

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**

**8·2025**

**ИЗДАНИЕ  
ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021–3411

# ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

---

Том 68

Август, 2025

№ 8 (813)

---

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  
**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](mailto:physics@mail.tsu.ru)

## СОДЕРЖАНИЕ

## ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

Гладков С.О. К вопросу о силе сопротивления шара при его вертикальном обтекании в поле силы тяжести .....5

## ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

Серебренников М.А., Дин Ю., Егоров И.С. Особенности формирования и использования электронных пучков с широким энергетическим спектром .....11

Коренблит С.Э., Аман Э.Г., Москаленко А.Д. Среда типа Грюнайзена для темной энергии и квинтэссенции.....19

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Янушоните Э.И., Панченко Е.Ю., Курлевская И.Д., Ефтифеева А.С., Чумляков Ю.И. Закономерности ориентационной зависимости сверхэластичности и эластокалорического эффекта в монокристаллах  $Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27}$  и текстурированных поликристаллах  $(Ni_{54}Fe_{19}Ga_{27})_{99.7}V_{0.3}$  .....32

Ашхотов О.Г., Ашхотова И.Б., Магкоев Т.Т. Влияние фазовых переходов на процессы поверхностной сегрегации в твердых сплавах индий – олово .....42

Боева Е.А., Лихоманова С.В. Исследование микротвердости поверхности йодно-поливинилспиртовых поляризаторов при различном времени йодирования .....48

Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Соловьева Ю.В., Старенченко В.А. Внутренние напряжения и их источники в технически чистой УМЗ-меди после интенсивной пластической деформации.....52

Черепанов Д.Н., Вовнова И.Г., Соловьева Ю.В., Старенченко В.А. Влияние порогов на расширение октаэдрической дислокационной петли и генерацию точечных дефектов в пластически деформируемых ГЦК-кристаллах .....60

Шкода О.А. Влияние механической активации на синтез трисицида пентаниобия .....73

## ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Майер Г.В., Чайковская О.Н., Базыль О.К., Бочарникова Е.Н., Безлепкина Н.П. О физических механизмах формирования и особенностях интерпретации Стоксова сдвига в молекулах органических соединений.....80

Татур В.В., Тихомиров А.А. Влияние паров ацетона и меркаптанов на измерение концентрации паров ртути анализатором на основе поперечного эффекта Зеемана .....86

Герасимова М.П., Садовников С.А., Яковлев С.В., Крючков А.В., Филатов В.В., Кравцова Н.С., Маркова А.А., Кистенев Ю.В., Романовский О.А. Диодная лазерная система для дистанционного зондирования углекислого газа в атмосфере .....95

## CONTENTS

## THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS

**Gladkov S.O.** To the question of the drag force of the ball at its vertical flowing around in the gravitational field..... 5

## ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

**Serebrennikov M.A., Ding Yu., Egorov I.S.** Features of the formation and use of electron beams with wide energy spectrum ..... 11

**Korenblit S.E., Aman E.H., Moskalenko A.D.** Gruneisen-type medium for dark energy and quintessence..... 19

## CONDENSED-STATE PHYSICS

**Yanushonite E.I., Panchenko E.Yu., Kurlevskaya I.D., Eftifeeva A.S., Chumlyakov Y.I.** Regularities of orientation dependence of superelasticity and elastocaloric effect in single crystals of  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$  and textured polycrystals of  $(\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27})_{99.7}\text{B}_{0.3}$  alloy..... 32

**Ashkhotov O.G., Ashkhotova I.B., Magkoev T.T.** Influence of phase transitions on surface segregation processes in indium-tin solid alloys ..... 42

**Boeva E.A., Likhomanova S.V.** The study of microhardness of the surface of iodine-polyvinyl alcohol polarizers at different iodine treatment times ..... 48

**Popova N.A., Nikonenko E.L., Solov'eva Yu.V., Starenchenko V.A.** Internal stresses and their sources in technically pure UFG copper after severe plastic deformation ..... 52

