воспламенения (по максимуму токов смещения и хемилюминесцентного излучения  $\text{OH}^*$ ). Построены температурные зависимости задержек воспламенения и выхода электронов на один атом углерода для различных исследованных смесей  $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$ , а также ацетона и *n*-гексана с кислородом. Проведены детальные кинетические расчеты профилей свободных электронов и их сравнение с экспериментально измеренными временными зависимостями для уточнения механизма химической ионизации.

P.A. VLASOV<sup>1</sup>, V.N. SMIRNOV<sup>1</sup>, O.B. RYABIKOV<sup>1</sup>,  
D.I. MIKHAILOV<sup>1</sup>, V.A. POLYANSKIY<sup>2</sup>, I.L. PANKRATYEVA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences. Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

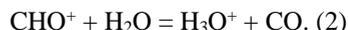
## **CHEMICAL IONIZATION DURING HYDROCARBON OXIDATION BEHIND REFLECTED SHOCK WAVES: EXPERIMENTS AND KINETIC SIMULATION**

Time profiles of the displacement currents and the total currents (conductivity and displacement) on the cylindrical isolated and conducting probes under a negative potential of – 9 V, as well as chemiluminescent radiation signals of electronically excited  $\text{OH}^*$  radicals ( $\lambda = 310 \pm 4$  nm) were measured. Based on these measurements, free electron concentration profiles were obtained and ignition delays were determined (based on the maximum displacement currents and chemiluminescent emission of  $\text{OH}^*$  radicals). Temperature dependences of the ignition delays and electron yield per carbon atom were constructed for various investigated mixtures:  $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$ , as well as acetone and *n*-hexane with oxygen. Detailed kinetic calculations of free electron profiles and their comparison with the experimentally measured time dependencies were performed to clarify the mechanism of chemical ionization.

Хемионизация представляет собой процесс, в котором сталкивающиеся частицы претерпевают химическую перестройку, которая высвобождает энергию достаточную для ионизации одного из продуктов. Реакцией образования первичных ионов и свободных электронов является реакция



за которой следует быстрая реакция перезарядки



Ион  $\text{H}_3\text{O}^+$  является доминирующим ионом, как в бедных, так и в слабообогатенных углеводородных пламенах. Ион  $\text{C}_3\text{H}_3^+$  становится доминирующим в очень богатых и коптящих пламенах.

Получены новые экспериментальные данные по химической ионизации при окислении различных смесей *n*-гексана и ацетона с кислородом и аргоном в широком интервале температур при давлении около 1 бар. Разработана единая детальная кинетическая модель процесса химической ионизации, позволяющая количественно описать результаты экспериментов по самовоспламенению смесей метана, ацетилен, *n*-гексана и ацетона с кислородом. Предсказательные возможности кинетической модели были проверены путем сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными. Получено хорошее согласие результатов кинетических расчетов с результатами экспериментов. Экспериментально показано, что процесс химической ионизации протекает только при наличии в реакционной смеси углеводородов и кислорода. Согласно нашим экспериментам, без кислорода химическая ионизация экспериментально не наблюдается, хотя в принципе возможно образование ионов  $\text{C}_3\text{H}_3^+$  и свободных электронов, но в гораздо меньших количествах (ниже предела регистрации), чем при наличии кислорода в реагирующей смеси. Учитывая, что пик тока химической ионизации коррелирует с пиком хемилюминесценции, электрические зондовые измерения могут быть использованы как простой и надежный метод измерения времени задержки воспламенения смесей различных углеводородов с кислородом.

Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, В.А. ВЫСОЦКИЙ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ АЛЮМИНИЯ В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

Методом молекулярной динамики исследовалось применение многочастичного потенциала взаимодействия погруженного атома EAM алюминия с целью изучения его теплофизических и транспортных свойств, структуры и фазового состояния. Рассчитаны свойства Al вдоль изотерм для температур от 300 К до 1500 К. Проанализирована структура и фазовое состояние Al при повышенных давлении и температуре. Проведена оценка самодиффузии атомов Al вблизи линии плавления в зависимости от давления.

Yu.A. BOGDANOVA, I.V. MAKLASHOVA, V.A. VYSOTSKY

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **MODELING OF THERMAL AND TRANSPORT PROPERTIES OF ALUMINUM AT HIGH PRESSURES**

We studied the application of the embedded atom method (EAM) potential for aluminum to study its thermophysical and transport properties, structure, and phase state using the molecular dynamics method. The properties of Al along isotherms were calculated for temperatures from 300 K to 1500 K. The structure and phase state of Al at high pressure and temperature were analyzed. The self-diffusion of Al atoms near the melting line is estimated as a function of pressure.

Целью настоящей работы является определение теплофизических и транспортных свойств алюминия с использованием модели погруженного атома EAM [1], а также исследование фазового состояния алюминия в широкой области изменения давления температуры и давления, охватывающей области твердой и жидкой фаз. Верифицированы параметры межатомного потенциала взаимодействия на основе экспериментальных данных. Показано, что параметры используемого потенциала достоверно воспроизводят свойства Al в широкой области изменения давления и температуры, включая область плавления.

Моделирование свойств алюминия при изотермическом сжатии в данной работе проводилось с помощью программного пакета LAMMPS [2] в каноническом изотермо-изобарическом *NPT*-ансамбле. В начальном состоянии структура решётки алюминия - кубическая гранцентрированная, период решётки 4.050 Å. Элементарная ячейка кристалла алюминия содержала 4 атома и состояла из 1372 атомов алюминия, использовались периодические граничные условия по всем трем пространственным направлениям. Шаг по времени составлял 0,1 фс, общее время расчета – 200 000 шагов, т.е. 20 пс.

Расчеты теплофизических свойств Al (плотность, энергия, коллективная динамика атомов) проведены в сериях численных экспериментов:

1. расчет изобары 1000 бар в диапазоне температур от 300 до 1500 К;
2. расчет изотермы 1500 К в диапазоне давлений от 1 ГПа до 9 ГПа.

На основе результатов моделирования получены зависимости плотности от давления вдоль заданных изотерм, а также функция радиального распределения (ФРР) и среднеквадратического отклонения (СКО) атома в расчетной ячейке алюминия при различных значениях заданного давления и температуры. Фазовое состояние и область плавления кристалла алюминия идентифицировались при анализе расчетной функции ФРР и СКО атомов кристалла.

Коэффициент самодиффузии. рассчитан на основе соотношения Эйнштейна – Смолуховского [3], связывающее подвижность молекулы с коэффициентом диффузии и температурой. В случае трехмерной диффузии производная СКО по времени пропорциональна коэффициенту диффузии. По результатам МД расчетов получено, что на изотерме с возрастанием давления диффузия затрудняется.

Сопоставление результатов, полученных методом МД моделирования в данной работе, с известными теоретическими и экспериментальными данными показывает их взаимную непротиворечивость.

#### *Список литературы*

1. K. W. Jacobsen, J. K. Norkov, and M. J. Puska // Phys. Rev. B 35, 7423
2. Sandia National Labs [сайт]. URL:[http://lammps.sandia.gov/doc/Section\\_intro.html](http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html)
3. М.Смолуховский. Брауновское молекулярное движение под действием внешних сил и его связь с обобщенным уравнением диффузии. В кн.: Брауновское движение. А.Эйнштейн, П.Смолуховский /под ред. Б.И.Давыдова/. Л., ОНТИ, 1936, с. 319-331.

М.А. ГОЛЕНИЩЕВ<sup>1</sup>, М.Е. СТЕПАНОВ<sup>1</sup>,  
А.В. КАРАБУЛИН<sup>1,2,3</sup>, В.И. МАТЮШЕНКО<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ*

<sup>3</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва*

<sup>4</sup>*Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук в г. Черноголовке*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ НИКЕЛЕВЫХ НАНОПРОВОЛОК И НАНОШАРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ**

Работа посвящена численному моделированию процессов перемагничивания ансамблей наночастиц никеля полученных абляцией металлической мишени в сверхтекучем гелии. Характерной особенностью изучаемых наносистем является наличие в них частиц двух видов: тонких проволок ( $d \approx 4$  нм) и шарообразных частиц различного диаметра (8–500 нм). Адекватность модели была проверена путем сравнения результатов расчета с данными СКВИД-магнитометрии.

М.А. GOLENISHCHEV<sup>1</sup>, М.Е. STEPANOV<sup>1</sup>, А.В. KARABULIN<sup>1,2,3</sup>,  
V.I. MATYUSHENKO<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Problems of Chemical Physics, RAS, Chernogolovka*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*Joint Institute for High Temperatures (RAS), Moscow*

<sup>4</sup>*Chernogolovka Branch of the N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics  
(RAS), Chernogolovka*

## **NUMERICAL SIMULATION OF MAGNETIZING PROCESSES OF NIKEL NANOWIRES AND NANOBALLS GROWN IN SUPERFLUID HELIUM**

The present work is dedicated to numerical modeling of magnetization processes of Ni nanoparticles ensembles acquired by pulsed laser ablation of metallic target in He II. The characteristic feature of the systems under study is their heterogeneous composition. One fraction of particles is represented by thin nanowires (with diameters of 4 nm strictly) meanwhile the other corresponds to a ball-shaped particles that can obtain diameters from 8 to 500 nm. A relevance of the model was verified by comparing its calculation results with SQUID-magnetometry data.

Работа посвящена моделированию процессов перемагничивания ансамблей никелевых наночастиц, полученных лазерной абляцией в сверхтекучем гелии [1]. Электронная микроскопия свидетельствует о наличии в образцах частиц

двух форм: тонкие проволоки ( $d \approx 4$  нм), а также шары различных диаметров (10–500 нм).

Магнитометрия образцов при комнатной температуре показала, что, в зависимости от концентрации наночастиц той или иной формы, возможно получение петель гистерезиса двух различных форм: прямоугольной (рис. 1а) – характерной для нанопроволок и S-образной (рис. 1б) – характерной, соответственно, для шаров.

При моделировании процессов перемагничивания исследуемых ансамблей мы считали их состоящими из большого числа невзаимодействующих магнитных частиц. Результирующая петля гистерезиса, в таком случае, является суммой индивидуальных петель всех частиц системы. Для проволок форма индивидуальной петли определялась их длиной и ориентацией относительно направления внешнего магнитного поля. В случае шарообразных частиц параметром, определяющим форму индивидуальной петли, считали их радиус. Примеры расчетов результирующих петель гистерезиса для нанопроволок и шаров приведен на рис.1 (сплошные линии).

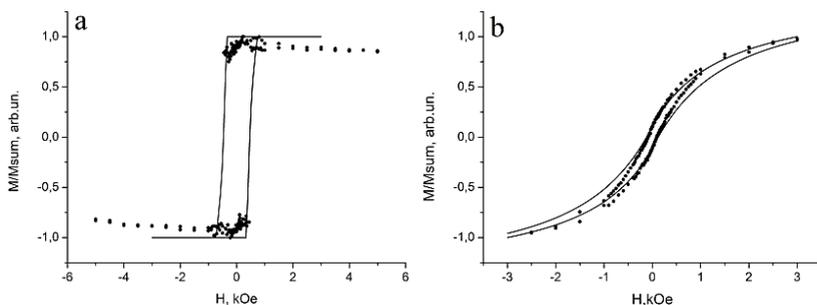


Рис. 1. «точки» – нормированные данные магнитометрии наночастиц никеля с подавляющим влиянием (а) нанопроволок и (б) шарообразных частиц (в обоих случаях внешнее поле параллельно плоскости подложки); «линии» – результаты соответствующих расчетов.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 18-19-00620).

#### Список литературы

1. Gordon E. B., Karabulin A. V., Matyushenko V. I., Sizov V. D., and Khodos I. I. // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2011, vol. 112, № 6, P. 1061–1070.

С.В. ГОРКУНОВ

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ЗАТУХАНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В КАНАЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ПРЕПЯТСТВИЯМИ**

Численно исследовано затухание ударной волны в каналах с препятствиями. В случае сильных ударных волн получены приближенные аналитические соотношения, связывающие скорость волны с параметрами газа. Показано, что в случае сильного загромождения канала ударная волна распространяться не может.

S.V. GORKUNOV

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **SHOCK WAVE ATTENUATION IN A CHANNEL WITH PERIODIC OBSTACLES**

The shock wave attenuation in channels with obstacles was numerically investigated. In the case of strong shock waves, approximate analytical relationships was obtained that relate the wave velocity to gas parameters. It was shown that in the case of a strong blockage of the channel, the shock wave couldn't propagate.

Рассматривается длинный канал прямоугольного сечения. Половина канала заполнена периодически расположенными препятствиями. По гладкой половине распространяется ударная волна, переходящая в заполненную половину (см. рис. 1).

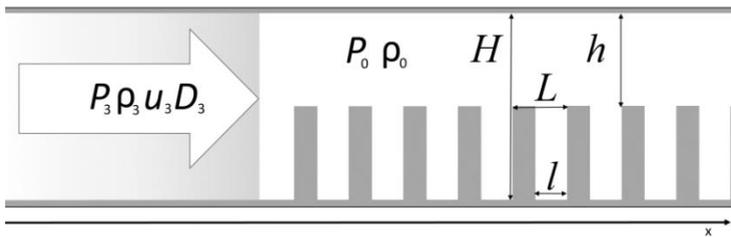


Рис. 1. Схема канала

Ранее в [1] показано, что в таких условиях ударная волна в загроможденном канале может распространяться как волна со структурой (зоной релаксации). Полученные приближенные аналитические соотношения, связывающие параметры газа со скоростью ударной волны предсказывают существования различных режимов течения в канале [2].

Проведенные численные расчеты по методике [3] показали, что в загроможденном канале может распространяться волна со структурой,

практически не затухая (см. рис. 2.). В случаях сильно загромождённых каналах лидирующая волна не образуется, возмущения распространяются с дозвуковой скоростью.

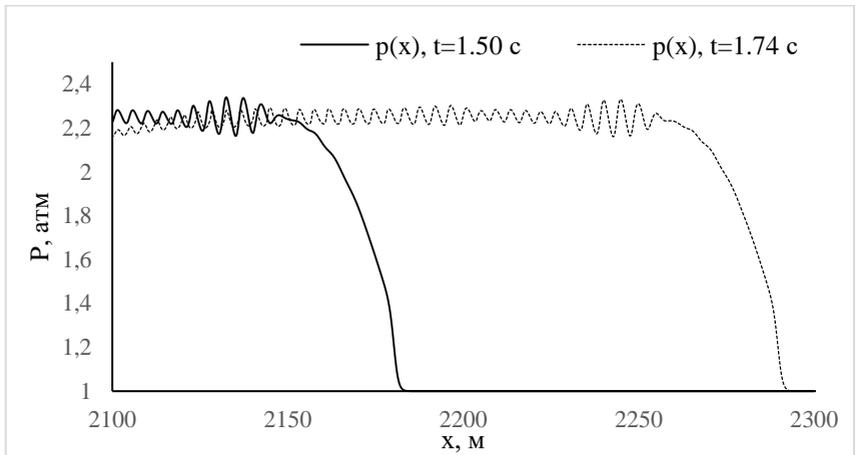


Рис. 2. Распределение давления вдоль канала для двух моментов времени

*Список литературы*

1. Shargatov V.A., Chugainova A.P., Gorkunov S. V. and. Sumskoj S. I. //Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2018. V. 300. P.216-228.
2. Chuganova A.P., Shargatov V.A., Gorkunov S.V., Sumskoj S.I. // AIP Conference Proceedings. 2018. V. 2025, 080002.
3. Shargatov V.A., Pecherkin A.S., Sofin A.S., Agapov A.A., Gorkunov S.V., Sumskoj S.I., Bogdanova Y.A., Karabulin A.V. // Journal of Physics: Conference Series. 2018 V. 1099. 012014.

С.В. НЕСКОРОМНЫЙ<sup>1</sup>, В.Г. ВИНОГРАДОВ<sup>1</sup>, С.О. АГЕЕВ<sup>1</sup>,  
Е.Л. СТРИЖАКОВ<sup>1</sup>, Е.Г. ГРИГОРЬЕВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Донской государственной технической университет (ДГТУ), Ростов-на-Дону, Россия

<sup>2</sup>Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения  
им. А.Г. Мерджанова РАН (ИСМАН), Черноголовка, Россия

## ВЫСОКОВОЛЬТНАЯ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНАЯ КОНСОЛИДАЦИЯ КАРБИДА ГАФНИЯ

Экспериментально исследован процесс высоковольтной электроимпульсной консолидации порошка карбида гафния. Установлен критерий, определяющий область технологических параметров для создания плотных консолидированных материалов. Приведены результаты экспериментального исследования микроструктуры полученного карбида гафния.

S.V. NESCOROMNIY<sup>1</sup>, V.G. VINOGRADOV<sup>1</sup>, S.O. AGEEV<sup>1</sup>,  
E.L. STRIZHAKOV<sup>1</sup>, E.G. GRIGORIEV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Don State Technical University (DSTU), Rostov-on-Don, Russia

<sup>2</sup>Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science,  
Russian Academy of Sciences (ISMAN), Chernogolovka, Russia

## HIGH VOLTAGE ELECTRIC PULSE CONSOLIDATION OF HAFNIUM CARBIDE

The process of high-voltage electropulse consolidation of hafnium carbide powder was experimentally studied. A criterion is established that defines the range of technological parameters for creating dense consolidated materials. The results of an experimental study of the microstructure of the obtained hafnium carbide are presented.

Метод высоковольтной электроимпульсной консолидации порошков высокотемпературных керамических материалов на основе карбидов переходных металлов позволяет локализовать высокую плотность энергии электромагнитного импульса в областях межчастичных контактов. Из-за интенсивного нагрева материал в зонах межчастичных контактов становится более пластичным, его вязкость снижается. Это способствует интенсивной пластической деформации материала. Сочетание короткого (длительностью  $\tau \sim 10^{-3} \div 10^{-4}$  с) электрического импульса (с амплитудой плотности тока  $j \sim 10^9$  А/м<sup>2</sup>) и одновременного воздействия механического давления ( $P \sim 10^8$  Па) вызывает высокоскоростную деформацию порошкового материала, локализованную в области контакта, которая приводит к формированию плотной структуры консолидированного материала. Существует ограничение на амплитуду плотности тока в зоне межчастичного контакта, превышение которой приводит к эффекту «электрического взрыва контакта». Теоретический анализ процессов, протекающих в контактной области [1] позволил установить

критическое значение плотности тока  $j^*$ , при  $j \geq j^*$  происходит «электрический взрыв контакта»:

$$j^* = \sqrt{\frac{2\xi\sigma}{\rho h}} T_b^2 \quad (1)$$

где:  $\sigma$  – постоянная Стефана – Больцмана;  $\xi \leq 1$ ;  $T_b$  – температура кипения (потеря проводимости) материала,  $h$  – размер контактной области с температурой  $T_b$ .

Экспериментально показана возможность получения компактных образцов методом высоковольтной электроимпульсной консолидации порошков карбида гафния. Проведены электронно-микроскопические исследования структуры полученных образцов карбида гафния. Пример (РЭМ) микроструктуры образца карбида гафния, полученного методом высоковольтной электроимпульсной консолидации, приведен на рис. 1. На рис. 2 приведен микроанализ распределения элементов Hf и C в образце, полученном методом высоковольтной консолидации.

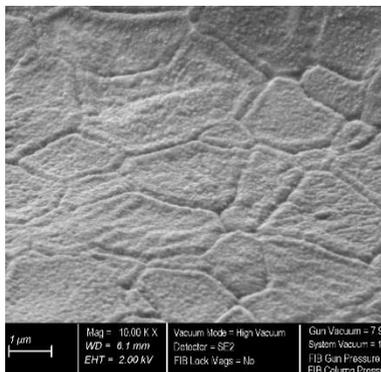


Рис. 1. Микроструктура карбида гафния, консолидированного высоковольтным методом.

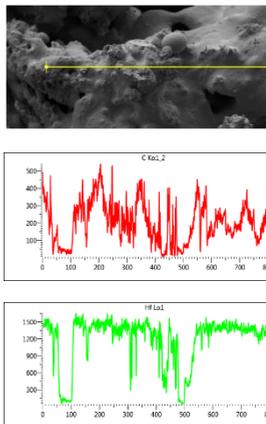


Рис. 2. Микроанализ распределения Hf и C на изломе образца.

#### Список литературы

1. Grigoryev E.G., Olevsky E.A. // Scripta Materialia, 2012, Vol. 66, Issue 9, p. 662-665.

Л.И. ГРИШИН<sup>1</sup>, А.Ю. ДОЛГОБОРОДОВ<sup>1</sup>, В.Г. КИРИЛЕНКО<sup>2</sup>, М.А. БРАЖНИКОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва,

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики  
им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, Москва

## ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ И ГОРЕНИЯ НАНОТЕРМИТОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ

В работе исследованы характеристики инициирования и распространения реакции горения в нанотермитах Al/CuO Al/Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> при воздействии лазерного импульса. Определены зависимости скорости горения и энергии инициирующего лазерного импульса от плотности для нанотермита Al/CuO. Выдвинуты предположения о механизме реакции при инициировании нанотермитов лазерным излучением.

