

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Издается с января 1958 г.

Том 66

Март, 2023

№ 3 (784)

СОДЕРЖАНИЕ

Физика полупроводников и диэлектриков

- Мамедова Х.И., Исаев А.И., Мехтиева С.И., Алекберов Р.И. Особенности локальной структуры халькогенидных стеклообразных полупроводниковых систем As–Ge–Se(Te).....3

Физика плазмы

- Ландль Н.В., Королев Ю.Д., Франц О.Б., Гейман В.Г., Болотов А.В., Нехорошев В.О. Наносекундная стабильность срабатывания тиратрона с холодным катодом с узлом запуска на основе пробоя по поверхности диэлектрика.....10

Физика элементарных частиц и теория поля

- Калиниченко И.С. Двумерный электронный кристалл и гармоническое приближение17
Абдулвагабова С.К., Эфендиева И.К. Рассеяние релятивистского нуклона на нуклоне в кварковой модели22
Скобелев В.В. К вопросу о проблеме солнечных нейтрино26

Теплофизика и гидродинамика

- Гладков С.О. О силе Стокса в конечном объеме33
Демкин В.П., Мельничук С.В., Завадовский К.В., Суяндуклова А.Т., Руденко В.В., Демкин О.В. Метод локальной гемодинамики для оценки гемодинамической значимости tandemных стенозов в бифуркациях коронарных сосудов44
Перевозников Е.Н., Степашкина А.С. Динамика и устойчивость процессов теплопроводности на примере модельной системы51

Оптика и спектроскопия

- Хачатрян А.Ж., Захарян Р.А., Седракан А.М., Лунин Б.С. О приближенном описании гармонического волнового поля57
Бердыбаева Ш.Т., Тельминов Е.Н., Солодова Т.А. Генерационные характеристики борфторидных комплексов дипиррометенов65
Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б. Предельно короткие оптические импульсы в оптически анизотропной среде с углеродными нанотрубками с учетом поглощения на тяжелых ионах71
Томилин Ф.Н., Мельчакова Ю.А., Артющенко П.В., Рогова А.В., Аврамов П.В. Атомная и электронная структура и квантовый конфайнмент в нанокристаллитах кремния. Часть II. Структура и оптические свойства допированных и сложных нанокристаллов кремния77

Физика конденсированного состояния

- Миньков Л.Л., Пикущак Е.В., Шрагер Э.Р., Ворожцов А.Б. Влияние агломерации на оптимальное расположение зерен окислителя в заряде смешанного металлизированного твердого топлива84
Кузьменко Е.Д., Матренин С.В., Ян Сяо. Исследование структуры и физико-механических свойств керамики на основе карбонитридов циркония90
Шеховцов В.В., Матвиенко О.В. Моделирование зарождения и роста наночастиц SiO₂ из газовой фазы, формируемой в условиях термической плазмы96
Красин В.П., Вертков А.В., Союстова С.И. Совместимость молибдена с жидким оловом при 1050 °C: сравнение теоретических оценок с экспериментальными наблюдениями105

Арефьев К.П., Вольф Э.Л., Швец А.С., Беллер А.В. Закономерности поверхностного разрушения технического железа при абразивном низкотемпературном воздействии в условиях воздушной среды	114
Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Молекулярно-динамическое исследование влияния упругой деформации на интенсивность взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ni и Al	120
Суриков Вад.И., Суриков Вал.И., Семенюк Н.А., Кузнецова Ю.В. Параметры электронного и фононного энергетических спектров в металлической фазе полупрозрачной окиси ванадия.....	126

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 621.315.592

DOI: 10.17223/00213411/66/3/3

ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ As–Ge–Se(Te)Х.И. Мамедова¹, А.И. Исаев¹, С.И. Мехтиева¹, Р.И. Алекберов^{1,2}¹ *Институт физики им. акад. Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана, г. Баку, Азербайджанская Республика*² *Азербайджанский государственный экономический университет, г. Баку, Азербайджанская Республика*

Методами дифракции рентгеновских лучей и комбинационного рассеяния света исследованы особенности локальной структуры, на уровне ближнего и среднего порядков, халькогенидных стеклообразных полупроводниковых систем As–Ge–Se(Te), а также основные структурные элементы и химические связи, образующие аморфную матрицу. Наблюдаемые изменения параметров локальной структуры и аморфной матрицы в зависимости от химического состава объяснены с учетом основных принципов модели подхода химической связи.

Ключевые слова: ближний порядок, средний порядок, локальная структура.

Введение

Такие свойства халькогенидных стекол, как высокое значение показателя преломления, прозрачность в средней и дальней инфракрасной областях, низкая энергия фононов, по сравнению с нехалькогенидными стеклами, способствуют их высокой перспективности для практических целей [1]. Они легко поддаются неограниченному легированию и вариации химического состава, способствующего получению материалов с широким спектром параметров. Отмеченные и другие уникальные свойства, а также функциональные возможности халькогенидных стеклообразных полупроводников (ХСП) обуславливали резкий интерес исследователей к указанному классу материалов начиная с 90-х годов прошлого века [2–6]. Однако для практических целей важно уметь управлять электронными процессами, происходящими в ХСП, лежащими в основе практических применений.

Как известно, в некристаллических материалах, в том числе и в ХСП, отсутствует дальний порядок в расположении атомов. В них как энергетический спектр электронных состояний, так и макроскопические свойства непосредственно контролируются особенностями локальной структуры в масштабе ближнего и среднего порядков в расположении атомов. Управление макроскопическими свойствами обычно осуществляется изменением локальной структуры. Реальным способом вариации локальной структуры является изменение химического состава многокомпонентных ХСП, состоящих из элементов, отличающихся координационными числами. Составы As–Ge–Se и As–Ge–Te состоят из элементов с координационными числами 3, 4 и 2 соответственно, которые удовлетворяют указанным требованиям. Настоящая работа посвящена исследованию особенностей локальной структуры на уровне ближнего и среднего порядков системы As–Ge–Se(Te) методами исследования дифракции рентгеновских лучей и комбинационного рассеяния света.

Методика эксперимента и изготовление образцов

Синтез ХСП систем As–Ge–Se и As–Ge–Te осуществлен в следующей последовательности: особо чистые элементарные вещества в требуемых атомных процентах помещались в кварцевые ампулы и после откачивания воздуха до давления 10^{-4} мм рт. ст. в течение 3 ч нагревались до температуры 900 °С и выдерживались при этой температуре 12 ч. С целью обеспечения однородности образцов синтез проводился во вращающейся печи, а охлаждение – в режиме выключенной печи. Пленки разной толщины получены термическим испарением со скоростью 0.2–0.4 мкм/с на стеклянные подложки в вакууме при давлении 10^{-4} мм рт. ст.

Исследования дифракции рентгеновских лучей осажденных пленок проведены на порошковом дифрактометре D8 ADVANCE фирмы «Брукер» (Германия) в режиме 40 кВ, 40 мА, $0 < 2\theta < 80^\circ$. Дифракционные картины проанализированы с помощью специальной программы

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

УДК 537.525

DOI: 10.17223/00213411/66/3/10

**НАНОСЕКУНДНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ СРАБАТЫВАНИЯ
ТИРАТРОНА С ХОЛОДНЫМ КАТОДОМ С УЗЛОМ ЗАПУСКА
НА ОСНОВЕ ПРОБОЯ ПО ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИКА***

Н.В. Ландль, Ю.Д. Королев, О.Б. Франц,
В.Г. Гейман, А.В. Болотов, В.О. Нехорошев

Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия

Представлены результаты исследования импульсного разряда в узле запуска тиратрона на основе пробоя по поверхности диэлектрика с высокой диэлектрической проницаемостью ($\epsilon \approx 1000$) разборного односекционного макета тиратрона с холодным катодом. Получены данные по временам запаздывания инициирования поверхностного разряда, по временам инициирования дугового разряда с полым анодом и по временам инициирования разряда в основном промежутке тиратрона. Показана возможность запуска тиратрона с временем запаздывания 30 нс и стабильностью срабатывания не хуже 2 нс.

Ключевые слова: тиратрон с холодным катодом, поверхностный разряд, дуговой разряд с полым анодом.

Введение

В настоящее время широкое применение получили коммутрующие приборы на основе сильноточных импульсных газовых разрядов низкого давления с полым катодом (так называемые псевдоискровые разрядники) [1–17]. Конструкция электродной системы самого разрядника в значительной степени напоминает конструкцию классического водородного тиратрона с накалимым катодом. Однако в данном типе приборов накалимый катод отсутствует.

