

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

11·2024

**ИЗДАНИЕ
ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

Том 67

Ноябрь, 2024

№ 11 (804)

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

12+

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., акад. РАН, Новосибирск, Россия

Асеев А.Л., акад. РАН, Новосибирск, Россия

Борисов А.В., проф., Москва, Россия

Вараксин А.Ю., чл.-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

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

Aseev 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

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

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

- Миньков Л.Л., Оберемок А.А.** Течение Куэтта между боковыми стенками закрытого канала и движущегося в нем вытянутого тела5
- Кириллова К.И., Бондарева Н.С.** Численное исследование влияния процесса плавления в стенке на конвективный теплообмен в замкнутой воздушной полости13
- Порязов В.А., Глотов О.Г., Крайнов Д.А., Сорокин И.В., Суродин Г.С.** Моделирование горения конденсированных высокоэнергетических материалов, содержащих порошкообразный алюминий. I. Эксперимент25

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

- Кузнецов В.С., Зиновьев М.М., Юдин Н.Н., Слюнько Е.С., Подзывалов С.Н., Габдрахманов А.Ш., Кальсин А.Ю., Лысенко А.Б., Кулеш М.М., Садовников С.А., Яковлев С.В.** Узкополосные фильтры ближнего ИК-диапазона для систем дистанционного газоанализа43
- Землянов А.А., Донченко В.А., Землянов Ал.А., Кочетов Д.И., Кравченко И.В., Рямбов Р.В.** Угловое распределение одно- и двухфотонно-возбужденной флуоресценции жидко-капельного аэрозоля с красителем Родамин 6Ж при возбуждении наносекундными лазерными импульсами51
- Осипов В.В., Шитов В.А., Максимов Р.Н., Щукина А.А.** Седиментация наночастиц $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$, синтезированных лазерным методом, и особенности изготовления оптической керамики на их основе56

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

- Андрианов А.А., Андрианова О.Н., Карпенко М.П., Купцов И.С., Уварова А.А.** Влияние неопределенности нейтронных данных на точность расчета критических параметров размножающихся сред с метастабильным америцием 24264

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

- Хлудков С.С., Прудаев И.А., Толбанов О.П., Ивонин И.В.** Ферромагнитный нитрид галлия, легированный примесями переходных элементов, в качестве материала для спинтроники74

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Корчагин В.Н., Сысоев И.А., Пашенко А.С., Ратушный В.И.** Влияние углеродных квантовых точек в матрице поливинилбутирала на электрофизические свойства солнечных элементов84
- Белослудцева А.А., Бобенко Н.Г., Сапезинская Т.А.** ТермоЭДС графена: роль примесных атомов и структурного беспорядка92
- Кузьминов Е.Д., Шугуров А.Р., Дербин А.Ю., Панин А.В., Дмитриев А.И.** Влияние содержания Si в покрытиях Ti–Al–Ta–Si–N на их разрушение при одноосном растяжении97
- Еремина Г.М., Мартышина И.П.** Влияние толщины костного цемента на процессы остеоинтеграции эндопротеза тазобедренного сустава. Макроскопическое моделирование107

CONTENTS

THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS

Minkov L.L., Oberemok F.F. Couette flow between the side walls of a closed channel and a moving elongated body	5
Kirillova K.I., Bondareva N.S. Numerical study of the influence of the melting in the wall on the convective heat transfer in a closed cavity	13
Poryazov V.A., Glotov O.G., Krainov D.A., Sorokin I.V., Surodin G.S. Simulation of combustion of condensed high-energy materials containing powdered aluminum. I. Experiment	25

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Kuznetsov V.S., Zinoviev M.M., Yudin N.N., Slyunko E.S., Podzyvalov S.N., Gabdrakhmanov A.Sh., Kalsin A.Yu., Lysenko A.B., Kulesh M.M., Sadovnikov S.A., Yakovlev S.V. Narrow-band near-IR filters for remote gas analysis systems	43
Zemlyanov A.A., Donchenko V.A., Zemlyanov A.I., Kochetov D.I., Kravchenko I.V., Ryamov R.V. Angular distribution of one- and two-photon excited fluorescence of a liquid-droplet aerosol with the Rhodamine 6G dye excited by nanosecond laser pulses	51
Osipov V.V., Shitov V.A., Maksimov R.N., Shchukina A.A. Sedimentation of Yb:Y ₂ O ₃ nanoparticles synthesized by the laser method and features of manufacturing optical ceramics based on them	56

ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

Andrianov A.A., Andrianova O.N., Karpenko M.P., Kuptsov I.S., Uvarova A.A. Impact of neutron data uncertainty on the accuracy of critical parameter calculations for neutron-multiplying media containing metastable americium-242	64
--	----

PHYSICS OF SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS

Khludkov S.S., Prudaev I.A., Tolbanov O.P., Ivonin I.V. Ferromagnetic gallium nitride doped with transition elements as a material for spintronics	74
--	----

CONDENSED-STATE PHYSICS

Korchagin V.N., Sysoev I.A., Paschenko A.S., Ratushny V.I. Influence of carbon quantum dots in a polyvinyl butyral matrix on the electrophysical properties of solar cells	84
Belosludtseva A.A., Bobenko N.G., Sapezhinskaya T.A. Thermopower of graphene: the role of impurity atoms and structural disorder	92
Kuzminov E.D., Shugurov A.R., Derbin A.Yu., Panin A.V., Dmitriev A.I. The effect of Si content in Ti–Al–Ta–Si–N coatings on their fracture under uniaxial tension	97
Eremina G.M., Martyshina I.P. Influence of bone cement thickness on the osseointegration of hip joint endoprosthesis. Macroscopic modeling	107

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532.58

DOI: 10.17223/00213411/67/11/1

**Течение Куэтта между боковыми стенками закрытого канала
и движущегося в нем вытянутого тела***Л.Л. Миньков¹, А.А. Оберемок¹¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Получено приближенное аналитическое решение задачи о ламинарном течении несжимаемой среды в зазоре, образованном боковой поверхностью движущегося вытянутого тела и боковой стенкой замкнутого канала. Найдены зависимости для нахождения профиля продольной скорости в зазоре, перепада давления вдоль зазора, напряжения на стенках зазора и силы сопротивления при движении вытянутого тела внутри замкнутого канала в приближении плоского и осесимметричного ламинарного течения. Сравнение результатов численного моделирования с приближенным аналитическим решением показало приемлемую точность последнего для чисел Рейнольдса не более 10.