**Cherepanov D.N., Vovnova I.G., Solov'eva Yu.V., Starenchenko V.A.** Dislocation jogs impact on the expansion of octahedral dislocation loop and the point defects generation in plastically deformed FCC crystals..... 60

**Shkoda O.A.** Effect of mechanical activation on the synthesis of pentaniobium trisilicide..... 73

## OPTICS AND SPECTROSCOPY

**Mayer G.V., Tchaikovskaya O.N., Bazyl O.K., Bocharnikova E.N., Bezlepkina N.P.** Physical mechanisms of formation and interpretation of the Stokes shift in molecules of organic compounds ..... 80

**Tatur V.V., Tikhomirov A.A.** Effect of acetone and mercaptan vapors on the measurement of mercury vapor concentration by an analyzer based on the Zeeman transverse effect ..... 86

**Gerasimova M.P., Sadovnikov S.A., Yakovlev S.V., Kryuchkov A.V., Filatov V.V., Kravtsova N.S., Markova A.A., Kistenev Yu.V., Romanovskii O.A.** Diode laser system for remote sensing of carbon dioxide in the atmosphere..... 95

## ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 532.526.2.011.6

DOI: 10.17223/00213411/68/8/1

**К вопросу о силе сопротивления шара при его вертикальном обтекании в поле силы тяжести**С.О. Гладков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия*

Приведено аналитическое решение задачи о вычислении силы сопротивления шара в поле силы тяжести, когда поток вязкого континуума обтекает его точно по вертикали. Полученная общая формула для силы сопротивления проанализирована в некоторых предельных случаях, и показано, что она сильно зависит от высоты падения потока. Дается обобщенное выражение для силы сопротивления, когда обтекание шара происходит в потоке, скорость движения которого направлена под некоторым углом  $\alpha$  к вертикали. Найдено физическое условие возможного стекания жидкости с поверхности шара при его горизонтальном обтекании, а также критерий применимости формулы Стокса. Приведено также строго обоснованное условие того, когда возможен эффект парения частиц мелкодисперсной фазы.

**Ключевые слова:** сила тяжести, уравнение Навье – Стокса, сила сопротивления.

**Введение**

Вопрос, на котором мы хотели бы остановиться в настоящей работе, посвящен аналитическому решению задачи о вычислении силы сопротивления, которую испытывает шар, обтекаемый вертикальным потоком вязкого континуума. Фактически речь идет о задаче Стокса, но только в поле силы тяжести. Интерес к ней вызван, прежде всего, тем обстоятельством, что до настоящего момента времени никаких вычислений в этом направлении мы не обнаружили.

В самом деле, когда речь идет о классической задаче Стокса, связанной с вычислением силы сопротивления шара, обтекаемого горизонтальным потоком вязкой жидкости, в этом случае сила тяжести роли не играет, и, в рамках граничных условий прилипания [1], сопротивление в горизонтальном потоке описывается формулой

$$F_S = 6\pi\eta Ru, \quad (1)$$

где  $\eta$  – динамическая вязкость континуума;  $R$  – радиус шара;  $u$  – скорость потока.

**1. Критерий применимости формулы (1)**

В связи с упоминанием формулы Стокса необходимо также обратить внимание и на следующий важный момент. Дело в том, что когда скорость потока мала, то вполне возможен эффект стекания жидкости с поверхности шара под воздействием силы тяжести.

Действительно, поскольку процесс стекания является нестационарным, то для оценки времени стекания можно воспользоваться кинематической формулой  $t = \sqrt{\frac{H}{2g}}$ , где  $g$  – ускорение силы тяжести,  $H$  – высота падения потока. Поскольку линейную длину стекания с самой верхней точки поверхности шара можно определить как  $H = \pi R$ , то время стекания следует оценить как

$$t_c = \sqrt{\frac{\pi R}{2g}}. \quad (2)$$

С другой стороны, поток жидкости, обтекающей шар в горизонтальном направлении, затрачивает на свое движение время

$$t_0 = \frac{\pi R}{u}. \quad (3)$$

**ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ**

УДК 621.384.6, 539.1.08

DOI: 10.17223/00213411/68/8/2

**Особенности формирования и использования электронных пучков с широким энергетическим спектром\***М.А. Серебренников<sup>1</sup>, Ю. Дин<sup>1</sup>, И.С. Егоров<sup>1</sup><sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия*