L.I. GRISHIN<sup>1</sup>, A.YU. DOLGOBORODOV<sup>1,2</sup>, V.G. KIRILENKO<sup>2</sup>,  
M.A. BRAZHNIKOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Moscow,

<sup>2</sup>N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Moscow

## CHARACTERISTICS OF LASER INITIATION AND BURNING OF NANOTEMITES BASED ON ALUMINUM

In the present work, there were studied the characteristics of the ignition and flame propagation in nanothermites caused by laser pulse radiation. Al/CuO Al/Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, nanothermites manufactured with the use of ultrasonic mixer were tested. The dependences of the burning rate and the energy of the initiating laser pulse on the density were determined for Al / CuO nanothermite. Assumptions have been advanced regarding the reaction mechanism upon the initiation of nanothermites by laser radiation.

Исследовано воспламенение наноразмерных смесей алюминия с оксидами меди и висмута лазерным импульсом. Термитные смеси на основе наноразмерных порошков Al + CuO и Al + Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с соотношением близком к стехиометрическому готовились по специальной технологии ультразвуковым перемешиванием исходных нано порошков Al (размер частиц 100 нм), CuO (80 нм) и Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (200 нм).

В качестве источника излучения использовался лазер с длиной волны 808 нм. Плотность мощности излучения на поверхности образцов составляла 310 Вт/см<sup>2</sup> при облучаемой площади 1,1 мм<sup>2</sup>, длительность импульса изменялась от 1 до 10 мс. В опытах двухканальным пирометром регистрировалось появление свечения продуктов реакции с облучаемой и тыльной стороны образцов диаметром 6 мм и толщиной 4÷9 мм.

Определены задержки инициирования  $t_{ign}$ , минимальная энергия инициирования  $E_{cr}$  и средняя скорость горения в зависимости от плотности и состава образцов. Изучено влияние старения составов на чувствительность к воздействию лазерного импульса. В частности, для свежеприготовленного состава Al/CuO (19/81)  $E_{cr} = 5$  мДж, а при сроках хранения более 2 недель достигала значения  $E_{cr} = 11$  мДж при  $t_{ign} = 4$  мс, и в дальнейшем не изменялась. Для Al/Vi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Фторопласт 42 (14/82/4)  $E_{cr} = 6,5$  мДж,  $t_{ign} = 2,5$  мс. Также получены зависимости скорости горения и энергии инициирования от пористости образцов. На основании полученных результатов выдвинуты предположения о механизме протекания реакции при воздействии лазерного излучения.

С.П. ЗОТКИН, А.А. СЕЛЕЗЕНЕВ

*Саровский физико-технический институт – филиал Национального исследовательского ядерного университета МИФИ, Саров, Россия*

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУГАСНОГО ДЕЙСТВИЯ ЗАРЯДОВ В МОДЕЛЬНЫХ ОПЫТАХ**

Проведена расчетная оценка работоспособности (фугасности) различных взрывчатых веществ, таких как тротил, гексоген, пентаэритриттетранитрат, октоген и гексанитростильбен с помощью систем автоматического проектирования. Метод расчётной оценки фугасности основывается на численном моделировании взрыва заряда ВВ в свинцовой бомбе (проба Траутцля). В процессе работы с помощью методов компьютерного моделирования производились исследования работоспособности заряда ВВ в свинцовой бомбе (проба Траутцля) и исследования максимального избыточного давления заряда ВВ в осколочно-фугасных зарядах цилиндрической и сферической формы. В результате исследования построены модели свинцовой бомбы (проба Траутцля) в различных программных комплексах. Методами компьютерного моделирования были построены модели срабатывания осколочно-фугасных зарядов.

S.P. ZOTKIN, A.A. SELEZENEV

*Sarov Physical & Technical Institute – National Research Nuclear University MEPHI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **USE OF MATHEMATICAL MODELING METHODS FOR DETERMINING THE EFFECTIVE ACTION OF CHARGES IN MODEL EXPERIENCES**

The estimated performance (explosiveness) of various explosives, such as trotyl, hexogen, pentaerythritoltetranitrate, octogen and hexanitrostilbene, using automatic design systems, was calculated. The method for calculating the explosive charge is based on numerical simulation of the explosion of an explosive charge in a lead bomb (Trautzl test). In the course of work, using the computer simulation methods, studies were made of the working capacity of an explosive charge in a lead bomb (Trautzl test) and the study of the maximum excess pressure explosive charge in high-explosive fragmentation charges of a cylindrical and spherical shape. As a result, of the study, models of a lead bomb (Trautzl test) were constructed in various software systems. Computer simulation methods were used to construct models for the operation of high-explosive fragmentation charges.

Свинцовая бомба из чистого рафинированного свинца представляет собой массивный цилиндр, высота и диаметр которого 200 мм, с несквозным каналом, расположенным по оси цилиндра глубиной 125 мм и диаметром 25 мм. Метод определения работоспособности в свинцовой бомбе основан на определении расширения канала бомбы продуктами взрыва заряда ВВ определенной массы и размеров и распространяется на ВВ с критическим диаметром детонации не

более 20 мм. В рамках исследования, необходимо было построить с помощью программных комплексов (ПК) математические модели срабатывания заряда ВВ в свинцовой бомбе, для нахождения изменения объема канала полученного взрывом заряда ВВ, и первоначального объема канала, с помощью которых нужно определить относительную работоспособность ВВ. Задача эквивалентная натурному исследованию работоспособности зарядов ВВ. С применением программного комплекса была построена осесимметричная двумерная модель срабатывания свинцовой бомбы и получен результат расчётного определения работоспособности ВВ. Свинцовая бомба помещается в воздушную среду при нормальных условиях. С применением ПК были построены осесимметричные задачи на расчет цилиндрического и сферического осколочно-фугасных снарядов (рисунок 1) на расстоянии 500 мм от стенки (условия вытекания веществ) в области, заполненной воздухом размером  $500 \cdot 500$  мм. Измерение давления производится на расстоянии до 300 мм от снаряда.

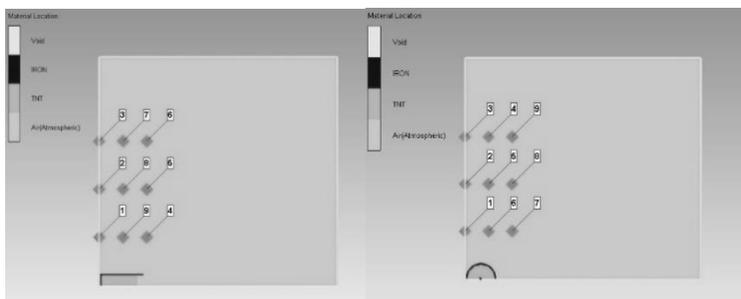


Рис. 1. Постановка задачи исследования динамики срабатывания цилиндрического и сферического осколочно-фугасного снаряда методами математического моделирования в двумерной осесимметричной модели.

#### *Список литературы*

1. Селиванов В.В. Средства поражения и боеприпасы. – М.: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 977 с.
2. Harris P., Avrami L. Some Physics of the Gruneisen Parameter. – Technical report, 1972. – 301 с.

Вас.С. ИВАНОВ<sup>1,2</sup>, Р.Р. ТУХВАТУЛЛИНА<sup>2</sup>, В.С. ИВАНОВ<sup>2</sup>,  
С.М. ФРОЛОВ<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия,

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова  
Российской академии наук, Москва

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В КОРОБКЕ ПЕРЕДАЧ МЕТОДОМ СГЛАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ**

Разработана вычислительная программа для трехмерного расчета течений вязкой несжимаемой жидкости методом сглаженных частиц в условиях сложной геометрии с подвижными элементами. Для проверки численного алгоритма проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными и с данными конечно-объемных расчетов других авторов по крутящему моменту и скорости жидкости в зубчатой коробке передач с шестернями, частично погруженными в моторное масло. Получено удовлетворительное количественное и качественное согласие результатов расчетов и измерений.

Vas.S. IVANOV<sup>1,2</sup>, R.R. TUKHVATULLINA<sup>2</sup>, V.S. IVANOV<sup>2</sup>,  
S.M. FROLOV<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),

<sup>2</sup>Moscow, Russia, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian  
Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

## **MATHEMATICAL MODELING OF THE FLOW OF INCOMPRESSIBLE LIQUID IN A GEAR BOX BY THE SPH METHOD**

A computer code for three-dimensional simulation of the flows of viscous incompressible liquid by the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method in complex geometries with moving parts has been developed. To validate the numerical algorithm, the results of numerical simulations are compared with experimental data, as well as with the computational results obtained by other authors by the finite volume method, in terms of the mechanical torque and liquid velocity field for the problem of the gear box operation with rotating wheels partly immersed in motor oil. Satisfactory quantitative and qualitative agreement between the results has been obtained.

В настоящее время при решении задач гидродинамики вязких несжимаемых и сжимаемых течений в условиях сложной геометрии с подвижными элементами предпочтение часто отдают бессеточным численным алгоритмам, основанным на методе сглаженных частиц (МСЧ) [1]. Нами разработан собственный параллельный алгоритм МСЧ, использующий графические процессоры (GPU) для решения задач газовой динамики с элементами, затрудняющими применение обычных сеточных методов (очень узкие щели,

вращающиеся и контактирующие диски и т. д.). Математическая модель основана на уравнениях гидродинамики, описывающих движение вязкой несжимаемой жидкости. Разностный аналог дифференциальных уравнений сохранения массы и количества движения имеет следующий вид:

$$\rho = const$$

$$\frac{dv_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left( \frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + P_{ij} \right) \nabla W_{ij} + F_i,$$

$$P = \rho g (h_{ref} - h)$$

где  $\rho$  – плотность,  $v_i$  – скорость  $i$ -той частицы,  $m_j$  – масса  $j$ -той частицы,  $p$  – давление,  $P_{ij}$  – член, моделирующий искусственную вязкость, и  $h$  – высота столба жидкости.

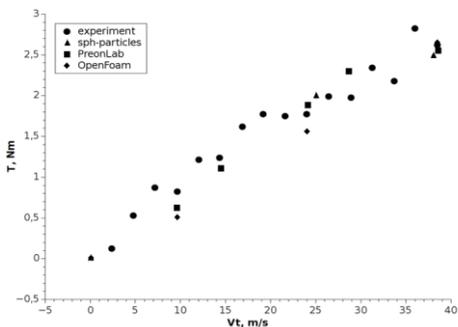


Рис. 1 Результаты численных расчетов крутящего момента системы

Для проверки зитма нами проведены расчеты ящего момента и поля ости жидкости в зубчатой бке передач с шестернями, ично погруженными в рное масло. Расчеты едены для различных режимов ы зубчатой передачи эйна скорость вращения от 0 м/с до 8 м/с). На Рис. 1 представлено сравнение крутящего момента системы с экспериментальными данными, а также с результатами

других авторов [2]. Из Рис. 1 видно удовлетворительное количественное и качественное согласие результатов наших расчетов с экспериментальными данными и расчетами других авторов. Расчетные поля скорости жидкости после выхода системы на квазистационарный режим также удовлетворительно согласуются с результатами расчетов по методу конечных объемов [2].

Список литературы

1. Gingold R.A., Monaghan J.J. // Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 1977, № 181, 375
2. Concli, F., & Gorla, C. // Tribology International, 2016, 103, 58–68.

А.В. ИВЧЕНКО

Самарский Национальный Исследовательский Университет, Самара, Россия

## ТЕРМОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДНЫХ СИСТЕМ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРЯДА С НЕПОДВИЖНЫМ И ДВИЖУЩИМСЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ БАРЬЕРОМ

В работе приведены результаты термографической регистрации температурных полей электродных систем поверхностных разрядов, возбуждаемых на неподвижных и движущихся диэлектрических слоях. Показана возможность обнаружения деструктивных процессов приводящих к нарушению работоспособности устройств.

A.V. IVCHENKO

Samara National Research University, Samara, Russia

## THE THERMOGRAPHIC STUDY OF THE SURFACE DISCHARGE ELECTRODE SYSTEMS WITH A FIXED AND MOVING DIELECTRIC BARRIER

The paper presents the thermographic investigation results of temperature fields on electrode systems of surface discharges excited on a fixed and moving dielectric layers. The detection possibility of the destructive processes leading to a malfunction of these devices is shown.

В настоящее время устройства на основе поверхностного разряда [1, 2] находят все большее применение в технике и используются в качестве плазменных электродов ТЕА-лазеров, высоковольтных коммутаторов, а также плазмохимических генераторов для обработки материалов и сред.

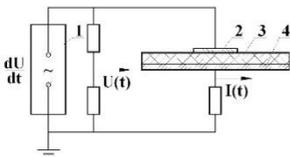


Рис. 1. Электродная система для возбуждения НПР на стационарной диэлектрической подложке:

1-высоковольтный блок питания; 2-разрядный электрод; 3-диэлектрический барьер 4 –экран

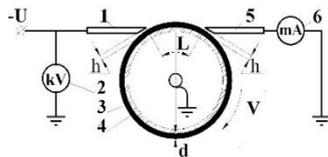


Рис. 2. Электродная система для возбуждения ОПР на движущемся диэлектрическом слое: 1 – катод; 2 – киловольтметр С-197; 3 – электрод-ротор; 4 – диэлектрический барьер; 5 – анод; 6- амперметр.  $V=1-10$  м/с,  $d \approx 1$  мм,  $h < 0.5$  мм

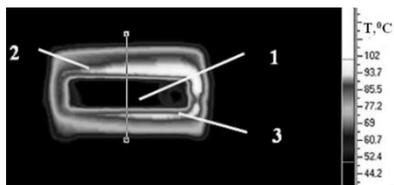


Рис.3 Термограмма рабочей поверхности электродной системы с неподвижным диэлектрическим барьером: 1-разрядный электрод; 2-диэлектрик; 3-зона горения разряда

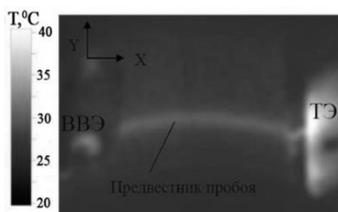


Рис.4. Развитие процесса искрового пробоя в электродной системе ОПР: ВВЭ - высоковольтный электрод (катод); ТТЭ –токосъемный электрод (анод)

Одним из методов контроля газоразрядных устройств может стать ИК-термография [3], позволяющая не только бесконтактно регистрировать температурные поля электродных систем, но и оценивать распределение плотности мощности выделяющейся энергии в процессе разряда.

В работе представлены результаты термографической съемки систем возбуждения (рис. 1, 2) незавершенного поверхностного разряда (НПР) [4], формируемого на неподвижном диэлектрическом барьере и однородного поверхностного разряда (ОПР), получаемого на движущейся диэлектрической подложке [5].

Термограммы на рис. 3, 4 демонстрируют уровень нагрева элементов электродных систем и позволяют обнаружить предвестники процессов нарушения электрической прочности межэлектродного промежутка L (рис. 4).

Полученные результаты подтверждают эффективность ИК термографии при исследовании и диагностике газоразрядных процессов.

#### Список литературы

1. Журавлев О.А., Некрасов В.В., Шорин В.П. Исследование процессов формирования плазменных электродов импульсных и импульсно-периодических  $\text{CO}_2$ -лазеров атмосферного давления. Самара: НПО "Импульс", 1997.140с.
2. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том 2. / под ред. академика В.Е. Фортова. М.: Наука, 2000. 634с.
3. Вавилов В.П. Инфракрасная термография и тепловой контроль. М.: ИД Спектр, 2009. 544с.
4. Калинин А.В., Козлов М.В., Панюшкин В.В. // Известия АН: Энергетика, 1993. №4. С.45-51.

5. О.А. Журавлев, А.В. Ивченко, И.А. Бакулин, А.Ю. Стрельников. Барьерная корона постоянного тока: процессы формирования и примеры применения. Самара: Самарск. Гос. Аэрокосмич. Ун-т, 2010. 184с.

М.А. КАДАТСКИЙ, К.В. ХИЩЕНКО

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ УДАРНЫХ АДИАБАТ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ МЕТАЛЛОВ**

Представлены результаты расчётов ударных адиабат пористых образцов алюминия, железа, меди и молибдена. Расчёты проведены по моделям Томаса–Ферми и Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионной подсистемы по моделям идеального газа Больцмана и заряженных твёрдых сфер в диапазоне давлений от 10 до  $10^7$  ГПа. Приведено сравнение результатов расчётов с доступными экспериментальными данными и с результатами расчётов по другим моделям.

M.A. KADATSKIY, K.V. KHISHCHENKO

*Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia*

## **QUANTUM-STATISTICAL CALCULATION OF HUGONIOTS OF POROUS METALLIC SAMPLES**

The results of calculations of the Hugoniots of porous samples of aluminum, iron, copper and molybdenum are presented. The calculations are carried out by the Thomas–Fermi and the Hartree–Fock–Slater models with taking into account the ionic subsystem by the ideal Boltzmann gas and the charged hard spheres models in the pressure range from 10 to  $10^7$  GPa. The comparison of the calculation results with the available experimental data and with the calculation results of other models is given.

Исследование ударно-волновых свойств является удобным способом получения знаний об уравнении состояния различных типов веществ. Применение законов сохранения для описания изменения состояния вещества во фронте ударной волны позволяет получить связь между плотностью  $\rho_0$ , давлением  $P_0$  и внутренней энергией  $E_0$  в исходном состоянии, и советующими параметрами  $\rho$ ,  $P$  и  $E$  за фронтом ударной волны с помощью соотношения Гюгоню  $E - E_0 = 0.5(P + P_0)(1/\rho_0 - 1/\rho)$ .

Для построения уравнения состояния вещества в широком диапазоне температур и плотностей успешно применяются квантово-статистические модели среднего атома: Томаса–Ферми с поправками (ТФП) и Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) [1]. Использование приближений этих моделей тем более оправдано, чем выше температура и плотность вещества.

Результаты расчётов ударных адиабат пористых образцов алюминия по различным моделям представлены на рис. 1. Показано, что лучшее согласие с экспериментальными данными [2–4] даёт модель ХФС с учётом ионной подсистемы по модели заряженных твёрдых сфер (ЗТС). Кроме ударных адиабат

пористых образцов алюминия, также были рассчитаны ударные адиабаты пористых образцов железа, меди [7] и молибдена.

Показано, что квантово-статистический подход может успешно применяться для описания термодинамических свойств этих металлов в области состояний, реализующихся при ударном сжатии пористых образцов.

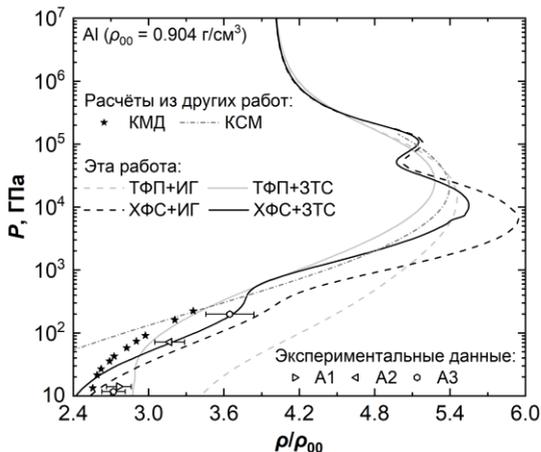


Рис. 1. Давления  $P$  в зависимости от степени сжатия  $\rho/\rho_0$  на ударных адиабатах пористых образцов алюминия (с начальной пористостью  $m = 3$ ) рассчитанных по моделям ТФП и ХФС с учётом ионного вклада по моделям идеального газа Больцмана (ИГ) и ЗТС. Приведено сравнение с данными экспериментов (A1—[2]; A2—[3]; A3—[4]) и результатами расчётов по методу квантовой молекулярной динамики (КМД—[5]) и по квантово-статистической модели (КСМ—[6]).

*Список литературы*

1. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000.
2. Bakanova A. A., Dudoladov I. P., Sutulov Y. N. // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 1974. V. 15, №2. P. 241–245.
3. Трунин Р. Ф. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / 2-е изд. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
4. Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42, №3. С. 686–702.
5. Minakov D. V., Levashov P. R., Khishchenko K. V., Fortov V. E. // J. Appl. Phys. 2014. V. 115, № 22. P. 223512.
6. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. // Мат. моделирование. 1998. Т. 10, № 7. С. 111–123.
7. Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V. // Phys. Plasmas. 2018. Vol. 25, № 11. P. 112701.

М.В. КАЗАЧЕНКО<sup>1,2</sup>, И.О. ШАМШИН<sup>2</sup>, В.С. АКСЁНОВ<sup>2,3</sup>,  
С.М. ФРОЛОВ<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет), Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр Химической физики им. Н.Н. Семенова РАН,  
Москва, Россия

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## ОЦЕНКА ДЕТОНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА ПОЛИЭТИЛЕНА И ПОЛИПРОПИЛЕНА

С помощью эталонной детонационной трубы определена относительная детонационная способность воздушных смесей продуктов пиролиза полиэтилена и полипропилена в существенно одинаковых экспериментальных условиях. Показано, что детонационная способность продуктов пиролиза увеличивается по мере роста температуры пиролиза от 650 до 850 С, а детонационная способность продуктов пиролиза полиэтилена оказывается выше детонационной способности продуктов пиролиза полипропилена.

