

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ

ФИЗИКА

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

ФИЗИКА МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

4·2023

**ИЗДАНИЕ
ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

Том 66

Апрель, 2023

№ 4 (785)

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Основан в 1957 г.

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ
ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА
ФИЗИКА МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ
ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ
КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА
ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

Свидетельство о регистрации
ПИ № ФС77-84127 от 28 ноября 2022 г.
выдано Федеральной службой по надзору
в сфере связи, информационных технологий
и массовых коммуникаций



Журнал входит в перечень рецензируемых научных журналов,
включенных в список ВАК, для публикации основных результатов
кандидатских и докторских диссертаций

Учредитель:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский государственный университет»

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Шеремет М.А., проф. (гл. редактор), Томск, Россия
Багров В.Г., проф. (зам. гл. редактора), Томск,
Россия
Козырев А.В., проф. (зам. гл. редактора), Томск,
Россия
Пермякова Л.В. (отв. секретарь), Томск, Россия
Алексеев С.В., академик РАН, Новосибирск,
Россия
Асеев А.Л., академик РАН, Новосибирск, Россия
Борисов А.В., проф., Москва, Россия
Вараксин А.Ю., член-корр. РАН, Москва, Россия
Ворожцов А.Б., проф., Томск, Россия
Войцеховский А.В., проф., Томск, Россия
Гитман Д.М., проф., São Paulo, Бразилия
Демин В.А., проф., Пермь, Россия
Джафаров Р.Г., д.ф.-м.н., Баку, Азербайджан
Дитенберг И.А., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Ивонин И.В., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Казинский П.О., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Кистенев Ю.В., проф., Томск, Россия
Ковалевская Т.А., проф., Томск, Россия
Колобов Ю.Р., проф., Белгород, Россия
Коротаев А.Д., проф., Томск, Россия
Майер Г.В., проф., Томск, Россия
Манка Оронцо, проф., Неаполь, Италия
Месяц Г.А., акад. РАН, Москва, Россия
Неклюдов И.М., акад. НАН Украины, Харьков
Озтоп Хакан, проф., Элязыг, Турция
Ратахин Н.А., акад. РАН, Томск, Россия
Сагхир Зиад, проф., Торонто, Канада
Саранин А.А., чл.-корр. РАН, Владивосток, Россия
Суржиков А.П., проф., Томск, Россия
Суханов Д.Я., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Тао Вен-Куан, академик Китайской академии
наук, Сиань, Китай
Углов В.В., проф., Минск, Республика Беларусь
Ушаков В.Я., проф., Томск, Россия
Чайковская О.Н., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Черепанов В.Н., д.ф.-м.н., Томск, Россия
Чумляков Ю.И., проф., Томск, Россия
Шаповалов А.В., проф., Томск, Россия
Шипилов С.Э., д.ф.-м.н., Томск, Россия

EDITORIAL BOARD

Sheremet M.A. (Editor-in-Chief), Professor, Tomsk,
Russia
Bagrov V.G. (Deputy Editor-in-Chief), Professor, Tomsk,
Russia
Kozyrev A.V. (Deputy Editor-in-Chief), Professor,
Tomsk, Russia
Permyakova L.V. (Executive Editor), Tomsk, Russia
Alekseenko S.V., Academician RAS, Novosibirsk, Russia
Ascev A.L., Academician RAS, Novosibirsk, Russia
Borisov A.V., Professor, Moscow, Russia
Varaksin A.Y., Corr. Member RAS, Moscow, Russia
Vorozhtsov A.B., Professor, Tomsk, Russia
Voitsekhovskii A.V., Professor, Tomsk, Russia
Gitman D.M., Professor, São Paulo, Brazil
Demin V.A., Professor, Perm, Russia
Jafarov R.G., Professor, Baku, Republic of Azerbaijan
Ditenberg I.A., Professor, Tomsk, Russia
Ivonin I.V., Professor, Tomsk, Russia
Kazinski P.O., Professor, Tomsk, Russia
Kistenev Y.V., Professor, Tomsk, Russia
Kovalevskaya T.A., Professor, Tomsk, Russia
Kolobov Y.R., Professor, Belgorod, Russia
Korotaev A.D., Professor, Tomsk, Russia
Mayer G.V., Professor, Tomsk, Russia
Manca Oronzio, Professor, Naples, Italia
Mesyats G.A., Academician RAS, Moscow, Russia
Neklyudov I.M., Academician UAS, Kharkov, Ukraine
Oztop Hakan, Professor, Elazığ, Turkey
Ratakhin N.A., Academician RAS, Tomsk, Russia
Saghir Ziad, Professor, Toronto, Canada
Saranin A.A., Corr. Member RAS, Vladivostok, Russia
Surzhikov A.P., Professor, Tomsk, Russia
Sukhanov D.Y., Professor, Tomsk, Russia
Tao Wen-Quan, Academician of the Chinese Academy of
Sciences, Xi'an, China
Uglov V.V., Professor, Minsk, Republic of Belarus
Ushakov V.Ya., Professor, Tomsk, Russia
Tchaikovskaya O.N., Professor, Tomsk, Russia
Cherepanov V.N., Professor, Tomsk, Russia
Chumlyakov Y.I., Professor, Tomsk, Russia
Shapovalov A.V., Professor, Tomsk, Russia
Shipilov S.E., Professor, Tomsk, Russia

Журнал «Известия вузов. Физика» выходит 12 раз в год и распространяется по подписке. Подписной индекс 70380 в объединенном каталоге «Пресса России». Полные тексты статей доступны на сайте Научной электронной библиотеки: <https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>. Публикация статей в журнале – бесплатная.

КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Адрес: 634050, РФ, г. Томск, пр. Ленина, д. 36
Телефон: +7(3822) 53-33-35, 78-37-02
Сайт: <http://journals.tsu.ru/physics/>
E-mail: physics@mail.tsu.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

- Козырев А.В., Ландль Н.В., Королев Ю.Д., Семенюк Н.С., Франц О.Б. Кинетика формирования разряда низкого давления с полым анодом, инициированного локальным пробоем на поверхности керамического катода.....5

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

- Чайковская О.Н., Бочарникова Е.Н., Базыль О.К., Майер Г.В. Влияние замещения на спектральные и физико-химические свойства производных фенола.....13
- Помогаев В.А., Садык С., Филатов М., Цой Ч.Х. Моделирование фотохимических преобразований на траектории неадиабатической молекулярной динамики.....25
- Романов А.Н., Хвостов И.В., Рябинин И.В., Тихонов В.В., Шадуйко О.М. Связь сезонных вариаций радиояркостных температур акватории Карского моря с гидролого-климатическими изменениями в Арктике.....34

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

- Лобода Е.Л., Луценко А.В., Агафонцев М.В. Исследование турбулентности в пламени модельного пожара и возникновение индуцированной атмосферной турбулентности.....48

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

- Скобелев В.В., Копылов С.В. О дефиците солнечных электронных нейтрино.....57
- Абдуллаев С.К., Годжаев М.Ш., Гулаева А.К. Рождение и распад хиггс-бозонов в мюонных коллайдерах. Ч. II.....62
- Чувашов И.Н., Левкина П.А., Шеин А.В. Долговременная орбитальная эволюция объектов геостационарной зоны.....72
- Сюсина О.М. Исследование линейных отображений доверительной области движения астероидов в кеплеровом и декартовом пространствах.....79

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

- Эрвье Ю.Ю., Есин М.Ю., Дерябин А.С., Колесников А.В., Никифоров А.И. Сближение ступеней на поверхности Si(100): эксперимент и моделирование.....85

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Симаков И.Г., Гулгенов Ч.Ж., Базарова С.Б., Очиров Т.Ч. Диэлектрическая релаксация воды, адсорбированной на поверхности ниобата лития.....93
- Коровкин М.В., Ананьева Л.Г., Жерлицын А.А., Кондратьев С.С., Савинова О.В., Курская В.С. Оценка степени кристалличности природного и синтетического диоксида кремния.....101
- Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Шалыгина Т.А. Математическое моделирование зависимости прочностных свойств кристаллических дисперсно-упрочненных сплавов от объемной доли и размеров некогерентных наночастиц.....109
- Потекаев А.И., Бородин В.И., Тришкина Л.И., Клопотов А.А., Черкасова Т.В., Кулагина В.В. Развитие дислокационной структуры поликристаллов однородных медно-марганцевых твердых растворов при пластической деформации.....115
- Абубакаров А.Г. Стеклокомпозиты SCS – LMZBS с низкой диэлектрической проницаемостью.....123
- Милинский А.Ю., Барышников С.В., Егорова И.В., Львов А.Э. Диэлектрические свойства нанокompозитов триглицинсульфат – наночастицы оксида алюминия.....127
- Вахрушев Д.О., Гурулев А.В., Ефимов Д.Д., Иванова А.И., Корнева О.С. Исследование эффектов синергии высокоинтенсивной имплантации ионов титана в кремний и энергетического воздействия ионного пучка на поверхность.....134

CONTENTS

PLASMA PHYSICS

- Kozyrev A.V., Landl N.V., Korolev Yu.D., Semeniuk N.S., Frants O.B.** Kinetics of low-pressure discharge with hollow anode initiated by local breakdown on the surface of ceramic cathode..... 5