Ключевые слова: течение Куэтта, профиль скорости, сила сопротивления, закрытый канал, движущееся тело.

Введение

Течение вязких жидкостей в зазорах представляет практический интерес в связи с решением различного рода прикладных задач [1, 2]. Точные решения линеаризованных уравнений Навье – Стокса, в которых не учитывается инерционность движения, для целого класса задач о течении жидкости в каналах и зазорах приведены в работах [2, 3]. К таким задачам относится задача о стационарном движении жидкости между двумя параллельными плоскостями (течение Куэтта, течение Пуазейля), задача о движении жидкости между вращающимися коаксиальными цилиндрами, задача о скольжении ползуна вдоль плоскости, покрытой вязкой жидкостью, задача о пульсирующем течении вязкой жидкости в круглой трубе и др. [3].

Конвективные члены в уравнениях Навье – Стокса создают определенные трудности в получении точного решения, и в этом случае приходится прибегать к численному решению. Например, в работе [4] численно решена задача определения перепада давления в нестационарном потоке вязкой жидкости в зазоре между двумя неподвижными параллельными плоскими стенками на основании информации об изменении во времени объемного расхода жидкости в зазоре.

В рассмотренных выше задачах предполагается, что каналы и зазоры имеют открытый вход и выход или имеет место периодичность течения. Интересным с практической точки зрения является течение в зазоре между боковыми стенками закрытого канала и объекта, перемещающегося внутри канала, заполненного жидкостью. К подобным течениям можно отнести течения, возникающие при движении подводных лодок, морских животных в морских гротах, подводных пещерах, тоннелях.

Цель данной работы – получение приближенного аналитического решения задачи о ламинарном течении несжимаемой среды в зазоре между горизонтальными поверхностями тела и закрытого канала круглого или прямоугольного сечения, вызванном продольным перемещением тела внутри канала, а также определение границ применимости полученного решения на основе сравнения его с численным решением задачи.

Постановка задачи

При относительно медленном движении вытянутого тела в замкнутом узком канале, заполненном несжимаемой средой (газ или жидкость), происходит вытеснение среды, находящейся перед телом, которая, обтекая тело, движется в зазоре между стенками канала и тела. Для определения сил сопротивления со стороны среды, действующих как на движущееся тело, так и на стенки

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

Численное исследование влияния процесса плавления в стенке на конвективный теплообмен в замкнутой воздушной полости*

К.И. Кириллова^{1,2}, Н.С. Бондарева¹

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

² *АО «ТомскНИПИнефть», г. Томск, Россия*

Процессы тепломассопереноса с фазовыми превращениями представляют большой интерес с точки зрения систем хранения и отвода энергии. Процессы плавления и затвердевания меняют теплофизические свойства материалов, при этом преобразуя большое количество энергии в скрытую при переходе через точку плавления. В данном исследовании рассматривается двумерная нестационарная задача естественной конвекции в воздушной полости, граничащей со стенкой из материала с изменяемым фазовым состоянием.

Ключевые слова: численное моделирование, конвективный теплоперенос, плавление, формстабильный материал.

Введение

Изучение теплообмена имеет большое значение для управления и предсказания физических процессов, связанных с производством и использованием энергии [1]. Быстрые темпы развития городских агломераций и развитие технологий ведут к стремительному росту энергопотребления, большая часть которого приходится на системы кондиционирования и поддержания комфортных условий в зданиях и элементах транспортной структуры. Это приводит к необходимости постоянного перераспределения и оптимального хранения энергии для достижения комфортных условий внутри помещений без ущерба для энергоэффективности. Структура строительных сооружений, гидродинамика воздуха оказывают существенное влияние на температурное распределение и влажность внутри помещения. Снижение тепловых потерь достигается высоким тепловым сопротивлением ограждающих конструкций, включающих материалы с низкой теплопроводностью [2].

Накопление тепловой энергии стало ключевым сектором энергосбережения в зданиях, что толкнуло на модификации строительных материалов. В режиме теплового равновесия стена с низкой теплопроводностью приводит к низкому тепловыделению и низким тепловым потерям, что выгодно для снижения энергопотребления. Однако на практике тепловой режим никогда не бывает устойчивым, а скорее находится в почти периодическом режиме из-за смены дня и ночи и времен года. Эти тепловые циклы вызывают колебательные потери/прирост тепла, что отрицательно сказывается на потреблении энергии системой и поддержании теплового комфорта. Материалы с невысокой температурой плавления являются своего рода аккумулятором для накопления скрытой тепловой энергии и могут быть применены для устранения приведенного энергетического дисбаланса [3–5]. Спектр использования материалов с невысокими температурами плавления постоянно расширяется во всех направлениях, так или иначе связанных с энергетикой. Слой парафина или другого материала в стене будет плавиться при повышении температуры и затвердевать при понижении температуры внешней среды, вследствие чего внутренняя часть помещения может стать относительно нечувствительной к внешним условиям. Кроме того, такие материалы обладают характерной температурой плавления и затвердевания, которые могут быть выбраны в зависимости от конкретных требований. Это позволяет выбирать материалы с определенными характеристиками для конкретных сценариев использования. Материалы с фазовым переходом могут быть классифицированы как органические и неорганические. Неорганические материалы, такие как гидраты солей и металлы, могут проявлять переохлаждение и разделение фаз во время переходных процессов. В отличие от этого, органические материалы, такие как парафины, жирные кислоты и полиэтиленгликоль, обычно не подвергаются переохлаждению и не демонстрируют разделения на фазы. Они доступны в широком диапазоне температур и совместимы с обычными строительными материалами. Однако эти материалы легко воспламеняются и обладают низкой теплопроводностью [6, 7].