M.V. KAZACHENKO<sup>1,2</sup>, I.O. SHAMSHIN<sup>2</sup>, V.S. AKSENOV<sup>2,3</sup>,  
S.M. FROLOV<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

<sup>2</sup>N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of  
Sciences, Moscow, Russia, <sup>3</sup>National Research Nuclear University MEPHI

## RATING OF DETONABILITY OF POLYETHYLENE AND POLYPROPELENE PYROLYSIS PRODUCTS – AIR MIXTURES

Using a standard pulsed detonation tube a relative detonability of the mixtures of polyethylene and polypropylene pyrolysis products with air in the essentially same experimental conditions is determined. The detonability of such mixtures is shown to increase with the temperature ranging from 650 to 850 C. The detonability of polyethylene pyrolysis products is proved to be higher than that of polypropylene pyrolysis products.

Переход от дефлаграционного горения к детонационному в тепловых машинах разного назначения позволит выйти на более высокий уровень их эффективности [1]. Полимерные материалы рассматриваются как перспективное горючее для воздушно-реактивных двигателей [2]. В связи с этим возникает необходимость изучения детонационной способности (ДС) широко применяемых полимеров таких, как полиэтилен (ПЭ) и полипропилен (ПП), которые и были выбраны в качестве объектов исследования.

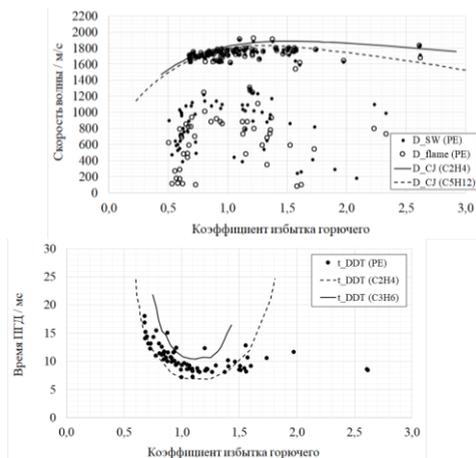


Рис.1. Скорость волны и время ПГД.

ДС топливно-воздушных смесей определяется по времени и расстоянию перехода горения в детонацию (ПГД) по методике [3]. Эксперименты проводятся на установке, оборудованной пиролизическим реактором и эталонной детонационной трубой [4].

На рис. 1 представлены экспериментальные зависимости скорости волны горения и времени ПГД от коэффициента избытка горючего, полученные после обработки большого количества экспериментов. Светлые точки на левом рисунке соответствуют скорости фронта пламени, а темные – скорости детонационной волны, сплошная линия – термодинамический расчет для скорости детонации в этилено-воздушной смеси, а пунктирная линия – скорость детонации Чепмена-Жуге в пентано-воздушной смеси. Сплошная линия на правом рисунке соответствует данным для воздушных смесей пропилена, пунктирная – этилена, а точки – экспериментальным данным для продуктов пиролиза ПЭ.

ДС воздушных смесей продуктов пиролиза ПЭ оказалась чуть хуже ДС воздушных смесей этилена, поскольку кроме этилена в продуктах пиролиза содержится значительное количество более тяжелых углеводородов [4]. Для ПП получены аналогичные данные. ДС продуктов пиролиза ПП оказалась хуже, чем ДС продуктов пиролиза ПЭ.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант РФФИ 18-08-00076а).

*Список литературы*

1. Фролов, С.М. // Энергетика. 2008. №3 (41). С. 44-45.

2. Фролов С. М., Звегинцев В. И., Аксенов В. С. и др. // Доклады академии наук. 2019. Т.488. № 2, С. 162–166 (DOI: 10.31857/S0869-56524882162-166).
3. Фролов, С. М., Шамшин, И.О., Аксёнов В. С., Казаченко М. В., Гусев П. А. // Горение и взрыв. 2019. т.12. №3. С. 78-90 (DOI: 10.30826/CE19120309).
4. Фролов С.М., Звегинцев В.И., Аксёнов В.С. и др. // Горение и взрыв. 2018. Т.11, №4, С. 44 – 60 (DOI: 10.30826/CE18110406).

Р.И.КАНЫГИН, И.И. КАНЫГИН, Е.Е. МЕШКОВ,  
И.А. НОВИКОВА

*Саровский физико-технический институт – филиал Национального исследовательского  
ядерного университета МИФИ, Саров, Россия*

## **ВИЗУАЛИЗАЦИЯ СЛОЖНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МАРКЕРОВ**

Разработана уникальная методика «метод маркеров» - течение визуализируется твердыми шариками полистирола, плотность которых  $\sim \rho$  воды. Данный метод служит для определения скорости потока и визуализации его течений. Приведены результаты визуализации траектории подъема маленького пузырька воздуха в воде с применением разработанной методики.

R.I. KANYGIN, I.I. KANYGIN, E.E. MESHKOV,  
I.A. NOVIKOVA

*Sarov Physical & Technical Institute - National Research Nuclear University MEPHI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **VISUALIZATION OF COMPLEX THREE-DIMENSIONAL FLOWS USING THE MARKER METHOD**

A unique technique the method of solid markers has been developed, in which the flow is visualized by solid polystyrene beads, whose density is close to the density of water. This method serves to visualize the flow and determine the flow rate. The results of visualizing the trajectory of the rise of a small air bubble in water using the developed method are presented.

Исследования в гидродинамике, начиная с О.Рейнольдса, тесно связано с разработкой методов визуализации течений. На базе гидродинамической лаборатории СарФТИ с 2013 года ведется разработка методов визуализации потока.

- Метод маркеров – течение визуализируется твердыми шариками полистирола, плотность которых  $\sim \rho$  воды. Данный метод служит для определения скорости потока и визуализации его течений.

- Метод «жидких ниток» – течение визуализируется при помощи тонких струй, окрашенных  $\text{KMnO}_4$ , плотность которых близка к плотности жидкости.

- Метод «ниспадающей завесы» - течение визуализируется при помощи множества примыкающих друг к другу тонких струй, окрашенных  $\text{KMnO}_4$ .

Эти методы были использованы при исследовании следующих задач:

- обтекание [1-2].

- всплывающий цилиндр в воде [3].
- всплывающий пузырь в воде [4].

В этих случаях исследовались, главным образом, двумерные течения. В последнее время начата разработка методики исследования сложных трехмерных течений. В этом случае течение снимается с помощью двух камер, образующих между собой угол  $90^0$ , синхронно, затем полученные данные с двух камер компилируются в программе OriginPro7.0 и представляются в виде 3D графиков.

Эта методика начала применяться для регистрации течения в виде всплывающих маленьких пузырьков и течения, возникающего при подъеме водяного пузыря в растворе соли [5].

*Список литературы*

1. Bashurin V.P., Budnikov I.N., Natunkin V.Yu., Klevtsov V.A., Kitorov L.V., Lazareva A.S., Meshkov E.E., Novikova I.A., Pletenev F.A., Yanbaev G.M. // *Physica Scripta*, Volume 91, № 4 ( <http://doi.org/10.1088/0031-8949/91/4/044002>.)
2. Башурин В.П., Будников И.Н., Клевцов В.А., Ктиторов Л.В., Лазарева А.С., Мешков Е.Е., Новикова И.А., Плетенёв Ф.А., Федоренко Я.В., Ямбаев Г.М. // *ЖТФ*, 2015, т.85, №7, сс.149-150.
3. Власов К.О., Долинский В.Ю., Мешков Е.Е., Новикова И.А. // XLIII международная (звенигородская) конференция по физике плазмы и термоядерному синтезу, г.Звенигород 8-10 февраля 2016г.
4. Meshkov E.E., Novikova I.A. // *Abstracts of Sixth International Conference Turbulent Mixing and Beyond 14-18 August, 2017, Trieste, Italy*, p. 104.
5. Kanygin R.I., Kashcheev A.D., Kudryavtsev A.Y., Meshkov E.E., Novikova I.A. // *Physica Scripta* Vol. 93 Num. 2 2018 // <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aa9abc>

А.Д. КИВЕРИН<sup>1</sup>, И.С. ЯКОВЕНКО<sup>1</sup>,  
Б.В. КИЧАТОВ<sup>2</sup>, А.М. КОРШУНОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Объединенный Институт Высоких Температур РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

## **ЭФФЕКТ КУМУЛЯЦИИ В ПЕНАХ И МЕХАНИЗМ РАЗВИТИЯ ДЕТОНАЦИИ**

В работе исследуется процесс нестационарного горения и детонации в водных растворах и эмульсиях, вспененных водород-кислородной газообразной смесью. Экспериментально и численно изучены процессы ускорения пламени и перехода в детонацию. На основе комплексного анализа в качестве механизма формирования и распространения детонации предложен эффект кумулятивного сжатия реагирующей газовой смеси внутри схлопывающихся пузырей. Распространение пламени в пене с ускорением приводит к генерации волн сжатия. В процессе схлопывания газового пузыря под действием волн сжатия внутри пузыря достигаются состояния с высокой плотностью энергии, что обеспечивает воспламенение реагирующего газа и представляется базовым механизмом как формирования, так и поддержания детонации.

A.D. KIVERIN<sup>1</sup>, I.S. YAKOVENKO<sup>1</sup>,  
B.V. KICHATOV<sup>2</sup>, A.M. KORSHUNOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Joint Institute for High Temperatures of RAS, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Physical Institute by P.N. Lebedev of RAS, Moscow, Russia*

## **CUMULATIVE EFFECT IN FOAMS AND MECHANISM OF DETONATION DEVELOPMENT**

The paper is devoted to the analysis of non-steady combustion and detonation in aqueous solutions and emulsions foamed with hydrogen-oxygen gaseous mixture. The processes of flame acceleration and transition to detonation are studied experimentally and numerically. On the basis of complex analysis the effect of cumulative compression of reactive gaseous mixture inside collapsing bubbles is proposed to be the mechanism of detonation formation and further self-sustained propagation. Flame propagation through the foam leads to the compression waves generation. Under the action of compression waves the gas bubble collapses and states with high energy densities are achieved inside the bubble. As a result the ignition inside the bubble takes place that represents a basic mechanism of detonation formation and propagation.

Пористые среды и, в частности, пены являются ярким примером систем, развитие динамических процессов в которых связано с генерацией состояний с высокими плотностями энергии [1]. При этом отдельный интерес представляют пены на водной основе, добавление в состав которых реагирующих компонент делает возможным их горение [2, 3]. При этом наличие воды в реагирующей системе обеспечивает снижение температуры горения и тем самым ограничивает эмиссию окислов азота и полиароматических углеводородов. В связи с этим такие горючие пены представляют также интерес с точки зрения

экологически чистой и безопасной энергетики. Как было показано в недавней работе [4], при вспенивании водного раствора горючим газом (водород-кислородной смесью) горение в такой системе развивается нестационарным образом, и заключительной стадией является установление самоподдерживаемого детонационного режима. При этом интенсивность ударной волны, регистрируемая датчиками давления, оказывается недостаточной для формирования детонации в чистой газовой смеси, что указывает на наличие иного механизма формирования и распространения детонации. Совместный экспериментальный и расчетно-теоретический анализ указывает на следующий сценарий развития горения. Пламя, распространяясь по пене инициирует ее распад в предпламенной зоне. В результате этого фронт пламени оказывается подвержен воздействию капель жидкости, возмущающих фронт и провоцирующих рост газодинамической неустойчивости фронта. Это в свою очередь обеспечивает ускорение пламени и генерацию волн сжатия, сжимающих пену перед фронтом. Объемное сжатие пены приводит к схлопыванию газовых пузырей внутри жидкой матрицы пены. В свою очередь, кумулятивный эффект при сжатии пузыря [5] определяет достижение в эпицентре сжатия экстремально высокого давления и температуры. Реагирующая смесь в пузыре воспламеняется независимо от основного фронта пламени, а коллективный эффект от воспламенения системы пузырей формирует ударный фронт, запускающий кумуляцию и воспламенение в следующих слоях пены. Предложенный механизм представляется базовым как для формирования, так и поддержания детонации в пене.

*Список литературы*

1. Демидов Б.А. и др. // ЖТФ, 2000, Том 70(7), С. 57-64.
2. Kichatov B. and others // Fuel, 2017, Vol. 203, P. 261-268.
3. Kichatov B., Korshunov A., Kiverin A. // Proc. Combust. Inst., 2019, Vol. 37(3), P. 3417-3424.
4. Kichatov B. and others // Intl. J. Hydrogen Energy, 2019, Vol. 44(59), P. 31567-31578.
5. Sychev A.I. // Combust. Expl. Shock Waves, 2003, Vol. 39(2) P. 218-225.

С.А. КОЗЛОВА, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ БЕНЗОЛА МЕТОДАМИ РЕАКЦИОННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ**

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового сжатия бензола и термодинамический расчет ударно-волновых характеристик бензола в диапазоне  $P=1-50$  ГПа и  $T=347-4550$  К. Для описания межатомного взаимодействия, а также для анализа кинетики разложения бензола, использовались две параметризации реакционного силового поля ReaxFF: ReaxFF(c/h/o)\_2008 [1] и ReaxFF(c/h/o)\_2016 [2]. Полученные результаты имеют хорошее согласие с экспериментом. Анализ разложения бензола в ударной волне осуществлен посредством реакционного силового поля ReaxFF, которое позволяет наблюдать компонентный состав системы в процессе моделирования.

S.A. KOZLOVA, S.A. GUBIN, I.V. MAKLASHOVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **SHOCK-WAVE SIMULATIONS OF BENZENE BY THE REACTIVE MOLECULAR DYNAMICS AND EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS METHODS**

We performed in this work molecular-dynamics simulations and thermodynamic calculations of benzene properties under shock conditions in the range  $P = 1-50$  GPa and  $T=347-4550$  K. There were used two parameters of the ReaxFF reactive force field ReaxFF(c/h/o)\_2008 [1] and ReaxFF(c/h/o)\_2016 [2] to describe the interatomic interaction, as well as to analyze the kinetics of the decomposition of benzene. The results obtained are in good agreement with experiment. Analysis of the decomposition of benzene in the shock wave was carried out by means of the ReaxFF reactive force field, which allows observing the component composition of the system during the simulation.

Одной из первых работ по экспериментальному исследованию термического разложения ароматических углеводородов, включая бензол, при высоких давлениях в ударных волнах была работа [3]. В работе [3] была получена ударная адиабата (УА) бензола в диапазоне давлений  $1-43$  ГПа, на которой отчетливо наблюдался излом между  $13,3$  и  $19,4$  ГПа. Авторы [3] предполагают, что данный излом на УА соответствует фазовому переходу, возникающему в результате полимеризации молекул бензола. В дальнейшем, во многих работах с помощью расчетных методов, в том числе методами молекулярной динамики, воспроизводились термодинамические характеристики ударно сжатого бензола [4, 5, 6]. Также более современные экспериментальные работы, совместно с расчетами параметров бензола за УВ показали полимеризацию бензола через

реакции циклоприсоединения, а так же выявили особенности разложения бензола в УВ за малые времена порядка пикосекунд, сопоставимыми с временами расчета в методах МД [7, 8, 9].

В данной работе для термодинамического (ТД) расчета была получена диаграмма состава продуктов разложения бензола за ударной волной в зависимости от давления, демонстрирующая фазовое превращение углерода из графита в алмаз. В МД расчетах термическое разложение (расчет количества молекул бензола и продуктов разложения, а также покомпонентная классификация продуктов разложения) осуществлялась с помощью механизма анализа химических связей ReaxFF.

ТД расчет УВ сжатия бензола лучше согласуется с аналогичными экспериментальными данными, повторяя характерный для эксперимента излом на кривой ударной адиабаты в диапазоне  $P=13 - 20$  Гпа и  $T=1756 - 1790$  К. Данный излом на  $P(V)$  диаграмме в ТД соответствует фазовому переходу углерода из графита в алмаз. МД расчет УВ сжатия бензола показал наилучшее согласие с термодинамическим расчетом, в котором в продуктах реакции предполагается образование углерода в фазе алмаза. Исходя из этого, можно судить о том, что данные параметризации реакционного поля ReaxFF 2008 и 2016 годов не учитывают образование алмаза в продуктах реакции, вследствие чего нельзя зарегистрировать фазовый переход углерода при высоких давлениях и температурах.

#### *Список литературы*

1. K. Chenoweth and van Duin, A.C.T. // J. Phys. Chem. A, 112, 1040-1053 (2008).
2. C. Ashraf and van Duin, A.C.T. // J. Phys. Chem. 121, 1051-1068 (2017).
3. R. Dick // J. Chem. Phys. 52, 6021 (1969).
4. F. H. Ree, J. Chem. Phys. 70, 974 (1979).
5. J. A. Viccelli, S. Bastea, J. N. Glosli, and F. H. Ree. // J. Chem. Phys., 115, 6, 2730 (2001).
6. J.-B. Mailliet and N. Pineau // J. Chem. Phys. 128, 224502 (2008).
7. S. Root and Y. M. Gupta // Chem. Phys.Lett. 442, 293–297 (2007).
8. S. Root and Y. M. Gupta // J. Phys. Chem. A 113,1268–1277 (2009).
9. D. Lacina and Y. M. Gupta.// J. Chem. Phys. 138, 174506 (2013).

Н.Д. КОНДРАТЮК, В.В. ПИСАРЕВ

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ СМАЗОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

В данной работе используются методы классической молекулярной динамики для предсказания свойств жидких углеводородов, являющихся модельными смазочными жидкостями, при давлениях до 1 ГПа. Различные потенциалы межатомного взаимодействия сравниваются по предсказательной способности. Потенциал класса II COMPASS применяется для точного расчета свойств. Расчеты коэффициента вязкости проводятся как равновесными, так и неравновесными методами. Демонстрируется эквивалентность методов расчета.

N.D. KONDRATYUK, V.V. PISAREV

*Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia*

## **PREDICTION OF LUBRICANTS PROPERTIES UNDER HIGH PRESSURES**

In this work, we apply the molecular dynamics methods for predicting the liquid hydrocarbons viscosities at pressures up to 1 GPa. The different classical force fields are compared by their predictive power. The COMPASS class II force field is chosen for the precise calculations. Both equilibrium and non-equilibrium methods are used to calculate the shear viscosities of model lubricants.

Современная промышленность проявляет большой интерес к исследованию свойств углеводородов, так как они входят в состав смазочных жидкостей. Одними из определяющих характеристик являются транспортные свойства: диффузия, вязкость и теплопроводность.

В работе проведен анализ применимости методов молекулярной динамики и классических потенциалов взаимодействия для воспроизведения свойств жидких углеводородов [1 – 6]. Выполнен расчет расширенного уравнения состояния для разветвленных алканов и для 1,1-дифенилэтана (Рис. 1) в широком диапазоне давлений (от 0.1 до 1 ГПа) для трех изотерм. В полученных точках уравнения состояния получена зависимость коэффициента вязкости от давления равновесным (формула Грина-Кубо) и неравновесным методами. Выполнено сравнение с экспериментальными значениями (Рис. 2), проанализирована применимость данных методов. Подобные данные повсеместно используются в индустрии смазок.

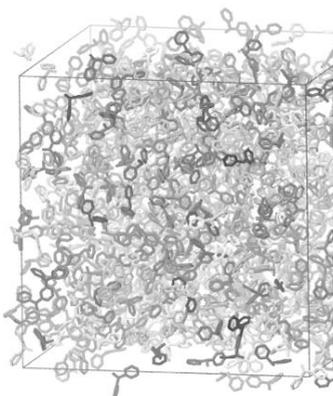


Рис. 1. Расчетная МД ячейка с молекулами 1,1-дифенилэтана при 0.1 МПа и 311 К.

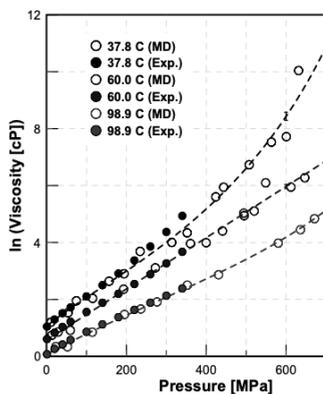


Рис. 2. Результаты МД расчета зависимости вязкости от давления для трех температур.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 17-79-20391.

*Список литературы*

1. Кондратьюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // ВМС. Сер. А. 2016. Т. 58(5). С. 519.
2. Kondratyuk N.D., Norman G.E. and Stegailov V.V. // J. Chem. Phys. 2016. V. 145. P. 204504.
3. N. Kondratyuk // J. Chem. Phys. 2019. V. 151(7). P. 074502.
4. N.D. Kondratyuk // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1385 (1). P. 012048.
5. V. Pisarev and N. Kondratyuk. // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 501. P. 112273.
6. N.D. Kondratyuk and V.V. Pisarev. // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 498. P. 151-159.

С.Н. КОПЫЛОВ<sup>1,2</sup>, П.С. КОПЫЛОВ<sup>2</sup>, И.П. ЕЛТЫШЕВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Всероссийский НИИ противопожарной обороны МЧС России, Балашиха, Россия

## ИНГИБИРОВАНИЕ ВЗРЫВНОГО РАСПАДА АЦЕТИЛЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

На основании анализа особенностей механизмов распада ацетилена и превращения флегматизирующих распад газов объяснено уменьшение флегматизирующей эффективности газов для взрывного распада ацетиленовых углеводородов в ряду  $C_4H_{10} > C_3H_8 > CO > CH_4 > C_2H_4 > H_2$ . Спрогнозирована и подтверждена высокая эффективность пропилена как ингибитора распада ацетилена.