Проведен анализ влияния энергетического спектра субмикросекундного пучка электронов на глубинное распределение дозы при его поглощении в воздухе атмосферного давления. На основе реальных экспериментальных характеристик электронных пучков смоделирован способ оперативного формирования оптимизированного дозового распределения в воздушном объеме в серии импульсов электронного пучка с широким энергетическим спектром. Расчет параметров серии импульсов тока пучка произведен с использованием разработанного эвристического программного алгоритма, вычисляющего интегральную поглощенную дозу с приоритизацией частиц с более высокой кинетической энергией.

**Ключевые слова:** *электронный пучок, импульсный ускоритель электронов, распределение поглощенной дозы по глубине, энергетический спектр электронного пучка.*

**Введение**

Электронный пучок — широко используемый инструмент для решения научных, промышленных, сельскохозяйственных и медицинских задач [1–5]. При решении ряда практических задач может потребоваться как равномерность облучения по площади и глубине обработки (объемная стерилизация), так и создание специфического, в том числе неравномерного, распределения дозы по глубине. Классический пример — лучевая терапия в медицине, когда максимум дозы (пик Брэгга) нужно создать на глубине залегания объекта облучения [6, 7]. Другим примером является использование электронного пучка для обработки зерновых культур [8, 9]. При обработке необходимо радиационное воздействие, преимущественно на поверхностную оболочку семени с минимальным воздействием на зародыш. При этом эффективное значение вложенной энергии (дозы) существенно зависит от спектра кинетических энергий электронов пучка [10], определяющего распределение поглощенной дозы по глубине объекта обработки облучением.

Решение конкретной задачи оптимизации распределения может быть достигнуто за счет использования как многостороннего облучения (если возможно), так и комбинированных пучков с различными кинетическими энергиями электронов с использованием сразу нескольких ускорителей. В настоящей работе анализируется подход по использованию для облучения объектов серии импульсов пучка с широким спектром кинетических энергий электронов, когда целевое распределение достигается интегрально. Произведено моделирование формирования заданного распределения поглощенной дозы при использовании импульсного ускорителя электронов с широким энергетическим спектром пучка при облучении воздушной среды атмосферного давления.

**1. Методика и экспериментальное оборудование**

Экспериментальная база исследования содержит массив данных экспериментов, произведенных с использованием импульсного ускорителя электронов «Астра-М» (ускоряющее напряжение — до 450 кВ, длительность импульса напряжения на полувысоте — 150 нс, полный ток пучка — до 1.5 кА, частота повторения — до 40 имп./с) [11]. Генерация электронного пучка происходит из холодного катода посредством взрывной эмиссии. Генератор импульсов ускоряющего напряжения ускорителя построен на базе импульсного трансформатора, что обуславливает «колоколообразный» им-

\* Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-29-00695).

## Среда типа Грюнайзена для темной энергии и квинтэссенции

С.Э. Коренблит<sup>1,2</sup>, Э.Г. Аман<sup>1</sup>, А.Д. Москаленко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Иркутский государственный университет, г. Иркутск, Россия

<sup>2</sup> Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

Связь вида  $P = \lambda u$  в равновесной однокомпонентной среде с заданной  $\lambda = \text{const}$  возможна и при наличии взаимодействия, а при  $\lambda(V), \lambda(u), \lambda(P)$  также определяет все ее функции состояния, например, на различных стадиях эволюции Вселенной, в терминах одной, задаваемой хипотенциалом, функции одной переменной, выделяя значения  $\lambda = -1, 0, 1/3$ . Условия равновесия и устойчивости исключают такую среду для  $-1 < \lambda(\cdot) < 0$ .