Основной высоковольтный промежуток тиратрона формируется полым или плоским анодом и полым катодом. Область рабочих давлений газа в разряднике соответствует левой ветви кривой Пашена. В таких условиях как для случая самопробоя, так и для принудительного запуска разрядника требуется значительный предпробойный ток из основной катодной полости в основной промежуток тиратрона [18–20]. В случае принудительного инициирования этот ток обеспечивается за счет специального узла запуска разрядника, который обычно располагается в основной катодной полости [1, 16, 21–25].

В общем случае любой узел запуска предназначен для генерации плазмы высокой плотности в полости основного катода в заданный момент времени. Для этого к одному из электродов узла запуска прикладывается импульс напряжения амплитудой 2–8 кВ. В результате в полости основного катода генерируется плазма разряда запуска с током 20–100 А. Электроны с поверхности плазмы извлекаются в основной промежуток тиратрона и инициируют развитие разряда в соответствии с механизмом, описанным в работах [1].

В настоящее время наиболее широко используются узлы запуска на основе вспомогательного тлеющего разряда и узлы запуска на основе пробоя по поверхности полупроводника, также разработаны отпаянные металлокерамические приборы, которые производятся компанией ООО «Импульсные технологии», г. Рязань [1, 23, 26]. Тиратроны с узлами запуска на основе вспомогательного тлеющего разряда обычно используются в установках, где требуется большой ресурс коммутатора по количеству импульсов и в системах с высокой частотой следования импульсов. В стандартных и в модернизированных приборах удается получить времена запаздывания пробоя относительно момента приложения импульса запуска на уровне 70 нс и разброс времен срабатывания оказывается не хуже 3 нс [1].

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 19-48-700023.

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 539

DOI: 10.17223/00213411/66/3/17

ДВУМЕРНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ КРИСТАЛЛ И ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ*

И.С. Калиниченко

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Изучена применимость гармонического приближения к описанию двумерных электронных (вигнеровских) кристаллов. В частности, найдены и описаны все стабильные в гармоническом приближении простые решетки Браве.

Ключевые слова: вигнеровский кристалл, гармоническое приближение, стабильность.

Введение

Модель желе, рассматриваемая здесь, состоит из большого числа электронов N , движущихся на однородном положительном фоне, обеспечивающем электронейтральность системы. Вигнер [1] впервые предположил, что в пределе низких плотностей электроны образуют упорядоченную структуру – вигнеровский кристалл, энергия основного состояния которого выглядит следующим образом:

$$\frac{E}{N} = \frac{a}{r_s} + \frac{b}{r_s^{3/2}} + \frac{c}{r_s^2} + \dots, \quad (1)$$

где r_s есть безразмерный параметр, обратно пропорциональный плотности электронов. Первый член в (1) соответствует классической электростатической энергии, второй представляет собой энергию вакуумных колебаний фононов, третий и последующие описывают ангармонические эффекты.

Ясно, что в пределе очень низких плотностей ($r_s \gg 1$) тип решетки определяется первым членом разложения. Известно, что в двумерном случае минимальную энергию имеет гексагональная, или треугольная, решетка. Однако различие между электростатическими энергиями решеток с разными симметриями чрезвычайно мало, иногда менее одного процента. В связи с этим разумно ожидать, что при увеличении плотности (или температуры) решетка может испытать фазовый переход в другую кристаллическую модификацию еще до своего плавления. Так, в работах [2, 3] обнаружены такие переходы в приближении Хартри – Фока. Однако в рамках фононной теории возмущений подобные вычисления отсутствуют. Одним из препятствий, в частности, является тот факт, что множество решеток, стабильных в гармоническом приближении, неизвестно. Вопрос стабильности решен лишь в частных случаях квадратной и треугольной решеток [4].

В настоящей работе мы нашли множество всех простых решеток Браве, стабильных в гармоническом приближении. Полученный общий результат согласуется с известными частными случаями.

Гармоническое приближение

Пусть положение электрона задается вектором $\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i$, где $\mathbf{X}_i$ характеризуют положения узлов кристаллической решетки, а $\mathbf{u}_i$ есть небольшие отклонения электронов от узлов. Тогда гамильтониан, описывающий динамику решетки, имеет вид

$$H_{\text{dyn}} = \sum_i \frac{m u_i^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_{\alpha\beta}(i,j) u_i^\alpha u_j^\beta + \mathcal{O}(u^3). \quad (2)$$

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема номер FSWM-2020-0033).

РАССЕЯНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКОГО НУКЛОНА НА НУКЛОНЕ В КВАРКОВОЙ МОДЕЛИ

С.К. Абдулвагабова¹, И.К. Эфендиева²¹Бакинский государственный университет, г. Баку, Азербайджанская Республика²Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности,
г. Баку, Азербайджанская Республика

Рассматривается рассеяние релятивистского нуклона на нуклоне. Используются волновые функции кварков внутри нуклона. Полученные результаты подтверждают гипотезу о том, что кварки внутри адронов ведут себя как нерелятивистские частицы. Амплитуда рассеяния данного процесса представляет собой самое общее выражение для амплитуды, которое можно получить в кварковой модели без использования каких-либо ограничений на относительные величины кварковых амплитуд. А это, в свою очередь, позволяет рассчитать амплитуду рассеяния аналитически, без потери точности, которая возникает при вычислении многомерных интегралов.

Ключевые слова: потенциальная яма, дифракционное приближение, амплитуда рассеяния, кварки.

Введение

Успех составных моделей адронов, квантовой хромодинамики, а также прогресс, связанный со спектроскопией кварковых систем, стимулировали попытки более детального учета структуры адронов и использования идей квантовой хромодинамики при описании рассеяния адронов в широкой области переданных импульсов. В основе квантовой теории поля лежит чрезвычайно ясное на первый взгляд представление о взаимодействии как об обмене частицами – переносчиками тех или иных квантовых чисел. Поэтому в этой теории поля попытка описания взаимодействия даже двух частиц приводит к задаче с бесконечным числом степеней свободы.

Вместо того, чтобы рассматривать задачу о связанных состояниях системы трех кварков, находящихся в интенсивном взаимодействии друг с другом, кварки в нуклоне обычно представляются как независимые частицы, движущиеся в некотором «усредненном», или самосогласованном, поле. При таком подходе имеет смысл волновая функция не только всей системы трех кварков, но и индивидуальная, одночастичная волновая функция каждого кварка. А это позволяет представить амплитуду любого двухнуклонного процесса взаимодействия адронов в виде суммы амплитуд однократного рассеяния отдельных кварков, составляющих взаимодействующие адроны.

В данной работе рассматривается рассеяние релятивистского нуклона на нуклоне с использованием волновых функций кварков внутри нуклонов.

Релятивистский нуклон внутри ямы

Рассмотрим рассеяние релятивистского нуклона на нуклоне в случае, когда мишень находится в потенциальной яме конечной глубины:

$$\begin{aligned} V(r, E_n) &= -V_0 \text{ при } r \leq a, \\ V(r, E_n) &= 0 \text{ при } r \geq a. \end{aligned} \quad (1)$$

Потенциал (1) используется в составных моделях релятивистских элементарных частиц [1]. В этих моделях массу следует рассматривать как массу кварков – μ , $2E_n = m$ – как массу составной частицы (в системе $c = 1$), ширина ямы a – это размер составной частицы. Будем предполагать, что орбитальный момент частиц $l = 0$.

Уравнение для радиальной части релятивистской волновой функции имеет следующий вид:

$$\frac{1}{2} H_0 (2E_n - H_0) R(r, E_n) = V(r, E_n) R(r, E_n), \quad (2)$$

где оператор $\hat{H}_0$ – радиальная часть релятивистского гамильтониана, имеет вид

$$\hat{H}_0 = m \operatorname{ch}(iD) + \frac{i}{r} \operatorname{sh}(iD); \quad D = \frac{1}{m} \frac{d}{dr}. \quad (3)$$

К ВОПРОСУ О ПРОБЛЕМЕ СОЛНЕЧНЫХ НЕЙТРИНО

В.В. Скобелев

Московский политехнический университет, г. Москва, Россия

С использованием вероятностных представлений традиционной квантовой механики предложена формальная интерпретация известного факта отклонения «количества» солнечных электронных нейтрино от теоретического значения, полученного на основе принятой концепции о процессах их генерации в центре звезды. Результаты работы согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: вероятность, солнечные нейтрино, диапазон.