S.N. KOPYLOV, P.S. KOPYLOV, I.P. ELTYSHEV

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

*All Russian Research Institute for Fire Protection, Balashikha, Russia*

## AN INHIBITION OF EXPLOSIVE DECOMPOSITION OF ACETYLENE HYDROCARBONS

Lowering of inertization effectiveness of some gases for explosive decomposition of acetylene hydrocarbons in the consequence  $C_4H_{10} > C_3H_8 > CO > CH_4 > C_2H_4 > H_2$  is explained on the basis of analysis of mechanisms of decomposition of acetylene and transformation of gases inertizing the decomposition. High effectiveness of propylene as inhibitor of decomposition of acetylene was projected and confirmed.

Для предотвращения взрывного распада ацетилена и его гомологов используется ряд агентов [1], которые по флегматизирующей способности располагаются в следующем порядке:  $C_4H_{10} > C_3H_8 > CO > CH_4 > C_2H_4 > H_2$ . Объяснить эту последовательность только разбавлением не удается, и в настоящей работе флегматизирующее действие  $C_4H_{10}$ ,  $C_3H_8$ ,  $CO$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $H_2$  объясняется на основании оценки их ингибирующей способности по отношению к взрывному распаду ацетилена.

Согласно известного механизма взрывного распада ацетилена [1], лимитирующей стадией процесса является реакция  $H + C_2H_2 = C_2H + H_2$  (1), имеющая энергию активации  $E_1=99$  кДж/моль [2]. Поскольку для реакций  $C_3H_8 + H = C_3H_7 + H_2$  (2) и  $C_4H_{10} + H = C_4H_9 + H_2$  (3)  $E_2=36,5$  и  $E_3=35,9$  кДж/моль [2], они эффективно конкурируют с реакцией (1). Легко показать, что радикал  $C_3H_7$  в основном расходуется по реакции  $C_3H_7 + H = C_3H_8$  (4), и процессы (2) и (4) являются актами ингибирования с регенерацией ингибитора. Аналогичная картина получается и для бутана.

В работе показано, что этилен, хотя и имеет низкое значение энергии активации для реакции  $C_2H_4 + H = C_2H_5$  (5) ( $E_5=6,3$  кДж/моль [2]), быстро расходуется уже после первого акта ингибирования с образованием либо метана, либо ацетилена, что и объясняет слабое флегматизирующее действие  $C_2H_4$  на взрывной распад  $C_2H_2$ .

Метан, хотя и способен ингибировать распад  $C_2H_2$  за счет реакций  $CH_4 + H = CH_3 + H_2$  ( $E_6=63,0$  кДж/моль, [2]) (6) и  $CH_3 + H + M = CH_4 + M$  ( $E_7=5$  кДж/моль, [2]) (7), является слабым ингибитором по сравнению с  $C_3H_8$ , так как  $E_6$  много больше  $E_2, E_3$ .

Для монооксида углерода показано, что, хотя далеко не каждая реакция  $CO + H + M = CHO + M$  ( $E_8=7,0$  кДж/моль, [2]) (8) является актом ингибирования, в отличие от этилена, CO не расходуется быстро и циркулирует в реагирующей системе.

Только водород оказывает только разбавляющее действие; о чем говорит и большое значение его флегматизирующей концентрации для распада ацетилена.

Используемый в настоящей работе подход позволяет предсказывать активность того или иного ингибитора. Например, пропилен может вступать в реакции  $C_3H_6 + H = \text{изо-}C_3H_7$  ( $E_9=4,0$  кДж/моль, [2]) (9),  $\text{изо-}C_3H_7 + H = C_3H_8$  ( $E_{10}=0$ , [2]) (10), превращаясь в пропан - тоже активный ингибитор. Поскольку  $E_9$  в несколько раз меньше  $E_2, E_3$ ,  $C_3H_6$  должен быть более эффективным ингибитором по сравнению с  $C_3H_8$  и  $C_4H_{10}$ .

Для проверки этого прогноза были проведены эксперименты по ГОСТ 12.1.044-89 по определению минимальной флегматизирующей концентрации (МФК) пропилена по отношению к взрывному распаду ацетилена при атмосферном начальном давлении и комнатной температуре. Энергия зажигания составила порядка 200 Дж.

Получено, что МФК  $C_3H_6$  по отношению к взрывному распаду ацетилена составляет 9 % (об.), в то время как МФК пропана для распада  $C_2H_2$  равна 10 % (об.). Таким образом, сделанный прогноз получил экспериментальное подтверждение.

Проведенный анализ показывает также определяющую роль регенерации ингибитора при горении.

#### *Список литературы*

1. Иванов Б.А. Физика взрыва ацетилена. М.: Химия, 1969, 180 С
2. Химия горения (под ред. У. Гардинера). М.: Мир, 1988, 462 С.

А.В. КУДИНОВ, С.А. ГУБИН, Ю.А. БОГДАНОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ МЕТАНА**

Методом молекулярной динамики было проведено моделирование ударно-волнового сжатия метана с использованием различных методов расчета конечного состояния за ударной волной. В качестве потенциала взаимодействия использовался ReaxFFlg. Представлена ударная адиабата ( $P = 0,1 - 44$  ГПа), проведено сравнение времен расчета одинаковой задачи разными методами.

A.V. KUDINOV, S.A. GUBIN, YU.A. BOGDANOVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **COMPARISON OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION METHODS OF METHANE SHOCKWAVE COMPRESSION**

Shockwave compression of methane was simulated using the molecular dynamics method with Hugoniot and MSST approach. The calculation was carried out employing ReaxFFlg potential. We show comparison of simulated Hugoniot for pressure range 0,1 – 44 GPa and times required for simulation run of two different methods.

Для моделирования ударно-волнового сжатия веществ в LAMMPS возможно использование метода одноосного Гюгониостата [1] и метода MSST [2] (Multiscale Shock Technique). Метод Гюгониостата заключается в том, что система мгновенно сжимается по трем направлениям до конечного состояния, соответствующего состоянию системы после прохождения ударной волны (УВ), после чего мгновенное значение внутренней энергии некоторое время релаксирует, пока не достигнет значения, соответствующего величине энергии, полученной из законов сохранения. Мгновенное сжатие является недостатком метода, так как при сильном сжатии начальные температура и напряжения могут превысить свои реалистичные значения, что приводит к искаженному конечному результату. Одноосный Гюгониостат, разработанный авторами [3], обеспечивает достижение итогового состояния системы за конечное время, задавая конечное давление в направлении распространения волны. Во избежание резких скачков температуры и напряжений в уравнения движения добавлены коэффициенты затухания для напряжения и потока тепла. В методе Гюгониостата в качестве начальных условий необходимо задать температуру системы и давление за фронтом УВ. Метод MSST основан на одномерных уравнениях Эйлера для сжимаемой жидкости, представляющие законы сохранения на УВ без учета переноса тепла. Отсутствие учета переноса тепла при ударно-волновом сжатии дает корректный результат до области температур, где электронный механизм передачи тепла не оказывает заметного влияния.

Деформация происходит только в направлении распространения УВ. Давления в уравнении движения выбраны так, чтобы соответствовать одноосному компоненту напряжений. В данном подходе моделируется небольшая часть системы с предположением о том, что градиенты давления и температуры малы вдоль ударной волны. В качестве начальных условий необходимо задать параметры ячейки волны  $p_0$  – давление,  $\rho_0$  – плотность,  $e_0$  – полная энергия системы; масс-подобный параметр, входящий в лагранжиан и направление распространения ударной; интенсивность ударно-волнового сжатия задается через скорость УВ, которая подбирается таким образом, чтобы получить желаемое давление. Для сравнения двух методов было проведено моделирование ударно – волнового сжатия жидкого метана ( $T=110$  К,  $P=0.1$  ГПа) в интервале давлений  $P=0,1 – 44$  ГПа. В качестве потенциала взаимодействия использовался ReaxFFlg [4]. Результат расчета методом MSST в данной работе совпадает с расчетом с помощью Гюгониостата, обеспечивая хорошее согласие с экспериментальными данными [5]. Так как два метода дали практически совпадающие результаты, проводилось сравнение времени расчета одной точки ударной адиабаты двумя методами. В табл. 1 приведены значения времени моделирования для каждой методики. Видно, что MSST считает такую же задачу в 3,3 раза быстрее.

Таблица 1 – Сравнение времени расчета ударно-волнового сжатия

Метод	t, c
Гюгониостат	7912
MSST	2385

*Список литературы*

1. Maillet J.-B., Mareschal M., Souillard L. // Phys. Rev. E. 2000. V. 63. P. 016121.
2. Ravelo R., Holian B.L., Germann T.C. // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. P. 014103.
3. Reed E. J., Fried L. E., Joannopoulos J. D. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 235503.
4. Liu L., Liu Y., Zybin S.V. // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. P. 11016-11022.
5. Nellis W. J., Ree F. H., et.al. // J. Chem. Phys. 1981. V. 75. P. 3055 – 3063.

А.В. КУДИНОВ, С.А. ГУБИН, Ю.А. БОГДАНОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРНОГО УГЛЕРОДА ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ РАЗЛОЖЕНИИ МЕТАНА**

Методом молекулярной динамики было проведено моделирование термического разложения метана при высоких температуре и давлении. В качестве потенциала взаимодействия использовался ReaxFFlg. Показаны зависимости изменения продуктов разложения от времени, приведены результаты полимеризации углерода при поддержании постоянной температуры. Показано влияние постепенного снижения температуры на размер полимеров.

A.V. KUDINOV, S.A. GUBIN, YU.A. BOGDANOVA

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THERMAL DECOMPOSITION OF ORGANIC MATERIALS ON THE EXAMPLE OF HYDROCARBONS POLYMERIZATION**

Thermal decomposition of methane was simulated at high temperature and pressure using the molecular dynamics method. The calculation was carried out employing ReaxFFlg potential. We show the dependence of the decomposition products on time and the results of hydrocarbons polymerization at constant temperature. We also show the influence of gradual temperature decrease at the size of the polymers.

В настоящее время для моделирования термодинамических свойств различных веществ и физических процессов широко применяется компьютерное моделирование методом молекулярной динамики (МД). В данной работе для МД моделирования использовался пакет LAMMPS [1]. В качестве потенциала взаимодействия был выбран потенциал ReaxFFlg [2]. Расчет термического разложения метана проводился для NVT ансамбля с шагом интегрирования 0,1 фс. Система, состоящая из 64 молекул метана, при плотности 0,05 г/см<sup>3</sup> была приведена в состояние равновесия в условиях NVT ансамбля.

Затем был выполнен расчет термического разложения метана для температуры 3500 К на протяжении 10 нс ( $P = 1600$  атм). На первом этапе разложения CH<sub>4</sub> образуются атомы и молекулы водорода, радикалы CH<sub>3</sub> и др. Появляются димеры углерода C<sub>2</sub>. Со временем появляются все более тяжелые промежуточные продукты разложения CH<sub>4</sub> в виде углеводородов C<sub>n</sub>H<sub>m</sub> ( $n > m$ ). Начиная с определенного времени, атомы углерода начинают образовывать нитевидные структуры. Происходит полимеризация углерода. Критерий начала

полимеризации в соответствии с [3]: 40 % атомов углерода находится в кластерах с 5 и более атомами с временем жизни более 20 фс. Расчеты показывают, что переход системы в полимерное состояние произошел на 452 пс, с образованием молекул  $C_{11}H_3$ ,  $C_{10}H_3$  и  $C_6H_3$ . В дальнейшем в системе образуются длинные углеродные нити, содержащие до 60 % атомов углерода. Время жизни нитевидных структур лежит в интервале от 1 до 9 пс, после чего данные структуры распадаются на составляющие части. Неустойчивость нитевидных структур объясняется их разрушением при столкновении с более легкими молекулами промежуточных продуктов разложения метана.

Для уменьшения количества легких молекул в системе выполнен расчет с постепенным охлаждением системы до  $T = 1500$  К за 1 нс. При этом в момент времени  $t = 10,56$  нс при снижении  $T$  до 2400 К из молекул  $C_{17}H_5$  и  $C_{14}H$  образуется молекула  $C_{31}H_6$ . Через 5,6 пс она распадается на  $C_{27}H_4$  и  $C_4H_2$ . Через  $t = 369,3$  пс ( $T = 1500$  К)  $C_{27}H_4$  захватывает молекулу ацетилена, и образовавшаяся нитевидная структура  $C_{29}H_6$  сохраняется в системе на протяжении 1062 пс.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что при снижении температуры системы до  $T = 1500$  К, крупные нитевидные структуры перестают распадаться и формируют устойчивую молекулу. Помимо полимерных структур ( $C_{29}H_6$ ,  $C_8H_3$ ,  $C_{13}H_3$ ) в системе также присутствуют молекулы  $H_2$ ,  $C_4H_3$ ,  $C_2H$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_4H_2$ . Число атомов водорода при этом составляет  $N_{H_2} = 117$ , то есть 91,4 % атомов водорода системы находятся в молекулярной форме. При этом большая часть молекул водорода образуется при термическом разложении ( $T = 3500$  К), а не в результате охлаждения системы. Схожий результат был получен авторами [3] для расчета диссоциации метана при сжатии в ударной волне до  $T = 4000$  К методом DFT-MD.

#### Список литературы

1. Sandia National Labs [сайт]. URL: [http://lammps.sandia.gov/doc/Section\\_intro.html](http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html)
2. Liu L., Liu Y., Zybin S.V. // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. P. 11016-11022.
3. Sherman B.L., Wilson H.F., Weeratne D. // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. 224113.

**В.В. ЛАВРОВ<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Институт проблем химической физики Российской академии наук, г.Черноголовка  
Московская обл., Россия*

*<sup>2</sup>Институт Машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук, Москва,  
Россия*

## **РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА В УСЛОВИЯХ ДЕТОНАЦИИ ВВ ГРУППЫ II**

Приведены результаты исследований взрывных процессов в составах на основе нитрата аммония с использованием современных экспериментальных методов. Известно, что детонация этих смесей сопровождается рядом особенностей, которые не являются характерными для ВВ военного назначения. По этой и другим причинам взрывчатые смеси на основе нитрата аммония относят к ВВ группы II, а также к неидеальным взрывчатым веществам.

**V.V. LAVROV<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,  
Chernogolovka, Moscow Region, Russia*

*<sup>2</sup>Blagonravov Mechanical Engineering Research Institute, Russian Academy  
of Sciences, Moscow, Russia*

## **RESULTS OF THE STUDY OF THE STATE OF THE SUBSTANCE IN THE CONDITIONS OF DETONATION OF EXPLOSIVES FROM GROUP II**

The results of studies of explosive processes in compositions based on ammonium nitrate using modern experimental methods are presented. It is known that the detonation of these explosive compositions is accompanied by a number of features that are not characteristic of high explosives. For this and other reasons, the mixtures based on ammonium nitrate belong to group II of explosives, as well as to non-ideal explosives.

В научной литературе все взрывчатые вещества принято делить на две группы. Исторически такое деление было проведено по виду зависимости критического диаметра детонации от плотности. Для ВВ, относящихся к группе I (таких как тротил, гексоген, нитроглицерин, нитрометан и др.), критический диаметр уменьшается с ростом плотности, а для ВВ, относящихся к группе II (таких как смеси нитрата аммония с невзрывчатыми добавками, перхлорат аммония и некоторых других), увеличивается. К настоящему времени накоплено большое количество экспериментальных данных о процессе детонации ВВ первой группы, для ВВ второй группы подобных данных крайне мало, хотя явление детонации в этих системах не ограничиваются только одной этой особенностью. Кроме того, из-за использования зарядов относительно малого диаметра и длины, экспериментальные данные для этих составов, как правило, не отличаются надежностью.

Новый импульс исследованиям детонации взрывчатых составов на основе нитрата аммония был дан после успешного развития технологии изготовления сложных смесевых составов, имеющих структуру обратной эмульсии. В отличие от других взрывчатых смесей на основе НА, эмульсионные ВВ обладают относительно высокой детонационной способностью, а параметры детонации таких составов за счет изменения пористости могут варьироваться в широких пределах, что предоставляет дополнительные возможности для проведения исследований различными методами.

В настоящей работе приведены результаты исследований взрывных процессов в составах на основе нитрата аммония с использованием современных экспериментальных методов. Определялись такие характеристики, как скорость детонации, кривизна детонационного фронта, временной профиль массовой скорости, размеры зоны реакции. Результаты пионерских исследований по оценке распределения плотности вещества в зоне реакции детонационной волны с использованием высокоскоростных потоков заряженных частиц также были проведены. Полученные данные позволяют сделать вывод, что наблюдаемые отличия в поведении составов на основе нитрата аммония, объясняются особенностями очагового механизма взрывчатого превращения веществ из группы II. Полученные в работе экспериментальные данные также показывают, что в основе некоторых современных расчетных методов лежат предположения, не подтверждающиеся для ВВ из этой группы экспериментально.

Новые данные о протекании взрывных процессов в исследованных веществах и статистика крупных аварий позволяют сделать вывод, что взрывоопасность смесей на основе НА, как с активными, так и с инертными добавками, остается недооцененной. Такая недооценка приводит к повышению риска возникновения катастрофических ситуаций, а также расширяет возможности для использования продуктов на основе нитрата аммония в террористических целях.

Л.И. ЛИПЕНКОВА<sup>1</sup>, Д.В. МИЛЬЧЕНКО<sup>2</sup>, А.И. ПЯТОЙКИНА<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Саровский физико-технический институт – филиал Национального  
исследовательского ядерного университета МИФИ, Саров, Россия

<sup>2</sup> ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров, Россия

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ТОНКОСЛОЙНЫХ ЗАРЯДОВ С МОДИФИЦИРУЮЩИМИ ДОБАВКАМИ**

В данной работе проводится экспериментальная проверка предположения о возможности влияния структурно-модифицирующих добавок на детонационную способность ВВ-ТТ. Доказана возможность существенного снижения критической толщины детонации гексогена-ТТ за счет добавки БТФ.

L.I. LIPENKOVA<sup>1</sup>, D.V. MILCHENKO<sup>2</sup>, A.I. PYATOYKINA<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Sarov Physical & Technical Institute – National Research Nuclear University MEPhI,  
Sarov, Russia,

<sup>2</sup> RFNC-VNIIEF, Sarov, Russia

## **STUDY OF DETONATION PROPERTIES OF THIN-LAYER CHARGES WITH MODIFYING ADDITIVES**

This research provides experimental verification of the assumptions about the influence of structural-modifying additives on detonation ability of explosives-TT. Proved the possibility of a significant reduction of the critical thickness of detonation of RDX-TT due to the additive BTF.

При возгонке различных веществ [1] наличие в возгоняемом продукте легирующих добавок, близких по атомной или молекулярной структуре к основному компоненту, может приводить к разупорядочиванию структуры осажденного слоя и к накоплению дислокаций в кристаллах.

Теоретически, увеличение числа дислокаций и других микроскопических дефектов в кристалле какого-либо вещества можно добиться следующим образом. При кристаллизации ВВ необходимо добавить в его раствор небольшое количество примеси (легирующей или структурно-модифицирующей добавки), молекулы которой имеют сходную симметрию и кристаллизуются в том же типе решетки, что и основной компонент, но не могут образовывать с основным компонентом стабильные комплексы. Тогда отдельные молекулы примеси могут встраиваться в кристаллическую решетку основного вещества, нарушая при этом дальнейший правильный рост решетки на микроуровне. Возникают дислокации, которые могут переходить и в более крупные дефекты.

Применительно к гексогену, из относительно распространенных и доступных ВВ, такими добавками могут являться тринитробензол (ТНБ) и

бензотрифуроксан (БТФ), имеющие орторомбический тип кристаллической решетки.

Модифицирующие добавки (ТНБ и БТФ) несколько снижают термическую стойкость гексогена, но это снижение не является критичным с точки зрения возможностей его практического применения.

Газодинамические испытания для определения критической толщины детонации показали, что критическая толщина детонации осталась на уровне штатного гексогена-ТТ при введении 3 % ТНБ и снизилась примерно в 3 раза при введении 3 % БТФ в кристаллическую структуру гексогена-ТТ. Это подтверждает сделанное предположение о возможном влиянии структурно-модифицирующих добавок на детонационные свойства ВВ.

Снижение критической толщины детонации в 3 раза представляет большой интерес, поскольку такой взрывчатый наполнитель может быть перспективен для получения смесевых пластичных ВВ с малым критическим диаметром детонации.

#### *Список литературы*

1. Д.В. Мильченко, В.А. Губачев, Л.А. Андреевских, С.А. Вахмистров, А.Л. Михайлов, В.А. Бурнашев, Е.В. Халдеев, А.И. Пятойкина, С.С. Журавлев, В.Н. Герман. // Физика горения и взрыва, 2015, т.51, №1.

Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, У.Д. ВАГИНА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ГЕЛИЯ И ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА**

В работе проведены исследования для определения правил смешения при расчете теплофизических свойств бинарных и трёхкомпонентных систем гелия и изотопов водорода. Расчеты выполнялись с использованием теоретической модели уравнения состояния на основе теории возмущений и методом молекулярной динамики. Показано, что фактор сжимаемости, а с ним и давление исследуемой смеси, подчиняется правилу аддитивного смешения, в том числе в области высокого сжатия.