* Работа выполнена в рамках реализации проекта Российского научного фонда (соглашение № 22-79-10341).

Моделирование горения конденсированных высокоэнергетических материалов, содержащих порошкообразный алюминий.

І. Эксперимент*

В.А. Порязов¹, О.Г. Глотов^{1,2}, Д.А. Крайнов^{1,3}, И.В. Сорокин^{1,2}, Г.С. Суродин^{1,2}

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

² *Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, г. Новосибирск, Россия*

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

Методом отбора исследованы характеристики конденсированных продуктов горения (КПГ) топлив на основе перхлората аммония, алюминия и инертного связующего СКДМ-80 при вариации дисперсности алюминия. Эксперименты проведены в диапазоне давлений 2–8 МПа в аргоне, гашение частиц осуществляли вблизи поверхности горения. Представлены экспериментальные данные по скоростям горения, морфологическому и гранулометрическому составу КПГ, неполноте сгорания и эффективности энерговыделения металлического горючего. Размеры отобранных частиц КПГ сопоставлены с размерами агломератов, полученных при расчете по тетраэдрической модели карманов. Измеренные параметры горения будут использованы для разработки и валидации модели горения во второй статье цикла.

Ключевые слова: *смесевое топливо, алюминий, перхлорат аммония, связующее СКДМ-80, скорость горения, конденсированные продукты горения, функция распределения частиц по размерам.*

Введение

Скорость горения является одной из основных характеристик высокоэнергетических материалов. В частности, в случае ракетного двигателя скорость горения топлива определяет темп высвобождения химической энергии топлива и выделения рабочего тела, создающего реактивную тягу. Как правило, скорость горения топлива измеряется в эксперименте. Однако на стадии проектирования топлива и оптимизации его параметров представляется крайне привлекательным заменить хотя бы часть натурных экспериментов на проведение расчетов. Для этого требуются математические модели, которые бы учитывали ключевые особенности горения топлив и влияние характеристик компонентов на скорость горения. Данная работа начинает цикл из двух статей, и в ней изложены экспериментальные данные, которые во второй статье используются для валидации разрабатываемой модели.

1. Компоненты топлива, условия проведения экспериментов с отбором частиц-продуктов горения

Характеристики конденсированных продуктов горения (КПГ) исследованы с применением методики отбора ИХКГ СО РАН. В ходе экспериментов с отборами также определяли скорость горения. Методика включает установку – проточную бомбу для отбора КПГ, технологии препарирования отобранных частиц, процедуры проведения их морфологического, гранулометрического и химического анализов, а также программное обеспечение для обработки результатов. Все упомянутые аспекты методики описаны в [1, 2]. Вкратце, гашение частиц, вылетающих с поверхности горения образца топлива, горящего в бомбе, осуществляется на заданном расстоянии от образца путем смешения струи продуктов горения образца со спутным потоком инертного газа, непрерывно продувающего бомбу. Погашенные частицы улавливаются пакетом металлических ситовых секций и аналитическим аэрозольным фильтром типа АФА, затем анализируются любыми доступными методами. Как правило, проводятся морфологический, гранулометрический и химический анализы отобранных частиц. Преимуществами методики являются неповреждающее замораживание частиц в инертном газе и высокая представительность отбора частиц любых размеров – от нанометровых до сантиметровых. Для определения (не)полноты сгорания металлического горючего используется цериметрический метод [1]. По завершении серии экспериментов пакет сит и другие

* Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 19-79-10054.

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 621.375.826

DOI: 10.17223/00213411/67/11/4

**Узкополосные фильтры ближнего ИК-диапазона
для систем дистанционного газоанализа***

В.С. Кузнецов^{1,3}, М.М. Зиновьев^{1,3}, Н.Н. Юдин^{1,2,3}, Е.С. Слюнько^{1,3},
С.Н. Подзывалов^{1,3}, А.Ш. Габдрахманов^{1,3}, А.Ю. Кальсин^{1,3}, А.Б. Лысенко^{1,3},
М.М. Кулеш¹, С.А. Садовников², С.В. Яковлев²

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

² *Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия*

³ *ООО «Лаборатория оптических кристаллов», г. Томск, Россия*

Проведено моделирование узкополосных фильтров на целевые длины волн 2010.7, 2022.5, 2025.8, 2241.8, 2245.9 и 2260.6 нм, шириной пропускания 10 нм и с «крыльями» блокировки по 250 нм с каждой стороны. Установлено, что среди пар материалов ZnS/MgF₂, Ge/YbF₃ и Ge/MgF₂ наилучшие результаты для создания узкополосных интерференционных фильтров в указанном спектральном диапазоне показала пара Ge/MgF₂.

Ключевые слова: *ZnGeP₂, параметрические генераторы света.*

Введение

Проблема смягчения последствий изменения климата за счет парникового эффекта становится одним из определяющих факторов как внешней, так и внутренней политики большинства стран мира. Основной вклад в изменение климата вносят выбросы таких парниковых газов, как углекислый газ (CO₂), метан (CH₄), оксид азота (N₂O). Среди инструментов, призванных ограничить и сократить выбросы парниковых газов, наиболее гибкими и эффективными считаются экономические (рыночные) инструменты, т.е. такие, которые создают фактическую «цену на углерод». Наиболее популярные из таких инструментов – углеродные налоги и системы торговли квотами (СТК, emissions trading system, ETS). В ближайшей перспективе произойдет увеличение доли глобальных выбросов, покрытых квотами. Данные инструменты стимулирования сокращения выбросов парниковых газов закреплены в рамочной конвенции ООН об изменении климата, Киотском протоколе и Парижском соглашении. Приведенные выше обстоятельства требуют создания эффективной технологической базы для производства инструментов постоянного мониторинга распределения и динамики концентрации фоновых составляющих парниковых газов для наблюдения повышения общего содержания данных газовых компонент на обширных территориях с возможностью определения вклада в эмиссию каждого конкретного промышленного предприятия.