Введение

Как это давно известно, «дефицит» солнечных электронных нейтрино с достаточно существенным отклонением их «количества» от теоретического значения при принятых механизмах их генерации в центре Солнца привел к фундаментальному выводу о наличии осцилляций трех сортов нейтрино (ν_e, ν_μ, ν_τ), которые далее для простоты будем нумеровать как 1, 2, 3. Согласно основным принципам квантовой механики [1] и в простейшем варианте это, очевидно, означает, что существует ненулевая вероятность $W(i \rightarrow j)$ обнаружения нейтрино сорта $i \in \{1, 2, 3\}$ в состоянии $j \in \{1, 2, 3\}$, $j \neq i$. В этом и состоит исходная предпосылка развиваемой нами в данной работе формальной интерпретации эффекта нейтринных осцилляций и предложенного в связи с этим в том числе и количественного объяснения «дефицита» солнечных электронных нейтрино. Как будет видно, этот достаточно простой подход к проблеме позволяет получить нетривиальные результаты, согласующиеся с данными экспериментов. При этом предполагается, что в общем случае система нейтрино находится в состоянии $1 + 2 + 3$.

С другой стороны, в нашей работе [2] было указано, что развиваемый в ней подход к описанию экспериментально подтвержденных [3–6] переходов в системе атомов с изменением пространственной размерности $D \in \{1, 2, 3\}$ их электронных структур может быть применен к любой системе из $N = \text{const}$ тождественных объектов, если каждый из них может находиться в одном из трех состояний 1, 2, 3 с вероятностными соотношениями между ними.

Используемые в данной работе некоторые результаты [2] получены в вытекающем из такой постановки задачи предположении существования «двойных» переходов типа, например, $1, 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1, 2$, происходящих через «промежуточное» состояние с $D = 3$ и с идентичными «начальным» и «конечным» состояниями с $D = 1$ или $D = 2$. Вероятность таких «двойных» переходов по принципу умножения вероятностей, очевидно, равна

$$W_{\text{double}} = W(1, 2 \rightarrow 3) \times W(3 \rightarrow 1, 2). \quad (1)$$

Наряду со следующим отсюда существованием переходов «кратности $2k$ », которым соответствует вероятность $(W_{\text{double}})^k$, это и является ключевой предпосылкой нашей работы [2], на основе которой фактически получены все ее результаты.

Однако в работе [2] был рассмотрен лишь частный случай, когда вероятность $W(1, 2 \rightarrow 3)$ переходов $1, 2 \rightarrow 3$ равна единице: $W(1, 2 \rightarrow 3) = 1$. Это отвечало ситуации, в которой относительное число атомов $E_i \equiv N_i / N$ в пространственной конфигурации $D = 3$, т.е. $E_3 \equiv N_3 / N$, имело максимально возможное значение $E_{3\text{max}} \equiv E_{\text{max}}$, а в конфигурациях $D = 1, 2$, т.е. с числом атомов $E_{1,2} \equiv N_{1,2} / N$, — минимально возможное: $E_{1,2\text{min}} \equiv E_{\text{min}} < E_{\text{max}}$.

В данной работе мы применяем развитую в [2] методику к системе $1 + 2 + 3$ из трех сортов нейтрино в общем случае $W(1, 2 \rightarrow 3) \equiv z \leq 1$, включающем и рассмотренный в [2] «предельный» вариант $z = 1$. Это позволяет найти диапазоны значений E_i , а также диапазоны значений «вероят-

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532. 526.2.011.6

DOI: 10.17223/00213411/66/3/33

О СИЛЕ СТОКСА В КОНЕЧНОМ ОБЪЕМЕ

С.О. Гладков

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

Вычислена сила Стокса в условиях, когда шар радиуса R , находящийся в центре сферической полости радиуса H , симметрично обтекается стационарным потоком жидкости, втекающей в полость и вытекающей из нее вдоль направления произвольно выделенного диаметра абсолютно твердого и непроницаемого шара, под действием перепада давлений. Доказано, что взаимодействие шара с границей полости сильно влияет на силу Стокса. Задача решается с помощью метода диссипативной функции и основного уравнения гидродинамики при условии несжимаемости потока.

Ключевые слова: закон Стокса, уравнение непрерывности, бигармоническое уравнение, уравнение Навье – Стокса.

Введение

Вопрос, на котором мы хотели бы сейчас остановиться, напрямую связан с классическими задачами теоретической гидродинамики. Как известно (см. [1]), закон Стокса справедлив только для бесконечной области. Однако когда речь заходит о вычислении силы Стокса в конечном объеме, решение задачи будет иметь не совсем тривиальный характер, поскольку в подобных условиях необходимо учитывать взаимодействие с обеими границами области. Заметим, что, например, в работах [2–10] рассматривались задачи близкой тематики.

Анализу этой задачи и будет посвящена настоящая работа, суть которой заключается в следующем. Пусть имеется сферическая полость радиуса H , в центр которой помещен шар радиуса R . В радиальном, по отношению к центру абсолютно твердого и непроницаемого шара, направлении в эту полость втекает стационарный поток жидкости благодаря перепаду давлений слева и справа от полости, вытекающий так же симметрично с противоположной стороны (рис. 1). Поток жидкости, как и в задаче Стокса, считается ламинарным, и мы рассматриваем пограничную область шара, где число Рейнольдса мало. В этой связи следует подчеркнуть, что в рассматриваемом нами случае постановка задачи точно такая же, как и у Стокса, но с той лишь разницей, что обтекаемый шар «зажат» в конечном объеме с некоторым зазором $\delta = H - R$. Суть же всех последующих аналитических выкладок заключается в вычислении силы сопротивления в условиях, показанных на рис. 1, когда взаимодействие слоев жидкости с внешней сферической границей становится существенным.

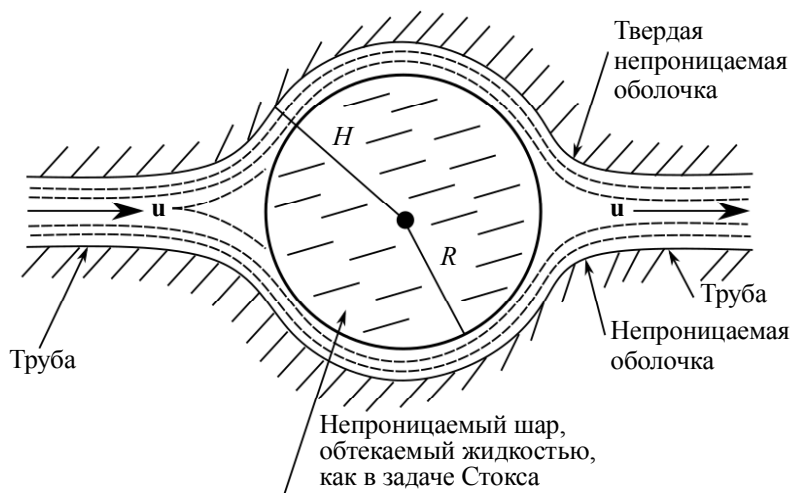


Рис. 1. Схематическое изображение геометрической постановки задачи

МЕТОД ЛОКАЛЬНОЙ ГЕМОДИНАМИКИ ДЛЯ ОЦЕНКИ ГЕМОДИНАМИЧЕСКОЙ ЗНАЧИМОСТИ ТАНДЕМНЫХ СТЕНОЗОВ В БИФУРКАЦИЯХ КОРОНАРНЫХ СОСУДОВ

В.П. Демкин¹, С.В. Мельничук¹, К.В. Завадовский²,
А.Т. Суюндукова¹, В.В. Руденко³, О.В. Демкин¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

² *НИИ кардиологии Томского НИМЦ, г. Томск, Россия*

³ *Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия*

Рассмотрена 3D-модель локальной гемодинамики коронарных сосудов и предложен метод вычисления коронарного кровотока для оперативной диагностики пациентов с атеросклеротическим бифуркационным поражением коронарных артерий. В основу модели заложен ряд принципиальных положений, определяющих особенности гемодинамики в стенозированных сосудах. Для вычисления скорости кровотока использовано уравнение Навье – Стокса совместно с уравнением непрерывности. Проведен вычислительный эксперимент по определению гемодинамической значимости кровотока для тандемных стенозов различного типа в бифуркации левой коронарной артерии для различных значений вязкости крови. Показано, что вязкость крови, степень сужения просвета артерии, а также форма и расположение атеросклеротической бляшки могут заметно влиять на ее гемодинамическую значимость и вызывать значительное снижение фракционного резерва кровотока (ФРК). Представленный в данной работе метод расчета коронарного кровотока и ФРК позволяет оперативно провести персонализированную оценку значимости стеноза для принятия врачебного решения.

Ключевые слова: вязкость крови, коронарный кровоток, бифуркации коронарных артерий, тандемный стеноз, физико-математическая модель, фракционный резерв кровотока.