OPTICS AND SPECTROSCOPY

- Tchaikovskaya O.N., Bocharnikova E.N., Bazyl O.K., Mayer G.V.** Influence of substitution on the spectral and physico-chemical properties of phenol derivatives..... 13
- Pomogaev V.A., Sadiq S., Filatov M., Choi C.H.** Modeling of photochemical conversions on nonadiabatic molecular dynamics trajectories..... 25
- Romanov A.N., Khvostov I.V., Ryabinin I.V., Tikhonov V.V., Shaduyko O.M.** Relationship between seasonal variations in radio-brightness temperatures in the Kara Sea area and hydrological-climate changes in the Arctic 34

THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS

- Loboda E.L., Lutsenko A.V., Agafontsev M.V.** Investigation of turbulence in the flame of a model fire and the appearance of induced atmospheric turbulence 48

ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

- Skobelev V.V., Kopylov S.V.** On the shortage of solar electron neutrinos 57
- Abdullayev S.K., Gojayev M.Sh., Gulayeva A.K.** Production and decay of Higgs bosons in muon colliders (II) 62
- Chuvashov I.N., Levkina P.A., Shein A.V.** Long-term orbital evolution of objects of geostationary region 72
- Syusina O.M.** Investigation of linear mappings of the confidence region of asteroid motion in Keplerian and Cartesian parameter spaces 79

PHYSICS OF SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS

- Hervieu Yu.Yu., Yesin M.Yu., Deryabin A.S., Kolesnikov A.V., Nikiforov A.I.** Pairing of monoatomic steps on the Si(100) surface: experiment and modeling 85

CONDENSED-STATE PHYSICS

- Simakov I.G., Gulgenov Ch.Zh., Bazarova S.B., Ochirov T.Ch.** Dielectric relaxation of adsorbed water on the surface of lithium niobate 93
- Korovkin M.V., Ananyeva L.G., Zherlitsyn A.A., Kondratyev S.S., Savinova O.V., Kurskaya V.S.** Assessment of the degree of crystallinity of natural and synthetic silicon dioxide 101
- Kovalevskaya T.A., Daneyko O.I., Shalygina T.A.** Mathematical modeling of the dependence of the strength properties of crystalline dispersed-strengthened alloys on the volume fraction and size of incoherent nanoparticles 109
- Potekaev A.I., Borodin V.I., Trishkina L.I., Klopotov A.A., Cherkasova T.V., Kulagina V.V.** Development of dislocation structure of polycrystals of homogeneous copper-manganese solid solutions under plastic deformation..... 115
- Abubakarov A.G.** Glass composites SCS – LMZBS with low permittivity 123
- Milinskiy A.Yu., Baryshnikov S.V., Egorova I.V., Lvov A.E.** Dielectric properties of nanocomposites triglycine sulphate – aluminum oxide nanoparticles 127
- Vakhrushev D.O., Gurulev A.V., Efimov D.D., Ivanova A.I., Korneva O.S.** Study of the synergy effects of high-intensity implantation of titanium ions into silicon and the energy impact of the ion beam on the surface..... 134

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

УДК 537.525

DOI: 10.17223/00213411/66/4/1

**Кинетика формирования разряда низкого давления
с полым анодом, инициированного локальным пробоем
на поверхности керамического катода***А.В. Козырев¹, Н.В. Ландль¹, Ю.Д. Королев¹, Н.С. Семенюк¹, О.Б. Франц¹¹ *Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия*

Представлены результаты теоретического и экспериментального исследований начальной стадии развития разряда низкого давления с полым анодом в водороде, который инициируется разрядом по поверхности катода внутри полости. Моделирование проведено на базе кинетического описания ионного и электронного ансамблей на фоне нестационарной динамики электрического поля в рамках одномерной цилиндрической геометрии анодной полости. Показано, что при давлении водорода 0.1 Торр генерирование плазмы в полости протекает за наносекундные времена с образованием немонотонного профиля электрического потенциала. Продемонстрировано хорошее согласие модельных расчетов с экспериментом.

Ключевые слова: кинетическое описание плазмы, разряд низкого давления, полый анод.

Введение

В настоящее время тлеющие разряды низкого давления с полым анодом широко используются для различных применений. В частности, такие разряды применяются в установках для генерации пучков заряженных частиц [1–4], в сильноточных коммутирующих приборах [1, 5–8], для генерации плазмы большого объема и модификации свойств поверхности различных материалов [9–12] и т.д. Под термином «разряды низкого давления» принято понимать разрядные системы, в которых длина свободного пробега электрона для реакции ионизации сравнима или превышает характерный размер разрядного промежутка. В условиях разреженного газа формирование и поддержание разряда не может обеспечиваться развитием электронных лавин из инициирующих электронов, стартовавших с катода, поэтому реализуются иные механизмы генерации плазмы.

В таких разрядах часто появляются области инверсии электрического поля (например, прианодный слой с отрицательным падением потенциала), которые создают электростатические ловушки для плазменных электронов, заставляя последние совершать финитные колебания в анодной или катодной полостях. В этом случае разряды низкого давления называют также разрядами с осциллирующими электронами [13, 14]. Разряд низкого давления не может быть описан в терминах жидкостной модели плазмы, так как понятия скорости дрейфа и диффузии не применимы к ситуации, когда длина свободного пробега больше длины промежутка. Альтернативой здесь может быть либо численный эксперимент на основе метода частиц (PIC+MCC) [15], либо кинетический подход к моделированию плазмы [16]. Мы полагаем, что метод физической кинетики, имеющий дело с функциями распределения заряженных частиц по скоростям, оптимален для исследования газоразрядной плазмы низкого давления. Он сочетает фундаментальность описания стохастических процессов в плазме с использованием детерминистического математического аппарата на базе кинетического уравнения Больцмана.

В нашем эксперименте разряд низкого давления реализуется в катодной полости тиратрона с холодным катодом и узлом запуска на основе пробоя по поверхности диэлектрика [1, 17]. В типичных схемах включения тиратронов катодная полость основного высоковольтного промежутка является полым анодом для узла запуска, который располагается внутри полости. Цель настоящей работы – теоретическое описание процесса генерации плазмы в анодной полости после появления инициирующей плазмы на катоде, в результате которого можно объяснить наблюдаемые параметры и понять физику запуска водородного тиратрона.

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

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 538.958

DOI: 10.17223/00213411/66/4/2

**Влияние замещения на спектральные
и физико-химические свойства производных фенола***О.Н. Чайковская¹, Е.Н. Бочарникова¹, О.К. Базыль¹, Г.В. Майер¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Представлены результаты исследования электронных спектров поглощения и флуоресценции некоторых производных фенола в зависимости от их структурных особенностей. Введение в бензольное кольцо группы CH_3 приводит к уменьшению рассчитанной энергии электронных переходов, батохромному сдвигу максимумов полос в длинноволновой и средней областях спектра и увеличению интенсивности длинноволновой полосы поглощения. Такой же эффект наблюдается при образовании симметричной молекулы бисфенола А. Показано, что молекула бромкрезолового пурпурного имеет две равновесные формы (открытую и закрытую). С помощью волновых функций метода частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием интерпретированы полосы поглощения электронного спектра бромкрезолового пурпурного и подтверждено существование его двух равновесных форм. Рассчитаны величины минимумов молекулярного электростатического потенциала и определены наиболее вероятные места протонирования молекул в основном и возбужденном состояниях.

Ключевые слова: фенол, поглощение, флуоресценция, квантово-химический расчет, пара-крезол, бисфенол А, бромкрезоловый пурпурный.

Введение

В окружающей среде существует огромное разнообразие фенольных соединений природного и техногенного характера. Некоторые из них, такие как эвгенол, тимол, пирогаллол, гваякол или пирокатехин, образуются естественным путем, но подавляющее большинство из них попадает в окружающую среду в результате промышленной и сельскохозяйственной деятельности человека [1–3]. Если первые нейтрализуются в результате естественных процессов, то вторые представляют серьезную опасность для окружающей среды [4]. Фенолы – это соединения, имеющие одну или несколько гидроксильных групп, непосредственно связанных с ароматической системой (например, фенильной, нафтильной) [5, 6]. Структурные особенности придают фенолу специфические физико-химические свойства. Фенол представляет собой водорастворимое кристаллическое твердое вещество со своеобразным запахом, с низкой температурой плавления и высокой температурой кипения [7]. Физико-химические свойства фенола могут быть усилены или ослаблены введением в ароматическое кольцо заместителей.

Количество и распределение гидроксильных групп в фенольных соединениях влияют на их биологическую активность [8–10]. Известно, что фенольные соединения с большим количеством гидроксильных групп могут проявлять антиоксидантную активность, что связано со способностью гидроксильных групп образовывать реакционноспособные частицы. Распределение гидроксильных групп может изменить молекулярный электростатический потенциал фенольных соединений, что повлияет на их реакционную способность и функциональные свойства [11].