Использование спектроскопических методов зондирования для решения проблемы контроля выбросов парниковых газов, в отличие от стандартных методов газоанализа, имеет ряд несомненных преимуществ в оперативном получении бесконтактным способом необходимых данных для изучения состава и физических параметров атмосферы. Лазерные локаторы (лидары) позволяют уверенно детектировать локальные газовые образования, шлейфы промышленных выбросов, идентифицировать присутствие в них повышенного содержания органических и других опасных примесей, составляющих потенциальную угрозу экологической катастрофы. Инфракрасный (ИК) диапазон спектра представляет значительный интерес в вопросах обнаружения повышенного содержания парниковых и техногенных газов в атмосфере, так как именно в нем колебательно-вращательные спектры основных загрязняющих атмосферу веществ обладают специфическими особенностями, что и облегчает их идентификацию. В частности, колебательно-вращательные спектры парниковых газовых составляющих имеют достаточно интенсивные линии поглощения в

* Исследование было поддержано Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (бюджетные средства ИОА СО РАН).

Угловое распределение одно- и двухфотонно-возбужденной флуоресценции жидко-капельного аэрозоля с красителем Родамин 6Ж при возбуждении наносекундными лазерными импульсами*

А.А. Землянов¹, В.А. Донченко², Ал.А. Землянов^{1,2},
Д.И. Кочетов¹, И.В. Кравченко², Р.В. Рямбов²

¹ Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

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

Проведены измерения углового распределения одно- и двухфотонно-возбужденной флуоресценции раствора красителя в аэрозоле. Показано, что при двухфотонном возбуждении диаграмма направленности флуоресценции более вытянута назад, чем при однофотонном возбуждении.

Ключевые слова: наносекундный импульс, флуоресценция, жидко-капельный аэрозоль.

Анализ аэрозолей приземного слоя воздуха является одной из актуальных задач экологического мониторинга, поскольку в аэрозоле могут содержаться микроорганизмы, способные вызывать аллергические реакции и различные заболевания человека. Измерение сигналов флуоресценции и упругого рассеяния позволяет изолировать потенциально опасные биологические частицы в условиях переменного атмосферного фона как неорганического, так и биологического происхождения, маскирующего присутствие микроорганизмов [1, 2].

Разнообразие переносимых по воздуху бактерий [3, 4], пыльцы и вирусов представляют медицинский, сельскохозяйственный или экологический интерес. Некоторые заболевания человека [3–6] (туберкулез, грипп), сельскохозяйственных животных (кокцидиомикоз), сельскохозяйственных культур (черная стеблевая ржавчина) и лесных деревьев (пузырчатая ржавчина белой сосны) обычно передаются воздушно-капельным путем. Некоторые виды пыльцы, переносимые по воздуху, вызывают аллергию у человека. Бактерии (*Bacillus thuringensis*), используемые для борьбы с некоторыми вредителями, обычно распространяются через воздух. Помимо известных микробных агентов, еще не классифицированы тысячи бактерий [7]. Поскольку переносимые по воздуху споры и пыльца настолько важны, то необходимы новые и более совершенные методы их мониторинга [6].

Прежде чем использовать ультракороткие фемтосекундные импульсы в аэрозольной среде, была проведена серия экспериментов с использованием наносекундных лазерных импульсов с целью получения углового распределения флуоресценции раствора красителя в водном аэрозоле, имитирующего органические вещества в атмосфере, поскольку он способен флуоресцировать.

Спектры как возбуждения флуоресценции, так и спектры излучения могут быть полезны для различения биологических и небиологических частиц и могут помочь в идентификации [3] разных видов бактерий. Спектры возбуждения и излучения флуоресценции бактерий [4–6] широки и имеют тенденцию быть сходными для разных видов. Такое сходство неудивительно, поскольку первичные флуоресцентные вещества [6] в большинстве бактериальных клеток одни и те же: аминокислоты триптофан, тирозин и фенилаланин; восстановленные никотинамидадениндинуклеотиды (НАДН, НАДФН); флавиновые соединения (ФАД, рибофлавин). Спектры этих флуоресцентных молекул, которые в разных пропорциях встречаются во всех биологических клетках, зависят от внутриклеточной среды. Дополнительные флуоресцентные молекулы (хлорофиллы) в биологических частицах могут вызывать дополнительные спектральные особенности и тем самым увеличивать разницу между спектрами флуоресценции разных видов.

При этом важную роль в эффективности зондирования играет форма диаграммы направленности возбуждаемого флуоресцентного излучения. По форме диаграммы направленности можно судить о типе флуоресцентного вещества [8].

Из численного моделирования в [9] мы знаем, что интенсивность флуоресценции одной капли наибольшая в «обратном» направлении. В то же время в реальной атмосфере мы сталкиваемся с

* Работа выполнена в рамках Государственного задания ИОА СО РАН.

Седimentация наночастиц $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$, синтезированных лазерным методом, и особенности изготовления оптической керамики на их основе*

В.В. Осипов¹, В.А. Шитов¹, Р.Н. Максимов^{1,2}, А.А. Щукина^{1,2}

¹ Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

² Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

Исследовалась возможность синтеза высокопрозрачной керамики на основе оксида иттрия, активированного иттербием ($\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$), в условиях введения в методику изготовления дополнительного этапа седimentации нанопорошка после его прокаливания. Выбранный для исследования нанопорошок был произведен путем лазерной абляции мишени $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$ с последующей конденсацией паров в потоке несущего газа. Полученные таким способом наночастицы имели моноклинную модификацию, а их перевод в кубическую фазу, проводимый при температуре 900 °С в течение 3 ч, сопровождался уменьшением удельной поверхности с 48 до 25 м²/г. Условия седimentации выбирались таким образом, чтобы в результате ее проведения из нанопорошка главным образом извлекались частицы с размерами более 300 нм, а декантированная суспензия после сушки была пригодна для дальнейшего использования. Синтез керамик из таких порошков позволил получить керамические образцы $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$ со средним размером кристаллитов 8 мкм, микротвердостью 7–14 ГПа, пористостью 1.6 ppm и коэффициентом пропускания 82% на длине волны $\lambda = 1070$ нм, что совпадает с теоретической прозрачностью.