**Ключевые слова:** уравнение состояния, термодинамическое равновесие, темная энергия, квинтэссенция.

### Введение

Под средой типа Грюнайзена будем понимать среду, для которой общее размерное соотношение  $P \equiv \lambda u$  при заданной безразмерной функции  $\lambda(\cdot, \cdot)$  имеет неформальный смысл как независимое дополнительное уравнение состояния этой среды. Здесь  $P$  – равновесное давление среды, а

$$\frac{PV}{\lambda} = U(T, V, N), \quad u(T, \bar{v}) = \frac{U}{V}, \quad \sigma(T, \bar{v}) = \frac{S}{V}, \quad (1)$$

$$\text{а также } \bar{v} = \frac{V}{N}, \quad \bar{\varepsilon}(T, \bar{v}) = \frac{U}{N} = \bar{v}u(T, \bar{v}), \quad \bar{s}(T, \bar{v}) = \frac{S}{N} = \bar{v}\sigma(T, \bar{v}) \quad (2)$$

есть зависящие от ее температуры  $T$ , выделяемого ее объема  $V$  и числа  $N$  частиц в нем, соответственно: полная внутренняя энергия, объемные плотности этой энергии и энтропии, а также удельные объем, энергия и энтропия. Для однокомпонентной среды зависящий, вообще говоря, от двух интенсивных переменных безразмерный параметр  $\lambda(\cdot, \cdot)$  назван параметром Грюнайзена [1]. Например, для гиббсовского  $d$ -мерного газа с однородными функциями полных кинетической  $K(\{\mathbf{p}\})$  и потенциальной  $\Pi(\{\mathbf{x}\})$  энергий взаимодействия частиц степеней однородности  $\ell$  и  $-\ell$  найдем  $\lambda = \ell/d$ . Действительно, масштабное преобразование  $N$ -частичной статсуммы такого газа [2], сперва при  $\Pi(\{\eta\mathbf{x}\}) = \eta^n \Pi(\{\mathbf{x}\})$  с  $\{\mathbf{x}\} \equiv \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ ,  $K(\{\eta\mathbf{p}\}) = \eta^\ell K(\{\mathbf{p}\})$  с  $\{\mathbf{p}\} \equiv \{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\}$ , и

$$Z_N(T, V) = \frac{1}{N! h^{Nd}} \prod_{j=1}^N \left\{ \int_{V_d} d^d x_j \int d^d p_j \right\} \exp \left\{ -\frac{K(\{\mathbf{p}\}) + \Pi(\{\mathbf{x}\})}{k_B T} \right\}, \quad (k_B - \text{константа Больцмана})$$

вида  $\mathbf{x} \rightarrow \eta\mathbf{x}$ , т.е.  $V_d \rightarrow \eta^d V_d$ , и  $\mathbf{p} \rightarrow \eta^{n/\ell} \mathbf{p}$ ,  $T \rightarrow \eta^n T$  дает для нее функциональное уравнение  $Z_N(\eta^n T, \eta^d V_d) = \eta^{[1+n/\ell]Nd} Z_N(T, V)$  с решением  $Z_N(T, V) = [T/\Theta]^{[d/n+d/\ell]N} (\exp[\omega(q)])^N$  для нее и для аддитивной свободной энергии  $F$  [2]. Здесь  $\Theta$  – константа размерности температуры;  $\omega(q)$  – некоторая безразмерная функция одной инвариантной интенсивной переменной  $q = T\bar{v}^{-n/d}$ ,

$F(T, V, N) \equiv -k_B T \ln Z_N(T, V) = -Nk_B T \left\{ \left( \frac{d}{n} + \frac{d}{\ell} \right) \ln \left( \frac{T}{\Theta} \right) + \omega(q) \right\} \rightarrow -Nk_B T \omega(q)$  при  $n \rightarrow -\ell$ , что при

$F \equiv N\bar{\mathcal{G}}(T, \bar{v})$ ,  $q \rightarrow T\bar{v}^\lambda$  и дает (1) с  $\lambda = \ell/d$  для давления и внутренней энергии [3] как

$$P = -\left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, N} = -\left( \frac{\partial \bar{\mathcal{G}}}{\partial \bar{v}} \right)_T \rightarrow \frac{\lambda}{\bar{v}} k_B T q \omega'(q) \quad \text{и} \quad U = -T^2 \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N} \rightarrow Nk_B T q \omega'(q). \quad (3)$$