Введение

Ишемическая болезнь сердца (ИБС) является наиболее распространенным кардиологическим заболеванием и основной причиной смертности в мире [1]. В настоящее время уровень летальности, масштабы инвалидизации и временной нетрудоспособности при ИБС в целом, и при заболеваниях коронарных артерий в частности, представляют не только важную медицинскую, но и серьезную социально-экономическую проблему, так как, в первую очередь, речь идет и о наиболее молодой, высококвалифицированной и творчески активной части населения. ИБС обусловлена атеросклерозом коронарных артерий (КА), который ограничивает кровоток к сердечной мышце и может привести к тяжелым последствиям, а именно к острому инфаркту миокарда и острой сердечной недостаточности. Гемодинамические факторы, такие как разделение и рециркуляция потока, низкое и колебательное напряжение сдвига стенки, играют важную роль в локализации и прогрессии атеросклероза с момента появления поражения и до разрыва атеросклеротической бляшки. В коронарной ангиопластике наиболее сложными и частыми случаями являются поражения коронарных артерий в области их бифуркаций. Лечение этого поражения связано с низкой процедурной эффективностью, высокой частотой осложнений и рестенозов [2, 3].

Одним из современных методов оценки ишемии миокарда является определение фракционного резерва кровотока (ФРК) по данным компьютерно-томографической коронарной ангиографии (КТКАГ) [4]. Данный метод демонстрирует высокую информативность и позволяет с высокой точностью идентифицировать гемодинамически значимые стенозы [4, 5]. К сожалению, в клинической практике данный метод используется недостаточно широко в связи с высокой стоимостью и тем фактом, что анализ КТКАГ проводит только фирма «HeartFlow Inc» [6]. В связи с этим разработка альтернативных решений для оценки ФРК, которые пригодны для широкого использования в целях своевременного выявления значимых стенозов коронарных артерий по данным КТКАГ, является актуальной задачей. Возможности прямых измерений морфологических и гемодинамических параметров сосудов ограничены, в то время как математическое моделирование коронарного кровотока на основе доступных экспериментальных данных позволяет обеспечить детальную информацию о состоянии сосудов. Успех численного эксперимента зависит от соответствия математической и вычислительной моделей реальным физическим процессам, протекающим в системе кровообращения человека. Численное моделирование кровотока в нормальных физиоло-

ДИНАМИКА И УСТОЙЧИВОСТЬ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Е.Н. Перевозников¹, А.С. Степашкина²

¹ Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, г. Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения,
г. Санкт-Петербург, Россия

На основе обобщенной теории переноса процесс теплопроводности в твердых телах рассматривается как процесс распространения потока тепла по системе взаимосвязанных каналов, моделирующих различные механизмы теплопередачи среды. Полученная при этом система уравнений динамики может быть сведена к известным уравнениям Фурье и Каттанео. Рассматривается устойчивость процессов. Получена система уравнений для возмущений. Приведен расчет спектра возмущений. Показано, что в линейной системе стационарный процесс теплопроводности устойчив относительно малых возмущений и что учет нелинейности и неоднородности даже в простейших случаях приводит к возникновению различных неустойчивостей и возбуждению хаотических тепловых волн.

Ключевые слова: моделирование процесса теплопроводности, устойчивость процессов.

Исходные положения многоканальной теории теплопроводности

Описание процесса теплопереноса на макроскопическом уровне производится с помощью хорошо известных классических методов и моделей (закон Фурье, принцип локального термодинамического равновесия, система уравнений Максвелла – Каттанео, статистические неравновесные теории теплопроводности) [1–5]. Каждый известный метод имеет как свои границы применимости, так и общие вопросы, в частности, связанные с описанием процессов в многокомпонентных средах и быстрых тепловых процессов, которые не стабильны и сопровождаются различными неустойчивостями.

Используем для исследования динамики процессов теплопроводности в твердых телах с электронным и фононным механизмами передачи энергии подход обобщенной теории переноса [6, 7], согласно которой процесс теплопередачи рассматривается как поток тепла, распространяющийся по N различным механизмам каналами. Каждый канал характеризуется определенным физическим процессом – механизмом переноса, скоростью распространения тепла, теплоемкостью и др.

Рассмотрим самый простой случай: изолированную одномерную систему с N механизмами передачи теплоты. То есть рассматриваем линейный образец с различными механизмами теплопроводности. Влияние окружающей среды косвенно учтено через граничные условия на концах образца.

Поток тепла в каждом канале n распространяется вдоль оси OX как по ее направлению, так и в противоположном. Обозначим плотности потоков тепла, распространяющихся по q_n и против q_n заданной оси по N каналам распространения (всего $2N$ -величин).

Тогда общий вид плотности теплового потока в системе равен [6, 7]

$$q(x, t) = \sum_{n=1}^N q_n(x, t) = \sum_{n=1}^N (q_n(x, t) - q_n(x, t)). \quad (1)$$

Переносимая часть внутренней энергии $U(x, t)$ равна сумме энергий в каждом канале:

$$U(x, t) = \sum_{n=1}^N [u_n(x, t) + u_n(x, t)] = \sum_{n=1}^N \frac{1}{c_n} [q_n(x, t) + q_n(x, t)], \quad (2)$$

где c_n – скорость распространения тепла в n -м канале. Таким образом, можно говорить о том, что каждый канал обладает собственной частотой и, соответственно, локальной температурой.

При нестационарном теплопереносе имеют место два физических процесса: первый – передача энергии от более нагретого участка к менее нагретому, второй – обмен энергией между различными каналами распространения.

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.147

DOI: 10.17223/00213411/66/3/57

О ПРИБЛИЖЕННОМ ОПИСАНИИ ГАРМОНИЧЕСКОГО ВОЛНОВОГО ПОЛЯ

А.Ж. Хачатрян¹, Р.А. Захарян², А.М. Седракян¹, Б.С. Лунин³¹ *Национальный политехнический университет Армении, г. Ереван, Армения*² *Академия гражданской защиты Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий имени генерал-лейтенанта Д.И. Михайлика, Московская область, г. Химки, Россия*³ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

Рассматривается задача о приближении волнового поля в ближней, средней и дальней зонах наблюдения. Указана возможность введения более точного по сравнению с приближением Френеля так называемого квазиточного приближения. Для рассматриваемой задачи интерференции получено распределение интенсивности в ближней зоне наблюдения. Показано, что положение максимумов интенсивности в ближней зоне наблюдения определяется ку-бическим уравнением.

Ключевые слова: *суперпозиционное поле, квазиточное приближение, приближения Френеля и Фраунгофера, интерференционная картина в ближней зоне наблюдения.*

Введение

Как известно, одной из центральных проблем теории волн является задача описания волнового поля в областях, далеких от генерирующих, переизлучающих или поглощающих данное поле источников и поверхностей [1, 2]. Обычно в предположении, что влияние генерированного поля на процесс генерации волн источниками мало, данную задачу в теории волн называют дифракционной задачей. В общем случае решение дифракционной задачи представляет собой трудную математическую проблему, которую даже в приближенном виде, как правило, приходится выполнять численно [3–12]. Наиболее известными методами приближенного рассмотрения дифрагированного поля являются так называемые картины Френеля и Фраунгофера.

Обоснованность применения того или иного приближения обычно связывается с близостью или удаленностью области наблюдения от области источников и влияющих на распространение волн поверхностей. Вместе с тем хорошо известно, что эта связь зависит от длины волны излучения. То есть, если для одной длины волны данная дистанция наблюдения попадает, например, в среднюю зону наблюдения, где может быть применено приближение Френеля, то та же самая дистанция для другого значения длины волны может попадать, например, уже в ближнюю зону. Поэтому в теории дифракции, помимо пространственных параметров задачи, вводится также еще один дополнительный так называемый волновой параметр. Помимо накладываемых на пространственные параметры задачи ограничений, условие применимости приближенного описания поля обосновывается также ограничением, накладываемым на значения волнового параметра. В последующем на основе данных значений волнового параметра вводятся понятия ближней, средней и дальней волновых зон наблюдения.

В рамках данной работы для описания волнового поля нами рассматривается возможность введения более точного по сравнению с приближениями Френеля и Фраунгофера так называемого квазиточного приближения. На основе задачи приближенного описания поля сферической волны показано, что частным случаем квазиточного приближения является приближение Френеля. В свою очередь, частным случаем приближения Френеля является приближение Фраунгофера. В рамках квазиточного приближения нами также рассматривается задача интерференции для двух источников, имеющая не только общетеоретическое, но и практическое значение.

ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ БОРФТОРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДИПИРРОМЕТЕНОВ*

Ш.Т. Бердыбаева, Е.Н. Тельминов, Т.А. Солодова

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Представлены результаты исследования люминесцентных и генерационных характеристик 2,2'-bisBODIPY и 2,3'-bisBODIPY в различных растворителях: толуоле, тетрагидрофуране, хлороформе при лазерном возбуждении. Отмечены особенности спектральных характеристик. Проведены исследования фотостабильности. Получены значения КПД для 2,2'-bisBODIPY и 2,3'-bisBODIPY, 23 и 16% соответственно.

