ISSN 0021-3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ

MARKED FOR CONTRACTOR

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



ИЗДАНИЕ ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021-3411

известия вузов ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

Том 68

Апрель, 2025

№ 4 (809)

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 Козырев А.В., проф. (зам. гл. редактора), Томск, Россия Пермякова Л.В. (отв. секретарь), Томск, Россия Алексеенко 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 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 Kovalevskava 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 Tchaikovskava O.N., Professor, Tomsk, Russia Cherepanov V.N., Professor, Tomsk, Russia Chumlvakov 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 – <u>бесплатная</u>.

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

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

Вологжин М.А., Краснобаева Л.А., Шаповалов А.В. Исследование динамики конформационного возмущения в молекуле ДНК в модели Муто	5
Зарипов Р.Г. Обобщение соотношения неопределенностей Мандельштама – Тамма с высшими центральными моментами	.14
Бреев А.И., Чалый Н.А. Спектр квазисвязанных состояний в графене в окрестности сверхкритической кулоновской примеси	.21

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

nie of the position of the position of the second s	
отражения от слоя магнитной жидкости с добавлением МУНТ2	28
Алмаев Д.А., Цымбалов А.В., Копьев В.В., Кукенов О.И. Фотодетекторы УФ-излучения на основе пленок Ga ₂ O ₃ с высоким быстволействием	35

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Безлепкина Н.П., Базыль О.К., Чаиковская О.Н., Маиер І.В. Природа электронно-возоужденных состоянии и	
спектрально-люминесцентные свойства сульфаниламида в воде	42
Валиулина Л.И., Валиев Р.Р., Насибуллин Р.Т., Черепанов В.Н. Предсказание константы скорости внутренней конверсии методом машинного обучения	53

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

Гладков С.С)., 30 Ay	иг. О новом	гранич	чном условии в за	адаче обтекан	ия шара				•••••		60
Мельников	А.Ю.,	Звегинцев	В.И.	Классификация	дозвуковых	режимов	течения	вязкого	газа	в	канале	
постоянн	ого сече	ния										73

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Саммель А.Ю., Скосырский А.Б., Дьячковский А.С., Ищенко А.Н., Буркин В.В., Кудрявцев В.А., Степанов Е.Ю.,	
Чупашев А.В. Особенности механизма высокоскоростного проникания цилиндрических ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама в металлическую преграду	81
Грабко Г.И., Басс М.С., Батухтин С.Г. Определение параметров энергетического спектра локализованных состояний сэндвич-структуры Al-Pb ₃ O ₄ -Al	87
Точиев Дж.С., Долбин И.В., Сапаев Х.Х. Теоретическое описание упругости композитов на основе полиамида-6	
в рамках модели «термита»	94

CONTENTS

ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

Vologzhin M.A., Krasnobaeva L.A., Shapovalov A.V. Study of the dynamics of conformational perturbation in the DNA molecule of the Muto model	5
Zaripov R.G. Generalization of the Mandelstam-Tamm uncertainty relation with higher central moments	14
Breev A.I., Chalyi N.A. Spectrum of quasibound states in graphene in the vicinity of a supercritical Coulomb impurity	21
PHYSICS OF SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS	
Pavlova A.A., Suslyaev V.I., Korovin E.Yu., Mazilov D.A. Investigation of reflection coefficient from ferrofluid layer with the addition of MWCNTs under the application of a magnetic field	28
Almaev D.A., Tsymbalov A.V., Kopyev V.V., Kukenov O.I. UV-photodetectors based on GA ₂ O ₃ films with high-speed performance	35
OPTICS AND SPECTROSCOPY	
Bezlepkina N.P., Bazyl O.K., Tchaikovskaya O.N., Mayer G.V. Nature of electronically excited states and spectral- luminescent properties of sulfonamide in water	42
Valiulina L.I., Valiev R.R., Nasibullin R.T., Cherepanov V.N. Machine learning prediction of the internal conversion rate constant	53
THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS	
Gladkov S.O., Zaw Aung. On a new boundary condition in the problem of flow around a sphere	60
Melnikov A.Yu., Zvegintsev V.I. Classification of subsonic flow regimes of viscous gas in a constant cross-section channel	73

CONDENSED-STATE PHYSICS

Sammel A.Yu., Skosyrsky A.B., Dyachkovskiy A.S., Ishchenko A.N., Burkin V.V., Kudryavtsev V.A., Stepanov E.Y., Chupashev A.V. Features of the mechanism of high-speed penetration of cylindrical strikers made of tungsten-based heavy alloy into a metal obstacle.	81
Grabko G.I., Bass M.S., Batukhtin S.G. Determination of the parameters of the energy spectrum of localized states of the sandwich structure Al–Pb ₃ O ₄ –Al.	87
Tochiev D.S., Dolbin I.V., Sapaev Kh.Kh. The theoretical description of elasticity of composites on the basis of polyamide-6 within the frameworks of «termite» model	94

Физика элементарных частиц и теория поля

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 530.182

DOI: 10.17223/00213411/68/4/1

Исследование динамики конформационного возмущения в молекуле ДНК в модели Муто^{*}

М.А. Вологжин¹, Л.А. Краснобаева^{1,2}, А.В. Шаповалов^{1,3}

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия ² Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия

³ Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

Динамика локальных конформационных возмущений (ЛКВ) в молекуле ДНК исследуется с помощью модели Муто с потенциалом Тоды и потенциалом Леннарда-Джонса методами вейвлет-преобразований. Анализ решений уравнений однородной модели Муто, проведенный с помощью численных реализаций дискретного и непрерывного вейвлет-преобразований, приводит к выводу о возникновении и распространении вдоль цепочки атомов молекулы ДНК локальных конформационных возмущений, которые можно рассматривать как аналоги солитонов в модели Инглэндера, построенной на основе уравнения синус-Гордона. Получены оценки скорости распространения ЛКВ, проведена оценка алгоритмической сложности численных реализаций.