Ключевые слова: нанопорошок, седimentация, синтез, керамика, микротвердость, спектр пропускания.

Введение

Оксид иттрия длительное время привлекает внимание исследователей в качестве матрицы твердотельных лазеров из-за высокой теплопроводности, хороших механических характеристик и широкого диапазона прозрачности. Однако приготовление монокристаллов из Y_2O_3 наталкивалось на серьезные трудности, обусловленные его высокой температурой плавления (2439 °С) и наличием обратимого перехода из кубической в гексагональную структуру вблизи 2300 °С, приводящего к разрушению образца при охлаждении. После того, как была разработана технология приготовления высокопрозрачных керамик [1], эти трудности исчезли, поскольку температура приготовления керамик на 700 °С ниже, чем монокристаллов. Это позволило синтезировать высокопрозрачный $\text{Nd:Y}_2\text{O}_3$ активный элемент и получить в нем высокоэффективную генерацию [2]. В то же время более предпочтительным представляется использование в такой среде в качестве активного иона Yb^{3+} из-за отсутствия в этом случае ап-конверсии и наличия широкой полосы усиления, что важно для создания лазеров с широким диапазоном перестройки длины волны излучения и лазеров со сверхкороткой длительностью излучения. С учетом сказанного, в этом направлении выполнен большой объем исследований, что привело к созданию лазеров на $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$ с дифференциальной эффективностью 82.4% [3], оптической эффективностью 69.3% [4], мощностью излучения 70 Вт [5] и длительностью импульсов 152 фс [6]. Однако, согласно литературным данным [3, 4, 7–9], оптическое совершенство полученных на сегодняшний день образцов проявляется лишь локально, и синтезировать $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$ -керамики с полным отсутствием структурных дефектов пока не удалось. В существующих методиках изготовления лазерных $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$ -керамик применяются, в основном, порошки, приготовленные химическим соосаждением [3, 7, 8], самораспространяющимся высокотемпературным [9] или лазерным [4] синтезом, обязательным этапом которых является обжиг, приводящий к образованию жестких агломератов частиц. В случае лазерного синтеза в нанопорошке вдобавок могут присутствовать мелкие капли и обломки мишени. Данный факт оказывает существенное влияние на динамику уплотнения частиц, тем самым предопределяя количество формирующихся дефектов структуры и оптическое качество керамик.

Настоящая работа посвящена исследованию специфики седimentации наночастиц $\text{Yb:Y}_2\text{O}_3$, полученных методом лазерного синтеза, с целью выделения из нанопорошка ультрадисперсной фракции и изучению особенностей изготовления оптической керамики на ее основе.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20074, <https://rscf.ru/project/24-19-20074/>, при финансовой поддержке со стороны Правительства Свердловской области.

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 621.039.518.4

DOI: 10.17223/00213411/67/11/7

**Влияние неопределенности нейтронных данных
на точность расчета критических параметров размножающихся сред
с метастабильным америцием ^{242m}Am ***А.А. Андрианов¹, О.Н. Андрианова¹, М.П. Карпенко¹, И.С. Купцов¹, А.А. Уварова¹

¹ Обнинский институт атомной энергетики –
филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»,
г. Обнинск, Россия

Метастабильный изотоп америция-242 (^{242m}Am) представляет интерес благодаря своим нейтронно-физическим свойствам: аномально высокому сечению деления в тепловой области энергий и высокому выходу нейтронов при делении. Эти особенности обуславливают возможность достижения критической массы размножающихся сред на основе ^{242m}Am всего в несколько десятков граммов. В данной работе представлен обзор доступных экспериментальных нейтронно-физических данных для ^{242m}Am из международных баз данных Агентства по ядерной энергии ОЭСР и МАГАТЭ и проведено сравнение современных оценок нейтронных данных для этого нуклида. Также представлены результаты оценки влияния различных наборов оцененных ядерных данных для ^{242m}Am на расчет эффективного коэффициента размножения бесконечных водных растворов и критических параметров водных растворов с отражателем, содержащих ^{242m}Am . Полученные результаты сравниваются с аналогичными расчетами для основных делящихся топливных нуклидов ^{235}U и ^{239}Pu . Показано, что, несмотря на сближение оценок основных нейтронных сечений ^{242m}Am в различных библиотеках оцененных ядерных данных, сохраняются существенные различия в энергоугловых распределениях реакций нейтронных взаимодействий, спектрах нейтронов деления и средних числах нейтронов, испускаемых в процессе деления. Это приводит к значительному (в несколько раз по сравнению с основными делящимися нуклидами ^{235}U и ^{239}Pu) увеличению относительного разброса расчетных значений критических параметров размножающихся сред с ^{242m}Am , полученных с использованием различных наборов нейтронных данных.

Ключевые слова: метастабильный изотоп америция-242, экспериментальные данные, нейтронные сечения, оцененные ядерные данные, критические параметры, неопределенность ядерных данных.

Введение

Интерес к метастабильному изотопу америция 242 (^{242m}Am) обусловлен его уникальными нейтронно-физическими свойствами: за счет аномально высокого сечения деления в тепловой области энергии, а также высокого выхода нейтронов при его делении критическая масса размножающихся сред на основе данного нуклида может составлять всего порядка десятка граммов. В этой связи данный нуклид потенциально рассматривается как перспективный кандидат для производства топлива реакторных установок нового поколения для различных сфер применения: реакторы сверхмалой мощности для изолированных удаленных потребителей, медицинские реакторы для нейтронной терапии, атомные источники с прямым преобразованием тепловой энергии в электрическую, реакторы ядерных энергетических установок для космических и летательных аппаратов и пр. [1–3]. Однако высокая стоимость получения ^{242m}Am в необходимых количествах является основным сдерживающим фактором для его промышленного применения [1–5].