Ключевые слова: лазерная генерация, спектры люминесценции, фотостабильность, борфторидные дипиррометеновые комплексы.

Введение

В настоящее время активно развивается направление фотоники, связанное с использованием сложных органических соединений в различных оптических устройствах. Особый интерес представляют борфторидные дипиррометеновые комплексы BODIPY, характеризующиеся высокой хромофорной активностью в видимой и УФ-областях электромагнитного излучения, отличной фотохимической стабильностью и простотой функционализации [1–3]. В настоящее время BODIPY люминофоры успешно применяются в качестве лазерных сред [4–6], флуоресцентных меток для визуализации клеток [7, 8], компонентов солнечных батарей [9, 10], оптических сенсоров [11, 12]. Последние активно используются в различных прикладных задачах биологии и экологического мониторинга, в системах обеспечения безопасности.

Оптические химические сенсоры являются одной из важнейших категорий химических сенсоров. Оптические химические сенсоры, в отличие от других, нечувствительны к электромагнитным и радиационным помехам. Среди большого разнообразия люминесцентных химических датчиков значительное внимание уделяется применению люминесцентных тонкопленочных сенсоров с использованием в них органических лазерно-активных сред. Обеспечение режима вынужденного излучения в таких сенсорах позволяет многократно повысить чувствительность устройства. В работах [13, 14] минимальная определяемая концентрация аналита в сенсорах, работающих в режиме пороговой лазерной генерации, была в 30 раз ниже по сравнению с аналогичными устройствами, работающими в режиме флуоресценции. Кроме этого, при работе сенсора в режиме лазерной генерации уменьшается время отклика на присутствие аналита [15].

В представленной работе исследованы фотохимические и генерационные характеристики борфторидных комплексов дипиррометенов при возбуждении лазерным излучением с целью расширения ряда химических соединений для возможных применений в оптических лазерных хемосенсорах, предназначенных для детектирования кислорода и паров кислородсодержащих химических соединений.

Объекты исследования

В качестве объектов исследований взяты соединения борфторидных дипиррометеновых комплексов BODIPY: бис(1,2,3,7,9-пентаметил-дипирролилметен-8-ил)метана бис(дифторборат) (2,2'-bisBODIPY), бис(1,2,3,7,8-пентаметил-дипирролилметен-9-ил) (1,2,3,7,9-пентаметил-дипирролилметен-8-ил)метана бис(дифторборат) (2,3'-bisBODIPY). Данные соединения были синтезированы в Институте химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново, Россия. Структуры флуорофоров представлены на рис. 1. В качестве растворителей были выбраны растворители, применяемые для создания тонкопленочных лазерно-активных структур на основе полиметилметакрилата (ПММА): тетрагидрофуран (ТГФ), хлороформ (ХЛФ), толуол. Выбранные соединения растворялись до концентрации $5 \cdot 10^{-4}$ М.

* Работа выполнена в рамках научного проекта Приоритет 2030, проект № НУ 2.0.7.22 МЛ.

ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИЕ ОПТИЧЕСКИЕ ИМПУЛЬСЫ В ОПТИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ С УЧЕТОМ ПОГЛОЩЕНИЯ НА ТЯЖЕЛЫХ ИОНАХ*

Н.Н. Конобеева, М.Б. Белоненко

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Россия

Исследована динамика предельно короткого оптического импульса в нелинейной среде с оптически анизотропными свойствами, в которую введены углеродные нанотрубки. На основании уравнений Максвелла для двух поляризаций и с учетом разной величины компонент скорости получена система эффективных уравнений на векторный потенциал поля импульса с учетом колебаний ионов рассматриваемой среды. Выявлены параметры, позволяющие контролировать пространственно-временные характеристики импульса.

Ключевые слова: *тяжелые ионы, предельно короткий импульс, углеродные нанотрубки, оптическая анизотропия.*

Введение

Предельно короткие лазерные импульсы с длительностью всего несколько оптических циклов [1] стали революционным инструментом для исследования и управления взаимодействиями света с веществом [2–5]. Обычно такие импульсы с небольшим числом колебаний поля производятся лазерами с высокой пиковой мощностью за счет нелинейных эффектов в объемных или волоконных материалах или непосредственно из лазерного генератора. Поэтому достижение сильного временного и пространственного ограничения импульса важно для оптимизации эффективности нелинейного процесса, особенно для приложений интегрированной фотоники, где используются импульсы с энергией в несколько пикоджоулей. При этом такое пространственное ограничение могут обеспечить оптические волноводы, что дает возможность не только управлять формой импульса, но и реализовать сжатие импульсов [6, 7]. В этом контексте углеродные материалы привлекают особое внимание в качестве сред, перспективных как для фундаментальных исследований, так и для практических приложений в сфере фотоники и оптоэлектроники. Особенно хочется выделить углеродные нанотрубки (УНТ) [8], которые хорошо зарекомендовали себя с точки зрения стабилизации предельно короткого импульса [9].

В данной работе исследуется динамика предельно короткого оптического импульса в нелинейной среде с оптически анизотропными свойствами, которая содержит массив углеродных нанотрубок. Авторами построена модель взаимодействия излучения с такой средой [10], выявлены параметры, позволяющие контролировать пространственно-временные характеристики импульса. При этом большой интерес представляет вопрос вынужденного комбинационного саморассеяния (ВКС). Как известно, данный эффект оказывает существенное влияние на импульсы длительностью несколько пикосекунд и менее [11]. Как и многие нелинейные явления, в конкретном прикладном случае ВКС может оказывать как негативное [12], так и позитивное влияние [13, 14] на систему в целом.

В работе [15] показано существенное влияние колебаний тяжелых ионов среды, содержащей УНТ, на динамику предельно короткого импульса. Выявлена возможность управления режимом генерации терагерцовых импульсов за счет данного эффекта.

Цель настоящей работы – изучение влияния поглощения на тяжелых ионах среды с учетом ее оптической анизотропии. Данный вопрос является важным, поскольку анизотропия среды приводит к значительному изменению свойств распространяющихся в ней предельно коротких импульсов и может вызывать не наблюдаемые ранее особенности динамики таких импульсов.

* Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Совета по грантам Президента РФ, грант № МД-3173.2021.1.2.

**АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА
И КВАНТОВЫЙ КОНФАЙНМЕНТ В НАНОКРИСТАЛЛИТАХ КРЕМНИЯ.
ЧАСТЬ II. СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОПИРОВАННЫХ
И СЛОЖНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ***

Ф.Н. Томилин^{1,2}, Ю.А. Мельчакова³, П.В. Артюшенко^{2,4,5}, А.В. Рогова^{2,5}, П.В. Аврамов⁶

¹ *Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, Россия*

² *Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия*

³ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

⁴ *Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», г. Красноярск, Россия*

⁵ *Красноярский государственный медицинский университет им. профессора А.Ф. Войно-Ясенецкого,
г. Красноярск, Россия*

⁶ *Кёнбукский национальный университет, г. Тэгу, Республика Корея*

Во второй части обзора подробно рассмотрены структура и оптические свойства уникальных кремниевых нанокластеров, состоящих либо из двух и более фрагментов кубического кремния, химически соединенных посредством эквивалентных $\langle 111 \rangle$ поверхностей за счет двойникования, либо допированных ионами редкоземельных металлов нанокристаллитов кремния, в частности, ионами Er^{+3} . Показано, что допирование нанокристаллов кремния, внедренных в оксидную матрицу, приводит к формированию узкого, с выраженной прямой зависимостью от концентрации допанта, высокоинтенсивного пика в спектрах фотолюминесценции в длинноволновой области (0.8 эВ) с одновременным резким уменьшением интегральной широкополосной интенсивности в области 1.3–1.7 эВ за счет полного подавления люминесценции от кремниевых нанокристаллов и полного переноса интегральной интенсивности в область излучения ионов эрбия. Показано, что оптимальными люминесцентными свойствами обладают nc-Si:Er/SiO_2 гетероструктуры с достаточно маленькими нанокристаллами кремния, в которых ионы эрбия включены внутрь кристаллитов и не взаимодействуют с SiO_2 -матрицей. Был синтезирован широкий класс квазисферических и декаэдральных кремниевых наночастиц двойниковой природы с эффективными размерами 20–60 нм и различными механизмами компенсации структурных напряжений.

Ключевые слова: кремниевые кластеры, атомная структура, электронная структура, запрещенная щель, оптические свойства, квантовый конфайнмент.