Изучение зависимости свойств от структуры фенолов и его производных представляет чрезвычайно сложную и актуальную задачу. Последнее в большей степени относится к структурам бисфенола А (BPA) и бромкрезолового пурпурного (BCP) (рис. 1). Исследованию структуры молекулы фенола посвящено большое количество работ, в том числе касающихся экспериментального определения геометрических параметров [12, 13], а также оптимизации геометрии молекулы квантово-химическими методами [14–17]. В работах [14–17] проведены исследования геометрии молекулы фенола, расчеты устойчивости его промежуточных продуктов и переходных состояний, а также показано, что введение в молекулу бензола донорного заместителя приводит к возраста-

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

Моделирование фотохимических преобразований на траектории неадиабатической молекулярной динамики*

В.А. Помогаев¹, С. Садык², М. Филатов², Ч.Х. Цой²

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

² *Кёнбукский национальный университет, г. Тегу, Республика Корея*

Представлена схема применения неадиабатической молекулярной динамики, реализованной в рамках квантово-механического (КМ) пакета программ *GAMESS* с частично интегрированным кодом *Tinker* классической молекулярной механики, для моделирования фотодинамики и оптических спектров хромофорных фрагментов в различной среде на примере электронно-возбужденной несвязанной молекулы урацила в воде. КМ-свойства фотоактивного региона рассчитываются с использованием времязависимой теории функционала плотности в приближении смешанных исходных состояний с противонаправленным спином (*mixed-reference spin-flip, MRSF*). Фотодиссоциация электронно-возбужденной молекулы происходит через ряд конических пересечений энергетических поверхностей состояний за счет неадиабатической составляющей траектории межповерхностных переходов, в частности, методом минимального количества таких переходов, до полной электронной релаксации. Время модельного процесса хорошо согласуется с экспериментально регистрируемой сверхбыстрой диссипацией энергии возбуждения. Анализ свойств дайсеновских орбиталей расширенной теоремы Купманса позволяет оценить энергию возбужденных переходов в случаях использования многоконфигурационных методов, в том числе и *MRSF*, когда теория канонических молекулярных орбиталей неприменима.

Ключевые слова: фотохимия, квантово-классическая динамика, электростатика, неадиабатика, дайсеновские орбитали, фотодинамика урацила в воде.

Введение

Стремительное развитие современной индустрии, медицины и экологии с использованием технологий фотоиндуцированных процессов, в частности генерируемых и экспериментально регистрируемых сверхбыстрых пикосекундных и даже фемтосекундных фотопреобразований, требует развития прикладных расчетных методов оценки, интерпретации и предсказания эволюции молекулярной структуры в возбужденном электронном состоянии с последующими топологическими и химическими изменениями, влияющими на свойства всей системы. Методы квантово-классической молекулярной динамики (МД) возбужденных состояний применимы ко всем сферам человеческой деятельности, где фотоиндуцированные процессы имеют место, от производства *OLED*-экранов и солнечных батарей или медицинских процедур до решения экологических проблем утилизации отходов путем фотохимического разрушения токсичных молекулярных структур в окружающей среде.

В последние десятилетия особое внимание уделяется развитию гибридных методов моделирования фотохимических преобразований, включающих в себя классическое движение частиц в сочетании с неадиабатической квантовой механикой (КМ) электронно-возбужденных фрагментов отдельных хромофорных соединений как комплексов, так и отдельных фрагментов в растворах, в частности, азотистых оснований ДНК, фотоактивных аминокислот в составе белков, так же как кластеров благородных металлов, лекарственных или токсичных молекулярных соединений, инкорпорированных в биополимеры, с целью изучения спектрально-люминесцентных свойств системы, отклика на фотохимические преобразования хромофорных фрагментов с изменением биохимической активности.

В настоящее время методы гибридной молекулярной динамики (ГМД), включающие в себя неадиабатическую квантовую механику возбужденных состояний фотоактивных соединений и классическую теорию движения окружающей фотопассивной молекулярной системы и определяемые как неадиабатическая молекулярная динамика (НАМД, *NAMD*) [1–6], активно развиваются и применяются различными теоретическими группами во всем мире. НАМД с учетом вкладов от взаимодействия с атомами классического региона позволяет не только проводить теоретические фотохимические эксперименты в режиме реального времени, но и генерировать интеграль-

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

Связь сезонных вариаций радиоярких температур акватории Карского моря с гидролого-климатическими изменениями в Арктике*

А.Н. Романов¹, И.В. Хвостов¹, И.В. Рябинин¹, В.В. Тихонов^{2,1}, О.М. Шадуйко³

¹ Институт водных и экологических проблем СО РАН, г. Барнаул, Россия

² Институт космических исследований РАН, г. Москва, Россия

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

По данным спутника SMOS (продукт L1C) оценены сезонные вариации радиоярких температур акватории Карского моря между о. Новая Земля и полуостровом Ямал за период с 2012 по 2017 г. Динамика радиоярких температур акватории моря исследовалась на горизонтальной поляризации. Тестовые участки находились на разном удалении от суши, устьев рек и различались по продолжительности существования и толщине ледового покрова, температуре и солености воды. В летний период радиояркие контрасты ($\Delta T_{\text{я}} = 20$ К) связаны с вариациями температуры и солености воды, морским волнением. В зимний период наблюдавшиеся радиояркие контрасты ($\Delta T_{\text{я}} = 100\text{--}150$ К) связаны с разрушением ледяного покрова, образованием на его поверхности снежиц, появлением разводий. Определены границы временных периодов открытой воды, замерзания, ледостава и вскрытия для Карского моря, соответствующие качественным изменениям характеристик микроволнового излучения морской акватории. На основе анализа временных рядов радиоярких температур определены фазы ледового режима: период открытой воды, период образования ледового покрова, период установившегося ледового покрова, период таяния ледового покрова. В качестве гидрологических параметров, характеризующих происходящие гидролого-климатические изменения, выбраны продолжительности периодов открытой воды и ледового периода. Из анализа данных SMOS следует, что на всех участках Карского моря в летние периоды 2014–2016 гг. наблюдалось двукратное увеличение продолжительности периода открытой воды, сопровождаемое соразмерным сокращением продолжительности периода ледостава в зимние периоды 2015–2017 гг.

Ключевые слова: Арктика, Карское море, морской лед, соленость воды, опресненность, радиояркая температура, коэффициент излучения, спутник SMOS.

Введение

Потепление Арктики влечет за собой гидрологические и климатические изменения, которые проявляются в сокращении площадей ледового покрова, интенсивном таянии ледников и полярных шапок, уменьшении количества и суммарной площади термокарстовых озер, более раннем оттаивании и более позднем замерзании тундры [1, 2]. Мониторинг гидролого-климатических изменений в гидрологических бассейнах Арктики показал, что наблюдаемая динамика связана с вариациями осадков и температуры [3], деградацией вечной мерзлоты [4, 5], тундровой растительности [6], более сильным прогреванием почвенного покрова на участках дефляции, возрастанием скорости испарения и, как результат, поступлением в атмосферу дополнительных количеств водяного пара и метана, способствующих увеличению парникового эффекта [7, 8]. На основе пятидесятилетних метеорологических наблюдений на островах Северного Ледовитого океана зафиксированы значительные климатические изменения, связанные с интенсивным потеплением. Начиная с 1960-х годов наблюдалось повышение температуры воздуха, уменьшение количества твердых осадков и массы ледников, сокращение суммарной площади морских льдов в Сибирской Арктике [9].

Детальное изучение современных гидролого-климатических изменений необходимо для возможности надежного прогнозирования возникающих опасных гидрологических и метеорологических явлений. Оперативная информация о гидрологических реакциях на климатические изменения в Арктическом регионе имеет решающее значение при планировании экономического развития и поддержке инфраструктуры, особенно для прогнозирования непредвиденных затрат при ликвидации ущерба, связанного с климатическими факторами [10], мероприятий по защите окружающей среды и адаптации общества к изменяющимся условиям жизнедеятельности. Наличие и использование такой информация становится тем более важным, что в Российской Арктике, в зоне, наиболее чувств

* Работа выполнена в рамках государственных заданий Института водных и экологических проблем СО РАН, Института космических исследований РАН, при поддержке Программы развития Томского государственного университета («Приоритет-2030»).

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532.5.013

DOI: 10.17223/00213411/66/4/5

**Исследование турбулентности в пламени модельного пожара
и возникновение индуцированной атмосферной турбулентности***Е.Л. Лобода^{1,2}, А.В. Луценко^{1,2}, М.В. Агафонцев^{1,2}¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*² *Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия*

Приведены результаты экспериментальных исследований спектров пульсации температуры и соответствующие им масштабы турбулентности в пламени при модельном верховом пожаре и в воздухе в окрестности фронта горения. Установлено, что в пламени верхового пожара внутренние масштабы турбулентности соответствуют инерционно-му интервалу энергетического спектра, а турбулентные процессы в пламени формируют индуцированную атмосферную турбулентность. Определены значения волновых чисел, при которых внутренние масштабы индуцированной атмосферной турбулентности соответствуют диссипативным процессам.

Ключевые слова: *верховой пожар, турбулентность, пламя, атмосферная турбулентность, горение, диссипативные процессы.*

Введение

Ежегодно во всем мире наблюдается рост количества природных пожаров, приводящих зачастую к катастрофическим последствиям как для локальных биогеоценозов, так и для человека. Очевидно, что массовые природные пожары оказывают влияние и на глобальные климатические процессы. При природных пожарах реализуется диффузионный механизм горения, характеризующийся поступлением окислителя за счет диффузионного переноса и перемешивания продуктов пиролиза с атмосферным кислородом. Такой режим горения проявляется в существенной нестационарности и турбулентности течения в пламени [1]. Исследование структуры пламени и режимов течения в нем является достаточно сложной задачей, требующей применения бесконтактных методов диагностики, таких как ИК-термография [2], PIV (Particle Image Velocimetry) [3, 4], PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) [5–7], и других оптических методов. Визуализацию турбулентных структур в пламени можно увидеть в работах с применением PIV-методов [8–10]. Следует отметить, что применение всех упомянутых методов сопряжено с рядом фундаментальных трудностей и ограничений.