Таким образом, даже  $\lambda = \text{const}$  отнюдь не означает идеальности среды [1]. Но с тем же  $\lambda = \ell/d$  связь (1) хорошо известна [1–3] для идеального газа, т.е. с  $\Pi(\{\mathbf{x}\}) \equiv 0$  (как с любой желаемой степенью однородности) и с суммой одночастичных кинетических спектров вида

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 669.245'1'871:548.55:536.62

DOI: 10.17223/00213411/68/8/4

**Закономерности ориентационной зависимости сверхэластичности и эластокалорического эффекта в монокристаллах  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$  и текстурированных поликристаллах  $(\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27})_{99.7}\text{B}_{0.3}$ \***Э.И. Янушоните<sup>1</sup>, Е.Ю. Панченко<sup>1</sup>, И.Д. Курлевская<sup>1</sup>,  
А.С. Ефтифеева<sup>1</sup>, Ю.И. Чумляков<sup>1</sup><sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Установлены закономерности и физические причины ориентационной зависимости эластокалорического эффекта, прочностных свойств  $L1_0$ -мартенсита и параметров сверхэластичности в  $[001]_A$ -,  $[011]_A$ - и  $[334]_A$ -монокристаллах сплава  $\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}$ . Показано, что высокие прочностные свойства  $L1_0$ -мартенсита (дислокационный предел текучести  $\sigma_{0.1}^M > 1000$  МПа) способствуют проявлению максимальной величины адиабатического охлаждения  $\Delta T_{ad} = (10.3 \pm 0.5)$  К в  $[001]_A$ -монокристаллах и  $\Delta T_{ad} = (9.3 \pm 0.5)$  К в поликристаллах сплава  $(\text{Ni}_{54}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27})_{99.7}\text{B}_{0.3}$  с острой текстурой вдоль  $[001]_A$ -направления.

**Ключевые слова:** монокристаллы, поликристаллы, мартенситные превращения, ориентационная зависимость, эластокалорический эффект.

**Введение**

В настоящее время в различных холодильных машинах применяется метод компрессионного охлаждения пара, основанный на использовании химических хладагентов, претерпевших жидкостно-газообразное преобразование в замкнутой системе. Однако широкое использование таких хладагентов привело к значительным экологическим проблемам, таким как глобальное потепление и истощение озонового слоя. Твердотельные системы охлаждения, использующие такие эффекты, как магнитокалорический, электрокалорический, барокалорический и эластокалорический эффект (ЭКЭ), рассматриваются как значимая альтернатива паровой компрессии, поскольку данные технологии охлаждения совершенно безвредны для окружающей среды. Среди технологий теплового охлаждения эластокалорические материалы, обладающие изотермическим изменением энтропии  $\Delta S$  или адиабатическим изменением температуры  $\Delta T_{ad}$  во время мартенситного превращения (МП) под нагрузкой, являются перспективными для практического применения из-за высокого коэффициента производительности материала  $\text{COP}_{\text{mat}} \geq 20$  и максимальной величины  $\Delta T_{ad}$  около 30 К [1–4].