Введение

Полупроводники в целом и, в частности, кремниевые квантовые точки с уникальными люминесцентными свойствами являются ключевыми строительными блоками новых технологий и устройств. Экспериментально для создания квантовых точек могут быть использованы различные технологии, в том числе эпитаксиальный рост, ряд жидкофазных химических методов, в первую очередь коллоидных, ионная имплантация и современные литографические методы [1]. Благодаря чрезвычайно высокому квантовому выходу кремниевые квантовые точки имеют большие перспективы для использования в оптических системах передачи информации. Их можно также применять в качестве одноэлектронных транзисторов и кубитов для квантовых компьютеров в нанoeлектронике.

В мягких внешних условиях регулировать базовые физические свойства материалов можно с помощью базовых эффектов квантового размерного ограничения. Примеры включают квантовый эффект Холла [2, 3], баллистическую проводимость [4] и кулоновскую блокаду [5, 6]. В результате вышеупомянутых физических явлений гетероструктуры имеют более высокую подвижность электронов [7], более высокий квантовый выход [8], более низкий порог генерации лазерного излучения с более высокой степенью квантового конфайнмента [9], на основе которых создаются такие новые устройства, как фотовольтаические элементы [10], ИК-детекторы [11], полевые транзисторы [12] и нанoeлектромеханические устройства [13]. Многие из вышеперечисленных аспектов строения, электронных и оптических свойств нанобъектов ранее рассматривались также с использованием теоретических квантово-химических методов [14–18].

* Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2020-0033.

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 519.628.1:662.62

DOI: 10.17223/00213411/66/3/84

**ВЛИЯНИЕ АГЛОМЕРАЦИИ
НА ОПТИМАЛЬНОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ ЗЕРЕН ОКИСЛИТЕЛЯ
В ЗАРЯДЕ СМЕСЕВОГО МЕТАЛЛИЗИРОВАННОГО ТВЕРДОГО ТОПЛИВА***

Л.Л. Миньков, Е.В. Пикущак, Э.Р. Шрагер, А.Б. Ворожцов

Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Получены зависимости оптимального распределения частиц зерен окислителя с массовым содержанием 70% в прочно скрепленном заряде смесевых металлизированных твердых топлив (СТТ) с центральным каналом цилиндрической формы, обеспечивающих максимальную полноту сгорания металлических агломератов, образующихся на поверхности горения СТТ. Для массовых долей металла в составе топлива 0.1 и 0.2 проведено сравнение результатов для одномерного и двумерного приближений поля течения продуктов сгорания в цилиндрическом канале.

Ключевые слова: эффективность сгорания металлических частиц, зерна окислителя, смесевое металлизированное твердое топливо, аддитивные технологии.

Введение

Развитие аддитивных технологий открывает большие возможности для создания зарядов смесевых металлизированных твердых топлив (СТТ), позволяющих обеспечить не только требуемую зависимость площади горения от толщины сгоревшего свода, но и заданную структуру топлива [1–3].

Поскольку основными компонентами СТТ являются связка (полибутадиен с концевыми гидроксильными группами, бутадиен-акрилатный каучук и т.д.), частицы окислителя (перхлорат аммония, нитрид аммония, октоген, гексоген и др.) и частицы металла (алюминий, бор и др.), то повышения эффективности сгорания СТТ можно достичь путем изменения структуры топлива, а именно за счет изменения размеров зерен окислителя и/или металла, а также за счет изменения массового содержания этих компонентов, что в итоге ведет к увеличению удельного импульса ракетного двигателя на твердом топливе (РДТТ). Так, в 1976 г. был зарегистрирован патент на состав твердого топлива, структура которого была изменена за счет варьирования размеров частиц металла [4]. Заряд СТТ в виде цилиндрической шашки с каналом был изготовлен таким образом, что более мелкие частицы металла располагались ближе к выходу из канала, а более крупные – ближе к торцевой части канала. Вычислительный эксперимент [5] показал, что в полузамкнутом канале СТТ максимальная эффективность сгорания частиц для заданной массы металла в заряде может быть достигнута за счет линейного перераспределения массовой доли металла вдоль канала. В работе [6] увеличение полноты сгорания твердотопливного заряда в гибридном ракетном двигателе было достигнуто за счет монотонного увеличения содержания окислительного компонента от головной части заряда к предсвальной его части.

Теоретический анализ и оценка эффективности сгорания алюминия в ракетном двигателе на твердом топливе выполнены в [7–9]. Основными параметрами, влияющими на эффективность сгорания, являются: отношение времени сгорания частицы к среднему времени ее пребывания в камере сгорания РДТТ и отношение мольных потоков металла и окислителя на поверхности топлива [7]. С использованием приближения одномерного поля течения [8] и приближения двумерного поля течения [9] в цилиндрическом канале заряда СТТ были построены профили оптимального распределения частиц металла в заряде, обеспечивающие максимальную полноту сгорания частиц на выходе из канала, и было показано влияние скоростного отставания частиц от газа на профили оптимального распределения.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № FSMN-2020-0028.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ КАРБОНИТРИДОВ ЦИРКОНИЯ

Е.Д. Кузьменко¹, С.В. Матренин¹, Ян Сяо²

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

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

Исследованы физико-механические свойства двойной керамики на основе карбида и нитрида циркония и тройной керамики на основе данных компонентов с введением ультрадисперсного диоксида циркония. Рассмотрен процесс получения данных керамик при помощи горячего прессования при температуре 2000 °С и давлении 30 МПа с выдержкой 15 мин. Для данных керамических образцов было произведено исследование поверхности образцов при помощи растровой электронной микроскопии. Получены изображения поверхностей в SE-режиме, данные изображения имеют топографический контраст. В результате проведенного исследования указаны области применения рассматриваемых керамик. Механические испытания исследуемых керамик проводились на приборе Nano Indenter G 200.

Ключевые слова: карбид циркония, нитрид циркония, керамика, горячее прессование, наноиндентирование.

Введение

Одной из ключевых задач, имеющих в передовом материаловедении, является синтез, исследование и производство материалов, способных работать в экстремальных условиях. Данные условия определяются сочетанием воздействия агрессивных химических сред, высоких температур, механических напряжений и т.д. При решении данной задачи применяют соединения тугоплавких металлов с азотом, бором, углеродом. В этих соединениях сочетаются устойчивость к воздействию высоких температур, значительные показатели твердости, а также специфические физические свойства [1]. При рассмотрении соединений переходных металлов с углеродом – карбидов, карбид циркония по показателям ряда свойств, таких как износостойкость, трещиностойкость, тугоплавкость, выделяется в данной группе соединений [2].

При рассмотрении ряда соединений циркония ZrO_2 – ZrN – ZrC карбид циркония имеет самую высокую температуру плавления и относится к группе высокотемпературных материалов [3, 4].

Благодаря этому соединения карбида циркония принадлежат к перспективным инструментальным и термостойким материалам. Цель работы – изучение структуры и физико-механических свойств керамики на основе карбонитридов циркония.

Горячее прессование

В настоящей работе для исследования были подготовлены следующие составы шихты: 50 мас.% ZrC + 50 мас.% ZrN и 33 мас.% ZrC + 33 мас.% ZrN + 33 мас.% ZrO_2 . Для подготовленных шихт применялась операция горячего прессования. Горячее прессование шихт проводилось при температуре 2000 °С с выдержкой при заданной температуре 15 мин и давлении 30 МПа.

Рассмотрим механизм уплотнения процесса горячего прессования. Процесс, при котором шихту подготавливаемой керамики помещают в графитовую форму таким образом, что спекание и прессование выполняются одновременно, называется горячим прессованием [5].

Хотя горячее прессование выполняется, основываясь на двух процессах: прессовании и спекании, принципиального отличия от обычного формования и спекания нет [6]. С точки зрения эффекта горячее прессование значительно сокращает фазовый переход и время формирования образца [7, 8]. Следовательно, можно сказать, что процесс горячего прессования является активированным процессом спекания.

Процесс спекания при горячем прессовании является крайне несбалансированным процессом. Когда порошковая смесь непрерывно нагревается под давлением, оксидная пленка на поверхности порошка разрушается под давлением и может быть восстановлена углеродом [9]. Однако в отличие от процесса спекания, горячему прессованию не хватает времени, чтобы сбалансировать растворимость компонентов смеси, и процесс перекристаллизации через жидкую фазу не происходит во время процесса горячего прессования. Следовательно, усадка продукта горячего прессования отличается от обычного метода спекания [10].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАРОЖДЕНИЯ И РОСТА НАНОЧАСТИЦ SiO_2 ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ, ФОРМИРУЕМОЙ В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ*В.В. Шеховцов¹, О.В. Матвиенко^{1,2}¹ *Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия*² *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Предложена модель, адекватно описывающая процессы зарождения и роста наночастиц SiO_2 из газовой фазы, формируемой в условиях термической плазмы. Модельные расчеты проводились при изменении характеристик: начальная температура в диапазоне $3200 \leq T_0 \leq 4200$ К; интенсивность объемного теплообмена в пределах $10 \leq K \leq 10^3$ Вт/(м³·К); температура охлаждения 293, 373 и 77 К. Проведенные расчеты показывают, что при $K \geq 100$ Вт/(м³·К) тепловыделение в результате конденсации становится незначительным и может не учитываться при анализе баланса температуры. Показано, что рост числа зародышей дисперсной фазы при температуре выше 1200 К с течением времени происходит по линейному закону. При понижении температуры скорость нуклеации уменьшается и при $T < 800$ К формирование новых зародышей практически прекращается. Экспериментальные исследования показали, что предложенная модель адекватно описывает процесс при закалке парогазовой фазы, формируемой в плазмохимическом реакторе, в качестве которого может выступать природный материал с содержанием диоксида кремния до 99%.