Известно, что при природных пожарах выделяется значительное количество тепловой энергии, а интенсивные турбулентные процессы в пламени природного пожара формируют турбулентность в конвективной колонке над очагом горения [11]. Безусловно, это оказывает влияние на метеорологические параметры: скорость ветра, температуру и влажность воздуха, индуцированную атмосферную турбулентность. Изменения этих параметров напрямую влияют на перенос газообразных продуктов горения, дыма и аэрозоля. Исследования в этой области ведутся как с помощью экспериментальных методов [2, 12, 13], так и с помощью математических моделей [14–17]. Учитывая вышесказанное, можно утверждать, что массовые природные пожары способны оказывать влияние на глобальные климатические процессы, обеспечивать локальные условия, поддерживающие распространение пожара [18] и препятствующие формированию метеорологических условий для прекращения пожара.

Следует отметить, что турбулентные процессы в атмосфере характеризуются внутренним и внешним масштабами, которые соответствуют размерам крупных вихрей и мелких вихревых структур соответственно. Представление о внутреннем и внешнем масштабах турбулентности считается общепринятым [19, 20]. Внутренний масштаб l_0 определяется кинематической вязкостью воздуха и интенсивностью турбулентных процессов. В атмосфере вблизи земной поверхно-

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 539.01

DOI: 10.17223/00213411/66/4/6

О дефиците солнечных электронных нейтрино

В.В. Скобелев¹, С.В. Копылов¹¹ *Московский политехнический университет, г. Москва, Россия*

На основе развитой в предыдущих работах одного из авторов формальной теории обсуждается механизм взаимопревращений в системе из нейтрино и антинейтрино $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau, \bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_\tau$, которая рассматривается как совокупность $N = \text{const}$ тождественных микрообъектов, находящихся в $N_S = 6$ состояниях с принципиальной возможностью объяснения «дефицита» солнечных электронных нейтрино. Получено также, что наиболее удовлетворительное согласие с экспериментом существует для системы из ν_e, ν_μ, ν_τ , т.е. при $N_S = 3$.

Ключевые слова: солнечные нейтрино, система нейтрино – антинейтрино, идентичные микрообъекты, состояния.

Введение

В конце XX и начале XXI века были сделаны важные открытия в области физики нейтрино. К ним можно отнести обнаружение так называемого «дефицита» солнечных электронных нейтрино ν_e [1–6], состоящего в существенном (примерно до 50%) уменьшении их количества по сравнению с первоначальным, генерированным в центральных областях Солнца.

Возможным объяснением этого эффекта является предположение, что физические нейтрино ν_e, ν_μ, ν_τ на самом деле есть суперпозиция состояний ν_1, ν_2, ν_3 , имеющих определенное значение масс m_i , $i = 1, 2, 3$. При $m_i \neq m_j$, $i \neq j$ это может привести к взаимопревращениям (осцилляциям) различных «сортов» нейтрино (на такой эффект впервые было указано в работе [7]), т.е. в том числе и к превращению электронных нейтрино ν_e в другие их «сорты» ν_μ, ν_τ , которые в экспериментах (например, в [1, 2]) не регистрировались, в отличие от электронных.

С другой стороны, в работе одного из авторов [8] на примере переходов между различными возможными пространственными состояниями атомов $D_i \in \{1, 2, 3\}$ был предложен другой формальный механизм подобных взаимопревращений. В [8] было также указано, что результаты фактически применимы к любой системе микрообъектов, в частности, с их возможным приложением к системе из нейтрино ν_e, ν_μ, ν_τ и с получением количественного значения «дефицита» электронных нейтрино, близкого к экспериментальному с диапазоном $\{ \approx 20 \div 60\% \}$, чему в [8] соответствовало минимальное $E_{\min} \approx 0.2$ и максимальное $E_{\max} \approx 0.6$ значение относительного числа атомов $E_i = N_i / N$ в их системе $1 + 2 + 3$, т.е. применительно и к системе нейтрино с указанным диапазоном этого «дефицита». Однако результаты [8] в любом случае не распространяются на переходы «с участием» физических антинейтрино $\bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_\tau$, которые также возможны.

Целью данной работы и является учет этого обстоятельства на основе развитого в работе [8] формализма с его обобщением на этот случай.

В работе [8] предполагалось по определению, что существует вероятность обнаружения атома (микрообъекта) в процессе измерения в состоянии с пространственной размерностью $D_i \in \{1, 2, 3\}$, если сначала он находился в состоянии с размерностью $D_j \in \{1, 2, 3\}$, $i \neq j$. Подобные эксперименты применительно к системам атомов $1 + 3$ и $2 + 3$ проводились авторами работ [9–12]. Очевидно, при таком оперировании с понятием вероятности полученные на этой основе результаты относятся только к микромиру, т.е., например, к системам собственно атомов в состояниях $D_i \in \{1, 2, 3\}$ или нейтрино в состояниях ν_e, ν_μ, ν_τ .

Таким образом, результаты [8] на самом деле относятся к любой системе идентичных микрообъектов, которые могут находиться в трех состояниях $j, i \in \{1, 2, 3\}$, $i \neq j$, связанных между со-

Рождение и распад хиггс-бозонов в мюонных коллайдерах. Ч. II

С.К. Абдуллаев¹, М.Ш. Годжаев¹, А.К. Гулаева¹

¹ Бакинский государственный университет, г. Баку, Азербайджанская Республика

Изучены процессы рождения пары фундаментальных фермионов при мюон-антимюонной аннигиляции: $\mu^- \mu^+ \rightarrow (\Phi^*, \gamma^*, Z^*) \rightarrow f\bar{f}$. Здесь Φ^* ($\Phi^* = H^*, h^*, A^*$) – хиггс-бозон Минимальной суперсимметричной стандартной модели, $f\bar{f}$ – пара тау-лептонов $\tau^- \tau^+$ или $c\bar{c}$ -, $b\bar{b}$ -, $t\bar{t}$ -кварков. Получены выражения для спиральных амплитуд и спиральных сечений процессов $\mu^- \mu^+ \rightarrow (\gamma^*, Z^*) \rightarrow f\bar{f}$, определены следующие измеряемые характеристики: асимметрия вперед-назад A_{FB} в угловом распределении фермионов, лево-правая спиновая асимметрия A_{LR} , степень продольной поляризации фермиона P_f , поперечная спиновая асимметрия A_ϕ и т.д. Даны качественные оценки этих характеристик.

Ключевые слова: мюон-антимюонная пара, фермионная пара, хиггс-бозон, асимметрия, тау-лептон, топ-кварк.

Введение

В развитии физики высоких энергий существенную роль сыграло изучение процессов глубоко-конечного лептон-нуклонного рассеяния и аннигиляции встречных электрон-позитронных пучков. Именно в этих экспериментах, последовательно проводимых при все более возрастающих энергиях, было открыто большинство явлений, сыгравших важную роль в понимании природы фундаментальных взаимодействий. Так, масштабная инвариантность, обнаруженная в глубоко-конечном лептон-нуклонном рассеянии, и струйная картина инклюзивного адронобразования в электрон-позитронной аннигиляции, привели к созданию кварк-партоновой модели адронов, а затем к квантово-хромодинамической теории сильного взаимодействия.

Экспериментальное исследование электрон-позитронной аннигиляции оказалось удивительно плодотворным для физики электрослабых взаимодействий. В лабораториях со встречными $e^- e^+$ -пучками SLC и LEP с высокой точностью измерены масса, полная и парциальные ширины распада нейтрального Z -бозона, извлечены константы взаимодействия слабых нейтральных токов лептонов и кварков с Z -бозоном [1–3]. Эти исследования убедительно подтвердили справедливость Стандартной модели (СМ).

Особенно с открытием хиггс-бозона H_{SM} в Большом адронном коллайдере (БАК) коллаборациями ATLAS [4] и CMS [5] (см. также обзоры [6–8]) началась новая эра в изучении фундаментальных взаимодействий. С одной стороны, экспериментально подтвердился механизм генерации масс частиц, а с другой стороны, СМ получила логическое завершение и приобрела статус стандартной теории.

Несмотря на успехи СМ, существуют причины, вызывающие неудовлетворенность этой теорией. Так, неясны причины повторения поколений лептонов и кварков, нет обоснования их числа. Пространственно-временная структура слабых взаимодействий не следует из каких-либо внутренних требований теории, а введена феноменологически, в соответствии с экспериментальными фактами. Отсутствие частиц темной материи в СМ, возникновение проблемы в перенормировке массы стандартного хиггс-бозона, очень большой разброс масс фундаментальных фермионов – лептонов и кварков, обладание массами нейтрино и активное смешивание их друг с другом – все эти факты и ряд других причин свидетельствуют о выходе за рамки СМ. При этом особое внимание уделяется Минимальной суперсимметричной стандартной модели (МССМ) [9–11].