YU.A. BOGDANOVA, I.V. MAKLASHOVA, U.D. VAGINA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

## **MODELING OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES FOR HELIUM AND HYDROGEN ISOTOPES MIXTURES**

The mixing rules for calculating of the thermophysical properties for binary and three-component systems of helium and hydrogen isotopes were studied in the work. The calculations were carried out using a theoretical model of the equation of state based on perturbation theory and the molecular dynamics method. It was shown that the compressibility factor, and with it the pressure of the examination mixtures, conform to the additive mixing rule, including in the region of high compression.

В настоящее время существует большое количество моделей уравнений состояния (УРС) отдельных веществ, однако используемые смесевые модели не всегда реалистично прогнозируют термодинамические свойства смесевых композиций. Данная работа посвящена выбору правил смешения для расчета фактора сжимаемости смесей гелия и изотопов водорода по соответствующим значениям индивидуальных компонентов смесей на основе результатов моделирования с использованием теоретического УРС [1] на основе теории возмущений и методом молекулярной динамики. Взаимодействие между атомами гелия и водорода, включая их изотопы, описывалось потенциалом Леннард-Джонса (Л-Д). Значения глубины потенциальной ямы  $\epsilon/k_B$  для  $^4\text{He}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{D}_2$  равны 10.8 К, 33.3 К, 34.9 К, соответственно. Расстояние  $\sigma$ , на котором энергия взаимодействия становится равной нулю, для  $^4\text{He}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{D}_2$  равны 2.57 А, 2.948 А, 2.938 А, соответственно. Перекрестные значения потенциальных параметров рассчитывались по правилу Лоренца-Берфелотта. Верификация выбранных потенциальных параметров изотопов водорода и гелия была проведена для смеси  $\text{H}_2$ - $^4\text{He}$ , для которой имеются экспериментальные данные [2]. Состав смеси варьировался (мольная доля водорода  $\text{H}_2$  составляла от 0.14 до 0.73 объемных процентов). Статистика отклонений результатов расчетов

плотности при заданных давлениях и составе смеси от экспериментальных данных показала, что результаты отлично согласуются с экспериментальными данными (максимальное отклонение – в пределах 1%). С использованием выбранных потенциальных параметров на основе теоретического УРС [1] были выполнены расчеты термодинамических свойств бинарных и трехкомпонентных смесевых композиций гелия и изотопов водорода при различном содержании компонентов в смеси в области температур 500 – 3000 К и давлений 1 – 3000 атм. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование свойств смесей гелия и изотопов водорода проводилось с использованием компьютерного кода SageMD [3]. Для МД симулирования поведения смеси газов была использована расчетная ячейка, состоящая из 1372 атомов. Рассматривался канонический изохорно-изотермический ансамбль  $NVT$ . В результате моделирования были построены зависимости давления от плотности вдоль изотерм от 500 до 3000 К и рассчитана величина фактора сжимаемости смесевой композиции  $Z_{mix}$ . Для определения правил смешения для расчета  $Z_{mix}$  было проведено сравнение значений фактора сжимаемости, полученных путем аддитивного смешения значений индивидуальных компонентов, от значений сжимаемости, рассчитанных на основе теоретического УРС [1] и результатов МД моделирования. Статистика отклонений аддитивных значений  $Z_{mix}$  от расчетных значений на основе УРС [1] в зависимости от состава для бинарных смесей  ${}^4\text{He}-\text{H}_2$  и  ${}^4\text{He}-\text{D}_2$  показала, что максимальное отклонение не превысило 0.4%, а среднее – 0.1%. На основании проведенных расчетов можно заключить, что  $Z_{mix}$  бинарных и трехкомпонентных смесей изотопов водорода и гелия можно рассчитать, используя аддитивные правила смешения по значениям фактора сжимаемости индивидуальных компонентов  $Z_{mix} = \sum_{i=1}^K x_i Z_i$ , где  $x_i$  – мольная доля каждого компонента,  $Z_i$  – фактор сжимаемости каждого компонента,  $K$  – число компонентов в смеси.

#### Список литературы

1. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., et al // High Temperature. 2015. V. 53. № 4. P. 481–490.
2. Kestin J, Yata J. // J. Chem. Phys. 1968. V. 49, P. 4780.
3. Selezenev A.A., Aleynikov A.Yu., et al. // Comp. Mat. Science, 2003. V.28. P.107-124.

З.И. МАМЕДОВ, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕЛИЯ ВО ФЛЮИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Проведены термодинамические расчеты системы, состоящей из атомов гелия во флюидном состоянии в диапазонах давлений до 250 ГПа. Рассчитаны изоэнтропы и ударные адиабаты. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными и расчетными данными, полученными методом Монте-Карло. Показана применимость методики для моделирования параметров состояния гелия во внутренних слоях планет-гигантов.

Z.I. MAMEDOV, S.A. GUBIN, I.V. MAKLASHOVA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **THE STUDY OF HELIUM IN THE FLUID STATE**

Thermodynamic calculations of a system consisting of helium atoms in a fluid state in the pressure ranges up to 250 GPa were performed. The isentropes and shock adiabats are calculated. The calculation results are consistent with the available experimental and calculated data obtained by the Monte Carlo method. The applicability of the method for modeling the parameters of the state of helium in the inner layers of giant planets is shown.

Гелий является вторым по распространенности химическим элементом во Вселенной после водорода. По этой причине его изучение занимает особое внимание исследователей самых разных специальностей. Особый интерес представляют физические свойства гелия в мегабарном диапазоне давлений, что соответствует внутренним слоям планет-гигантов Солнечной системы, активно изучаемых в настоящее время.

Рассматривается ансамбль одинаковых атомов гелия, взаимодействующих между собой со сферически симметричным межмолекулярным потенциалом Хр-6.

Для моделирования параметров во внутренних слоях атмосферы планет-гигантов проведены равновесные термодинамические расчеты ударной адиабаты гелия до 250 ГПа. В исходном состоянии гелий находился в жидком состоянии с заданными значениями плотности ( $\rho_0=0.12$  г/см<sup>3</sup>,  $P_0=0.012$  ГПа;  $\rho_0 = 0.17$  г/см<sup>3</sup>,  $P_0 = 0.012$  ГПа). При высокой температуре атомы He ионизируются с образованием ионов He<sup>+</sup> и электронов. При ионизации гелия предполагалось, что плотность ионов мала, кулоновским взаимодействием между ионами можно пренебречь и выполняется условие сохранения электрического заряда в системе. Образование ионов и электронов учитывается заданием энергии кулоновского потенциала.

Таким образом, исследуемая система представляет собой многокомпонентную смесь, состоящую из следующих частиц: He, He<sup>+</sup> и электронов. Расчет данной системы производится с использованием модели эффективного однокомпонентного флюида Ван дер Ваальса. В данной модели многокомпонентная смесь флюидов рассматривается как гипотетический (эффективный) однокомпонентный флюид. Потенциальные параметры эффективного флюида определяются через параметры потенциалов межмолекулярного взаимодействия атомов многокомпонентной смеси.

Проведены равновесные термодинамические расчеты с использованием программного комплекса TDS [1], в котором термодинамические свойства флюидных (газообразных сверхкритических) веществ рассчитывались на основе теоретически обоснованной модели уравнения состояния (УРС) газовой (флюидной) фазы.

В качестве калорического УРС использовалась база данных ИВТАНТЕРМО.

При изэнтропическом сжатии ионизация гелия начинается при давлении  $P = 118$  ГПа и температуре  $T = 12000$  К, что согласуется с данными [2].

Результаты расчетов с различными значениями начальной плотности жидкого гелия, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [2 - 4] и расчетами МК, выполненными с использованием программного пакета MCCCSTowhee [5] с заданием межчастичного потенциала Exр-6.

Таким образом, совпадение экспериментальных данных и расчетных значений доказывает справедливость данной методики при исследовании гелия во флюидном состоянии и возможность её применения для изучения атмосферы планет-гигантов.

#### *Список литературы*

1. Victorov S.B., Gubin S.A., Maklashova I.V., Revyakin I.I. // In: Energetic Materials, Ignition, Combustion and Detonation. 32nd Int. Annual Conf. of ICT, 2001, P. 69/1–69/15.
2. Zhernokletov M. V. et al. // JETP. Lett. 2012. **96**. 432–6.
3. Nellis W. J. and others // J. Physical Review Letters. 1984. V. 53. P. 1248-1251.
4. Eggert J. and others. // Phys. Rev. Lett. 100. 124503 (2008).
5. MCCCSTowhee. <http://towhee.sourceforge.net>.

З.И. МАМЕДОВ, С.А. ГУБИН, И.В. МАКЛАШОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРОДА ВО ФЛЮИДНЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Проведены термодинамические расчеты системы, состоящей из молекул водорода во флюидном состоянии в диапазоне давлений до 400 ГПа. Рассчитаны изоэнтропии и ударные адиабаты. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными и расчетными данными, полученными методом Монте-Карло. Показана применимость методики для моделирования параметров состояния водорода во внутренних слоях планет-гигантов.

Z.I. MAMEDOV, S.A. GUBIN, I.V. MAKLASHOVA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **THE STUDY OF HYDROGEN IN THE FLUID STATE**

Thermodynamic calculations of a system consisting of hydrogen molecules in a fluid state in the pressure ranges up to 400 GPa were performed. The isoentropes and shock adiabats are calculated. The calculation results are consistent with the available experimental and calculated data obtained by the Monte Carlo method. The applicability of the method for modeling the state parameters of hydrogen in the inner layers of giant planets is shown.

Водород является самым распространенным химическим элементом во Вселенной. По этой причине его изучение привлекает внимание многочисленных исследователей. Особый интерес представляют физические свойства водорода в мегабарном диапазоне давлений, что соответствует внутренним слоям планет-гигантов Солнечной системы, активно изучаемых в настоящее время.

Рассматривается ансамбль одинаковых молекул водорода, взаимодействующих между собой со сферически симметричным межмолекулярным потенциалом E<sub>хр-6</sub>.

Рассчитывалось изоэнтропическое и ударно-волновое сжатие водорода в области высоких давлений и температур. В исходном состоянии водород находится в жидком состоянии с заданной плотностью ( $\rho_0=0.0630$  г/см<sup>3</sup>,  $P_0=0.15$  ГПа;  $\rho_0=0.0867$  г/см<sup>3</sup>,  $P_0=0.30$  ГПа). В результате изоэнтропического и ударно-волнового сжатия молекулярный водород диссоциирует с образованием смеси, состоящей из молекул и атомов. Также при высокой температуре частицы H<sub>2</sub> и H ионизируются с образованием соответствующих ионов (H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sup>+</sup> и e).

Таким образом, исследуемая система представляет собой многокомпонентную смесь, состоящую из следующих частиц: H<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sup>+</sup> и e.

Расчет данной системы производится с использованием модели эффективного однокомпонентного флюида Ван дер Ваальса. В данной модели многокомпонентная смесь флюидов рассматривается как гипотетический (эффективный) однокомпонентный флюид. Потенциальные параметры эффективного флюида определяются через параметры потенциалов межмолекулярного взаимодействия молекул и атомов многокомпонентной смеси.

Проведены равновесные термодинамические расчеты с использованием программного комплекса TDS [1], в котором термодинамические свойства флюидных (газообразных сверхкритических) веществ рассчитывались на основе теоретически обоснованной модели уравнения состояния (УРС) газовой (флюидной) фазы.

В качестве калорического УРС использовалась база данных ИВТАНТЕРМО.

Взаимодействие между ионами и электронами учитывалось заданием энергии кулоновского потенциала.

Результаты расчетов с различными значениями начальной плотности жидкого водорода, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [2, 3] и расчетами МК, выполненными с использованием программного пакета MCCCS Towhee [4] с заданием межчастичного потенциала Exр-6

Таким образом, совпадение экспериментальных данных и расчетных значений доказывает справедливость данной методики при исследовании водорода во флюидном состоянии и возможность её применения для изучения атмосферы планет-гигантов.

#### *Список литературы*

6. Victorov S.B., Gubin S.A., Maklashova I.V., Revyakin I.I. // In: Energetic Materials, Ignition, Combustion and Detonation. 32nd Int. Annual Conf. of ICT, 2001, P. 69/1–69/15.
7. Медведев А. Б. // Физика горения и взрыва. 2016. P. 3-14.
8. Brygoo S. and others // J. of Appl. Phys. 2015. Vol. 118. P. 195901.
9. MCCCS Towhee. <http://towhee.sourceforge.net>.

С.П. МЕДВЕДЕВ<sup>1</sup>, А.Н. ИВАНЦОВ<sup>1</sup>, С.В. ХОМИК<sup>1</sup>,  
М.В. СИЛЬНИКОВ<sup>1,2</sup>, А.И. МИХАЙЛИН<sup>2</sup>, Э.К. АНДЕРЖАНОВ<sup>1</sup>, А.М.  
ТЕРЕЗА<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики  
им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>ЗАО «НПО Специальных материалов», Санкт-Петербург, Россия

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СФЕРИЧЕСКИХ УДАРНЫХ ВОЛН ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЗРЫВА НА КОНИЧЕСКОЙ УДАРНОЙ ТРУБЕ**

Рассмотрена задача моделирования сферических ударных волн при разрыве сосуда высокого давления и взрыве заряда конденсированного взрывчатого вещества с помощью конической ударной трубы. Выявлены особенности течения в конической ударной трубе, связанные с влиянием ограничивающей стенки.

S.P. MEDVEDEV<sup>1</sup>, A.N. IVANTSOV<sup>1</sup>, S.V.KHOMIK<sup>1</sup>,  
M.V. SILNIKOV<sup>1,2</sup>, A.I. MIKHAYLIN<sup>2</sup>, E.K. ANDERZHANOV<sup>1</sup>,  
A.M. TEREZA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Special Materials Corp., St. Petersburg, Russia

## **SIMULATION OF SPHERICAL SHOCK WAVES FROM VARIOUS EXPLOSION SOURCES IN A CONICAL SHOCK TUBE**

The object of investigation is simulation of spherical shock waves from burst of a high-pressure vessel and detonation of the HE charge using a conical shock tube. The flow features in a conical shock tube associated with the influence of the bounding wall are revealed

Значительный интерес в связи с решением проблем взрывобезопасности и противодействия терроризму представляет моделирование сферических ударных волн (СУВ) при взрыве зарядов конденсированного взрывчатого вещества (КВВ) и разрыве сосудов высокого давления (СВД). КВВ по сравнению с СВД характеризуются на порядки большей скоростью энерговыделения и интенсивностью ударной волны в ближней зоне. Несмотря на такие существенные отличия, исследование действия взрыва КВВ и СВД возможно провести по единой (универсальной) методике. Примером такой методики является коническая ударная труба (КУТ), показавшая свою эффективность при моделировании действия взрыва от различных источников [1].

Несмотря на геометрическое соответствие сфере, течение в КУТ подвергается влиянию ограничивающей стенки. Для оценки степени этого влияния на параметры ударных волн проведен анализ результатов трехмерного

численного моделирования, выполненного с использованием пакета газодинамических расчетов GAS DYNAMICS TOOL (GDT) [2]. Объектом моделирования являлась коническая ударная труба КУТ-38 длиной 1 м с углом раствора 38°. Результаты, полученные для КУТ сравнивались с расчетным полем течения в случае взрыва в открытом пространстве. Установлено, что в случае СВД фронт основной ударной волны, распространяющейся в КУТ имеет форму, близкую к сферической. Основные отличия от СУВ проявляются при формировании вторичной ударной волны, направленной к центру взрыва. Эта волна распространяется по сужающемуся сечению КУТ в условиях неоднородного поля скорости и плотности. В пристеночной области скорость газа меньше, чем на оси трубы. Это приводит к бифуркации вторичной волны. Картина течения существенно искажается поперечными возмущениями. В результате в расчетных профилях давления наблюдаются колебания на фазе разрежения, и практически отсутствует вторичная фаза сжатия. Эти особенности соответствуют экспериментальным наблюдениям. Расчеты поля течения в КУТ при взрыве заряда КВВ показали, что из-за сильных поперечных волн сжатия в ближней зоне взрыва первоначально сферическая форма фронта волны искажается, наблюдается немонотонный характер изменения амплитуды ударной волны по длине и сечению КУТ. Также следует отметить практическое отсутствие фазы разрежения взрывной волны в КУТ по сравнению с СУВ в открытом пространстве. Выявленные особенности должны учитываться при обосновании методики моделирования действия взрыва с помощью конической ударной трубы, а также при определении тротилового эквивалента различных источников взрыва.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-19-00554)

#### *Список литературы*

1. Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Поленов А.Н., Хомик С.В. // Изв. РАН, МЖГ. 1997. №5. С. 144-161.
2. Зибаров А.В. Пакет прикладных программ GAS DYNAMICS TOOL и его применение в задачах численного моделирования газодинамических процессов. Дис. ...д-ра физ.-мат. наук: 05.13.16 - Тула, 2000, 307 с.

Г.Э. НОРМАН

*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва, Россия, Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Россия*

## **КЛАССИЧЕСКОЕ И КВАНТОВОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

Сделан краткий обзор возможностей этого подхода на конкретных примерах: образование полуметаллического молекулярного водорода под давлением, его металлизация; предсказание вязкости углеводородов под давлением; обнаружение кинетических сингулярностей в точках перехода от равновесного к метастабильному состоянию; взаимодействие лазерного излучения с веществом и warm dense matter. Приводятся примеры многомасштабных подходов трёх типов

G.E. NORMAN

*National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia, Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences Moscow, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Russia*

## **CLASSIC AND QUANTUM ATOMISTIC MULTI-SCALE MODELING AND SIMULATION IN CONDENSED MATTER PHYSICS**

A brief overview of the possibilities of this approach with specific examples is given: formation of semimetal molecular hydrogen under pressure, its metallization; predicting hydrocarbons viscosity under pressure; detection of kinetic singularities at the points of transition from equilibrium to metastable state; interaction of laser radiation with matter and warm dense matter. Examples of multiscale approaches of three types are given.

Этот подход зародился в конце 1950-х и сейчас превратился в прорывное направление теоретической физики на стыке с вычислительной физикой. Имеется в виду вооружённость лучшими вычислительными средствами, в первую очередь, суперкомпьютерными технологиями. Теоретическая сила подхода заключается в том, что исходными выражениями в расчётах являются первопринципные уравнения (уравнения Ньютона и Шредингера для систем взаимодействующих частиц и т.п.) и задачей является внести минимум приближений в процессе решения, а также, в случае необходимости, в процессе дальнейшего построения многомасштабной иерархической лестницы.

В докладе делается краткий обзор существующих и перспективных возможностей этого подхода. Основные идеи иллюстрируются примерами с упором на результаты нашего коллектива, в основном, недавние, в частности, с отсылками на секционные доклады этой конференции.

Первым примером поясняется основная идея подхода: показано, как уравнения Ньютона для ионов с расчётом сил между ними по теории функционала плотности приводят при повышении давления, без дополнительных внешних воздействий, к последовательности фазовых превращений в кристаллическом водороде, вначале в молекулярной фазе, включая появление полуметаллического молекулярного водорода (доклад И. Саитова), а затем и к его металлизации с базисами, отличными от простой протонной решётки. Рассмотрена метастабильная фаза при снижении давления.

Ярким примером предсказательных возможностей подхода являются Индустриальные конкурсы в США по определению вязкости углеводородов под давлением, когда результаты расчётов предъявляются в оргкомитет до объявления результатов проведенных параллельно экспериментальных измерений (доклад Н. Кондратюка).

Примером обнаружения нового эффекта являются кинетические сингулярности, найденные в переходной области от равновесного к метастабильному состоянию при изохорическом охлаждении Леннард-Джонсовских пара и жидкости, и металлического расплава. Другой пример – механизм движения пузырей в ОЦК решетке урана (доклад А. Антропова), т.е. из области радиационного материаловедения.

Группа вопросов связана с взаимодействием лазерного излучения с веществом и warm dense matter. Плазменный фазовый переход рассматривается как механизм фазового перехода первого рода флюид- флюид в warm dense hydrogen. Отрыв электронной температуры под воздействием лазерного импульса требует введения потенциала межатомного взаимодействия, зависящего от температуры. Фуллерены с вложенной структурой образуются при сверхбыстром охлаждении чистого углеродного газа, возникшего при лазерном нагреве (доклад Г. Остроумовой).

Приводятся примеры многомасштабных подходов трёх типов: (а) сопряжение атомистического моделирования и уравнений механики сплошной среды при рассмотрении фильтрации газоконденсатов применительно к задачам газодобычи, (б) несколько уровней огрубления атомистического описания при предсказании структуры рецептора инсулина, (в) сопряжение трёх пространственных масштабов при рассмотрении свойств наночастиц цемента и глины, используемых для захоронения радиоактивных отходов.

В заключение обсуждаются проблемы атомистического моделирования. В области теоретической физики это причины возникновения необратимости, описание переплетённых (entangled) состояний, декогеренции и др. В области computer science – построение в России суперкомпьютеров с топологией, адекватной этому подходу и задачам на сетках.

Г.М. ОСТРОУМОВА, Н.Д. ОРЕХОВ, В.В. СТЕГАЙЛОВ  
*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*  
*Объединенный институт высоких температур, Москва, Россия*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НУКЛЕАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИОННЫХ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Образование углеродных наночастиц - важный вид сложных неравновесных процессов, требующих точного атомистического теоретического осмысления. В данной работе рассматривается процесс сверхбыстрого охлаждения чистого углеродного газа, приводящий к образованию фуллерена с вложенной структурой. Моделирование проведено молекулярно-динамическими методами с использованием реакционной модели ReaxFF. Изучены стадии образования фуллереноподобных наночастиц и определены соответствующие температурные интервалы.