Ферромагнитный сплав с памятью формы на основе  $\text{NiFeGa}$ , испытывающий  $B2(L2_1)$ – $10M/14M$ – $L1_0$  МП, обладает как ЭКЭ, так и может дополнительно проявлять магнитокалорический эффект. Данный сплав Гейслера не содержит Mn, что облегчает его производство, так как обычно наличие Mn в сплавах создает трудности с получением однородного номинального сплава из-за его высокой летучести. Известно, что упругая анизотропия  $C_{44}/C'$  для сплава  $\text{Ni}_{51.5}\text{Fe}_{21.5}\text{Ga}_{27}$  составляет 6.6, что намного выше, чем значения для  $\text{NiTi}$  ( $C_{44}/C' = 2$ ) [1, 2]. Наряду с этим при развитии  $B2(L2_1)$ – $10M/14M$ – $L1_0$  МП наблюдается сильная зависимость деформации превращения от кристаллографической ориентации при развитии МП. Эти факторы приводят к сильной ориентационной зависимости функциональных характеристик сверхэластичности (СЭ), таких как критические напряжения образования мартенсита, модули упругости, механический гистерезис и обратимая деформация [1, 2]. Это дает основание ожидать сильную ориентационную зависимость эксплуатационных характеристик ЭКЭ в монокристаллах и текстурированных поликристаллах сплавов на основе  $\text{NiFeGa}$ . Так, в работе [2] на  $[001]_A$ -монокристаллах  $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{19}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$  величина адиабатического изменения температуры  $\Delta T_{ad}$  достигает до 10 К в температурном интервале от 328 до 398 К, тогда как на  $[111]_A$ -монокристаллах величина  $\Delta T_{ad}$  на 70% меньше и реализуется лишь

\* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00150, <https://rscf.ru/project/23-19-00150/>.

## Влияние фазовых переходов на процессы поверхностной сегрегации в твердых сплавах индий – олово\*

О.Г. Ашхотов<sup>1</sup>, И.Б. Ашхотова<sup>1</sup>, Т.Т. Магкоев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, г. Нальчик, Россия

<sup>2</sup> Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова, г. Владикавказ, Россия

Представлены новые экспериментальные данные по поверхностному составу твердых сплавов In–Sn на всем интервале объемных концентраций. Поверхностная сегрегация компонентов в двойных твердых сплавах In–Sn исследована методом электронной оже-спектроскопии. Сплавы приготавливались в инертной среде при 573 К с контролем объемного состава рентгенофлуоресцентной спектроскопией. Перед анализом поверхности образцы сплавов доводились до атомарно-чистого состояния облучением ионами аргона ( $E = 700$  эВ,  $J = 1$  мкА/см<sup>2</sup>) с последующим отжигом для достижения равновесного состояния. Измерения амплитуд оже-пиков выполнялись в условиях сверхвысокого вакуума (остаточное давление  $10^{-7}$  Па) от комнатной температуры до 443 К на всем интервале объемных концентраций, включающем твердые растворы, гомогенные и двухфазные области, а также фазовые переходы. По данным оже-анализа, проведенного для MNN-переходов In и Sn, были рассчитаны поверхностные концентрации образцов. Построенные изотермы поверхностного состава показали, что в изученном интервале температур наблюдается взаимная сегрегация компонентов. По полученным значениям поверхностных концентраций рассчитаны энергии сегрегации индия и олова в области твердых растворов, подтверждающие поверхностную активность обоих компонентов. Установлено, что политемы поверхностного состава аппроксимируются линейными уравнениями с положительными и отрицательными температурными коэффициентами.

**Ключевые слова:** поверхность, вакуум, адсорбция, электроны, сегрегация, индий, олово.

### Введение

Бинарные сплавы In–Sn благодаря уникальному сочетанию свойств компонентов часто используются в качестве бессвинцовых припоев [1, 2]. Их отличает хорошая смачиваемость меди, широко используемой в качестве подложек в электронной промышленности [3]. Они используются в качестве компонентов в сложных припоях, в стоматологических сплавах [4], а также в качестве элементов электрических цепей в устройствах систем безопасности [5]. В связи с этим исследование сплавов In–Sn, а именно их фазового состава, микроструктуры и других физических свойств, распределение компонентов в объеме и между поверхностью и объемом имеет научное и прикладное значение. Анализ литературных данных показывает, что для этой системы объемные и поверхностные параметры изучены достаточно подробно. Но если данные разных исследователей по объемным характеристикам достаточно хорошо согласуются между собой, то результаты исследования поверхности часто отличаются не только количественно, но и качественно. Качественно отличаются друг от друга и экспериментальные данные по изотермам поверхностного натяжения ( $\sigma$ ) этих расплавов. В [6] показано, что, если у авторов работ [7, 8] изотермы этой системы передаются монотонной кривой, то в [9] на изотермах  $\sigma$  выявлены минимумы эквимолярных составов. Здесь следует также отметить, что поверхности сплавов в жидком состоянии исследуются чаще, чем твердые сплавы.