Согласно МССМ, в природе должны существовать пять хиггсовских бозонов: СР-четные H - и h -бозоны, СР-нечетный A -бозон и заряженные $H^\pm$ -бозоны. Хиггсовский сектор характеризуется угловыми параметрами α и β (углы смешивания скалярных полей) и массовыми параметрами M_H , M_h , M_A , $M_{H^\pm}$. Из них параметры M_A и $\tan\beta = v_2/v_1$ (v_1 и v_2 – вакуумные значения хиггс-бозонных полей) являются свободными, а все остальные выражаются через них:

Долговременная орбитальная эволюция объектов геостационарной зоны*

И.Н. Чувашов¹, П.А. Левкина², А.В. Шеин²

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

² *Институт астрономии РАН, г. Москва, Россия*

В данном исследовании на реальных наблюдениях проверяется утверждение о дрейфе объектов геостационарной области, который может проявляться только на значительных интервалах времени (53.5 года), и оценка изменения плотности геостационарной области из-за возврата таких объектов в плоскость экватора. В данном случае речь идет о крупных тяжелых объектах космического мусора, в связи с чем исключается возможность значительного влияния на них возмущений от светового давления. Для численного моделирования движения совокупности объектов использована модель движения искусственных спутников Земли, разработанная в Томском государственном университете. В качестве наблюдательных данных взяты TLE-элементы орбит объектов геостационарной зоны на интервале времени 60 лет.

Ключевые слова: геостационарная область, численное моделирование, орбитальная эволюция, миграция геосинхронных объектов, космический мусор.

Введение

На текущий момент на геосинхронных орбитах (с наклонениями от 0 до 180° [1]) находятся 996 объектов, за которыми ведется постоянное наблюдение (space-track.org), 270 из данных объектов находятся на орбите уже более 30 лет. Большинство из них – это крупные объекты космического мусора, которые имеют достаточно малые отношения площади миделевого сечения к массе (коэффициенты парусности), что исключает возможность выметания их из области геостационарной орбиты под влиянием светового давления [2]. За это время в основном под действием лунно-солнечных возмущений элементы орбиты этих объектов изменяют свои значения, по большей части это касается наклонения орбиты и долготы восходящего узла. Как показано в монографии [3], наклонение орбиты у геостационарных объектов за 27 лет изменяется с 0 до 15° и далее начинает возвращаться к первоначальным значениям, что способствует обогащению геостационарной зоны в плоскости экватора. Кроме того, за время миграции объекты могут разрушаться и порождать большую совокупность новых объектов, что может значительно осложнить навигацию в области геостационарной орбиты.

Наблюдения, представленные на сайте space-track.org, позволяют отследить динамику изменения орбитальных элементов выбранных объектов геостационарной зоны (области, ограниченной от 0 до 25° по наклонению [1]) и оценить изменение плотности объектов в данной области за счет их миграции. К тому же такой большой наблюдательный ряд позволяет определить среднее значение коэффициента парусности (отношение миделевого сечения к массе) и оценить влияние светового давления на движение выбранных объектов.

Целями данной работы являются проверка на реальных наблюдениях утверждения о дрейфе объектов геостационарной области, который может проявляться только на значительных интервалах времени, и оценка изменения плотности геостационарной области из-за возврата таких объектов либо совокупности объектов вследствие распада родительского тела на орбите.

Для моделирования движения совокупности объектов используется модель движения искусственных спутников Земли (ИСЗ), разработанная в Томском государственном университете, включающая все рекомендации IERS [4]. В качестве наблюдаемых данных используются TLE-элементы орбит объектов геостационарной зоны, взятые на интервале времени 60 лет.

* Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых (МК-4236.2022.1.2).

Исследование линейных отображений доверительной области движения астероидов в кеplerовом и декартовом пространствах*

О.М. Сюсина¹

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

Предложен способ временного отображения доверительной области, при котором она сначала моделируется линейным стохастическим методом в кеplerовом пространстве, а затем отображается в декартово пространство. Такой подход позволяет избежать многократных и длительных расчетов, необходимых при решении задачи временного отображения ансамбля частиц. На примере трех объектов показано, что предложенный подход дает хорошее согласие со способом, основанным на непосредственном численном интегрировании, при этом он имеет значительное преимущество по времени расчета отображений.

Ключевые слова: нелинейность задачи оценивания, численное моделирование, астероиды, доверительные области.

Введение

Вероятностное исследование движения астероидов включает в себя два основных этапа – построение начальной доверительной области (облака неопределенности орбитальных параметров астероида) и ее отображение во времени. С этой целью могут быть использованы как линейный, так и нелинейный подходы. Данная работа посвящена исследованию отображения начальных доверительных областей, реализуемого с помощью линейного подхода. Суть линейного подхода состоит в отображении на произвольный момент времени t ковариационной матрицы ошибок, полученной вместе с оценкой орбитальных параметров для некоторого начального момента времени t_0 , и последующего вычисления на ее основе доверительной области. Нелинейный подход основан на численном интегрировании ансамбля частиц начальной области и поэтому является более трудоемким, чем линейные методы: линейные отображения быстрее нелинейного подхода в несколько раз. Однако применять линейные отображения можно не всегда. Выбор метода отображения (линейный или нелинейный) зависит от степени нелинейности решаемой задачи оценивания. Степень нелинейности принято характеризовать сравнением величины, называемой показателем нелинейности χ [1–6], с некоторым ее пороговым значением $\bar{\chi}$. В работе [4] приведено теоретическое обоснование порогового значения показателя нелинейности и показано, что $\bar{\chi} = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Используя данное значение, можно выделить три уровня нелинейности: слабая нелинейность ($\chi < 0.001$), умеренная ($0.001 < \chi < 0.01$) и сильная ($\chi > 0.01$). Определяемая при этом нелинейность задачи оценивания есть сумма двух видов нелинейности – внутренней и внешней [7]. Внешняя (параметрическая) нелинейность обусловлена неправильным выбором параметрического пространства, в котором решается задача оценивания. Внутренняя нелинейность присуща самой задаче, и ее уменьшить нельзя. В то же время подходящий выбор параметрического пространства может перевести сильно нелинейную задачу в класс слабо нелинейных. В данной работе в качестве параметрических пространств использовались пространства декартовых и кеplerовых параметров.

Задача корректного оценивания нелинейности особенно актуальна для объектов, наблюдавшихся в одном появлении и на малой мерной дуге. Так, по нашим оценкам, для 419 астероидов, наблюдавшихся в одном появлении и приведенных на сайте центра малых планет [8] на сентябрь 2022 г., для 82% объектов задача оценивания является слабонелинейной в пространстве декартовых переменных. Тогда как в пространстве кеplerовых элементов нелинейность является слабой или умеренной только для 9% объектов. С увеличением интервала, охваченного наблюдениями, степень нелинейности, как правило, уменьшается, что приводит к тому, что задача из сильно или умеренно нелинейной становится слабой как в пространстве декартовых переменных, так и в про-

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSWM-2020-0049). Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Терскольская обсерватория».

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 538.97, 539.23, 548.52

DOI: 10.17223/00213411/66/4/10

**Сближение ступеней на поверхности Si(100):
эксперимент и моделирование**Ю.Ю. Эрвье¹, М.Ю. Есин², А.С. Дерябин², А.В. Колесников², А.И. Никифоров²¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*² *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, Россия*

Методом дифракции быстрых электронов (ДБЭ) исследована эволюция вицинальной поверхности Si(100) при эпитаксиальном росте в системе молекулярно-лучевой эпитаксии в широких диапазонах изменения температуры T и скорости роста R . Полученные временные зависимости интенсивности рефлекса ДБЭ от сверхструктурного домена 1×2 ($I_{1 \times 2}$) демонстрируют уменьшение интенсивности со временем, с выходом на стационарное значение $I_{1 \times 2}^S$. При относительно высоких температурах $I_{1 \times 2}^S$ увеличивается с повышением T и с уменьшением R . Такое поведение стационарной интенсивности подобно поведению минимальной ширины А-террасы, достигаемой при сближении А- и В-ступеней, и может быть связано с увеличением роли упругого отталкивания ступеней, обусловленного анизотропией тензора упругих напряжений на реконструированной поверхности Si(100). В предположении прямо пропорциональной зависимости между интенсивностью $I_{1 \times 2}$ и шириной А-террасы проведено сопоставление теоретических зависимостей минимальной ширины А-террасы от температуры и скорости роста с экспериментальными данными. Показано количественное соответствие теории и эксперимента при относительно небольших значениях энергии образования адатома кремния на террасе.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, дифракция быстрых электронов, поверхность Si(100), поверхностная реконструкция, атомные ступени, изломы, адатомы.