G.M. OSTROUMOVA, N.D. OREKHOV, V.V. STEGAILOV

*Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow Region, Dolgoprudny, Russia*  
*Joint Institute for High Temperatures of the RAS, Moscow, Russia*

## **REACTIVE MOLECULAR-DYNAMICS STUDY OF CARBON NANOPARTICLE FORMATION**

Formation of carbon nanoparticles is an important type of complex non-equilibrium processes that require precise atomistic theoretical understanding. In this work, we consider the process of ultrafast cooling of pure carbon gas that results in nucleation of an onion-like fullerene. The model is based on molecular dynamics simulation with the interaction between carbon atoms described via a reactive ReaxFF model. We study the consecutive stages of fullerene-like nanoparticle formation and identify the corresponding temperature ranges.

Свойства таких углеродных наноструктур, как графены, фуллерены, нанотрубки, привлекают внимание исследователей уже несколько десятков лет. Применимость данных соединений в промышленных областях (энергетика, электроника, авиация и т.д.) огромна благодаря интересным свойствам материалов (повышенные прочность, износостойкость, тепло- и электропроводность и т.д.). Целью данной работы является исследование механизмов и поиск параметров, которые позволят упростить и понять механизм нуклеации углеродных структур.

Для изучения процесса нуклеации в данной работе используются методы молекулярной динамики (МД), т.к. образование критического зародыша - это процесс, который требует атомистического уровня описания. Помимо этого, исследование нуклеации требует точной модели, которая способна описать образование и разрыв химических связей, а также различные варианты гибридизаций ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ). В данной работе детальное теоретическое

исследование процесса нуклеации углеродных структур проводится методами молекулярной динамики с использованием реакционного межатомного потенциала ReaxFF (Reactive Force Field) [1], который способен описывать изменение типа химической связи.

Известно, что такие параметры синтеза, как температура, давление, плотность газа и присутствие катализаторов самым критичным образом влияют не только на геометрию, но и на образование структуры в принципе. Мы обнаружили, что при сверхбыстром охлаждении углеродного атомарного газа от 6000 К до 2500 К образуется фуллерен вложенного («луковичного») типа. В эксперименте такой резкий градиент температуры характерен для лазерного нагрева.

В процессе нуклеации мы выделили 3 стадии образования наночастицы (рис. 1): 1) полимерный неплотный гель, 2) аморфная капля и 3) графитизированная частица луковичного типа [2].

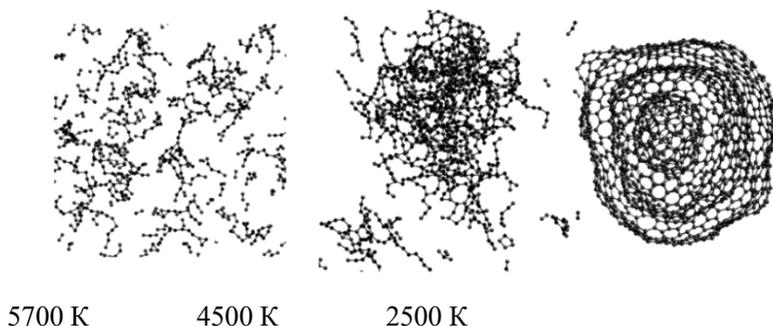


Рис. 1. Стадии формирования фуллерена «луковичного» типа в процессе охлаждения углеродного газа от 6000 К до 2500 К.

Большой интерес для анализа представляет трансформация аморфной капли в фуллерен. Было показано, что переход жидкость – твердое тело происходит в узком диапазоне температур и связан с процессом графитизации.

*Список литературы*

1. A.C.T. Van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard III // J. Phys. Chem. A, 2001, V. 105 (41), P. 9396–9409.
2. G.M. Ostroumova, N.D. Orekhov, V.V. Stegailov // Diam. Rel. Mater., 2019, V. 94, P. 14-20.

**Д.С. ПЛАКСИНА**

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

## **ПАТЕНТНАЯ АНАЛИТИКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТУШЕНИЯ РЕЗЕРВУАРОВ**

Рассмотрена возможность использования патентных исследований для анализа и определения перспективных направлений исследования в тушении резервуарных парков. Выявление достоинств и недостатков существующих устройств и способов пожаротушения.

**D.S. PLAKSINA**

*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute)*

## **PATENTS ANALITICS FROM RESEARCH IN THE EXTINGUISHING OF TANK**

The possibility of using patent research to analyze and determine promising areas of research in the extinguishing of tank farms is considered. Identification of the advantages and disadvantages of existing fire extinguishing devices.

Полезным инструментом в сопоставлении перспективных технологий является патентная аналитика (комплексное исследование рынков патентования: технологий, способов, изобретений).

Благодаря патентным источникам, можно оценить направления развития научной мысли: проследить актуальность исследования каждого устройства и способа; определить уровень техники в области исследования, а именно, горения и тушения резервуарных парков.

Оценка уровня техники позволяет выявить аномалии и устойчивые тенденции, раскрытой на примере тушения пожара на резервуарных парках.

При проведении патентной аналитики проводилось исследование на основе следующих технологий (способов) тушения пожаров нефти и нефтепродуктов [1, 2]:

1) применение воздушно-механических при осуществлении подачи подслоино (под верхний слой нефтепродукта) или при подаче сверху на слой горящего нефтепродукта (надслоино);

2) применение распыленной воды (для охлаждения поверхностного слоя горячей жидкости до температуры ниже температуры вспышки; для орошения стенки резервуара);

3) применение огнетушащих порошковых составов с различной интенсивностью подачи;

4) применение диоксида углерода в качестве огнетушащего вещества (осуществляя подачу из изотермического модуля; разбавляя воздух вокруг пожара);

5) применение газопорошкового состава (внести наиболее известные способы).

Главным преимуществом аналитического исследования патентной информации, опубликованной патентными ведомствами всех стран мира, является обязательность уровня технологического раскрытия: патентные документы для прохождения экспертизы должны содержать гораздо более детальное технологическое описание новизны предлагаемой технологии или устройства по сравнению с научными публикациями.

Построение патентного ландшафта позволяет выполнять всесторонний анализ родственных областей исследований, концентрируясь как на общих тенденциях характерных для любого способа пожаротушения, так и исследуя особенности каждого конкретного способа.

Тенденция в современном обществе говорят о востребованности конкретного способа пожаротушения (пенного, порошкового, аэрозольного, газового), а их совместного использования.

Принимая во внимание причины неэффективности используемых способов тушения пожаров, выявленные на основе практического анализа проблем, возникающих при тушении пожаров нефти и нефтепродуктов в резервуарах [3], определенно перспективным направлением в тушении пожаров резервуарных парков является тушение с помощью импульсных установок пожаротушения газоаэрозоленасыщенной пеной [4, 5].

#### *Список литературы*

1. Шароварников А.Ф., Молчанов В.П., Воевода С.С., Шароварников С.А. Тушение пожаров нефти и нефтепродуктов. М.: калан, 2002. 448 с.
2. Безродный И.О., Гилетич А.Н., Меркулов В.А. Тушение нефти и нефтепродуктов. Пособие. М.: ВНИИПО. 1996. 216 с.
3. Копылов С.Н., Копылов Н.П., Копылов П.С., Елтышев И.П. // Огнезащита и пожарная безопасность объектов нефтегазового комплекса, г. Тюмень. 2018.
4. Копылов Н.П., Кузнецов А.Е., Родионов Е.С., Федоткин Д.В., Орлов Л.А., Плаксина Д.С., Сенчишак Т.И., Кононов Б.В. // Пожарная безопасность. 2016. №3. С. 85-93.
5. Плаксина Д.С. // V Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии – ЛаПлаз-2019» сборник научных трудов. Москва. 2019. С. 315-316.

В.А. ПУШКОВ, Ю.В. БАТЬКОВ

*Саровский физико-технический институт – филиал Национального исследовательского ядерного университета МИФИ, Саров, Россия*

## **ДИНАМИЧЕСКОЕ РАСТЯЖЕНИЕ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АМЦ НА УСТАНОВКЕ СОСТАВНОГО СТЕРЖНЯ ГОПКИНСОНА**

Рассмотрены некоторые аспекты изучения динамического растяжения материалов по методу составного стержня Гопкинсона (ССГ). Обсуждены результаты опытов по динамическому растяжению сплава АМц при скоростях деформации 1200-1350 с<sup>-1</sup>, полученные по модифицированному методу ССГ.

V.A. PUSHKOV, Yu.V. BATKOV

*Sarov Physical & Technical Institute - National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **DYNAMIC TENSION OF ALUMINUM ALLOY AMTS IN A FACILITY OF SPLIT HOPKINSON BAR**

Some aspects of studying of material dynamic tension by using the Split Hopkinson Bar method (SHB) are considered. The results of experiments obtained by a modified SHB method for testing the dynamic tension of the aluminum alloy AMts at strain rates of 1200-1350 s<sup>-1</sup> are discussed.

Среди методов изучения динамических механических характеристик материалов при скоростях деформации 10<sup>2</sup>-10<sup>4</sup> с<sup>-1</sup> широкое распространение получил метод составного стержня Гопкинсона (ССГ) или метод Кольского [1]. Метод широко используется в разных странах, в том числе в России, например, во ВНИИЭФ [2] и в НИИ Механики ННГУ [3].

Для проведения опытов на динамическое растяжение ранее в методе ССГ применялись образцы колпачкового типа [4]. При этом нагружающий стержень вставлялся в колпачок, а фланцы колпачка опирались на опорный стержень в виде трубки. С точки зрения расчетного описания более предпочтительными являются сплошные цилиндрические образцы галтельного типа, которые закрепляются на резьбе в нагружающий и опорный стержень (оба стержня сплошные). При нагружении цилиндрическая рабочая часть образца при нагружении будет находиться в более однородном напряженно-деформированном состоянии. Используя такой подход, метод ССГ был модернизирован и была создана установка для изучения динамического растяжения материалов [2]. Были проведены тестовые опыты по динамическому растяжению АМц при скоростях деформации 1200-1350 с<sup>-1</sup>. Процесс деформирования и разрушения регистрировался скоростной видеокамерой. На рисунке 1 приведены диаграммы  $\sigma$ - $\varepsilon$  динамического растяжения АМц и кадры

видеосъемки одного из опытов, где образец находится перед разрушением с

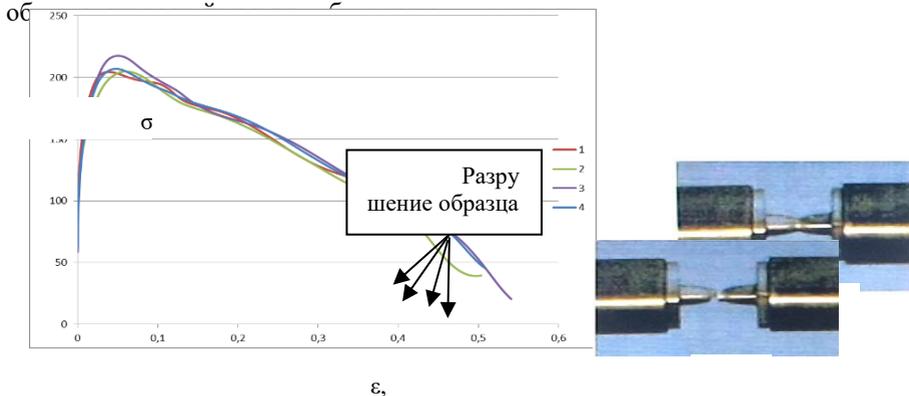


Рисунок 1 - Диаграммы  $\sigma$ - $\epsilon$  динамического растяжения АМц при  $\dot{\epsilon} = 1200$ - $1350 \text{ c}^{-1}$  (а) и видеокдры образца АМц перед разрушением (б) и разрушенного образца (в)

В целом можно отметить, что описанный подход позволяет проводить исследования динамического растяжения конструкционных материалов по модифицированному методу ССГ. Выполненные при скоростях деформации  $1200$ - $1350 \text{ c}^{-1}$  тестовые эксперименты по динамическому растяжению алюминиевого сплава АМц показали, что полученные прочностные и пластические характеристики согласуются с имеющимися литературными данными при динамическом и статическом растяжении.

#### Список литературы

1. Н. Kol'sky // Proceedings of the Physical Society, Section B, 62, 1949. Pp. 676-700c.
2. V. Pushkov, A. Yurlov, V. Leonov, A. Tsibikov, T. Naydanova // Proceedings of the 12<sup>th</sup> DYMAT International Conference, France, Arcachon, EDP Sciences, 2018. Pp. 2036/1-02036/3.
3. A. Bragov, A. Konstantinov, L. Kruszka, A. Lomunov, A. Filippov // Proceedings of the 12<sup>th</sup> DYMAT International Conference, France, Arcachon, EDP Sciences, 2018. Pp. 02035/1-02036/5.
4. U.S.Lindholm, L.M.Yeakley // Exp.Mech., 1, 1968. Pp.1-9.

И.А. САДЫКОВ<sup>1</sup>, С.М. ФРОЛОВ<sup>1,2</sup>, К.А. АВДЕЕВ<sup>1</sup>,  
В.С. АКСЕНОВ<sup>1,2</sup>, И.О. ШАМШИН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова  
Российской академии наук, Москва, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## **БУКСИРУЕМАЯ МОДЕЛЬ СУДНА С ГОРЕНИЕМ ТОПЛИВНОЙ СМЕСИ В ДНИЩЕВОЙ КАВЕРНЕ**

Проведены расчётно-экспериментальные исследования процесса горения топливно-воздушной смеси в газовой каверне под днищем судна. Определены подъёмная и тяговая силы. На основе полученных результатов спроектирована, изготовлена и подготовлена к испытаниям буксируемая модель судна с газовой днищевой каверной с возможностью организовать пульсирующее горение топливной смеси в объеме каверны. Проведены предварительные испытания буксируемой модели судна на открытой воде.

I.A. SADYKOV<sup>1</sup>, S.M. FROLOV<sup>1,2</sup>, K.A. AVDEEV<sup>1</sup>, V.S. AKSENOV<sup>1,2</sup>,  
I.O. SHAMSHIN<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics  
of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPHI, Moscow, Russia*

## **TOWED MODEL OF A BOAT WITH FUEL BURNING IN THE BOTTOM GAS CAVITY**

Computational and experimental studies of combustion of fuel-air mixture in the gas cavity under the bottom of a boat have been performed. The lifting and propulsive forces are determined. Based on the results of the studies the towed boat model with the bottom gas cavity with the ability to arrange pulsed combustion of a fuel mixture is designed, fabricated and prepared for testing. Preliminary tests of the towed boat model in open water have been performed.

Газовая каверна, формируемая под днищем судна за счет профилировки его дна и обводов, при подаче воздуха способна существенно уменьшить его гидродинамическое сопротивление. В [1, 2] к подаваемому в каверну воздуху предложено добавлять горючее и организовать в ней стационарное или пульсирующее горение топливно-воздушной смеси. При правильной организации процесса горения в каверне тепловое расширение продуктов горения может обеспечить дополнительную подъёмную силу, снижающую площадь контакта днища судна с водой, а также движущую силу благодаря воздействию давления продуктов горения на плоские вертикальные участки днища судна – реданы. В [2] проведены расчётно-экспериментальные исследования процессов, протекающих в модельной газовой каверне на режимах холодной продувки (чистым воздухом) и непрерывного горения

стехиометрической смеси пропан-бутана с воздухом. Полученные результаты показали, что в обоих случаях возникает подъёмная и движущая силы, которые позволят снизить гидродинамическое сопротивление, а также даст дополнительное усилие к движению судна. С учётом полученных результатов спроектирована и изготовлена буксируемая модель судна с газовой каверной. Для проведения экспериментальных исследований разработана мобильная лабораторная установка, состоящая из катера-буксировщика с тягоизмерительной штангой, буксируемой модели с газовой днищевой каверной и форкамерой, а также систем подачи топлива и воздуха, зажигания, измерения толкающего усилия и датчиков давления. Все эксперименты проведены на открытой воде при постоянной скорости движения связки «катер-буксировщик – буксируемая модель» не менее 5 м/с и частоте рабочего процесса в каверне от 4 до 10 Гц.

Работа выполнена за счет субсидий ФИЦ ХФ РАН и ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН на выполнение госзаданий по темам 0082-2016- 0011 (AAAA-A17-117040610346-5) и 0065-2019-0005 (AAAA-A19-119011590092-6) соответственно, а также при поддержке РФФИ (проект 16-29- 01065офи-м).

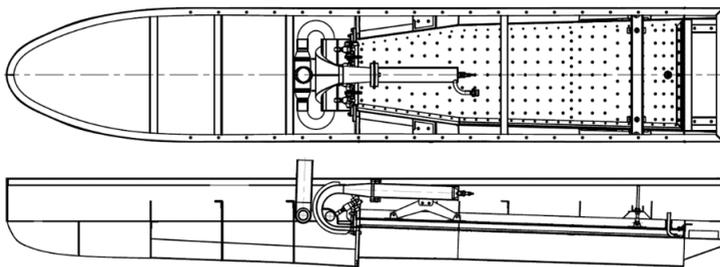


Рис. 1. Сборочный чертеж буксируемой модели судна с газовой каверной  
*Список литературы*

1. Фролов С.М., Платонов С.В., Авдеев К.А., Аксёнов В.С., Иванов В.С., Зангиев А.Э., Коваль А.С., Фролов Ф.С. // Горение и взрыв, 2016, т. 9, №4, с. 12-21.
2. Фролов С.М., Платонов С.В., Авдеев К.А., Аксёнов В.С., Зангиев А.Э., Садыков И.А., Шамшин И.О. // Горение и взрыв, 2018, том 11, №3, с. 60-73.

Г.Э. НОРМАН, И.М. САИТОВ

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

## **ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВОДОРОД ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

Получены полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при температуре 100 К в диапазоне давлений от 410 до 626 ГПа. Для анализа характера проводимости проводится расчет зонной структуры в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала HSE. Одно из полуметаллических состояний возникает в моноклинной структуре с симметрией  $C2/c$  при сжатии до давления 410 ГПа, при котором происходит закрытие щели между валентной зоной и зоной проводимости. Причем валентная зона является частично незаполненной, а зона проводимости - частично заполненной, что является характерным признаком полуметалла. При давлении 302 ГПа кристаллический молекулярный водород со структурой  $C2/c$  остается изолятором. Найдена зависимость электропроводности от давления для 300-500 ГПа. Второе полуметаллическое состояние наблюдается для ромбической структуры с симметрией  $Cmca-4$  при давлении 626 ГПа.

G.E. NORMAN, I.M. SAITOV

*Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences Moscow, Russia*

## **SEMIMETALIC CRYSTALLINE MOLECULAR HYDROGEN AT HIGH PRESSURES**

Semimetallic states of crystalline molecular hydrogen are obtained at a temperature of 100 K in a pressure range from 410 to 626 GPa. To analyze the nature of the conductivity, the band structure is calculated within the framework of the density functional theory using the HSE hybrid exchange-correlation functional. One of the semimetallic states arises in a monoclinic structure with  $C2/c$  symmetry upon compression to a pressure of 410 GPa, at which the gap between the valence band and the conduction band is closed. Moreover, the valence band is partially unfilled, and the conduction band is partially filled, which is a characteristic sign of semimetal. At a pressure of 302 GPa, crystalline molecular hydrogen with a  $C2/c$  structure remains an insulator. The pressure dependence of electrical conductivity is found for 300-500 GPa. The second semi-metallic state is observed for a orthorhombic structure with  $Cmca-4$  symmetry at a pressure of 626 GPa.

Проблема металлизации кристаллического молекулярного водорода при повышении давления теоретически исследуется с 1935 года; предполагалось, что молекулы водорода диссоциируют, образуя объёмно-центрированную кубическую кристаллическую решетку с одним протоном в элементарной ячейке [1]. В русле этого предположения продолжены первопринципные теоретические подходы, основанные на теории функционала плотности (ТФП) и квантовом методе Монте-Карло, которые предсказывают возможность существования стабильной атомарной структуры кристаллического водорода в диапазоне давлений от 370 до 500 ГПа. Было показано также, что вплоть до

атмосферного давления атомарный металлический водород может существовать в метастабильном состоянии [2, 3]. Первые экспериментальные указания на образование кристаллического металлического водорода предположительно были зафиксированы в работе [4] при давлениях 495 и 425 ГПа, соответственно.

Вместе с тем было обнаружено, что относительно высокие проводимости могут наблюдаться и в кристаллическом молекулярном водороде, т.е. в условиях, когда молекулы остаются недиссоциированными. Появился даже термин металлический молекулярный водород. Структура водорода при давлениях выше 200 ГПа является моноклинной с симметрией  $C2/c$  с 12-ю атомами в элементарной ячейке. Полученные значения удельного сопротивления кристаллического молекулярного водорода являются типичными для полуметаллов, в частности, для висмута. Это наталкивает на мысль, что молекулярные кристаллы водорода являются полуметаллами в указанных выше условиях. Однако зонная структура этих кристаллов не исследовалась. Этому вопросу посвящена настоящая работа. Рассматриваются структуры кристаллического молекулярного водорода, полученные в работе [5] при сжатии вдоль изотермы 100 К: моноклинная структура с симметрией  $C2/c$  и ромбическая структура с симметрией  $Srca-4$ . Наблюдается перекрытие зоны проводимости и валентной зоны на уровне Ферми, причем валентная зона оказывается частично незаполненной при частично заполненной зоне проводимости. Найденные зонные структуры и электропроводность позволяют отнести их к полуметаллам. Рассмотрен диапазон давлений  $P = 302-626$  ГПа. Приведены результаты расчёта зависимости электропроводности от давления для структуры  $C2/c$ .