Из изложенного выше следует, что процессы распределения компонентов между поверхностью и объемом в твердом состоянии изучены недостаточно. Между тем такие исследования позволят изучить закономерности формирования поверхностных фаз. Новые экспериментальные данные по поверхностному составу двойных твердых сплавов In–Sn в гомогенных и двухфазных областях, а также при фазовых переходах необходимы при разработке бессвинцовых припоев для прогнозирования оптимальных составов. Поэтому цель настоящей работы – исследование процессов поверхностной сегрегации в твердых сплавах In–Sn на всем интервале объемных концентраций.

### Экспериментальная часть

Для приготовления двойных сплавов In–Sn использовали металлы высокой чистоты (индий ИН-000, олово Sn-000). Сплавы In–Sn (5.11, 11.75, 24.66, 47.0, 63.63, 81.22, 92.84, 98.13 ат.% Sn)

\* Работа выполнена в рамках госзадания СОГУ Минобрнауки РФ (код научной темы: FEFN-2024-0002).

## Исследование микротвердости поверхности йодно-поливинилспиртовых поляризаторов при различном времени йодирования\*

Е.А. Боева<sup>1</sup>, С.В. Лихоманова<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения,  
г. Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> АО «Научно-производственное объединение Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова»,  
г. Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Исследуется влияние времени йодирования на микротвердость поверхности йодно-поливинилспиртовых поляризаторов. Изучено влияние различных временных интервалов йодирования (30, 60, 90 и 120 с) на механические свойства полимерных пленок из 8%-го водного раствора поливинилового спирта. В ходе экспериментов измерялась микротвердость образцов с использованием метода Виккерса при разных нагрузках. Установлено, что максимальная микротвердость йодно-поливинилспиртовых поляризаторов достигается при времени йодирования 60 и 90 с, в то время как более короткие (30 с) и более длительные (120 с) временные интервалы приводят к снижению микротвердости из-за изменений в структуре полимерной матрицы.

**Ключевые слова:** йодно-поливинилспиртовые поляризаторы, микротвердость, время йодирования, поливиниловый спирт, поляризационные свойства, метод Виккерса.

### Введение

Исследование полимеров и способов модификации их свойств, особенно в контексте их поляризационных характеристик, представляет интерес для разработки полимерных материалов с улучшенными оптическими параметрами [1–5]. Одним из таких материалов является поливиниловый спирт (ПВС), который активно используется в качестве основы для создания тонкопленочных поляризаторов в жидкокристаллических (ЖК) дисплеях [6–8]. ПВС обладает хорошими механическими и оптическими характеристиками – гибкостью и прозрачностью в видимом диапазоне спектра, что делает его идеальным кандидатом для основной матрицы пленочных поляризаторов.

Для создания поляризаторов в оптически прозрачную пленку поливинилового спирта внедряют дихроичные агенты поглощения. В качестве таковых могут быть использованы йод, органические красители, металлические наночастицы и др. [9–13].

Одним из наиболее важных факторов, определяющих долговечность и эксплуатационные характеристики поляризаторов, является микротвердость поверхности материала. Микротвердость характеризует сопротивление материала к локализованным повреждениям или деформациям под действием силы. Высокая микротвердость обеспечивает не только устойчивость поверхности к механическому износу, но и помогает сохранить стабильность поляризационных характеристик материала в процессе эксплуатации.

Влияние времени йодирования на микротвердость ПВС-поляризаторов является ключевым аспектом, так как увеличение времени воздействия йода на полимер может влиять на структуру и жесткость материала. Изучение зависимости микротвердости от времени йодирования позволяет оптимизировать процесс изготовления поляризаторов, улучшив их механическую стойкость и долговечность.