Введение

Поверхность Si(100) является базовой поверхностью для формирования различных полупроводниковых структур при эпитаксиальном росте [1, 2]. Использование вицинальных поверхностей, отклоненных от плоскости (100) к плоскости (111) на некоторый угол θ , позволяет избежать нежелательного многоуровневого двумерно-слоевого роста на террасах, ведущего к огрублению рельефа поверхности и образованию дефектов. Однако наличие на поверхности моноатомных вицинальных ступеней препятствует формированию высококачественных эпитаксиальных пленок соединений III–V на подложках Si(100) из-за генерации межфазных границ [3]. Согласно термодинамическим расчетам [4], при достаточно больших значениях θ на поверхности должны формироваться биатомные ступени, что позволяет избежать данной проблемы. Поэтому для гетероэпитаксии соединений III–V на кремнии используются подложки с углом отклонения $\theta > 2^\circ$. При этом в промышленных масштабах наиболее широко применяются подложки Si(100) с малым отклонением до 0.5° . В связи с этим необходимо проведение исследований по формированию структуры поверхности Si(100) при эпитаксиальном росте на подложках с отклонением не более 0.5° . Физико-технологическое обоснование к проведению таких исследований обусловлено возможностью интеграции оптических структур III–V на кремниевую платформу методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Необходимо отметить, что результаты исследований структуры поверхности, формирующейся в неравновесных условиях, указывают на возможность формирования биатомных ступеней при углах отклонения существенно меньших, чем предсказывают термодинамические расчеты [4]. Так, переход от двухдоменной поверхности с моноатомными А- и В-ступенями к однодоменной поверхности с биатомными ступенями наблюдался с помощью метода дифракции быстрых электронов (ДБЭ) для поверхностей с углами отклонения $\theta = 1^\circ$ и 0.5° при росте $R = 1$ нм/мин со скоростью в температурном интервале $450 - 550^\circ\text{C}$ [5]. Исследования с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) продемонстрировали быстрое (за время, меньшее времени роста монослоя кремния) сближение моноатомных ступеней на поверхности с углом отклонения $\theta \approx 0.5^\circ$ и

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.956

DOI: 10.17223/00213411/66/4/11

Диэлектрическая релаксация воды, адсорбированной на поверхности ниобата лития

И.Г. Симаков¹, Ч.Ж. Гулгенов¹, С.Б. Базарова¹, Т.Ч. Очиров¹¹ Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия

С применением поверхностных акустических волн в качестве инструмента исследования изучены особенности диэлектрической релаксации адсорбированной воды. Установлено, что релаксационный процесс в исследуемом диапазоне частот описывается теорией Дебая с одним временем релаксации. Методом диаграмм Коула – Коула получены значения низко- и высокочастотного пределов диэлектрической проницаемости адсорбированной воды в области частот, соответствующих ориентационной релаксации. Время диэлектрической релаксации адсорбированной воды зависит от толщины адсорбционного слоя и заметно больше времени релаксации воды в объемной жидкой фазе.

Ключевые слова: диэлектрическая проницаемость, поверхностные акустические волны, акустоэлектрический метод, диэлектрическая релаксация, адсорбированная вода, метод диаграмм Коула – Коула.

Введение

Вода играет важную роль во многих природных явлениях и технологических процессах. В последние годы наблюдается повышенный интерес к исследованию физико-химических свойств воды на границе раздела фаз. В частности, проводились исследования для выявления состояния водородных связей, динамической структуры граничной воды и роли межфазных взаимодействий [1–5]. Вместе с тем информации об особенностях структуры и свойствах воды у границы с твердым телом (адсорбированной воды) все еще недостаточно. Необходимые сведения о молекулярной структуре, межмолекулярных взаимодействиях, динамике и механизмах молекулярных процессов адсорбированной воды позволяют получить исследования ее диэлектрических свойств.

Поскольку молекулы воды находятся в непрерывном тепловом движении, то ее диэлектрические свойства должны зависеть не только от величины дипольного момента отдельных молекул, но и от динамической структуры жидкости. Процесс самопроизвольного перехода неравновесной макроскопической системы (адсорбированной воды, возмущенной электрическим полем) в состояние термодинамического равновесия характеризуется временем диэлектрической релаксации τ . В свою очередь, время релаксации зависит от температуры и потенциала межмолекулярного взаимодействия исследуемой жидкости. В случае воды, адсорбированной на гидрофильной твердой поверхности, влияние межфазных границ должно приводить к существенному увеличению времени диэлектрической релаксации.

В настоящей работе исследование диэлектрической релаксации воды, адсорбированной на поверхности ниобата лития, проводилось с помощью поверхностных акустических волн (ПАВ).

Методика исследования

Исследование процесса диэлектрической релаксации адсорбированной воды сводится к изучению частотных зависимостей действительной ε' и мнимой ε'' частей комплексной диэлектрической проницаемости ($\varepsilon^* = \varepsilon' - i\varepsilon''$) для разных фиксированных значений давления пара (соответственно, толщины адсорбционного слоя), а также зависимости диэлектрических характеристик от давления пара при фиксированных значениях частоты ПАВ. Чтобы исключить температурные изменения структуры адсорбированной воды, измерения проводились при постоянной температуре.

Пьезоэлектрический звукопровод (ниобат лития) и тонкий слой жидкости (адсорбированная вода на поверхности звукопровода) представляют собой слоистую систему. Поверхностные акустические волны в такой системе сопровождаются электрическими полями, которые приводят к ориентационной поляризации воды в адсорбционном слое. Регистрация возмущений параметров

Оценка степени кристалличности природного и синтетического диоксида кремния^{*}

М.В. Коровкин^{1,2}, Л.Г. Ананьева¹, А.А. Жерлицын³,
С.С. Кондратьев³, О.В. Савинова¹, В.С. Курская⁴

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

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

³ Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия

⁴ Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

Рассчитаны индексы кристалличности природных и искусственно выращенных образцов диоксида кремния с использованием методов инфракрасной спектроскопии и рентгеновской дифракции. Изменение степени кристалличности кварцевых материалов определяется их структурным совершенством в ближней зоне.

Ключевые слова: кварц, кварциты, диоксид кремния, индекс кристалличности, рентгеновская дифракция, инфракрасная спектроскопия.

Введение

Хорошо известно, что кристаллические и аморфные вещества отличаются своими оптическими, механическими, электрическими и прочими свойствами. Появление кристаллической фазы изменяет плотность, твердость, адгезию, прочность, проницаемость и другие характеристики материалов и покрытий на их основе. Постоянно возрастающее применение высокочистого кварцевого сырья (диоксида кремния) в высоких технологиях обусловлено получением на его основе новых перспективных материалов: оптических линз и оптоволокон, световодов, стеклокерамики, стекла специального назначения [1–5], а также микро- и наноразмерных материалов [6–8], требующих контроля степени кристалличности, которая влияет как на активацию, так и на деградацию их свойств. Кварц является химически инертным соединением благодаря высокому совершенству структуры.

Считается, что степень кристалличности или коэффициент (индекс) кристалличности – это величина, показывающая, какая часть вещества (по массе или объему) является кристаллической. Для определения степени кристалличности используются различные методы, но наиболее распространенным является метод рассеяния рентгеновских лучей: по параметрам дифрактограмм оценивается отношение суммарного рассеяния кристаллитов к общему рассеянию от кристаллических и аморфных областей. В работе [6] понятие «кристалличность» связывается со степенью структурного совершенства кристаллической решетки кварца, а в работах [9–11] – с размером кристаллитов.

Для оценки степени преобразования и кристаллического совершенства кварца в работе [12] было предложено использовать метод рентгеновской дифракции, а «индекс кристалличности» K_{сi} (или QCI) рассчитывать по параметрам мультиплетного пика в области 67–69° на рентгеновской дифрактограмме, однако какие-либо физически обоснованные аргументы в пользу его использования для оценки кристалличности отсутствуют.

В работе [13] предложено использовать метод инфракрасной спектроскопии (ИК) для оценки степени кристалличности халцедонов (скрытокристаллической тонковолокнистой разновидности кварца). Низкотемпературная кристаллическая фаза α -кварца определяется наличием двойного пика ИК-поглощения в диапазоне 800–778 см⁻¹ [14]. Характерный для α -кварца двойной пик ИК-поглощения при 778 и 797 см⁻¹ обусловлен фундаментальными колебаниями разного типа симметрии Si–O–Si связей в кремнекислородном тетраэдре [15, 16]. С изменением степени кристалличности вид данного дублета меняется и, по мнению И.И. Плюсниной [13], именно его можно использовать для получения относительного критерия оценки кристалличности кварца.

В данной работе методами рентгеновской дифракции (XRD) и инфракрасной спектроскопии (FTIR) нами оценена степень кристалличности природных и синтетических кристаллов кварца, а также проведен сравнительный анализ кристалличности некоторых материалов и изделий на основе диоксида кремния.

^{*} Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-27-00371).

Математическое моделирование зависимости прочностных свойств кристаллических дисперсно-упрочненных сплавов от объемной доли и размеров некогерентных наночастиц

Т.А. Ковалевская¹, О.И. Данейко^{1,2}, Т.А. Шалыгина¹

¹ Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

С использованием математического моделирования выявлены закономерности изменения прочностных свойств дисперсно-упрочненных материалов с ГЦК-матрицей в зависимости от объемной доли и размера упрочняющих некогерентных недеформируемых частиц. Показано, что на стадии накопления призматических петель при всех исследуемых значениях объемной доли частиц предел текучести, напряжение течения и коэффициент деформационного упрочнения уменьшаются с ростом размеров частиц. Выявлено, что появление в составе дефектной структуры дислокационных дипольных конфигураций заметно увеличивает прочностные свойства дисперсно-упрочненного материала.

Ключевые слова: математическое моделирование, пластическая деформация, дисперсно-упрочненные материалы, наноразмерные частицы, напряжение течения.