Ключевые слова: ДНК, репликация, транскрипция, модель Муто, открытое состояние, конформационное возмущение, солитон, вейвлет-анализ.

Введение

В исследованиях механизмов биологического функционирования молекул ДНК локализованные волновые возмущения, распространяющиеся вдоль основной и комплементарной полинуклеотидных цепочек ДНК, являются ответственными за конформационные изменения в молекуле ДНК, включая такие фундаментальные явления, как транскрипция, трансляция, денатурация [1–3]. Для локального волнового возмущения в молекуле ДНК часто используется термин «открытое состояние», или локальное конформационное возмущение (ЛКВ) [4].

Моделирование динамики ЛКВ в молекуле ДНК на основе теории солитонов началось с работ [5, 6], в которых солитонные решения уравнения синус-Гордона рассматриваются как математическое представление ЛКВ. В последующих работах, например [7–9], учитывалось воздействие эффектов диссипации и внешнего поля на динамику распространения ЛКВ вдоль последовательности молекулы ДНК.

Модель Муто является классической плоской моделью молекулы ДНК. Выбор этой модели в качестве объекта исследования обусловлен сравнительно более простой геометрией по сравнению с известной моделью Инглэндера, являющейся объемной моделью. При подтверждении существования солитонов в динамике модели последующая ее континуализация может предоставить модель, требующую сравнительно меньше вычислительных мощностей, чем в модели Инглэндера.

Исследуемая в данной работе модель является дискретной, и уравнения модели точно не интегрируются методом обратной задачи рассеяния, в отличие от моделей на основе уравнения синус-Гордона [10]. Поэтому для анализа уравнений модели Муто [11, 12] в настоящей работе применяются методы вейвлет-анализа [13], с помощью которых изучается наличие конформационных возмущений. Динамика плоских моделей является сравнительно проще динамики объемных моделей, а подтверждение существования солитонов в рамках изучаемой модели позволит расширить ее границы применения.

^{*} Исследования выполнены при поддержке гранта Правительства Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-009 от 28.02.2025 г.).

Физика элементарных частиц и теория поля

УДК 536.75

DOI: 10.17223/00213411/68/4/2

Обобщение соотношения неопределенностей Мандельштама – Тамма с высшими центральными моментами

Р.Г. Зарипов¹

¹ Институт механики и машиностроения – структурное подразделение ФИЦ «Казанский научный центр Российской академии наук», г. Казань, Россия

Получены новые и усиленные известные соотношения для квантовых неравновесных систем. Рассматривается матричный аналог соотношения неопределенностей Робертсона – Шредингера для описания состояний квантовых систем с высшими центральными моментами физических величин. Приводится обобщение соотношения Мандельштама – Тамма с четными центральными моментами.

Ключевые слова: соотношение неопределенностей, матрица, центральные моменты.

Введение

Вопросы совместных измерений физических величин, ограниченных соотношениями неопределенностей, широко обсуждались, начиная с неравенства Гейзенберга [1] для пары координата – импульс. Строгое доказательство приводится в работе Кеннарда [2]. Обобщение дается неравенством Робертсона – Шредингера [3, 4] с учетом корреляций в различных парах величин. Особое место занимает пара энергия – время, которая изучалась в работе Мандельштама – Тамма [5]. Значительный прогресс в этом направлении достигнут при применении идей несмещенного квантового оценивания в исследованиях Хелстрома [6]. Различные обобщения соотношений неопределенностей, интерпретации и их приложения рассматривались во многих работах. Среди приложений можно отметить оценивание предельной величины достижимой разрешающей способности к воздействию малых сил, определение неопределенностей времени для когерентных состояний квантового объекта, квантовое несмещенное оценивание измеряемых параметров и др. Обозначим некоторые исследования, в которых даются принципиально новые подходы к рассматриваемым вопросам [7–12]. В работе [13] рассматриваются соотношения неопределенностей для трех величин и приводится матричный аналог со вторыми центральными моментами. Далее, в работе [14] изучаются соотношения неопределенностей при термодинамическом описании с высшими центральными моментами, дается оценивание параметра – обратная температура. В продолжение работ [13, 14] целью настоящей работы является изучение неустранимых ограничений, связанных с соотношениями неопределенностей, в матричном представлении с высшими центральными моментами физических величин и соответствующим обобщением неравенства Мандельштама – Тамма.

1. Усиленные соотношения неопределенностей

Рассмотрим квантовую систему, описываемую нормированным оператором плотности смешанного состояния р и эрмитовыми операторами X, Y. Для флуктуаций и средних значений по ансамблю имеем известные выражения

$$\Delta X = X - E(X), \ E(X) = TrX\rho,$$

$$\Delta Y = Y - E(Y), \ E(Y) = TrY\rho.$$
(1)

Центральные моменты *п*-порядка и корреляционные моменты равны

$$E\left[\left(\Delta X\right)^{n}\right] = Tr\left[\left(\Delta X\right)^{n}\rho\right],$$

$$E\left[\left(\Delta Y\right)^{n}\right] = Tr\left[\left(\Delta Y\right)^{n}\rho\right],$$

$$E\left(\frac{\left\{\left(\Delta X\right)^{m},\left(\Delta Y\right)^{n}\right\}}{2}\right] = E\left[\frac{\left(\Delta X\right)^{m}\left(\Delta Y\right)^{n} + \left(\Delta Y\right)^{n}\left(\Delta X\right)^{m}}{2}\right],$$
(2)

где $\{(\Delta X)^m, (\Delta Y)^n\}$ есть антикоммутатор.