В период всплеска интереса к этой теме (1995–2005 гг.) нейтронные данные по ^{242m}Am , необходимые для расчета критических параметров сред и оценки эффективности его наработки, характеризовались значительной неопределенностью. Это приводило к существенному разбросу расчетных нейтронно-физических характеристик целевых систем. В последние годы проведены новые дифференциальные эксперименты по измерению характеристик взаимодействия нейтронов с ядрами ^{242m}Am и подготовлены новые оценки нейтронно-физических данных и их погрешностей. Эти данные потенциально позволят повысить точность расчетного предсказания критических па-

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10154, <https://www.rscf.ru/project/23-29-10154>.

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 621.382.2

DOI: 10.17223/00213411/67/11/8

**Ферромагнитный нитрид галлия,
легированный примесями переходных элементов,
в качестве материала для спинтроники*****С.С. Хлудков¹, И.А. Прудаев¹, О.П. Толбанов¹, И.В. Ивонин¹**¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Приведен обзор литературы по магнитным свойствам GaN, легированного железом, хромом и другими переходными элементами. По данным теоретических и экспериментальных исследований, GaN, легированный переходными элементами, обладает ферромагнитными свойствами с температурой Кюри выше комнатной и является материалом, перспективным для спинтроники.

Ключевые слова: нитрид галлия, ферромагнитные свойства, примеси переходных элементов, железо, хром.

Введение

Нитрид галлия является одним из основных полупроводниковых материалов, используемых на практике. Основная область его применения – оптоэлектроника. В последнее время большое внимание уделяется изучению GaN как материала, перспективного для спинтроники. Обычно ферромагнитные свойства полупроводниковым материалам $A^{III}B^V$ придают путем введения примесей, прежде всего, примесей переходных элементов.

В настоящем обзоре представлены результаты по получению и исследованию магнитных свойств GaN, легированного примесями переходных элементов, в первую очередь, железом и хромом, отмечены перспективы использования его в качестве материала для спинтроники.

1. Магнитные свойства GaN, легированного железом

Легирование GaN примесью Fe вначале проводили с целью получения полуизолирующего подложечного материала для СВЧ-приборов [1–5] и лишь позднее – для придания ему ферромагнитных свойств.

В ряде работ [2, 4–6] изучены физические свойства эпитаксиальных пленок GaN, легированных Fe, знание которых необходимо при получении как полуизолирующего, так и ферромагнитного материала. По данным [6], Fe в GaN занимает узлы Ga и действует как глубокий акцептор с энергией $E_V + 2.5$ эВ. По данным [4], для Fe в GaN наблюдаются два уровня: глубокий акцепторный уровень на 0.75 эВ выше вершины валентной зоны и глубокий донорный уровень на 1.39 эВ ниже дна зоны проводимости. Легирование GaN железом позволяет получить полуизолирующие подложки для электронных приборов с высоким сопротивлением: $7 \cdot 10^9$ Ом·см [3], $1.3 \cdot 10^9$ Ом·см [5]. При этом отжиг при температурах до 1050 °C не ухудшает изоляционных свойств материала.

Исследования GaN:Fe как многообещающего материала для спинтроники начались несколько позднее, чем GaN:Mn [7, 8]. GaN, легированный Fe, привлекает большое внимание как магнитный полупроводник (в англоязычной литературе – DMS) еще и потому, что в GaN атомы Fe замещают узлы Ga с их 3p- и 5d-электронной конфигурацией и являются идеальной системой для p-d-взаимодействия [6, 8–11].

* Работа поддержана грантом в рамках Постановления Правительства Российской Федерации № 220 от 09.04.2010 (Соглашение № 075-15-2022-1132 от 01.06.2022).

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.216.2

DOI: 10.17223/00213411/67/11/9

Влияние углеродных квантовых точек в матрице поливинилбутираля на электрофизические свойства солнечных элементовВ.Н. Корчагин^{1,2}, И.А. Сысоев¹, А.С. Пашенко³, В.И. Ратушный⁴¹ Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь, Россия² Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, Ростовская область, г. Новочеркасск, Россия³ Южный научный центр Российской академии наук, г. Ростов-на-Дону, Россия⁴ Волгодонский инженерно-технический институт НИЯУ МИФИ, Ростовская область, г. Волгодонск, Россия

Исследовано влияние покрытий на основе углеродных квантовых точек в пленке поливинилбутираля, находящихся на фронтальной поверхности кремниевого солнечного элемента. Результаты исследования показали, что углеродные квантовые точки эффективно поглощают свет в диапазоне 300–500 нм и это приводит к увеличению тока короткого замыкания на 0.1–0.25 мА кремниевого солнечного элемента площадью 12 см². В области 600–850 нм отмечается снижение тока короткого замыкания в среднем на 0.2 мА, что можно объяснить коагуляцией некоторой части углеродных квантовых точек. Таким образом, использование покрытий на основе поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками представляет собой перспективное и актуальное решение для улучшения характеристик солнечных элементов.

Ключевые слова: углеродные квантовые точки, функциональные покрытия, тонкие пленки, поливинилбутираль, перистальтический насос, атомно-силовой микроскоп.

Введение

Существует много работ по исследованию и разработке оптимального функционального покрытия, которое должно быть недорогим, эффективным и дополнительно оказывать защиту солнечным элементам [1–5]. Вместе с тем теоретический предел по КПД кремниевых солнечных элементов почти достигнут. Существующие высокоэффективные солнечные элементы (каскадные) с КПД 28–30%, используемые для питания электроэнергией космических спутников, на два порядка дороже кремниевых. Поэтому использование дополнительных функциональных покрытий с незначительной стоимостью и возможностью увеличения параметров кремниевых солнечных элементов является актуальной задачей.