Ключевые слова: нанопорошок диоксида кремния, конденсация, численное моделирование.

Введение

Нанодисперсный порошок диоксида кремния SiO_2 является распространенным материалом, используемым в различных отраслях производства [1–3]. Наиболее перспективным с точки зрения гранулометрического состава является диапазон от 10 до 150 нм, при этом отметим, что в специализированных областях техники необходим узкофракционный диапазон, где разница в размере не превышает 2%. Нанодисперсный порошок диоксида кремния SiO_2 в промышленности используется в основном в качестве добавки в высокоэффективный бетон, керамику и функциональные покрытия различного назначения [4, 5]. Он также используется для производства огнеупоров [6] и полимеров [7]. В зависимости от применения необходимо знать размеры частиц или площадь поверхности, поэтому актуальным является изучение благоприятных условий образования и роста нанодисперсного порошка диоксида кремния SiO_2 . Механизм роста наночастиц осуществляется, в основном, конденсацией парогазовой среды в результате резкого снижения температуры 10^4 – 10^5 К/с [8]. Обычно парогазовая смесь перетекает из реакторов в реакционную камеру (например, электрофильтр), где происходит процесс закалки.

Экспериментальные методы исследования процесса конденсации наночастиц из газовой фазы в настоящее время не позволяют наблюдать процессы роста и формирования дисперсной структуры. Полученные материалы исследуются после завершения процессов синтеза, без полного анализа значимости протекающих процессов. Математическое моделирование позволяет выявить основные закономерности нуклеации и роста формирующихся частиц. На сегодняшний день разработано достаточное количество физико-математических моделей, описывающих конденсацию наночастиц на основе неметаллических и металлических материалов в среде плазмы. Однако особенностью этих работ является узкий диапазон вариаций параметров или ограничения по технологическому аспекту, реализуемому в практике. Например, в работе [8] предложена модель, описывающая процессы гомогенного зарождения, гетерогенного роста и коагуляции за счет броуновских столкновений в сочетании с конвективным и диффузионным переносом частиц и реагирующих газов внутри осесимметричной области. Также известны двунаправленная узловая модель [9] и многокомпонентная модель конденсационного роста наночастиц при индукционной плазменной обработке. Во всех известных работах предполагается, что в начальный момент времени материал находится в паровой фазе, которую можно рассматривать как идеальный газ. Когда пар достигает насыщения, начинается процесс образования ядер конденсации. После зародышеобразования рост

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ FEMN-2022-0001 и гранта Президента РФ МК-66.2022.4.

СОВМЕСТИМОСТЬ МОЛИБДЕНА С ЖИДКИМ ОЛОВОМ ПРИ 1050 °С: СРАВНЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОЦЕНОК С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ НАБЛЮДЕНИЯМИ

В.П. Красин¹, А.В. Вертков², С.И. Союстова¹

¹ *Московский политехнический университет, г. Москва, Россия*

² *АО «Красная Звезда», г. Москва, Россия*

Жидкое олово рассматривается в качестве перспективного материала для использования обращенных к плазме внутрикамерных компонентов стационарного термоядерного реактора. Поскольку коррозия в жидком олове в значительной степени обусловлена процессами растворения твердых металлов в жидком, то растворимость и термодинамическая активность основных компонентов конструкционного материала являются ключевыми параметрами для прогнозирования коррозионных процессов. Для переходных металлов Fe, Cr, Nb, Mo и W проведены теоретические расчеты растворимости в жидком олове, результаты которых сравниваются с известными из литературы экспериментальными данными. Представлены результаты экспериментов по изучению совместимости молибдена с жидким оловом при 1050 °С. Полученные данные хорошо коррелируются с результатами расчетной оценки и дают оптимистичную основу для продолжения исследований на более широком временном интервале и в условиях, близких к условиям эксплуатации внутрикамерных компонентов токамака.

Ключевые слова: жидкое олово, молибден, коррозионная зона, химический потенциал, энергия Гиббса, энерго-дисперсионная рентгеновская спектроскопия.

Введение

Применение жидких металлов в токамаках в качестве материалов внутрикамерных компонентов (ВК), обращенных к плазме, позволит устранить серьезную проблему неизбежной деградации традиционно используемых твердых материалов. Литий и олово рассматриваются как для создания текущей жидкометаллической защитной пленки на поверхности ВК, так и в качестве жидкого наполнителя при использовании капиллярно-пористых систем (КПС) [1]. Однако каждый из них обладает как преимуществами, так и недостатками с точки зрения использования в ВК токамака.

По сравнению с жидким литием олово характеризуется более низкими значениями давления пара над расплавом [2], что позволяет его использовать в более широком диапазоне рабочих температур. Приходится также учитывать, что использование лития может вызвать проблемы с безопасностью, связанные с возможностью накопления в литии высоких концентраций трития. Последнее обусловлено сильным химическим сродством лития к водороду (тритию). С другой стороны, жидкое олово является более коррозионно-активной средой по отношению к большинству конструкционных материалов. Также использование жидкого олова, которое обладает высоким по сравнению с литием значением зарядового числа Z , вызывает озабоченность с точки зрения возможного загрязнения плазмы. Действительно, если атомы лития могут переизлучать значительную энергию только в так называемом SOL слое плазмы (Scrape-Off Layer), то атомы олова ($Z_{Sn} = 50$) могут проникать и значительно излучать энергию в центральной области плазмы, что приводит к ухудшению ее параметров.

Поскольку в качестве кандидатов для изготовления матриц КПС и других конструкционных материалов ВК рассматриваются нержавеющие стали и тугоплавкие металлы, то важным критерием, определяющим динамику коррозионных процессов на границе твердый металл – жидкое олово, является такой параметр, как растворимость переходного металла в жидком Sn. В настоящей работе при оценке достоверности тех или иных имеющихся в литературе экспериментальных данных [3, 4] предлагается использовать результаты теоретического расчета растворимости. В зависимости от конкретной бинарной системы при проведении таких расчетов использовалась модель Миедемы [5] или элементы термодинамического моделирования [6].

При изучении процессов, протекающих в системе, состоящей из двух разнородных твердых металлов, разделенных расплавом легкоплавкого металла, на основе результатов исследования по-

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРУШЕНИЯ ТЕХНИЧЕСКОГО ЖЕЛЕЗА ПРИ АБРАЗИВНОМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ В УСЛОВИЯХ ВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ

К.П. Арефьев¹, Э.Л. Вольф¹, А.С. Швец¹, А.В. Беллер²

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

² *ООО «Арвью», г. Томск, Россия*

Дана характеристика актуальности проблемы абразивного низкотемпературного изнашивания, а также изложены основы методологии износных физически обоснованных испытаний в условиях охлажденной воздушной среды. Описаны схема и методики низкотемпературных измерений твердости и испытаний на износ. Экспериментально обнаружен вязко-хрупкий переход при изнашивании технического железа. Данный результат базируется на наличии корреляционных связей абразивной износостойкости с механическими характеристиками. В качестве интегральной характеристики в исследовании рассмотрена твердость, которая измерялась по методу Роквелла. Отсутствие корреляции в поведении графиков износа (износостойкости) и твердости на интервале температур от критической температуры хрупкости 250 до 113 К объясняется изменением механизма поверхностного разрушения от среза к отрыву, что зафиксировано на оптических фрактограммах.

Ключевые слова: абразивное изнашивание, износ, износостойкость, твердость, механические характеристики, вязко-хрупкий переход, срез, отрыв.

Введение

Проблема и ее актуальность

Растущие масштабы освоения Северо-Востока страны, районов Заполярья, Арктики ставят перед современным научным и инженерно-техническим сообществом сложные и актуальные задачи, связанные как с созданием техники «северного исполнения», так и разработкой «арктических материалов» [1, 2]. Как показано в [3], использование, например, только хладостойких материалов значительно увеличивает вероятность безотказной работы машин.