Полная версия: https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725

Физика элементарных частиц и теория поля

УДК 530.182

DOI: 10.17223/00213411/68/4/3

Спектр квазисвязанных состояний в графене в окрестности сверхкритической кулоновской примеси*

А.И. Бреев¹, Н.А. Чалый¹

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

Исследован спектр квазисвязанных состояний дираковских квазичастиц в графене в сверхкритическом режиме. Определение квазисвязанных состояний через производную спектральной функции самосопряженного дираковского парциального гамильтониана позволило учесть неоднозначность определения гамильтониана в окрестности одиночной кулоновской примеси. Показано, что квазисвязанные состояния отвечают точкам максимума производной спектральной функции и получена их связь с комплексными решениями спектрального уравнения, отвечающего сверхкритической кулоновской примеси.

Ключевые слова: графен, безмассовые носители заряда, атомный коллапс, квазисвязанные состояния, кулоновская примесь, сверхкритический режим, самосопряженные расширения.

Введение

Нерелятивистская квантовая механика предсказывает [1–3], что, когда заряд сверхтяжелого атомного ядра превышает определенный порог, возникающее в результате сильное кулоновское поле вызывает необычное состояние атомного коллапса. Квазиклассическая интерпретация таких состояний состоит в том, что траектория электрона имеет форму спирали, закручивающуюся к ядру, тогда как в это же время из ядра вылетает позитрон по траектории той же формы. Коллапс имеет место там, где угловой момент электрона достаточно мал и благодаря этому все легкие ядра с зарядом $Z < Z_c$, $Z_c = 137$, не подвержены этому эффекту.

Отметим, что носители заряда (квазичастицы) в графене в низкоэнергетическом приближении ведут себя как дираковские безмассовые фермионы [4]. Уравнение Дирака для графена, используемое для описания таких квазичастиц, отличается от обычного уравнения Дирака тем, что носители заряда обладают линейным законом дисперсии, а также наличием двух долин (точек Дирака) в зонной структуре. Помимо этого, квазичастицы в графене живут в двумерном пространстве, а роль «скорости света» играет скорость Ферми v_F .

В окрестности кулоновской примеси в графене также возникает эффект, аналогичный атомному коллапсу [5]. Несмотря на то, что безмассовые частицы не могут образовывать связанные состояния, в случае, когда безразмерная величина силы кулоновского потенциала $g = Ze^2/\epsilon\hbar v_F$ превышает некоторое критическое значение g_c , возникает бесконечное семейство квазисвязанных состояний. Такие состояния являются нестабильными и имеют короткое время жизни, а также, подобно связанным состояниям, имеют дискретный спектр. В случае $g > g_c$ в окрестности кулоновской примеси возникают резонансы [4–6] и сама примесь называется сверхкритической. В графене критическое значение g может быть достигнуто уже для заряда примеси Z около единицы. С такими зарядами гораздо проще проводить эксперименты. Например, аналог эффекта атомного коллапса в графене был подтвержден экспериментально [7, 8]. Отметим, что оператор Дирака в окрестности кулоновской примеси неопределен однозначно и допускает семейство самосопряженных (с.с.) расширений.

В данной работе исследуются спектры квазисвязанных состояний на основе свойств производной спектральной функции, которая определяет спектр оператора Дирака [9, 10]. Показано, что квазисвязанные состояния отвечают точкам максимума производной спектральной функции и получена их связь с комплексными решениями спектрального уравнения, отвечающего сверхкритической кулоновской примеси.

^{*} Исследование выполнено при частичной поддержке гранта Правительства Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-009 от 28.02.2025 г.).

Физика полупроводников и диэлектриков

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 537.6/.8

DOI: 10.17223/00213411/68/4/4

Расчет микроволнового спектра коэффициента отражения от слоя магнитной жидкости с добавлением МУНТ^{*}

А.А. Павлова¹, В.И. Сусляев¹, Е.Ю. Коровин¹, Д.А. Мазилов¹

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

Методом математического моделирования исследуется возможность применения магнитных жидкостей (МЖ) для экранирования электромагнитного излучения на высоких частотах. Основанием для моделирования коэффициента отражения от плоского слоя МЖ являются частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости (КДП), измеренные в частотном диапазоне 1 кГц – 2 МГц. Исследованы спектры КДП магнитных жидкостей состава: синтетическое масло + тонер H1010 (магнетит) + многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) с концентрациями 0.5 и 0.75 вес.%. Спектры коэффициента отражения рассчитаны для плоских образцов различной толщины с концентрацией МУНТ в микроволновой области частот. Для расчета использовано плосковолновое приближение. Получены новые результаты, доказывающие перспективность использования МЖ для решения задач обеспечения электромагнитной совместимости и безопасности жизнедеятельности при использовании современных высокочастотных радиоэлектронных устройств. Обсуждаются перспективы дальнейших исследований.

Ключевые слова: магнитная жидкость, магнетит, МУНТ, магнитная проницаемость, диэлектрическая проницаемость, импедансный метод, математическое моделирование, электромагнитный отклик, экранирование.

Введение

Исследование фундаментальных физических процессов, определяющих макроскопические свойства гетерогенных сред, дает необходимую информацию для использования таких материалов в практических применениях. В последнее время большой интерес вызывают магнитные жидкости (МЖ), сочетающие текучесть с особенностями нанодисперсных систем, интенсивность изучения физико-химических свойств которых нарастает во всем мире [1-4]. Дисперсионная среда из магнитных масел существенно снижает трение между металлическими поверхностями при соответствующем выборе размера частиц и концентрации их в МЖ [5]. Повышение вязкости МЖ в магнитном поле используется в демпфирующих устройствах [6]. В медицине МЖ используют для адресной доставки лекарственных препаратов и в гипертермической методике борьбы со злокачественными образованиями [7]. Обнаружен эффект управления теплопроводностью МЖ путем воздействия магнитным полем [4]. Магнитная жидкость с электродинамической позиции относится к классу магнитодиэлектрических материалов с переменной сквозной проводимостью, поэтому интересным современным направлением исследования МЖ является изучение ее взаимодействия с электромагнитным излучением высоких частот. Очевидно, эффективность такого взаимодействия во многом определяется свойствами малых частиц, их диполь-дипольным взаимодействием и связанным с ним структурным состоянием системы [1]. В большей степени исследовались магнитные эффекты, например, проверка выполнения в МЖ закона Кюри [8], определение угла поворота плоскости поляризации (эффект Фарадея) в намагниченной МЖ [9], который используется для создания невзаимных устройств и фазовращателей. Эффект ферромагнитного резонанса в МЖ использован для создания магнитных поглотителей [10] с управляемым положением частотной области с максимальным поглощением. Диэлектрические свойства МЖ неоднократно обсуждались в литературных источниках [4, 11–14]. Показано, что диэлектрическая проницаемость возрастает при параллельной ориентации силовых линий магнитного и электрического полей [11] за счет формирования цепочных структур из магнитных частиц [12]. Управление величинами комплексной диэлектрической проницаемости можно использовать для целенаправленного создания экранирующих устройств высокочастотного диапазона. Эффективность экранирования магнитными жидкостями можно повысить, добавив в МЖ поглощающие углеродные материалы [15]. Предпоч-