Данная работа посвящена исследованию влияния углеродных квантовых точек (УКТ) в пленке поливинилбутираля (ПВБ) на изменения электрофизических параметров кремниевых солнечных элементов (КСЭ) [6–8]. УКТ обладают уникальными оптическими и электронными свойствами, которые делают их перспективным материалом для применения в технологиях солнечной энергетики. Углеродные квантовые точки поглощают свет в ультрафиолетовой области и переизлучают его в более длинноволновом диапазоне, что способствует увеличению количества квантов света в диапазоне эффективного их поглощения кремниевым солнечным элементом. Пленочное покрытие поливинилбутираля достаточно устойчиво к воздействию факторов окружающей среды, таких как влага, пыль, высокая температура, солнечная радиация, что совместно с УКТ делает их перспективными материалами в качестве защитного покрытия солнечных элементов. Согласно работе [6], углеродные квантовые точки повышают электрическую проводимость пленки ПВБ и снижают рекомбинацию носителей заряда в солнечных элементах, что в свою очередь положительно сказывается на их эффективности. Таким образом, использование углеродных квантовых точек в качестве функционального покрытия для солнечных элементов представляет собой перспективное направление для применения в области солнечной энергетики. Это направление исследований может привести к разработке более эффективных и долговечных материалов в фотовольтаике, способных удовлетворить потребности в чистой энергии и уменьшить воздействие на окружающую среду традиционных источников энергии.

ТермоЭДС графена: роль примесных атомов и структурного беспорядка*А.А. Белослудцева¹, Н.Г. Бобенко¹, Т.А. Сапежинская¹¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Проведено теоретическое исследование влияния примесных атомов и дефектов на термоЭДС однослойного графена. Рассмотрены температурные зависимости термоЭДС при различных концентрациях и расположении примесей. Показано, что структурные особенности изменяют термоЭДС вплоть до смены знака и изменения на несколько порядков. Обнаруженная взаимосвязь термоЭДС и структуры графена важна для управления его термоэлектрическими свойствами.

Ключевые слова: однослойный графен, термоЭДС, примесные атомы, структурные дефекты, термоэлектрические свойства, температурная зависимость, структурный беспорядок.

Термоэлектрические свойства широко исследуются для различных материалов [1, 2]. В частности, одним из перспективных материалов для термоэлектрических приложений является графен [3]. Одним из ключевых показателей эффективности для таких приложений является безразмерный параметр ZT , определяющий способность материала преобразовывать тепловую энергию в электрическую. Этот параметр выражается формулой $ZT = S^2 \sigma T / k$ [4], где S – коэффициент Зеебека, σ – электропроводность, T – абсолютная температура, а k – теплопроводность материала. В настоящее время лучшие термоэлектрические материалы достигают значений ZT , близких к 1 при комнатной температуре [4]. Существуют данные о возможных значениях ZT порядка 2–3, но такие материалы пока не доступны в коммерческом производстве при комнатной температуре. Остановимся более подробно на возможных вариациях S и ее влиянии на ZT . В работе [3] было исследовано влияние концентрации кремния на термоэлектродвижущую силу (термоЭДС) однослойного графена, выращенного методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) на медной подложке. Выявлено, что добавление 2.59 ат.% кремния приводит к двукратному снижению термоЭДС, что в совокупности с другими факторами приводит к 17-кратному увеличению ZT по сравнению с чистым графеном. Также показано, что при определенной температуре термоЭДС графена может изменять свой знак с положительного на отрицательный [5], что связывается с чувствительностью графена к легированию поверхностного слоя различными газами.

Таким образом, экспериментальные исследования показывают, что термоЭДС однослойного графена может значительно варьироваться в зависимости от концентрации, типа и расположения примесных атомов, вплоть до изменения знака и разброса значений на несколько порядков, что оказывает сильное влияние на значение ZT . Однако на данный момент не существует единого теоретического объяснения выявленного разброса значений термоЭДС. В связи с этим цель настоящей работы заключается в теоретическом исследовании влияния примесных атомов и структурных дефектов на термоЭДС однослойного графена.

Расчет температурной зависимости $S(T)$ для однослойного графена со структурными дефектами типа ближнего порядка был выполнен с использованием модели, ранее примененной для углеродных нанотрубок с аналогичными дефектами [6]. Предложенный в [6] подход позволяет оценить влияние структурного беспорядка на термоэлектрические свойства графена. В модели [6] структурный беспорядок качественно и количественно описывается параметром ближнего порядка α . Для бездефектной структуры $\alpha = 0$. В случае, если топологические дефекты находятся в первой координационной сфере (КС) или атомы другого типа расположены во второй КС, $\alpha > 0$. Если чужеродные атомы присутствуют в первой КС, то $\alpha < 0$.

Вычисления термоЭДС графена проводились по следующему выражению:

$$S(T) = -\frac{\pi^2 T}{3e} \frac{d \ln J}{d \varepsilon_F},$$

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2022-0002.

Влияние содержания Si в покрытиях Ti–Al–Ta–Si–N^{*} на их разрушение при одноосном растяжении

Е.Д. Кузьминов¹, А.Р. Шугуров¹, А.Ю. Дербин¹,
А.В. Панин¹, А.И. Дмитриев¹

¹ Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Исследовано влияние содержания Si на закономерности деформации и разрушения покрытий $Ti_{1-x-y-z}Al_xTa_ySi_zN$ при одноосном растяжении. Методом наноиндентирования показано, что максимальной твердостью обладают покрытия с $z = 0.10$, что вызвано образованием в них тонкой зернограничной аморфной фазы SiN_x . В то же время наиболее высокую стойкость к разрушению и адгезионную прочность показало покрытие $Ti_{0.35}Al_{0.40}Ta_{0.10}Si_{0.15}N$. Установлено, что этот эффект обусловлен подавлением в данном покрытии роста столбчатых зерен и формированием двухфазной аморфно-нанокристаллической структуры, которая затрудняет распространение трещин.

Ключевые слова: покрытия Ti–Al–Ta–Si–N, магнетронное распыление, нанокристаллическая структура, одноосное растяжение, адгезия.