Дисперсно-упрочненные сплавы представляют собой материал, в матрице которого равномерно распределены мелкодисперсные субмикронные и наноразмерные частицы другого вещества [1, 2]. Эти материалы характеризуются изотропией механических свойств, высокой пластичностью и прочностью [3, 4]. В таких материалах большую часть нагрузки принимает на себя матрица, в которой благодаря большому количеству практически не растворяющихся в ней частиц второй фазы создается структура, сопротивляющаяся пластической деформации [5–8]. Упрочняющие частицы, распределенные в матрице, в соответствии с теорией Орована [9–12] оказывают сопротивление движению дислокаций и тем самым способствуют повышению всех прочностных и деформационных свойств. Чем сильнее это сопротивление, тем выше прочность. Эффективность упрочнения зависит от вида частиц, их объемной доли, а также от равномерности распределения в матрице [13, 14]. Особый интерес представляют материалы, упрочненные наноразмерными частицами, они проявляют уникальные свойства по сравнению с традиционными сплавами [15]. Наночастицы используются для улучшения механических (текучесть, твердость) и эксплуатационных свойств изделий. Металлические материалы, армированные наночастицами, обладают наилучшим соотношением прочности и пластичности [13, 16].

Разработанная ранее [14] математическая модель, опирающаяся на физические законы формирования зоны сдвига в дисперсно-упрочненных кристаллических материалах с ГЦК-матрицей и сферическими некогерентными недеформируемыми частицами, дает возможность изучать влияние различных параметров дисперсно-упрочненных материалов и условий пластической деформации на формирование линейных и точечных дефектов в зоне сдвига, а также на формирование прочностных свойств – предела текучести, напряжения течения τ , коэффициента деформационного упрочнения $\theta = d\tau/da$ и др.

В настоящей работе проведено математическое моделирование накопления линейных деформационных дефектов (призматических петель, плотность которых обозначена как ρ_p , сдвигобразующих (матричных) дислокаций плотностью ρ_m и дислокационных диполей плотностью ρ_d), а также рассчитаны соответствующие кривые течения $\tau(a)$ дисперсно-упрочненных кристаллических сплавов с ГЦК-матрицей и некогерентными сферическими наноразмерными частицами. Размер частиц задавался равным $\delta = 10, 20, 50$ нм для трех фиксированных значений объемной доли ($f_1 = 10^{-4}\%$, $f_2 = 0.01\%$, $f_3 = 0.1\%$) при скорости деформации $\dot{a} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ и температуре 293 К.

Развитие дислокационной структуры поликристаллов однородных медно-марганцевых твердых растворов при пластической деформации*

А.И. Потекаев^{1,2}, В.И. Бородин¹, Л.И. Тришкина³, А.А. Клопотов³,
Т.В. Черкасова³, В.В. Кулагина⁴

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

² *Томский научный центр СО РАН, г. Томск, Россия*

³ *Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия*

⁴ *Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия*

Представлены результаты исследования методом электронной микроскопии эволюции дислокационной структуры поликристаллов однородных твердых растворов на основе Cu–Mn с ГЦК-кристаллической решеткой. Построена схема перестройки дислокационных субструктур при переходе от стадии к стадии, выделенных на деформационных кривых в зависимости от степени деформации в сплавах на основе Cu–Mn как функция концентрации. Установлена важная роль величины твердорастворного упрочнения в сплавах на основе Cu–Mn с ГЦК-кристаллической решеткой на развитие дислокационных субструктур (ДСС), которые являются основными носителями деформации для данной стадии. Показано, что переходы от одних типов ДСС к другим типам происходят в некоторых интервалах значений степени деформации ε . Выявлено, что каждой стадии деформации отвечают свои ДСС – носители деформации. Переход от стадии к стадии сопровождается образованием новых носителей деформации, что является характерной чертой слабоустойчивых состояний системы.

Ключевые слова: *сплавы Cu–Mn, твердорастворное упрочнение, дислокационные структуры, слабоустойчивые состояния.*

Введение

Современные представления о влиянии нано- и мезомасштабных объектов на свойства материалов основываются на многоуровневом подходе: нано-, мезо-, макроуровнях и на их взаимосвязях. Базовые представления в физике пластичности и прочности основываются на закономерностях накопления дислокаций в материале на различных стадиях деформации. Особенно важно развитие дислокационной структуры в слабоустойчивых состояниях в области структурно-фазовых превращений. Связи деформации с дислокациями уделяется много внимания [1]. Эволюция полей деформации исследуется давно, однако эти исследования сосредотачивались, как правило, на состояниях материала, далеких от областей слабой структурно-фазовой устойчивости.

В настоящее время изучаются детальные особенности дислокационной структуры [2]. Известно, что эти структуры могут быть классифицированы как высоко-, средне- и низкоэнергетические [3]. В чистых металлах закономерности накопления дислокаций были обобщены [4, 5], но накопление дислокаций в твердых растворах имеет свои отличия [6].

Исследование механических свойств и дислокационной структуры твердых растворов системы медь – марганец представляет интерес по ряду причин. Во-первых, твердые растворы системы Cu–Mn достаточно однородны [7]. Во-вторых, с ростом концентрации марганца наблюдается увеличение твердорастворного упрочнения (σ_r). В-третьих, содержание марганца слабо влияет на энергию дефекта упаковки (ЭДУ) [8]. Изменение процентного содержания марганца слабо влияет на ЭДУ [8]. При деформации этих сплавов при фиксированной температуре их физико-механические свойства соответствуют однофазному состоянию твердого раствора и полностью определяются развитием их дислокационной подсистемы. Поэтому представляется возможным детально изучить влияние состава твердого раствора медь – марганец на закономерности накопления дислокаций по крайней мере до состава Cu – 20 ат. % Mn. При этом особый интерес представляет эволюция дислокационной субструктуры (ДСС) вблизи структурно-фазовых превращений, что заставляет обратить пристальное внимание на слабоустойчивые состояния системы в области перехода с одной стадии упрочнения на другую.

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ FEMN-2023-0003.

Стеклокомпозиты SCS – LMZBS с низкой диэлектрической проницаемостью

А.Г. Абубакаров¹

¹ 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

Тетрагональный гиллеспит типа $\text{SrCuSi}_4\text{O}_{10}$ (SCS) был получен методом горячего прессования твердотельной керамики. SCS, спеченный при 1100 °С в течение 6 ч, показал $\epsilon_r = 4.0$ и $\text{tg } \delta = 1.1 \cdot 10^{-3}$ при частоте 5 ГГц. SCS обладает плохой способностью к спеканию, а добавление литий-магниево-цинкового боросиликатного стекла (Li_2O , Mg, ZnO, B_2O_3 , SiO_2) снижает температуру спекания и улучшает уплотнение. Керамика SCS с 5 мас.% стекла LMZBS, спеченного при 900 °С, имеет $\epsilon_r = 5.0$ и $\text{tg } \delta = 1.9 \cdot 10^{-3}$ при частоте 5 ГГц.

Ключевые слова: керамические диэлектрики, относительная диэлектрическая проницаемость, диэлектрические потери низкотемпературного совместного обжига керамики.

Стремительное развитие микроэлектронной промышленности требует миниатюрных микроволновых устройств с высокой скоростью обработки [1]. Комбинированное использование диэлектриков с низкой диэлектрической проницаемостью и стекол с низкими потерями, обеспечивающих технологию низкотемпературного совместного обжига керамики (LTCC), может удовлетворять это требование. По сравнению с печатными платами из полимерной смолы LTCC превосходят их благодаря своим высокочастотным характеристикам, термостойкости и способны интегрировать пассивные компоненты [2]. Подложка LTCC должна обладать несколькими характеристиками, такими как 1) низкая относительная диэлектрическая проницаемость (ϵ_r) для увеличения скорости передачи сигнала, 2) низкие диэлектрические потери ($\text{tg } \delta$) для селективности, 3) низкий температурный коэффициент относительной диэлектрической проницаемости для термической стабильности, 4) низкий или соответствующий коэффициент теплового расширения для прикрепленных к нему материалов и 5) высокая теплопроводность для рассеивания тепла. Преобладающая ковалентная природа силикатов ограничивает колебание атомов, что приводит к низкой диэлектрической проницаемости и низким диэлектрическим потерям [3]. Было разработано несколько материалов с низкими потерями и низкой диэлектрической проницаемостью с хорошими диэлектрическими свойствами [3]. Однако высокие температуры обработки ограничивают их применение в устройствах на базе LTCC. Температура спекания керамики должна быть меньше температуры плавления электродных материалов для применений LTCC. Кроме того, электродные материалы, такие как серебро или золото, должны быть химически совместимы с керамикой. Известно, что добавление легкоплавких стекол является эффективным недорогим способом снижения температуры спекания без существенного влияния на диэлектрические свойства [4].

Слоистый силикат меди – Вессельсит ($\text{SrCuSi}_4\text{O}_{10}$), далее SCS, был известен с древних времен. О структурных свойствах SCS сообщалось ранее [5, 6]. Он обладает структурой Гиллеспита, которая является тетрагональной с пространственной группой $P4/nsc$ (№ 130). В настоящей работе мы впервые сообщаем о микроволновых диэлектрических свойствах керамики SCS и ее низкотемпературном спекании.