^{*} Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ № 23-29-00686.

Физика полупроводников и диэлектриков

УДК 621.383.45

Фотодетекторы УФ-излучения на основе пленок Ga₂O₃ с высоким быстродействием

Д.А. Алмаев^{1,2}, А.В. Цымбалов¹, В.В. Копьев¹, О.И. Кукенов¹

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия ² Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

Представлены результаты исследования фотоэлектрических характеристик структур Pt/Ga₂O₃ при воздействии ультрафиолетовым (УФ) излучением с длиной волны $\lambda = 254$ нм. Рассмотрено влияние температуры отжига в атмосфере воздуха и времени роста пленок Ga₂O₃ на фоточувствительность и быстродействие фотодетекторов на их основе. Пленки Ga₂O₃ были получены методом ВЧ-магнетронного распыления на сапфировые подложки с базовой ориентацией (0001). Пленки Ga₂O₃ характеризуются высокой прозрачностью в длинноволновом УФ- (UVA) и видимом (VIS) диапазонах. Максимальные значения токовой монохроматической чувствительности и отношения сигнал/шум характерны при напряжении 100 В и составили 140.6 мА/Вт и 2·10⁵ отн. ед. соответственно. Структуры обладают высоким быстродействием, времена отклика и восстановления составили 7.6 и 2.0 мс соответственно при напряжении 10 В. В работе показана связь между фоточувствительностью и быстродействием фотодетекторов.

Ключевые слова: фотодетектор, оксид галлия, ВЧ-магнетронное распыление, УФ-излучение, быстродействие.

Введение

Оксид галлия (Ga₂O₃) является ультраширокозонным ($E_g = 4.4-5.3$ эВ) полупроводником *n*-типа проводимости, который имеет уникальные физико-химические свойства, удовлетворяющие требованиям современной электроники [1]. Ga₂O₃ обладает полиморфизмом и может кристаллизоваться в пяти фазах: α , β , γ , δ и $\varepsilon(\kappa)$. На данный момент наиболее изученной является β -фаза с моноклинной структурой, которая характеризуется высокой химической и термической стабильностями, что позволяет использовать приборы на основе Ga₂O₃ в экстремальных условиях [2].

В настоящее время оксид галлия находит широкое применение в различных областях: силовая электроника, газовая сенсорика, прозрачные электроды, солнечно-слепые детекторы УФ-излучения и т.д. [3]. Наибольший интерес представляют исследование и разработка солнечно-слепых фотодетекторов УФ-излучения на основе Ga₂O₃, что обусловлено наиболее подходящим значением $E_{\rm g}$, селективностью и внутренним усилением. Среди существующих детекторов выделяют планарные структуры металл/полупроводник/металл (MSM), которые получили широкое применение благодаря высокой чувствительности и простоте изготовления [4].

Электрические и фотоэлектрические характеристики фотодетекторов напрямую зависят от методов получения и последующей обработки пленок Ga₂O₃ [5]. На сегодняшний день пленки Ga₂O₃ могут быть получены следующими методами: импульсное лазерное осаждение (PLD), молекулярно-лучевая эпитаксия (MBE), осаждение металлорганических соединений из газовой фазы (MOCVD), химическое газофазное осаждение при низком давлении (LPCVD), хлоридная газофазная эпитаксия (HVPE), атомно-слоевое осаждение (ALD) и ВЧ-магнетронное распыление (RFMS) [6]. Последний способ характеризуется высокой скоростью роста и относительной дешевизной производства. Структуры, полученные RFMS-методом, не уступают в чувствительности к УФизлучению.

Чувствительность детекторов к ультрафиолетовому излучению зависит от толщины активной области, а также от температуры ее отжига. В связи с этим данная работа посвящена исследованию влияния времени роста и температуры отжига пленки оксида галлия на оптические, электрические и фотоэлектрические характеристики детекторов.

Методика исследования

Пленки Ga₂O₃ были получены методом RFMS мишени Ga₂O₃ (99.999%) на гладкие сапфировые подложки на установке AUTO-500 (Edwards) в газовой смеси Ar/O₂. Напыление пленок происходило в течение $t_g = 30$ и 60 мин. Концентрация кислорода в смеси поддерживалась равной (56.1±0.5) об.%. Расстояние между мишенью и подложкой составляло 70 мм. Давление в камере во время напыления поддерживалось равным 7.10⁻⁶ бар. Преднамеренного легирования пленок в Оптика и спектроскопия

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539:535

DOI: 10.17223/00213411/68/4/6

Природа электронно-возбужденных состояний и спектрально-люминесцентные свойства сульфаниламида в воде^{*}

Н.П. Безлепкина^{1,2}, О.К. Базыль¹, О.Н. Чайковская^{1,2}, Г.В. Майер¹

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия ² Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

Представлено экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров поглощения и флуоресценции сульфаниламида в воде. Квантово-химическая интерпретация спектров выполнена полуэмпирическим методом ЧПДП. Методом МЭСП определены протоно-акцепторные центры сульфаниламида, что позволило обоснованно построить геометрию комплексов с Н-связями молекулы сульфаниламида с водой. Установлено, что главными протоно-акцепторными центрами сульфаниламида являются атомы кислорода SO₂NH₂ группы. Результаты расчетов спектров поглощения удовлетворительно согласуются с экспериментальными спектрами. Квантовый выход флуоресценции сульфаниламида в воде равен 0.49. Наибольшее соответствие экспериментальному спектру поглощения получено при рассмотрении комплекса нейтральной формы сульфаниламида с водой состава 1:2. Наибольшее соответствие экспериментальному спектру флуоресценции было получено при расчете спектральных свойств дипротонированной формы сульфаниламида.