Анализ поломок техники «северного исполнения» показал, что первопричиной хрупких разрушений во многих случаях являются интенсивно развивающиеся на рабочих поверхностях износные дефекты, часто связанные с абразивным воздействием среды (абразивным изнашиванием) [3]. Макроразрушения при этом возникают как в самих изношенных деталях – в основном за счет уменьшения их рабочих сечений, так и в сопряженных деталях, например, вследствие появления дополнительных вибрационных и ударных воздействий, тем самым ухудшая работоспособность механизмов и машин в целом [4].

Особенности методологии

Учет по отдельности влияния внешних факторов (низких температур, высоких скоростей деформации, различных степеней стеснения деформации) на хрупкое разрушение металлических материалов был положен в основу системного подхода к выбору метода экспериментального исследования закономерностей абразивного низкотемпературного изнашивания с учетом следующих условий:

1. На исследуемой поверхности разрушение должно происходить при свободном (нестесненном) развитии пластических деформаций.
2. Абразивная способность изнашивающей среды в диапазоне низких температур меняться не должна, так как она влияет на различие в величине износа материалов.
3. Инееобразование на изнашиваемой поверхности необходимо учитывать, так как износные испытания в охлажденной воздушной среде сопровождаются вымораживанием влаги воздуха, которая в виде конденсата (инея) осаждается в процессе опыта.

Отмеченные методологические особенности низкотемпературных испытаний позволили, как и в работах [5, 6], сфокусировать внимание на экспериментальных методах, главной особенностью которых является свободное ударяющее воздействие абразивных частиц.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ ВЗАИМНОЙ ДИФфуЗИИ ПРИ ТВЕРДО-ЖИДКОФАЗНОМ КОНТАКТЕ Ni И Al

Г.М. Полетаев¹, Р.Ю. Ракитин²

¹ *Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия*

² *Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия*

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния упругой одноосной деформации кристаллической решетки Ni на интенсивность взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ni и Al. Во всех рассмотренных случаях наблюдалось увеличение интенсивности диффузии при растяжении и уменьшение при сжатии, что связано с соответствующим изменением свободного объема, в значительной степени влияющего на диффузионную подвижность атомов. Было выяснено, что интенсивность взаимной диффузии в случае ориентации межфазной границы (111) относительно кристаллической решетки Ni выше по сравнению с ориентацией (001). Данное отличие объяснено разницей в обоих случаях энергий атомов Ni в фазе алюминия и встроенных в границу кристаллического никеля.

Ключевые слова: молекулярная динамика, диффузия, межфазная граница, деформация, никель, алюминий.

Введение

Интерметаллические соединения системы Ni–Al и сплавы на их основе благодаря сочетанию таких свойств, как низкая плотность, высокий предел текучести при повышенных температурах, хорошая стойкость к окислению и коррозии, имеют высокий потенциал применения их в качестве высокотемпературных конструкционных материалов [1–4]. Основой технологии получения интерметаллидов и сплавов является диффузия, процесс которой в подобных системах имеет сложный и многофакторный характер. В диффузионной зоне на границе двух металлов в процессе высокотемпературного синтеза могут присутствовать одновременно как твердые упорядоченные и разупорядоченные фазы, так и жидкие смеси с различным содержанием компонентов [5–7]. Знание диффузионной кинетики, характеристик и механизмов диффузии в металлических системах, в частности в системе Ni–Al, необходимо для более детального понимания процессов, происходящих при высокотемпературном синтезе, а также имеет большое значение для всей области исследования и создания интерметаллидов и бинарных сплавов.

В предыдущих работах [8, 9] нами было проведено исследование самодиффузии отдельно атомов Ni, Ti и Al в жидких сплавах двухкомпонентных систем Ni–Al и Ti–Al. Рассматривались упорядоченные и разупорядоченные сплавы с составом $A_{75}B_{25}$, $A_{50}B_{50}$, $A_{25}B_{75}$ (A и B – компоненты сплава), а также чистые металлы. Для рассмотренных систем были, в частности, получены характеристики самодиффузии: энергия активации диффузии и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования влияния упругой одноосной деформации кристаллической решетки Ni на интенсивность взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ni и Al, т.е. при температурах выше температуры плавления Al, но ниже температуры плавления Ni. Реакция синтеза в условиях деформации компонентов имеет место, например, при предварительной механоактивационной обработке компонентов смеси [10, 11].

Описание модели

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ni–Al в молекулярно-динамической модели использовались ЕАМ-потенциалы из работы [12], где они были получены на основе сопоставления как с экспериментальными, так и с первопринципными данными о различных свойствах и структуре чистых металлов и интерметаллидов NiAl и Ni₃Al. Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов рассматриваемых систем [9, 12, 13].

ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО И ФОНОННОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ ПОЛУТОРНОЙ ОКИСИ ВАНАДИЯ

Вад.И. Суриков¹, Вал.И. Суриков¹, Н.А. Семенюк¹, Ю.В. Кузнецова²

¹ Омский государственный технический университет, г. Омск, Россия

² Сургутский государственный университет, г. Сургут, Россия

Представлены результаты исследования температурных зависимостей молярной теплоемкости при постоянном давлении и магнитной восприимчивости в интервале (от 80 до 300 К) для систем материалов (V_2O_{3+X} , где $X = 0.01, 0.04, 0.08$) и ($V_{1.98}Me_{0.02}O_{3+X}$, где $X = 0.01, 0.04, 0.08$) ($Me = Al, Fe$). Определены значения плотности электронных состояний для двух предельных значений ширины зоны проводимости $E_{Ф1} = 0.1$ эВ и $E_{Ф2} = 0.1$ эВ. Установлено, что фазовый переход металл – диэлектрик в исследуемых материалах связан с обменным электрон-фононным взаимодействием.

Ключевые слова: оксид ванадия, молярная теплоемкость, магнитная восприимчивость, электронный энергетический спектр, фононный энергетический спектр.

Введение

Соединение V_2O_3 в конденсированном состоянии обладает в окрестностях 170 К фазовым переходом полупроводник (диэлектрик) – металл (ФПМД). Этот переход сопровождается скачкообразным изменением магнитных, оптических, теплофизических и других свойств материала [1]. Несмотря на то, что фазовый переход сохраняется как при незначительном замещении атомов ванадия атомами других переходных металлов (в частности, алюминия, железа), так и при незначительном отклонении от стехиометрии данных соединений, однако такие параметры фазового перехода, как температура и ширина, а также величина скачка фазового перехода, могут меняться [1–4]. Авторами работ [5, 6] сообщается о значительном влиянии электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий на ФПМД в трехокиси ванадия. Однако недостаточно изученным остается вопрос о влиянии увеличения концентрации кислорода в материалах на основе оксида ванадия (III) как на температуру фазового перехода, так и на параметры электронного и фононного энергетических спектров (коэффициент Стонера μ , параметр электрон-фононного взаимодействия λ). Совместный анализ исследования температурных зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости соединений (V_2O_{3+X} , где $X = 0.01, 0.04, 0.08$) и ($V_{1.98}Me_{0.02}O_{3+X}$, где $X = 0.01, 0.04, 0.08$) ($Me = Al, Fe$) в интервале от 80 до 300 К позволяет оценить параметры ФПМД, а также параметры электронного и фононного энергетических спектров в металлической фазе $V_{1.98}Me_{0.02}O_{3+X}$ ($Me = Al, Fe$).

Объекты и методы исследования

Соединение V_2O_3 для исследований было получено путем восстановления пятиоксида ванадия в атмосфере водорода при повышенной температуре. Изменяя время окисления, были получены материалы с повышенным содержанием кислорода (V_2O_{3+X} , где $X = 0.01, 0.04, 0.08$).

Образцы состава ($V_{1.98}Me_{0.02}O_{3+X}$, где $X = 0.01, 0.04, 0.08$) ($Me = Al, Fe$) готовились аналогичным образом, однако в качестве исходного для восстановления материала были взяты предварительно полученные спеканием бронзы состава $V_{1.98}Me_{0.02}O_4$ ($Me = Al, Fe$). Рентгеновский анализ, выполненный на установке Shimadzu Maxima X XRD-7000 при комнатной температуре, показал, что все полученные образцы являются однофазными и обладают гексагональной структурой.

Молярная теплоемкость исследуемых материалов изучалась в интервале температур от 80 до 300 К методом вакуумного адиабатического калориметра. Температура образца регистрировалась платиновым термометром сопротивления, градуированным во ВНИИФТРИ г. Хабаровска. Установка тарировалась с помощью бензойной кислоты.

Магнитная восприимчивость и ее температурные зависимости в интервале температур от 80 до 300 К определялись стандартным методом Фарадея. Установка градуировалась по платине (ОСЧ). Погрешность измерения теплоемкости не превышала 1%, магнитной восприимчивости – 3%.