Работа выполнена при поддержке РНФ по гранту 18-19-00734.

#### *Список литературы*

1. Wigner E., Huntington H. B. // J. Chem. Phys. 1935. Vol. 3. P. 764 – 770.
2. Ashcroft N.W. // Phys. Rev. Lett. 1968. Vol. 21. P. 1748–1749.
3. Бровман Е.Г., Каган Ю., Холас А. // ЖЭТФ 1972. Т. 62. С. 1492–1501.
4. Dias R., Silvera I. F. // Science. 2017. Vol. 355. P. 715 – 718.
5. Саитов И.М. // Письма в ЖЭТФ 2019. Т. 110 №3. С. 184-189.

Н.Н. СЕРЕДКИН<sup>1,2</sup>, С.А. КОНЮХОВ<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур (ОИВТ РАН), Москва, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>3</sup>Удмуртский государственный университет УдГУ, Ижевск, Россия

## **ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТУГОПЛАВКИХ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ (КАРБИДОВ И НИТРИДОВ МЕТАЛЛОВ IV ГРУППЫ) В ОБЛАСТИ ИХ ПЛАВЛЕНИЯ И ЖИДКОЙ ФАЗЫ (2000 – 5000 К)**

Целью данной работы является экспериментальное исследование свойств тугоплавких проводящих веществ в области плавления и жидкой фазе. В первую очередь, это относится к электронным свойствам – электросопротивлению, а также к тепловым свойствам (энтальпии, теплоемкости, тепловому расширению в зависимости от температуры). Карбиды и нитриды металлов IV группы предполагается использовать как в ядерной технике, так и в авиаракетостроении.

N.N. SEREDKIN<sup>1,2</sup>, S.A. KONYUKHOV<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

<sup>3</sup>Udmurt State University, Izhevsk, Russia

## **THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF REFRACTORY PROTECTIVE COATINGS (CARBIDES AND NITRIDES OF GROUP IV METALS) IN THE REGION OF THEIR MELTING AND LIQUID PHASE (2000 - 5000 K)**

The purpose of this work is to experimental study of the properties for refractory carbides and nitrides of group iv metals in the melting range and liquid phase. First of all, this refers to the electrical resistivity, as well as to the thermal properties (enthalpy, heat capacity, introduced energy). Group IV metal carbides and nitrides are supposed to be used both in nuclear engineering and in aircraft manufacturing.

Керамические материалы – карбиды и нитриды металлов имеют высокие температуры плавления – выше чем, у металлов, входящих в их состав, высокую химическую стойкость, высокие тепло- и электропроводность сравнимые с металлами [1, 2, 3].

Рассматривается импульсный нагрев током, как дающий более однородное тепловыделение по объему исследуемого вещества. Данным методом выполнено исследование образцов карбидов и нитридов металлов IV группы – ZrC, HfC, ZrN.

В широко известном справочнике [4] 1969 года представлены расчетные термодинамические данные для карбидов в основном для твердой фазы. Первые эксперименты по нагреву спеченных карбидов импульсом электрического тока (5 – 7 мкс) были выполнены в [5] без измерения температуры. Исследование карбидов получило дальнейшее развитие в эксперименте [6], в котором начато использование оптической регистрации температуры.

Определена температура плавления  $ZrN$ , которая составила 2700 К. Исследован диапазон температур солидус – ликвидус  $ZrC$  ( $C/Zr \approx 0,95$ ) равный 3500 – 3820 К.

Получены предварительные данные по температуре ликвидуса  $HfC$  –  $4200 \pm 100$  К.

#### Список литературы

1. Савватимский А.И., Онуфриев С.В., Мубояджан С.А., Середкин Н.Н. // Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии; Ивановский государственный химико-технологический университет. 2018.
2. Savvatimskiy A. I., Onufriev S. V., Muboyadzhyan S. A., Seredkin N. N. // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 891, conference. 1.
3. Savvatimskiy A. I. and others // Journal of the European Ceramic Society. 2019. Vol.39, № 4, P. 907-914.
4. Котельников Р.Б. и другие // Особо тугоплавкие элементы и соединения (справочник). М.: Металлургия, 1969. 372 с.
5. Knyazkov A.M., Kurbakov S.D., Savvatimskiy A.I. // High Temp. High Press. 2011. V. 40 (3–4). P. 349.
6. Онуфриев С.В., Савватимский А.И., Янчук В.И. // Измерит. Техника. 2011. № 8. С. 49.

А.А. АГАПОВ<sup>2</sup>, А.С. СОФЬИН<sup>2</sup>, С.И. СУМСКОЙ<sup>1</sup>,  
С.Х. ЗАЙНЕТДИНОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия <sup>2</sup> ЗАО  
«Научно-технический центр «Промышленная безопасность», Москва, Россия

## РАСШИРЕНИЕ СЖАТОГО ГАЗА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИИ

Работа посвящена моделированию цилиндрических ударных волн, этой задаче соответствует реальный процесс – аварийный разрыв газопровода. Рассмотрен численный метод расчета параметров таких ударных волн. Показано, что существующие методы не обеспечивают необходимую точность расчетов. Предложена схема обезразмеривания результатов численных одномерных расчетов взрывов с цилиндрической симметрией, показано, что результаты расчета с различными исходными данными имеют подобие. Для всего диапазона расстояний от трубопровода получены аналитические соотношения для расчета избыточного давления на фронте ударной волны при физическом взрыве на газопроводе.

А.А. АГАПОВ<sup>2</sup>, А.С. СОФИН<sup>2</sup>, С.И. СУМСКОЙ<sup>1</sup>,  
S.Kh. ZAINETDINOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup> National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup> CJSC Scientific technical center of industrial safety problems research,  
Moscow, Russia

## EXPANSION OF COMPRESSED GAS IN CYLINDRICAL GEOMETRY

The work is devoted to cylindrical shock wave propagation modeling, this task corresponds to a real process - rupture of a gas pipeline. A numerical method for calculating the parameters of such shock waves is considered. It is shown that existing methods do not provide the necessary accuracy of calculations. A scheme is proposed to obtain the dimensionless results of numerical one-dimensional calculations of explosions with cylindrical symmetry. It is shown that the calculation results with different initial data have similarities. For the all ranges of distances from the pipeline, analytical relationships have been obtained to calculate the excess pressure at the front of the shock wave during a physical explosion in the gas pipeline.

Задача о расширении сжатого газа в цилиндрической постановке имеет большое практическое значение: разрыв современных газопроводов бывает достаточно протяженным (несколько десятков диаметров). При этом из-за высокого давления в современных трубопроводах (свыше 200 атмосфер) образующиеся ударные волны, которые обладают высокой интенсивностью и способны принести большой ущерб.

В работе проведен обзор упрощенных отечественных и зарубежных моделей для расчета последствий физических взрывов, указаны их недостатки. Показана необходимость разработки более точных методов предсказания. Представлен подход к одномерному численному моделированию задачи физического взрыва при наличии пространственной симметрии. Проведена верификация указанной модели путем сравнения с экспериментальными данными. Проведены расчеты задач с расширением цилиндрических областей сжатого газа у поверхности земли (разрывы газопровода). Проведено сопоставление с результатами оценки последствий цилиндрического взрыва в трехмерной постановке. Показано, что результаты расчета, полученные с использованием различных численных методов хорошо согласуются. Предложена схема обезразмеривания результатов расчетов взрывов с цилиндрической симметрией. Показано, что результаты расчета с различными исходными данными имеют подобие. Получены аналитические соотношения для расчета избыточного давления на фронте ударной волны. Выполнено сопоставление результатов, полученных с помощью численных расчетов, разработанных аналитических соотношения, а также результатов, полученных по более ранним методикам. Сравнение показало, что применение численных расчетов и полученных аналитических соотношений позволяет получить наименее консервативные результаты по сравнению с более ранними подходами, которые не позволяли учитывать особенности физических взрывов для протяженных источников и могли занижать последствия таких взрывов, что является неприемлимым.

В заключение необходимо отметить, что расчеты с использованием численной модели, несмотря на то, что она, как правило, позволяет получить наименьшее завышение избыточных давлений на фронте ударной волны по сравнению с другими подходами, также является консервативными. Это объясняется тем, что в расчетах используется допущение о мгновенном разрушении оболочки, в которой находится сжатый газ. Результат оценки последствий может быть улучшен, если вместо мгновенного поступления газа в окружающую среду объем сжатого газа, контактирующего с окружающей средой, будет определяться с учетом скорости роста трещины в оболочке оборудования. Данный процесс может быть учтен при совершенствовании численной модели физического взрыва.

А.А.СТАНОВОВ, Е.Н. БОГДАНОВ

*Саровский физико-технический институт – филиал Национального исследовательского ядерного университета МИФИ, Саров, Россия*

## **УДАРНО-ВОЛНОВАЯ СЖИМАЕМОСТЬ НЕРЕАГИРУЮЩЕГО ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ ОКТОГЕНА**

Проанализированы основные методы определения параметров ударно-волнового сжатия и применяемые методики регистрации. Для экспериментов выбраны плоско-волновые нагружающие устройства, традиционно используемые при проведении исследований ударно-волновой сжимаемости. Такое устройство состоит из генератора плоской ударной волны, активного заряда ВВ и медного экрана, на поверхности которого располагается исследуемый образец.

A.A. STANOVOV, E.N. BOGDANOV

*Sarov Physical & Technical Institute - National Research Nuclear University MEPhI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **SHOCK-WAVE COMPRESSIBILITY OF NON-RESPONSIBLE EXPLOSIVE SUBSTANCE BASED ON OCTOGEN.**

The main methods for determining the parameters of shock wave compression and the applied registration methods are analyzed. For the experiments, plane-wave loading devices, traditionally used in studies of shock-wave compressibility, were selected. Such a device consists of a plane shock wave generator, an active explosive charge, and a copper screen, on the surface of which the sample under study is located.

Данные по ударно-волновой сжимаемости нереагирующих взрывчатых составов используются при проведении инженерных расчетов и оценок при определении параметров ударных волн во взрывчатом веществе, а также при калибровке и верификации моделей кинетики детонации, которые кроме системы уравнений газовой динамики и формальной кинетики включают уравнения состояния взрывчатого вещества и продуктов взрыва. Поскольку малые изменения параметров уравнения состояния нереагирующего взрывчатого вещества существенно влияют на результаты расчетов с использованием моделей кинетики детонации, определение параметров ударного сжатия ВВ с необходимой точностью является актуальной задачей.

Целью работы является определение параметров ударно-волнового сжатия нереагирующего ВВ на основе октогена в диапазоне давлений до 5 ГПа.

Для определения параметров ударного сжатия применялся метод отражения ударных адиабат [1]. Исследования проведены с использованием взрывных нагружающих устройств с медными экранами, на которых размещались образцы ВВ.

Для определения кинематических параметров течений использованы две методики невозмущающей диагностики: гетеродин-интерферометр PDV и радиоинтерферометр [2]. Гетеродин-интерферометром определялись параметры исходного состояния в экранах нагружающих устройств и интервалы движения ударной волны по образцам ВВ. Радиоинтерферометром независимо определялись значения волновой и массовой скорости в образцах ВВ.

В результате проведенных экспериментов определены параметры состояний на ударной адиабате нереагирующего ВВ на основе октогена в диапазоне давлений 2-4 ГПа.

*Список литературы*

1. Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках. - Монография / Под общ.ред. д-ра физ-мат.наук М.В. Жерноклетова, 2-е изд., доп. и испр. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2005, 428 с.
2. Невозмущающие методы диагностики быстропротекающих процессов / Под ред. доктора техн. наук А.Л. Михайлова. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2015. 322 с.

М.Е. СТЕПАНОВ<sup>1</sup>, М.И. КУЛИШ<sup>1</sup>, А.В. КАРАБУЛИН<sup>1,2,3</sup>,  
В.И. МАТЮШЕНКО<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

<sup>4</sup>*Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук в г. Черноголовке*

## **ПИРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОНДЕНСАЦИИ НАНОЧАСТИЦ В ГАЗООБРАЗНОМ И СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ**

Изучалось тепловое излучение, сопровождающее конденсацию продуктов импульсной лазерной абляции металлической мишени в гелии (газообразном при разных давлениях; и в жидком (сверхтекучем)). Измерения, проведенные по специальной пирометрической методике, показали, что характеристики излучения зависят от среды. Полученные данные позволяют сделать вывод о том, что источниками излучения в газе являются преимущественно субмикронные частицы, тогда как в жидком гелии – нанометровые, что подтверждается данными электронной микроскопии.

М.Е. STEPANOV<sup>1</sup>, М.И. KULISH<sup>1</sup>, А.В. KARABULIN<sup>1,2,3</sup>, В.И. MATYUSHENKO<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Problems of Chemical Physics, RAS, Chernogolovka, Russia*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*Joint Institute for High Temperatures (RAS), Moscow, Russia*

<sup>4</sup>*Chernogolovka Branch of the N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics  
(RAS), Chernogolovka, Russia*

## **PYROMETRIC INVESTIGATION OF NANOPARTICLES CONDENSATION PROCESS IN GASEOUS AND SUPERFLUID HELIUM**

Condensation-accompanied thermal emission of metallic particles produced by pulsed laser ablation in gaseous helium at different pressures as well as in superfluid helium was studied within the present work. Measurements performed with a special pyrometric technique have shown that emission features depend on the medium. The findings let one to imply that the main sources of emission in the case of gaseous medium are submicron particles, whereas in superfluid helium they are nanometer-sized particles.

Лазерная абляция считается удобным и универсальным способом для создания наночастиц. Продуктами её, как правило, являются шарообразные кластеры с широким распределением по размерам (от единиц до сотен нанометров). Однако проведение абляции в сверхтекучем гелии приводит к появлению крайне необычных продуктов [1] – сетей из тонких нанопроволок

(диаметрами  $\sim 2$  нм для вольфрама). Такое поведение должно быть связано со специфическими свойствами сверхтекучего гелия – его рекордной теплопроводностью, наличием квантованных вихрей, что рождает интерес к изучению динамики происходящих при этом процессов. О таких процессах можно пытаться судить количественно, изучая особенности сопровождающего их излучения (рис.1). Из того, что при приблизительно равных температурах, интенсивности излучения резко отличаются начальной амплитудой и скоростью спада, можно сделать вывод о преимущественных размерах излучающих центров для разных сред.

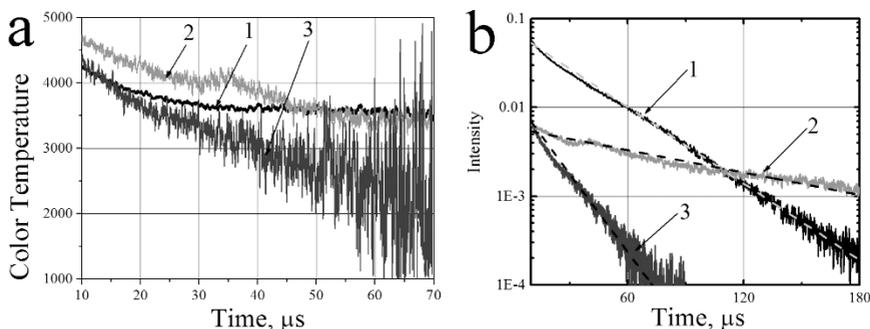


Рис.1. Зависимости цветовой температуры в градусах Кельвина (а) и интенсивности излучения (логарифмическая шкала) (б) от времени в случае конденсации паров вольфрама в: 1 – сверхтекучем гелии, 2 – газе при  $10^{-2}$  торр, 3 – газе при 760 торр

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 18-19-00620).

*Список литературы*

1. Gordon E. B., Karabulin A. V., Matyushenko V. I., Sizov V. D., and Khodos I. I. // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2011, vol. 112, № 6, P. 1061–1070.

А.М. ТЕРЕЗА, Г.Л. АГАФОНОВ, А.С. БЕТЕВ, С.П. МЕДВЕДЕВ  
*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН,  
Москва, Россия*

## **РЕДУЦИРОВАНИЕ ДЕТАЛЬНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПИРОЛИЗА, ГОРЕНИЯ И ДЕТОНАЦИИ**

Проведено сравнение рассчитанных значений задержек воспламенения для стехиометрической смеси ацетилена с воздухом с использованием различных детальных кинетических механизмов, представленных в литературе в диапазонах температуры  $1000 < T < 2100$  К и давления  $0.02 < P < 1.1$  МПа. Предложена методика редуцирования детальных кинетических механизмов по числу компонент.

A.M. TEREZA, G.L. AGAFONOV, A.S. BETEV, S.P. MEDVEDEV

*N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of  
Sciences, Moscow, Russia*

## **REDUCTION OF DETAILED KINETIC MECHANISMS FOR PYROLYSIS, COMBUSTION, AND DETONATION MODELING**

The values of ignition delay for a stoichiometric acetylene–air mixture calculated using various detailed kinetic mechanisms presented in the literature in the temperature range of  $1000 < T < 2100$  K and the pressure range of  $0.02 < P < 1.1$  MPa are compared. A procedure for reducing the number of species in a reaction network is proposed.

В настоящее время для оптимизации проведения исследований и мониторинга воспламенения, горения и детонации в газах широко используются методы численного моделирования. Для повышения достоверности расчетов в неравновесных условиях активного химического взаимодействия используются детальные кинетические механизмы (ДКМ). Возникающие при этом вычислительные процедуры обременены большими трудностями. В частности, для решения прямой кинетической задачи с использованием ДКМ требуется решение так называемой «жесткой» системы ОДУ, характеризующейся большим разбросом собственных значений матрицы Якоби [1]. Последнее приводит к измельчению шага интегрирования, накоплению вычислительной ошибки и увеличению времени счета. Необходимо уменьшать ДКМ как по количеству реакций, так и по числу компонент, получая в итоге редуцированный кинетический механизм. Методики редуцирования ДКМ сводятся к понижению числа реакций [1]. В тоже время ранг матрицы Якоби определяется количеством компонент в ДКМ. Если расчет скоростей реакций сводится к арифметическим действиям с матрицами, то интегрирование проходит по количеству компонент. В этой связи разумно понижать количество компонент.

В данной работе проведено сравнение рассчитанных значений задержки воспламенения  $\tau$  для стехиометрической смеси 21.43%  $C_2H_2$  + 53.575%  $O_2$  в Аг с использованием различных ДКМ, представленных в литературе, и предложена методика их редуцирования по числу компонент. Все вычисления в данной работе проводились с помощью пакета программ CHEMKIN III [2], в предположении  $V=\text{const}$  при давлениях 0.02, 0.1 и 1.1 МПа и температуре от 1000 К до 2100 К. Для апробации процедуры редуцирования использовался метод грубой силы [1], основанный на анализе отклика параметра, определяющего значение  $\tau$  при исключении отдельного компонента. Валидация различных ДКМ позволила сделать выбор в пользу ДКМ работы [3], содержащий 57 компонентов и 405 реакций. Специально была написана программа на языке FORTRAN-77, позволяющая в автоматическом режиме проводить расчеты с последовательным исключением компонент ДКМ и реакций с их участием. Критерием исключения компоненты было значение отклика  $\tau$  вне интервала  $\tau \pm \delta\tau$ . Процедура редуцирования позволила свести ДКМ [3] к РКМ с 37 компонентам при 235 реакциях для  $\delta=0.2$ . Сравнение экспериментальных данных, представленных в литературе, с результатами численного моделирования при использовании РКМ показало хорошее соответствие.

Таким образом, предложенная процедура показала свою эффективность при редуцировании ДКМ. Поскольку в рамках фиксированного ДКМ в таком виде задача редуцирования является корректной, то дальнейшая перспектива процедуры редуцирования ДКМ связана с поиском минимума функционала  $F=\Phi(P,T,\alpha,\delta,\eta)$ , где  $\alpha$  – коэффициент избытка окислителя, а  $\eta$  – физический параметр, по которому проводится редуцирование. В общем случае  $\eta$  может быть не только  $\tau$ , но и фактор разветвления цепи  $\phi$  и концентрация компонента  $[X_i]$ . Параметр  $[X_i]$  особенно важен в процессах пиролиза, фрагментации и квазиравновесия на стадиях выгорания.

*Список литературы*

1. Frenklach M., Modeling. *Combustion chemistry*, Gardiner W.C., Jr., Eds., New York: Springer, pp. 423–453, 1984.
2. Kee R.J., Rupley F.M., Meeks E., Miller J.A. CHEMKIN III: Tech. Report № SAND96-8216. Livermore, CA: Sandia National Laboratories, 1996.
3. Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. // *Acta Astronaut.* 163, pp. 18–24, 2019.