Ключевые слова: сульфаниламид, квантово-химический расчет, поглощение, флуоресценция, электронновозбужденные состояния.

Введение

Сульфаниламид (сульфонамид, 4-аминобензолсульфонамид) является основным представителем сульфаниламидных антимикробных препаратов и представляет собой основную структурнофункциональную единицу всего класса антимикробных сульфаниламидов. Сульфаниламиды являются антимикробными препаратами с широким спектром действия. В основе ингибирующего эффекта лежит сходство структур сульфонамида и *пара*-аминобензойной кислоты. Для антибактериальной активности сульфаниламидов необходима свободная ароматическая NH₂-группа в *пара*положении относительно сульфаниламидной группы [1]. Кроме того, сульфаниламидная группа должна быть непосредственно присоединена к бензольному кольцу. Замена бензольного кольца другой циклической системой также приводит к снижению или полной потере активности [2]. В настоящее время сульфаниламиды по-прежнему являются препаратами первого выбора для лечения некоторых состояний и заболеваний [3]. Чаще всего используются для лечения инфекций мочевыводящих путей, профилактики инфекций у пациентов с ожогами, в терапии кишечных инфекций, язвенного колита и энтерита [4–6], могут применяться в виде растворов или мазей при терапии коньюнктивита, а также в качестве дополнительного препарата при лечении трахомы.

Скорость и способ выведения сульфаниламидов зависят от применяемого соединения, введенной дозы, вида животных и пути введения [7]. Некоторые из сульфаниламидных препаратов могут выводиться из организма в неизмененном виде в количестве 50%, а также в виде ацетил- и глюкуронидных конъюгатов [8] и до ~ 90% выводятся из организма животных в неизмененном виде [9]. Применение сульфаниламидов и других антимикробных препаратов в терапии приводит к их постоянному попаданию в окружающую среду, распространению и поддержанию бактериальной резистентности. Результаты показали, что сульфаниламиды повсеместно распространены в водной среде в концентрациях от нг/л до мкг/л [8]. По этой причине удаление антимикробных препаратов из окружающей среды представляет серьезную проблему с точки зрения защиты окружающей среды. На основании вышесказанного необходимо усилить исследования для определения содержания антибиотиков в водных системах [10].

^{*} Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания (№ FSWM-2025-0007).

Оптика и спектроскопия

УДК 535.37

DOI: 10.17223/00213411/68/4/7

Предсказание константы скорости внутренней конверсии методом машинного обучения^{*}

Л.И. Валиулина¹, Р.Р. Валиев¹, Р.Т. Насибуллин¹, В.Н. Черепанов¹

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

Впервые с помощью метода машинного обучения «случайный лес» была построена модель для быстрой оценки константы скорости внутренней конверсии ($S_1 \rightarrow S_0$) на основе серии порфиринов с различными заместителями. На обучение модели подавалось 1058 молекул, а в качестве тестовых были использованы 256 молекулярных структур. Построенная модель использует в качестве начальных данных молекулярные геометрические параметры: длины связей, а также валентные и двугранные углы. Полученные результаты указывают на существование корреляции между геометрическими параметрами молекулы и константой скорости внутренней конверсии. Основными молекулярными дескрипторами для исследованных порфиринов являются длины связей и углы в порфириновом макроцикле.

Ключевые слова: порфириноиды, квантовая химия, машинное обучение, константа скорости внутренней конверсии, электронный переход.

Введение

В настоящее время методы машинного обучения широко востребованы не только в технических прикладных задачах, таких как обработка изображений, но и в задачах квантовой химии [1]. Конкретно, наиболее часто с их помощью предсказываются одноэлектронные энергии высшей занятой (HOMO) и низшей незанятой молекулярных орбиталей (LUMO), энергии энергетических щелей (разность энергий HOMO и LUMO) [2, 3], а также положения полос спектров поглощения [4, 5]. Последние определяются энергиями электронных переходов. В меньшей степени методы машинного обучения применяются для определения констант скоростей электронных переходов, где необходимо знать не только энергии электронных переходов, но также и значения матричных элементов операторов возмущения [6], вызывающих данные электронные переходы. Следует отметить, что наиболее сложной в предсказании, даже методами квантовой химии, является константа скорости внутренней конверсии, которая зависит от матричного элемента оператора неадиабатичности [6]. Вычисление константы скорости внутренней конверсии требует учета сложных эффектов, таких как эффект ангармоничности колебаний в конечном электронном состоянии, эффект перепутывания нормальных мод (эффект Душинского) или поворота системы нормальных координат, а также эффект Герцберга – Теллера, учет которого связан с вычислением производных матричного элемента неадиабатичности вдоль нормальных координат [7, 8]. Трудности учета указанных выше эффектов обуславливают сложность моделирования константы скорости внутренней конверсии методами машинного обучения.