Стехиометрические количества порошков высокой чистоты SrCO_3 , CuO и SiO_2 «Sigma Aldrich» взвешивали и измельчали в течение 24 ч в среде дистиллированной воды. Высушенные порошки прокаливали при 950 °С в течение 18 ч. К мелкодисперсному порошку прокаленного SCS добавляли различные мас.% литий-магниево-цинкового боросиликатного стекла (LMZBS). Цилиндрические шайбы различных размеров и квадратные листы с размерами 50×50×1.8 мм были изготовлены для определения характеристик на радио- и микроволновых частотах соответственно. Спекание проводили при температурах в диапазоне 800–1125 °С в течение 6 ч путем заглушения образцов порошком того же состава, чтобы ограничить утечку меди. Спеченные и порошкообразные образцы были использованы для анализа кристаллической структуры и чистоты фазы методом рентгеновской дифракции (XRD) с использованием излучения CuK_α Philips X'pert PRO MPD

Диэлектрические свойства нанокompозитов триглицинсульфат – наночастицы оксида алюминия

А.Ю. Милинский¹, С.В. Барышников^{1,2}, И.В. Егорова¹, А.Э. Львов¹

¹ Благовещенский государственный педагогический университет, г. Благовещенск, Россия

² Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия

Представлены результаты исследований диэлектрической проницаемости ϵ' и коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ композитов, полученных на основе сегнетоэлектрика триглицинсульфата (ТГС) и наночастиц Al_2O_3 со средним размером 100 нм. Исследования проводились в температурном интервале 300–355 К. Для ТГС, входящего в состав композитов $(\text{TGS})_{1-x}/(\text{Al}_2\text{O}_3)_x$ ($x = 0.10$ и 0.20), обнаружено смещение фазового перехода при нагреве к высоким температурам на 3 и 5 К соответственно по сравнению с объемным веществом. Обнаружен гистерезис фазового перехода ТГС в композитах, который увеличивается с ростом содержания наночастиц Al_2O_3 .

Ключевые слова: нанокompозит, триглицинсульфат, диэлектрическая проницаемость, коэффициент третьей гармоники, фазовый переход, гистерезис фазового перехода.

Введение

Сегнетоэлектрики с водородными связями, такие как триглицинсульфат, сегнетова соль, дигидрофосфат калия, используются в современной электронике благодаря своим свойствам, обеспечивающим электрическое переключение спонтанной поляризации. Эти кристаллы используются для создания энергонезависимой памяти [1], транзисторов [2], конденсаторов [3], различных преобразователей и датчиков [4, 5] и т.д. Триглицинсульфат (ТГС) является замечательным кандидатом для создания инфракрасных детекторов [6, 7].

ТГС является классическим сегнетоэлектриком, который хорошо изучен, и поэтому исследования его свойств уже не представляют интереса. Тем не менее в последнее время появился ряд работ по созданию на его основе композитов с различными включениями или нанокompозитов, полученных путем внедрения ТГС в нанопористые матрицы [8–11]. Например, в работе [10] авторами был синтезирован сегнетоэлектрический композит, состоящий из триглицинсульфата и наночастиц целлюлозы. Сильное взаимодействие в композите между ТГС и наночастицами целлюлозы через систему водородных связей привело к существенному повышению температуры сегнетоэлектрического фазового перехода ТГС. Повышение температуры Кюри увеличивалось от 3 до 63 К при росте содержания наночастиц целлюлозы в композите. В недавней работе [11] исследовались нанокompозиты на основе ТГС с включением окисленных многостенных углеродных нанотрубок. Показано, что для частиц ТГС в нанокompозитах происходит аномальное увеличение коэрцитивных полей, температуры фазового перехода и температур замерзания доменных стенок. За наблюдаемые эффекты ответственны радикалы ОН, расположенные на поверхности углеродных нанотрубок после окисления.

В данной работе приводятся результаты исследования диэлектрических свойств нанокompозитов $(\text{TGS})_{1-x}/(\text{Al}_2\text{O}_3)_x$, полученных на основе триглицинсульфата и наночастиц Al_2O_3 размером 100 нм.

1. Образцы и методика эксперимента

В кристаллах ТГС при нагреве до $T_c = 322$ К происходит фазовый переход второго рода в моноклинную симметрию с центросимметричным классом $2/m$ [12]. Ниже T_c кристалл принадлежит к полярной точечной группе 2 моноклинной системы (зеркальная плоскость исчезает). Полярная ось направлена вдоль моноклинной оси второго порядка. Величина спонтанной поляризации ТГС составляет 2.8 мКл/см² при температуре 293 К. Одна элементарная ячейка кристалла ТГС содержит более 100 атомов. Согласно данным рентгеноструктурного анализа и нейтронографии структура сульфата бис(глицина)-глицина (триглицинсульфата) $2\text{C}_2\text{H}_6\text{NO}_2^+ \cdot \text{SO}_4^{2-} \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$ ($\text{C}_6\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_{10}\text{S}$) включает одну нейтральную молекулу глицина $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$ с цвиттерионной конфигурацией, два монопротонированных иона глицина $\text{C}_2\text{H}_6\text{NO}_2^+$ и тетраэдрический сульфат-ион [13, 14]. При образовании водородных связей атомы водорода амино- и гидроксильной групп являются

**Исследование эффектов синергии
высокоинтенсивной имплантации ионов титана
в кремний и энергетического воздействия
ионного пучка на поверхность***

Д.О. Вахрушев¹, А.В. Гурулев¹, Д.Д. Ефимов², А.И. Иванова¹, О.С. Корнева¹

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

² *Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, г. Калининград, Россия*

Изучен метод глубокого ионного легирования материалов, основанного на синергии высокоинтенсивной имплантации и энергетического воздействия на поверхность пучка ионов с высокой плотностью мощности субмиллисекундной длительности. Показана возможность получения ионно-легированных слоёв с толщиной от менее 0.1 мкм до более чем 1 мкм в зависимости от флюенса облучения.

Ключевые слова: ионная имплантация, энергетическое воздействие, динамика температурных полей, радиационно-стимулированная диффузия, глубокое ионное легирование.

Методы модификации поверхностей металлов, сплавов и полупроводниковых материалов ионными пучками [1–4] представляют значительный интерес для направленного изменения физико-механических и электрофизических свойств во многих областях науки и техники. Расширению возможностей практического применения ионной имплантации как в полупроводниковые материалы, так и в металлы и сплавы может способствовать увеличение толщин ионно-модифицированных слоев. Предложенный в работе [5] метод высокоинтенсивной имплантации ионов низкой энергии продемонстрировал возможность увеличения глубины ионно-легированного слоя за счет радиационно-стимулированной диффузии до нескольких десятков и сотен микрометров. Высокая плотность тока в ионном пучке и значительный разогрев облучаемых материалов способствуют диффузии имплантируемых атомов на глубины, многократно превышающие проективный пробег ионов. В то же время во многих случаях разогрев облучаемых образцов до высоких температур в процессе ионной имплантации приводит к негативному изменению микроструктуры как в легированном слое, так и во всем объеме материала. В работе [6] рассмотрена возможность модификации приповерхностного слоя высокоинтенсивным импульсно-периодическим пучком [7] без существенного изменения микроструктуры и свойств облучаемого материала за пределами легированного слоя. Метод предполагает синергию высокоинтенсивной имплантации ионов и энергетического воздействия на поверхность пучков ионов с высокой импульсной плотностью мощности. При этом средняя температура облучаемой мишени может быть ограничена до значений, при которых не происходит ухудшение ее микроструктуры.

В настоящей работе впервые исследуется возможность реализации синергии высокоинтенсивной имплантации ионов титана и энергетического воздействия импульсно-периодического пучка высокой плотности мощности на поверхность кремния с целью многократного увеличения глубины ионного легирования за счет радиационно-стимулированной диффузии в условиях ограниченного разогрева всего образца.

Экспериментальное исследование проводилось на комплексной установке, оснащенной модифицированным ионным источником Радуга-5, описанной в работе [5]. Вакуумно-дуговой испаритель генерировал плазму титана в непрерывном режиме при токе разряда 130 А. Для экстракции ионов применялся одиночный сеточный электрод в виде части сферы радиусом 130 мм, с размером ячейки сетки 1×1 мм и прозрачностью 64%. Для отсечки осаждения микрокапельной фракции вакуумно-дугового разряда при генерации титановой плазмы на облучаемую поверхность, как и в работе [5], применялся дисковый электрод, расположенный по оси источника ионов. Генерация пучка осуществлялась в импульсно-периодическом режиме с помощью генератора импульсного напряжения с длительностью импульсов 500 мкс, с амплитудой потенциалов смещения 30 кВ.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10061, <https://rscf.ru/project/22-79-10061/>.

Ежемесячный научный журнал

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА
IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

2023. Т. 66. № 4

Адрес редакции и издателя:
634050, РФ, г. Томск, пр. Ленина, д. 36,
Томский государственный университет,
редакция журнала «Известия вузов. Физика»

Старший редактор *Л. А. Пивоварова*
Выпускающий редактор *Л. В. Пермякова*
Редактор-переводчик *И. А. Бобровникова*
Оригинал-макет *Д. В. Фортеса*

Подписано к печати 24.04.2023. Выпуск в свет 26.04.2023. Заказ № 5433.
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая.
Усл. п. л. 16.04. Уч.-изд. л. 17.97. Тираж 50 экз. Цена свободная.

Отпечатано на полиграфическом оборудовании
Издательства Томского государственного университета,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, тел. (3822) 531-528, 529-849.
<http://publish.tsu.ru>; e-mail: rio.tsu@mail.ru