Д.В. ЧЕПЕЛА, Ю.Н. БУХАРЕВ

*Саровский физико-технический институт – филиал Национального исследовательского  
ядерного университета МИФИ, Саров, Россия*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАПРЕГРАДНЫХ ОСКОЛОЧНЫХ ПОТОКОВ С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА ПРОГРАММ ЛОГОС**

С помощью пакета программ «ЛОГОС» проведено моделирование по методике SPH процессов формирования и развития запреградных осколочных потоков при пробитии тонких алюминиевых пластин. Результаты расчёта сопоставлены с опытными данными и данными численного моделирования по программе «AUTODYN». Сформулированы предложения по дальнейшему совершенствованию методик ПП «ЛОГОС».

D.V. CHEPELA, Y.N. BUKHAREV

*Sarov Physical & Technical Institute - National Research Nuclear University MEPHI  
(Moscow Engineering Physics Institute), Sarov, Russia*

## **DEBRIS CLOUD SIMULATION IN SOFTWARE PRODUCT LOGOS**

The simulation of debris cloud produced by projectile hypervelocity impact on thin aluminium plates have been carried out using the SPH technique of software product «LOGOS». The simulation results were compared with experimental data and simulation results data from software product «AUTODYN». Suggestions for the further improvement of software product «LOGOS» simulation methods were proposed.

Численное моделирование высокоскоростных соударений твёрдых тел, наряду с соответствующими экспериментальными исследованиями, составляет основу для решения многих научно-прикладных задач, в особенности, связанных с оптимизацией защитных экранов космических аппаратов от воздействий частиц космического мусора.

Многофункциональный пакет программ (ПП) «ЛОГОС» [1], разрабатываемый в РФЯЦ-ВНИИЭФ, позволяет проводить численное решение подобных задач. В 2017 – 2018 гг. сотрудниками и студентами СарФТИ совместно с разработчиками ПП «ЛОГОС» проведена НИР по верификации и развитию моделей и методик модуля «ЛОГОС-прочность» для численного моделирования задач высокоскоростного (до 10 км/с) удара. Полученные результаты были введены в модернизированную версию ПП «ЛОГОС», которая использована в данной работе.

В работе представлены результаты численного моделирования в 3D и 2D постановке по методике сглаженных частиц SPH ПП «ЛОГОС» процессов формирования и развития запреградных осколочных потоков при пробитии тонких алюминиевых пластин (сплав типа 6061-T6) толщиной  $h$  от 0,1 до 1,55

мм (5 значений, 4 из которых соответствовали опытным данным [2]) при воздействии на них сферического ударника (из алюминиевого сплава 2017-T4) диаметром  $d_0 = 9,53$  мм (масса 1,275 г) со скоростью 6,7 км/с по нормали к поверхности пластин. Задачи решались в упругопластической постановке с использованием уравнения состояния материалов типа Ми-Грюнауизена в форме «Shock», модели сдвиговой прочности Джонсона-Кука, учитывающей деформационное и скоростное упрочнение и термическое разупрочнение, изменение температуры плавления по закону Линдемана, с применением критериев разрушения по главным напряжениям и эффективным деформациям.

Получен комплекс расчётных данных по начальным параметрам удара в ударно-волновой стадии, структуре и динамике развития запреградных осколочных потоков и их характерных зон, параметрам напряжённо-деформированного состояния, разогрева материалов при ударе, их разрушения и плавления в зависимости от времени процессов (до 25 мкс) и толщины пластин. Результаты расчётов сопоставлены с опытными рентгенограммами [2] и данными их обработки, аналитическими расчётами, опубликованными материалами численного моделирования по программе «AUTODYN». Констатировано удовлетворительное согласие по характерным параметрам.

Сформулированы некоторые предложения по дальнейшему совершенствованию методик ПП «ЛОГОС» для повышения эффективности расчётов задач высокоскоростного удара.

#### *Список литературы*

1. Дьянов Д.Ю., Казанцев А.В., Цибереv К.В. и др. // Сб. тезисов XV Международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование». 13-17 октября 2014 г. Саров.
2. Piekutowski A.J.// Int. J. of Impact Engineering. 1993. Vol. 14. P. 573-586.

**В.А. ШАРГАТОВ**

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва  
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия*

## **ДИНАМИКА И УСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕНИЙ В ВИДЕ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ, ОПИСЫВАЮЩИХ ФРОНТ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ**

Изучается глобальная динамика фронтов испарения воды в виде бегущих фронтов в горизонтально протяженных пористых слоях, где вода расположена над паром. Асимптотическое поведение возмущений описывается аналитически с использованием особенностей распространения бегущих фронтов, подчиняющихся модельному уравнению диффузии, полученному в слабонелинейном приближении вблизи порога неустойчивости.

**V.A. SHARGATOV**

*Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia  
National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute),  
Moscow, Russia*

## **DYNAMICS AND STABILITY OF TRAVELING WAVE SOLUTIONS DESCRIBING A PHASE TRANSITION INTERFACE IN A POROUS MEDIUM**

We study global dynamics of phase transition evaporation interfaces in the form of travelling fronts in horizontally extended domains of porous layers where a water located over a vapor. The asymptotic behavior of perturbations are described analytically using propagation features of travelling fronts obeying a model diffusion equation derived recently for a weakly non-linear narrow waveband near the threshold of instability.

Рассматривается динамика конечных возмущений плоской поверхности фазового перехода в задаче об испарении жидкости внутри низкопроницаемого слоя пористой среды. Высокопроницаемый водный горизонт (область I на рис. 1) ограничен снизу плоскостью  $z = 0$  (ось  $z$  направлена вниз). Давление воды при  $z = 0$  постоянно и равно  $P_0$ . Порода в слое  $0 < z < L$  имеет низкую проницаемость, а на поверхности  $z = L$  она обдувается воздухом с влажностью  $v_a$ , которая меньше влажности насыщенного пара при заданном значении температуры  $T$ . В этом случае пористая среда в области  $\Omega_1$  при  $0 < z < s(x, t)$  содержит воду, а в области  $\Omega_2$  при  $0 < z < s(x, t)$  насыщена смесью воздуха и водяного пара (см. рис. 1).

Согласно [1] система уравнений, описывающих изучаемый процесс, совместно с граничными условиями имеет следующий вид:

$$\Delta P = 0 \text{ при } 0 < z < s(x, t), P = P_0 \text{ при } z = 0, P = P_a + P_c \text{ при } z = s(x, t),$$

$$\Delta v=0 \text{ при } s(x, t) < z < L, v = v^* \text{ при } z = s(x, t), v = v_a \text{ при } z = L, (1)$$

$$V_n = -k (m\mu_w)^{-1} [\text{grad}(P - \rho_w g z)]_n + D \rho_a \rho_w^{-1} [\text{grad}(v)]_n \text{ при } z = s(x, t),$$

где  $m$  – пористость,  $k$  – проницаемость,  $\mu_w$  – вязкость воды,  $g$  – ускорение свободного падения,  $\rho_w$  и  $\rho_a$  – плотности воды и воздуха,  $P_a$  – давление воздуха в области  $\Omega_2$ ,  $P_c$  – капиллярное давление, индекс  $n$  обозначает нормаль к поверхности фазового перехода  $s(x,t)$ , направленную из области воды,  $D$  – коэффициент диффузии,  $V_n$  – нормальная компонента скорости поверхности фазового перехода.

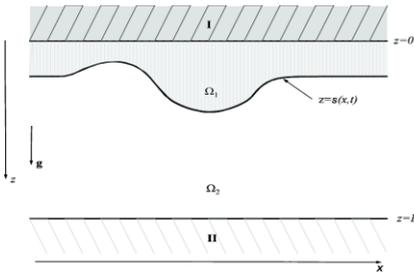


Рис. 1. Схема течения

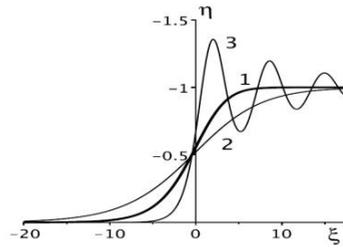


Рис. 2. Бегущие волны

Предметом изучения является возможность существования решений задачи (1) в виде бегущей волны и глобальная устойчивость таких решений. В слабонелинейном приближении уравнение для эволюции фронта фазового перехода удается свести к уравнению Колмогорова-Петровского-Пискунова:

$$\partial \eta / \partial \tau = \partial^2 \eta / \partial \xi^2 + \eta - \eta^2.$$

Это уравнение предсказывает существование решений в виде бегущей волны (см. рис. 2) в основной задаче. Показано, что бегущая волна с монотонным профилем (линии 1 и 2 на рис. 2) асимптотически устойчива относительно быстро затухающих возмущений, а бегущие волны с немонотонным профилем (линия 3 на рис. 2) – неустойчивы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 16-11-10195.

#### Список литературы

1. Shargatov V.A., П'ichev A.T., Tsyppkin G.G. // Int. J. Heat and Mass Transfer, 2015, V. 83, P. 552-561.

А.А. АГАПОВ<sup>2</sup>, А.С. СОФЬИН<sup>2</sup>, С.И. СУМСКОЙ<sup>1</sup>, С.Х.  
ЗАЙНЕТДИНОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия<sup>2</sup> ЗАО  
«Научно-технический центр «Промышленная безопасность», Москва, Россия

## **ПАРАМЕТРЫ УДАРНЫХ ВОЛН ПРИ ДЕТОНАЦИИ И ДЕФЛАГРАЦИИ ТОПЛИВНО-ВОЗДУШНЫХ ОБЛАКОВ**

Рассмотрены методы расчета параметров ударных волн, используемые в промышленной безопасности, для оценки последствий взрывов при аварийных выбросах углеводородов. Показано, что существующие методы не обеспечивают необходимую точность расчетов. Для корректного расчета параметров волн предлагается использовать высокоточные расчетные методы. Получены обезразмеренные зависимости давления от расстояния для оценки параметров ударных волн., позволяющие улучшить предсказание последствий аварийных взрывов.

A.A. AGAPOV<sup>2</sup>, A.S. SOFIN<sup>2</sup>, S.I. SUMSKOI<sup>1</sup>, S.Kh. ZAINETDINOV<sup>2</sup>

*1 National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics  
Institute), Moscow, Russia*

*2 JSC Scientific technical center of industrial safety problems research, Moscow, Russia*

## **SHOCK WAVE PARAMETERS OF DETONATION AND DEFLAGRATION OF FUEL-AIR CLOUDS**

Methods of shock waves parameter calculation, that's are necessary for explosion effect assessment during accidental releases of hydrocarbons are considered. It is shown that existing methods do not provide the necessary accuracy of calculations. For the correct calculation of wave parameters, it is proposed to use high-accuracy calculation techniques. The dimensionless dependences of pressure on distance have been obtained for estimating the parameters of shock waves. These dependences allow to improve the prediction of the consequences of accidental explosions.

На современных производствах обращается множество взрывоопасных веществ. При аварийных выбросах из оборудования этих веществ в атмосфере могут формироваться облака топливно-воздушных смесей, сгорание которых (в т.ч. в детонационном режиме) может приводить к появлению в окружающей среде ударных волн, способных привести к разрушениям и гибели людей.

В связи с этим возникает необходимость оценки параметров этих волн. На сегодня существует несколько различных подходов для оценки последствий (параметров ударных волн). Основная проблема с использованием этих подходов – невысокая точность и ограниченная область применения.

В данной работе с использованием подходов [1, 2] проведено исследование параметров ударных волн в широком диапазоне составов и расстояний.

Построена безразмерная зависимость давления от расстояния, которая приведена на рис 1. На этом же рисунке приведена одна из старых зависимостей для детонации. Эта линия имеет нефизичный «загиб» в зависимости давления.

Полученные результаты будут использованы в федеральных нормативных документах.

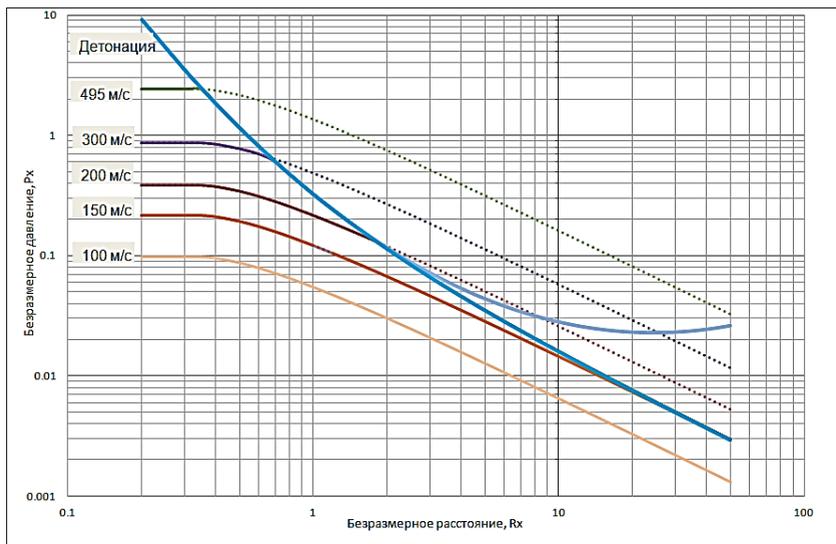


Рис. 1. Зависимости безразмерного давления от безразмерного расстояния для различных режимов сгорания облака ГВС: для детонации и дефлаграции с разной скоростью фронта пламени

*Список литературы*

1. Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Михалкин В.Н., Шаргатов В.А. // Химическая физика 1984 Vol. 3, № 3, С. 435.

1. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Губин С.А., Одинцов В.В., Шаргатов В.А. // Химическая физика 1986 Vol. 3, № 5, С. 435.

С. М. ФРОЛОВ<sup>1,2,3</sup>, И. О. ШАМШИН<sup>1,3</sup>, В. С. АКСЕНОВ<sup>1,2</sup>,  
М. В. КАЗАЧЕНКО<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова  
Российской академии наук, Москва

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

<sup>3</sup>Научно-исследовательский институт системных исследований  
Российской академии наук, Москва

<sup>4</sup>Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет), Россия

## **РАНЖИРОВАНИЕ ТОПЛИВНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ПО ИХ ДЕТОНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ЭТАЛОННОЙ ИМПУЛЬСНО-ДЕТОНАЦИОННОЙ ТРУБЫ**

Предложен новый экспериментальный способ оценки детонационной способности топливно-воздушных смесей, основанный на измерении расстояния и/или времени перехода горения в детонацию в эталонной импульсно-детонационной трубе в существенно одинаковых термодинамических и газодинамических условиях. Ранжирование топливовоздушных смесей по детонационной способности проведено при нормальных значениях температуры и давления для водорода, ацетилена, этилена, пропилена, пропан-бутана, н-пентана и метана (природного газа).

S. M. FROLOV<sup>1,2,3</sup>, I. O. SHAMSHIN<sup>1,3</sup>, V. S. AKSENOV<sup>1,2</sup>,  
M. V. KAZACHENKO<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>*N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russian Federation*

<sup>3</sup>*Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

<sup>4</sup>*N. E. Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation*

## **RANKING OF FUEL–AIR MIXTURES ACCORDING TO THEIR DETONABILITY USING A STANDARD PULSED DETONATION TUBE**

New experimental method for evaluating the detonability of fuel–air mixtures based on measuring the detonation run-up distance and/or time in a standard pulsed detonation tube under essentially identical thermodynamic and gasdynamic conditions was proposed. The ranking of fuel–air mixtures by their detonability was carried out at normal temperature and pressure for hydrogen, acetylene, ethylene, propylene, propane-butane, n-pentane, and methane (natural gas).

Детонационная способность (ДС) топливно-воздушных смесей (ТВС), с одной стороны, определяет их взрывоопасность при хранении, транспортировке

и использовании, а с другой – возможность их практического применения в перспективных энергопреобразующих устройствах, работающих на детонационном горении [1]. Под ДС ТВС обычно понимают способность ТВС заданного состава поддерживать распространение стационарной детонационной волны в тех или иных термодинамических (например, по давлению и температуре) и газодинамических (например, по уровню турбулентности) условиях. Детонационная способность ТВС – понятие относительное. Новый экспериментальный способ оценки ДС ТВС, основанный на измерении расстояния и/или времени перехода горения в детонацию (ПГД) в эталонной импульсно-детонационной трубе (ЭДТ) в существенно одинаковых термодинамических и газодинамических условиях был предложен нами ранее [2].

Цель работы – ранжирование предварительно перемешанных газовых ТВС по их ДС с помощью ЭДТ.

Расстояние и время ПГД экспериментально определены для ТВС на основе водорода ( $H_2$ ), ацетилена ( $C_2H_2$ ), этилена ( $C_2H_4$ ), пропилена ( $C_3H_6$ ), пропан-бутана ( $C_3H_8+C_4H_{10}$ ), н-пентана ( $C_5H_{12}$ ) и метана/природного газа ( $CH_4/ПГ$ ) разных составов: от предельно обедненных до предельно обогащенных горючим при нормальных значениях температуры и давления. Для всех рассмотренных горючих определены нижний и верхний концентрационные пределы детонации в ЭДТ. Полученные данные использованы для сравнительной оценки ДС разных ТВС разных составов. Используя время ПГД в качестве меры ДС ТВС ранжированы по убыванию ДС:



Предложена концепция «эквивалентных» ТВС, имеющих одинаковую или близкую ДС при одинаковых условиях. «Эквивалентные» ТВС могут использоваться для предсказательного физического моделирования взрывных процессов с участием ТВС других горючих.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант РФФИ 18-08-00076а).

#### *Список литературы*

1. Kasahara J., Frolov S. // Proc. 25th ICDERS, 2-7 August, 2015, Leeds, UK, Paper #304.
2. Фролов С. М., Звезгинцев В. И., Аксенов В. С., и др. // Докл. Акад. наук, 2019. Т. 488. № 2. С. 162–166 (DOI: 10.31857/S0869-56524882162-166).

А.С. СОФЬИН<sup>2</sup>, С.И. СУМСКОЙ<sup>1</sup>, С.Х. ЗАЙНЕТДИНОВ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия <sup>2</sup> ЗАО «Научно-технический центр «Промышленная безопасность», Москва, Россия

## РАСЧЕТЫ УДАРНЫХ ВОЛН ПРИ РАЗРЫВЕ МАГИСТРАЛЬНОГО ГАЗОПРОВОДА

Работа посвящена моделированию последствий при разрыве такого высокоэнергетического объекта как магистральный трубопровод. Рассмотрены различные постановки задачи: одномерные, двумерные и трехмерные. Проанализированы возможности применения к практике реальных расчетов результатов каждого из типа расчетов.

A.S. SOFIN<sup>2</sup>, S.I. SUMSKOI<sup>1</sup>, S.Kh. ZAINETDINOV<sup>2</sup>

<sup>1</sup> National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

<sup>2</sup> CJSC Scientific technical center of industrial safety problems research, Moscow, Russia

## CALCULATIONS OF SHOCK WAVES IN THE CASE OF A MAIN GAS PIPELINE RUPTURE

The work is devoted to modeling of the rupture of such a high-energy object as the main gas pipeline. Various statements of the problem are considered: one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional. The possibilities of applying to practice the results of each type of calculation are analyzed.

Рассматривается задача о физическом взрыве магистрального газопровода в одномерной, двумерной и трехмерной постановках.

Разрывы на газопроводах вследствие потери им устойчивости сопровождаются резким высвобождением сжатого газа из протяженной области разрушенных секций (порядка 40 м для газопровода DN1200). В таком случае, целесообразно рассматривать задачу в цилиндрической симметрии на расстояниях от оси порядка длины разрушенного участка газопровода.

Постановка задачи: разрушение газопровода DN1200 с давлением транспортируемой среды (природного газа) в 22.1 МПа.

На рис. 1 представлены показатели датчиков давлений на расстоянии 30 м от оси трубопровода, расположенные на разной высоте от уровня земли (высота определяется углом наклона направления от датчика до места выброса, отсчитанным от вертикали), рассчитанные по 2D-CFD модели (шаг 10 см). На рис 2 представлены показания датчика давления на расстоянии 55 м от оси на поверхности земли.

На рис. 3 и 4 представлены поля давлений в 2D и 3D постановках.

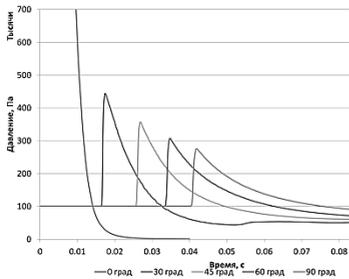


Рис.1. Зависимости давлений от времени на расстоянии 30 м (2D)

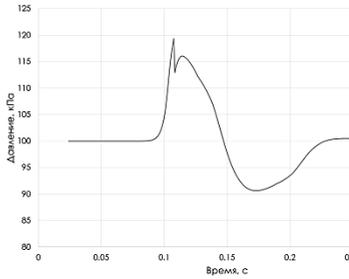


Рис. 2. Зависимость давления на от времени на расстоянии 55 м от оси на поверхности земли (3D)



Рис.3. Поле давления, рассчитанное по 2D-CFD модели на момент времени 0.05 с (2D)

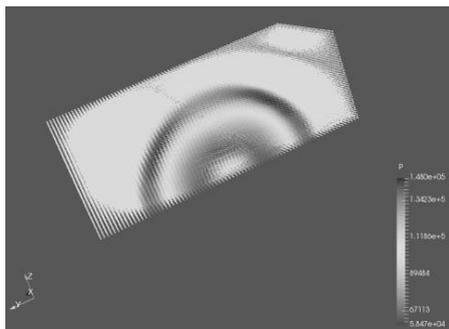


Рис. 4. Поле давлений на 0.03 с (3D)