В 2024 г. нами было показано, что основной определяющий вклад в расчет константы скорости внутренней конверсии вносит эффект ангармоничности [9]. При этом наибольший вклад в эффект ангармонизма дают колебания X–H-связей (X = C, N, O). В этой связи проведенное исследование [9] подтвердило предположение В.Г. Плотникова [10] о том, что главными промотирующими модами в процессе внутренней конверсии являются именно колебания X–H-связей. В 2020 г. нами был разработан программный код, который дает быструю оценку константы скорости внутренней конверсии только на основе расчета энергий электронных переходов и волновых функций основного электронного состояния [11]. В разработанном подходе волновая функция возбужденного электронного состояния не вычисляется явным образом, а моделируется в рамках метода линейного отклика с использованием зависящей от времени теории функционала плотности [11]. Следует отметить, что данный метод близок к методу, предложенному ранее В.Я. Артюховым и Г.В. Майером [12, 13], в основе которого используется полуэмпирический метод INDO. Однако метод, предложенный в нашей работе, является более универсальным и может использовать не

2025

^{*} Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-10081).

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА

Теплофизика и гидродинамика

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532. 526.2.011.6

DOI: 10.17223/00213411/68/4/8

О новом граничном условии в задаче обтекания шара

С.О. Гладков¹, Зо Аунг¹

¹ Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

Вычислена сила сопротивления шара в задаче его стационарного обтекания потоком вязкого континуума при учете бигармонического слагаемого в правой части уравнения Навье – Стокса. Помимо стандартных условий прилипания скорости к поверхности шара, сформулировано еще одно новое граничное условие, продиктованное именно спецификой задачи Стокса, что дает возможность точного вычисления силы сопротивления в аналитическом виде. Приведена графическая иллюстрация полученной формулы, и отмечено неплохое согласие с результатами других авторов.

Ключевые слова: граничная задача, обобщенное уравнение Навье – Стокса, уравнение непрерывности, число Кнудсена.

Введение. Граничные условия

Для решения поставленной задачи можно поступить так же, как и при решении классической задачи Стокса. То есть будем считать гидродинамический поток, движущийся с постоянной скоростью \mathbf{u} , стационарным и плавно обтекающим неподвижный шар радиуса R.

С помощью метода кинетического уравнения Больцмана, как это было строго показано в работе [1], правую часть уравнения Навье – Стокса можно представить с помощью знакочередующегося ряда по квадрату числа Кнудсена, т.е. как обобщенное гидродинамическое уравнение вида

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V}\right) = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{V} + \eta \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \nu^n \tau_n^{n+1} \Delta^{n+1} \mathbf{V}, \qquad (1)$$

где v – кинематическая вязкость; P – давление; ρ – плотность; τ_n – средние времена релаксашии.

Для примера т₁, которое будет фигурировать в дальнейшем, определяется по формуле

$$\tau_1 = \frac{1}{35m^5 T Z_0 v^2} \int_0^\infty \tau_p^3 p^8 e^{-\frac{p^2}{2mT}} dp , \qquad (2)$$

а кинематическая вязкость вычисляется согласно соотношению

$$v = \frac{1}{15m^3 T Z_0} \int_0^\infty \tau_p p^6 e^{-\frac{p^2}{2mT}} dp , \qquad (3)$$

m — масса молекулы; τ_p — время релаксации, определяемое с помощью функциональной производной от интеграла столкновений, исходя из известного определения (к примеру, см. [2])

$$\frac{1}{\tau_p} = -\frac{\delta L}{\delta f}\Big|_{f=f_0}.$$
(4)

Здесь $L\{f\}$ – больцмановский интеграл столкновений; f_0 – равновесная функция максвелловского распределения, т.е.

$$f_0 = \frac{e^{-\frac{p^2}{2mT}}}{Z_0},$$
 (5)

где нормировочный множитель

Полная версия: https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725

УДК 533.16

Теплофизика и гидродинамика

DOI: 10.17223/00213411/68/4/9

Классификация дозвуковых режимов течения вязкого газа в канале постоянного сечения^{*}

А.Ю. Мельников¹, В.И. Звегинцев¹

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Рассматривается одномерное течение вязкого газа в канале постоянного сечения с дозвуковой скоростью на входе. Предлагается использовать комплексный подход к оценке потерь на трение для дозвуковых участков течения: в виде потерь полного давления по длине этих участков и их зависимости от различных параметров. На основе предлагаемого подхода к оценке потерь полного давления выполнена классификация возможных режимов течения и определены количественные границы существования этих режимов в зависимости от скорости на входе, от длины канала и от соотношения давлений на входе и выходе рассматриваемого канала.

Ключевые слова: трение, канал постоянного сечения, дозвуковой поток.

Введение

Исследование внутренних течений газа в каналах, ограниченных твердыми стенками, представляет собой самостоятельное направление газовой динамики. Задача исследований состоит в определении параметров газового потока по длине и на выходе из канала. Исходными условиями для расчета внутренних течений являются параметры газа на входе в канал, геометрия канала и распределение энерго-массоподвода по длине канала. Для расчета параметров используются разнообразные модели течений и характеристик протекающего газа.

В данной работе рассматривается адиабатическое одномерное стационарное течение вязкого совершенного газа в канале постоянного сечения. В таком течении сохраняется расход и температура торможения потока по всей длине канала. Основной задачей является определение потерь полного давления вследствие трения на стенках канала.

Течения вязкого газа в канале постоянного сечения с дозвуковой скоростью на входе давно и подробно исследовались, начиная с классической работы И. Никурадзе по определению коэффициентов сопротивления гладких и шероховатых труб [1–3]. Работы [4–6] являются классическими и широко используются в научной и учебной литературе. В них представлены основные уравнения и методы анализа дозвукового течения, включая потери давления и изменение числа Маха вдоль канала. В работе [7] приведен огромный объем справочных данных по потерям полного давления в каналах с трением и с различного рода местными сопротивлениями. Важная особенность представленных выше работ заключается в том, что потери полного давления вычисляются по формуле Вейсбаха – Дарси как произведение коэффициента трения (зависящего от числа Рейнольдса и от шероховатости стенок) на скоростной напор потока на входе в канал. В то же время в работе [8] задача течения в канале решена с учетом гравитации, что расширяет классическую постановку. В работе авторов [9] показано, что при значительном изменении скорости по длине канала более точным является разделение канала на отдельные участки и определение потерь полного давления на каждом из участков по величине скоростного напора на входе этого участка.