Введение

Благодаря своей высокой твердости и стойкости к окислению композиция Ti–Al–N получила широкое распространение в качестве материала для защитных покрытий в обрабатывающей, аэрокосмической, автомобильной и других областях промышленности. Однако недостатками данных покрытий являются их невысокая трещиностойкость, а также резкое снижение твердости и износостойкости при температурах свыше 900 °С вследствие спинодального разложения метастабильного твердого раствора Ti–Al–N и образования мягкой гексагональной фазы вюрцита (w-AlN) [1]. Одним из способов улучшения свойств покрытий Ti–Al–N является их легирование дополнительными химическими элементами. В частности, известно, что введение Ta приводит к изменению электронной структуры твердого раствора Ti–Al–N и увеличению металличности химической связи, что обуславливает существенное увеличение трещиностойкости, стойкости к окислению и термической стабильности покрытий Ti–Al–Ta–N [2, 3]. В то же время данные покрытия обычно имеют столбчатую микроструктуру [4], которая способствует легкому распространению трещин по границам столбчатых зерен, что может приводить к отслоению покрытий и, как следствие, к увеличению износа инструмента [5].

На сегодняшний день можно выделить два основных направления решения данной проблемы. Первое – это создание многослойных покрытий, состоящих из чередующихся слоев керамических и металлических материалов [6]. Тонкие металлические слои подавляют псевдоэпитаксиальный рост керамических слоев, предотвращая формирование столбчатых зерен. Кроме того, наличие многослойной архитектуры позволяет обеспечить эффективную диссипацию энергии посредством отклонения трещин на границах раздела между слоями, а также приводит к резкому росту энергии разрушения при распространении трещины в металлических слоях вследствие образования зоны пластической деформации при ее вершине [7]. Второй способ заключается в формировании двухфазной аморфно-нанокристаллической структуры покрытий путем их легирования дополнительными химическими элементами, например Si. В работах [8–10] было показано, что легирование Si покрытий на основе TiN приводит к одновременному увеличению их твердости, трещиностойкости и адгезионной прочности. Данный эффект обусловлен подавлением формирования столбчатой структуры, уменьшением размера зерен, которое сопровождается ростом объемной доли границ зерен, а также образованием аморфной зернограничной фазы SiN_x . Все указанные факторы способствуют отклонению трещин и снижению скорости их распространения в глубь покрытий, а также по границе раздела покрытие/подложка [11]. Предыдущие исследования [12] показали, что с увеличением содержания Si в покрытиях Ti–Al–Ta–Si–N также наблюдается эволюция микроструктуры от однофазной столбчатой к двухфазной аморфно-нанокристаллической. Поэтому

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00441).

Влияние толщины костного цемента на процессы остеointеграции эндопротеза тазобедренного сустава. Макроскопическое моделирование

Г.М. Еремина¹, И.П. Мартышина¹

¹ *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия*

При дегенеративных изменениях тканей и травмах головки тазобедренного сустава применяют поверхностное эндопротезирование. При установке данного вида импланта для закрепления его штифта применяют два типа фиксации: цементную и бесцементную. В случае цементной фиксации толщина цементной прослойки может существенно влиять на механическое поведение проксимального отдела бедренной кости, процессы оссификации и риск асептического расшатывания. Для исследования влияния толщины цемента на процессы остеointеграции эндопротеза проведено компьютерное моделирование механического поведения трехмерного модельного образца проксимального отдела бедренной кости с поверхностным эндопротезом при физиологических нагрузках. В результате анализа данных моделирования с позиций механобиологических принципов установлена оптимальная толщина цементной прослойки порядка 700 мкм.

Ключевые слова: *эндопротез, костная ткань, биомеханическая совместимость, численное моделирование.*

Введение

Остеоартрит и остеонекроз головки бедренной кости требуют, как правило, оперативного лечения. Широкое распространение получило поверхностное эндопротезирование бедренной головки, при котором сохраняется шейка бедра [1]. Существуют два способа фиксации бедренного компонента этого эндопротеза (ЭП): цементный и бесцементный [2]. Преимуществом цементного способа является снижение скачка напряжений в контактной области (stress shielding эффект), за счет чего минимизируются риски резорбции окружающих костных тканей. Однако, как показали последние исследования, неверный выбор толщины цемента может приводить к асептическому расшатыванию штифта импланта [3]. Тем не менее цементный способ способствует увеличению контактной площади эндопротеза с костью, а также позволяет заполнять дефекты костной ткани вблизи области имплантации.

Наиболее предпочтительным материалом для фиксации протезов крупных суставов является костный цемент на основе полиметилметакрилата (ПММА) [4]. Поскольку ПММА биоинертен, на его границе с костью формируется промежуточный слой, состоящий из фиброзной ткани [5]. Таким образом, вокруг импланта образуется многослойная «композиционная» структура.

Для исследования процессов остеointеграции эндопротезов часто применяют компьютерное моделирование. При этом механическое поведение материалов может рассматриваться на мезо- и макроуровнях. Моделирование на мезоуровне позволяет детально изучить влияние структурных особенностей контактной области на условия остеointеграции эндопротеза. Однако такой подход позволяет лишь косвенно учитывать условия реального нагружения. Моделирование на макроуровне позволяет достаточно точно имитировать условия физиологического воздействия на тазобедренный сустав и оценить напряженное состояние в области контакта импланта с костью. При этом послойная структура контактной зоны учитывается неявно, что не позволяет определить условия для остеointеграции в зоне цементной прослойки и окружающей костной ткани.

Целью данной работы является разработка численной макроскопической модели бедренного сустава человека с поверхностным эндопротезом, где явно учитывается слоистая структура контактной области кость – цемент – эндопротез. На основе моделирования напряженно-деформированного состояния кости при физиологическом нагружении определена оптимальная толщина цементной прослойки, рекомендуемая для крепления поверхностного эндопротеза головки бедренной кости.

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2021-0009.

Ежемесячный научный журнал

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА
IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

2024. Т. 67. № 11

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 14.11.2024. Выпуск в свет 22.11.2024. Заказ № 6097.
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая.
Усл. п. л. 13.25. Уч.-изд. л. 14.84. 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