Настоящая работа посвящена классификации дозвуковых режимов течения вязкого газа в канале постоянного сечения. Определены количественные границы возможных режимов дозвукового течения с трением в зависимости от скорости, массового расхода, длины канала и соотношения давлений на входе и выходе. Предлагается комплексный подход к анализу потерь давления и их зависимости от различных факторов. Это позволит в дальнейшем объединить с единых позиций методы определения потерь на трение для дозвуковых и сверхзвуковых течений вязкого газа в канале постоянного сечения [10].

^{*} Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (№ гос. регистрации: 124020900037-2).

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.3

DOI: 10.17223/00213411/68/4/10

Особенности механизма высокоскоростного проникания цилиндрических ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама в металлическую преграду^{*}

А.Ю. Саммель¹, А.Б. Скосырский¹, А.С. Дьячковский¹, А.Н. Ищенко¹, В.В. Буркин¹, В.А. Кудрявцев¹, Е.Ю. Степанов¹, А.В. Чупашев¹

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

Экспериментальным методом проведены исследования высокоскоростного взаимодействия цилиндрических ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама с различным углом раствора конуса головной части с полубесконечной металлической преградой в диапазоне скоростей от 700 до 790 м/с. Выявлено, что высокоскоростное взаимодействие ударников с преградами происходит с образованием кратера для всех видов головных частей ударников, а механизм проникания данного типа ударников в преграду имеет явно выраженный стадийный характер.

Ключевые слова: механизм высокоскоростного проникания, высокоскоростное взаимодействие, тяжелые сплавы, композиционные материалы, ударник.

Исследование механизмов высокоскоростного взаимодействия композиционных материалов с различными типами преград представляет собой сложную многопараметрическую задачу, требующую учета множества факторов и имеющую важное практическое значение в разработке и оптимизации изделий, работающих в условиях экстремальных нагрузок [1–10]. В условиях высокоскоростного нагружения при постоянном увеличении максимального давления и уменьшения длительности его действия, начиная с некоторых давлений, критические напряжения сдвига достигаются одновременно для многих плоскостей, что приводит к множественному скольжению. Развитие множественного скольжения и составляет отличительную черту механизма высокоскоростной деформации, а его появление зависит от конкретных параметров взаимодействия и характеристик исследуемого материала. В работе [11] было исследовано влияние угла раствора конуса головной части ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама на проникающую способность в стальную преграду. При проведении исследования использованы цилиндрические ударники диаметром 6 мм одинаковой массы с углом раствора конуса головной части $\alpha = 30, 45, 60, 90$ и 180°. Выявлено, что при данной конфигурации ударников, диапазоне скоростей 680-785 м/с угол раствора конической головной части практически не влияет на глубину проникания данных ударников в стальную преграду. В связи с этим возникает закономерный вопрос, будет ли сохраняться данная тенденция при изменении параметров ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама в этом диапазоне скоростей? Для ответа на этот вопрос было проведено исследование высокоскоростного взаимодействия цилиндрических ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама с измененными параметрами относительно параметров ударников, исследованных в работе [11].

Таким образом данное исследование является логическим продолжением цикла работ, направленных на изучение особенностей и выявление основополагающих параметров высокоскоростного взаимодействия ударников из тяжелого сплава на основе вольфрама с металлическими преградами. В данной работе проводилось исследование высокоскоростного взаимодействия со стальными преградами цилиндрических ударников. В качестве исходного материала использовали промышленный тяжелый сплав на основе вольфрама, из которого изготавливались ударники одинаковой массы с конической головной частью цилиндрической формы диаметром 9 мм. Углы раствора конуса головной части составляли 45, 60, 90 и 180°. В качестве преграды-свидетеля исполь-

^{*} Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).

Физика конденсированного состояния

УДК 537.31

DOI: 10.17223/00213411/68/4/11

Определение параметров энергетического спектра локализованных состояний сэндвич-структуры Al–Pb₃O₄–Al^{*}

Г.И. Грабко¹, М.С. Басс¹, С.Г. Батухтин¹

¹ Забайкальский государственный университет, г. Чита, Россия

На основании релаксационных кривых темнового тока сэндвич-структур Al–Pb₃O₄–Al, перестроенных в координатах It–lgt, с последующим применением теоретического метода It = f(lgt) характеристик были рассчитаны значения параметров, определяющих особенности энергетического спектра ловушек, влияющих на поляризационный процесс, происходящий в исследуемых составах под воздействием электрического поля и температуры.

Ключевые слова: тетраоксид свинца, метод It = f(lgt) характеристик, энергетический спектр локализованных центров, частота попыток выхода электронов из ловушек, энергия дискретного уровня, плотность энергетических состояний.

Введение

Составы на основе халькогенидов [1-4] и оксидов [5-10] элементов IV группы PbS, SnSe, SnTe, PbTe, PbO, Pb₃O₄ находят применение в различных сегментах современной электроники: при производстве инжекционных лазеров, инфракрасных датчиков, ячеек фазовой памяти, фоторезисторов, радиационных стекол и т.д. [8, 11-13]. Одновременно с этим продолжаются исследования, позволяющие расширять область практического использования данных соединений, в частности при изготовлении фотоприемников, работающих в дальнем ИК-диапазоне [14-22]. Формирование сенсорных слоев последних сопровождается образованием сложной многофазной структуры, включающей оксидную фазу Pb–O, оказывающую значительное влияние на качество, в том числе на быстродействие обсуждаемых приборов. Это обуславливает необходимость всестороннего изучения физических свойств составов системы Pb–O, в частности Pb₃O₄, который является модельным объектом для исследования окислов свинца [8–10].

В ходе последних работ [23–26] было установлено существование сложного спектра локализованных состояний (который состоит как из распределенных, так и из дискретных уровней), связанных с различными нарушениями внутренней структуры поликристаллических слоев ортоплюмбата. Интерпретация экспериментальных данных в [26] осуществлялась методом It = f(lgt)характеристик [27]. При этом была произведена только качественная оценка обсуждаемых результатов, что не позволяет обеспечить полноту анализа особенностей энергетического спектра локализованных состояний композитных составов на основе поликристаллического Pb₃O₄.

В связи с этим, цель работы – продолжение исследований в этом направлении, позволяющих осуществить количественное определение параметров данного энергетического спектра.

Методика и техника эксперимента

Толщина экспериментальных слоев поликристаллического Pb_3O_4 со связующим, наносимых на алюминиевую подложку, составляла 50 мкм. Верхний электрод – металлическая пластинка – фиксировался прижимным контактом. Специализированная ячейка, где находились образцы, имела конструкцию, которая обеспечивала как подводку к исследуемым слоям электрического напряжения ($E = 10^2 - 10^4$ B/cм), воздействие температурой (посредством вмонтированной электропечи; диапазон температур составил T = 300 - 350 K), измеряемой термопарой, так и возможность фиксирования отклика изучаемой сэндвич-структуры Al–Pb₃O₄–Al [24].

Обсуждение экспериментальных результатов

Экспериментальные данные, представленные на рис. 1, свидетельствуют об эффекте насыщения поляризационного процесса с ростом температуры и величины прикладываемого электрического поля. Особенно отчетливо это видно при сравнении максимальных значений тока $I_{\rm max}$ в об-

^{*} Исследование выполнено за счет государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 123102000012-2, соглашение № 075-03-2023-028/1 от 05.10.2023 г.).

Физика конденсированного состояния

УДК 541.64:539.2

DOI: 10.17223/00213411/68/4/12

Теоретическое описание упругости композитов на основе полиамида-6 в рамках модели «термита»

Дж.С. Точиев¹, И.В. Долбин², Х.Х. Сапаев³

¹ Ингушский государственный университет, Республика Ингушетия, г. Магас, Россия ² Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, КБР, г. Нальчик, Россия ³ Чеченский государственный университет им. А.А. Кадырова, Чеченская Республика, г. Грозный, Россия

Для описания модуля упругости композитов на основе полиамида-6 в рамках теории перколяции использована модель случайной сверхпроводящей сетки или предел «термита». Выполненные оценки показали, что модуль упругости этих материалов определяется содержанием жесткой фазы (наполнителя) и структурой агрегатов наполнителя, характеризуемой их фрактальной размерностью. Обнаружено сильное влияние величины порога перколяции наполнителя на упругие свойства полимерных композитов.

Ключевые слова: композит, полиамид-6, наполнитель, теория перколяции, модуль упругости, случайная смесь, модель «термита».

Введение

Стенли [1] рассмотрел функциональные законы диффузии и переноса для сред, которые представляют собой случайные смеси компонентов А и В, имеющих хорошо и плохо проводящие участки. В свою очередь, полимерные композиты следует рассматривать как такую же смесь полимера и наполнителя, для которых существуют низкомодульная (полимерная матрица) и высокомодульная (наполнитель) компоненты [2, 3]. Существуют два предельных случая для описания таких систем [1, 2]:

1) случайная сетка резисторов (ССР) или предел «муравья», который предполагает, что большая проводимость (модуль упругости) равна единице, а меньшая – нулю;

2) случайная сверхпроводящая сетка (ССС) или предел «термита», который предполагает, что большая проводимость (модуль упругости) бесконечна, а меньшая – также равна нулю.

В реальном случае для рассматриваемых композитов на основе полиамида-6 предполагается модель «термита» (предел ССС) из-за большого различия модулей упругости их компонент. Так, для используемых наполнителей модуль упругости $E_{\rm H}$ составляет ~ 200 ГПа [4], а для матричного полиамида-6 модуль упругости $E_{\rm M} = 1.77$ ГПа, т.е. наблюдается различие на два порядка. Поэтому целью настоящей работы является описание зависимости модуля упругости композитов на основе полиамида-6 от концентрации наполнителя (твердотельной или жесткой компоненты) в рамках теории перколяции с применением рассмотренного выше предела «термита» (ССС) [1].

Эксперимент

В качестве матричного полимера использован полиамид-6 (ПА-6) со среднечисловой молекулярной массой 3.2 кмоль/кг, полидисперсностью ~ 4.2 и степенью кристалличности 0.67 промышленного производства. Наполнителями служили минеральные вещества диатомид и перлит. Эти мелко измельченные наполнители насыпали в фарфоровую чашку, помещали в муфельную печь и нагревали при температуре 1173 К в течение 3 ч. Затем после охлаждения до комнатной температуры наполнители измельчали в планетарной шаровой мельнице Retsch PM 100 при скорости 400 об/мин в течение 5 мин. ПА-6 предварительно сушили в вакуумном шкафу при температуре 373 К в течение суток.

Композиты ПА-6/перлит (ПА-6/П) и ПА-6/диатомид (ПА-6/Д) получены смешиванием компонент в расплаве на двухшнековом микроэкструдере SYZS-10P (производство КНР) с четырьмя ступенями нагрева (температура нагрева 488, 498, 508 и 518 К соответственно) при скорости вращения шнеков 35 об/мин. После гранулирования полученного экструдата из него получали образцы для испытаний на инжекционной литьевой машине фирмы «Ray-Ran Test Equipment LTD» (Великобритания) при температуре рабочего цилиндра 543 К и пресс-формы 373 К.

Механические испытания на одноосное растяжение выполнены на образцах в форме двухсторонней лопатки (ГОСТ 14236-81). Для этой цели использована испытательная машина A1-7000M Ежемесячный научный журнал

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

2025. T. 68. № 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 21.04.2025. Выпуск в свет 28.04.2025. Заказ № 6317 Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая. Усл. п. л. 11.39. Уч.-изд. л. 12.76. 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