### Материалы и методы исследования

Для исследования микротвердости поверхности йодно-поливинилспиртовых поляризаторов были использованы полимерные образцы, состоящие из 8%-го водного раствора ПВС, подвергнутые процессу йодирования для улучшения их поляризационных свойств. В качестве источника йодирования использовался водный раствор йодистого калия (KI), создающий оптимальные условия для внедрения молекул йода в объем поливинилспиртовой пленки в различных временных интервалах, что позволяет изучить влияние времени йодирования на механические свойства материала.

\* Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ 24-23-00021.

## Внутренние напряжения и их источники в технически чистой УМЗ-меди после интенсивной пластической деформации\*

Н.А. Попова<sup>1</sup>, Е.Л. Никоненко<sup>1</sup>, Ю.В. Соловьева<sup>1</sup>, В.А. Старенченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

Методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии проведено исследование зеренной структуры внутренних напряжений и их источников в технически чистой ультрамелкозернистой меди, полученной в условиях интенсивной пластической деформации кручением под высоким давлением. Установлено, что интенсивная пластическая деформация кручением под высоким давлением привела к образованию в ультрамелкозернистой меди частиц вторичных фаз, обладающих нанометрическим размером и локализованных внутри, на границах и в стыках зерен. Выявлены источники внутренних напряжений и определена их амплитуда. Установлено, что источниками внутренних напряжений являются: стыки зерен, в которых присутствуют или отсутствуют частицы вторичных фаз; границы зерен, свободные от частиц вторичных фаз; частицы, расположенные на дислокациях внутри зерен, и, наконец, дислокационная структура. Установлено, что внутренние напряжения от всех источников охватывают все зерна независимо от их внутренней структуры и носят преимущественно упругий характер.

**Ключевые слова:** интенсивная пластическая деформация кручением под высоким давлением, ультрамелкозернистая медь, зерно, стык зерен, частица, кривизна-кручение кристаллической решетки, объемная доля, внутренние напряжения.

### Введение

В настоящее время существует целый ряд методов интенсивной пластической деформации (ИПД) [1–7], приводящих к измельчению зерен. Одним из таких методов является интенсивная пластическая деформация кручением под высоким давлением (ИПДК) [1, 8–11]. Это метод, когда образец, имеющий форму тонкого диска, подвергается деформации кручением под высоким гидростатическим давлением [1]. Таким путем удастся получать материалы с ультрамелким размером зерен (УМЗ). Известно, что отличие мелкозернистой структуры от фрагментированной состоит в том, что зерна, как правило, ограничены большеугловыми границами (угол разориентировки больше  $6^\circ$ ), а фрагменты – малоугловыми границами (угол разориентировки меньше  $6^\circ$ ) [12].

Известно также, что структура УМЗ-материалов может быть стабилизирована наноразмерными частицами вторых фаз, расположенными на границах и в стыках зерен [1, 13–16]. Расположенные на границах и в стыках зерен эти частицы препятствуют перемещению границ и тем самым участвуют в формировании УМЗ-структуры [1, 13].

Однако УМЗ-материалы, полученные методом ИПД, обладают значительной избыточной энергией, локализованной в дефектной структуре границ зерен и фрагментов, в дислокационной структуре. Значительная часть избыточной энергии УМЗ-материала – это упругая энергия искажения кристаллической решетки [1, 15, 17, 18]. Исследование природы внутренних упругих напряжений УМЗ-материалов является важной задачей. Изучение и анализ внутренних упругих напряжений проводится различными методами. Однако при использовании большинства методов удастся определить лишь интегральные характеристики, усредненные по всему объему образца. Поэтому к настоящему времени информация как об амплитуде внутренних напряжений, так и об их источниках остается незначительной. Эта задача наиболее полно решается методом просвечивающей электронной микроскопии.

Настоящая работа посвящена детальному исследованию внутренних напряжений и идентификации их источников в технически чистой УМЗ-меди, полученной методом ИПДК. Подчеркнем, что это описание является количественным и статистическим.

\* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

## Влияние порогов на расширение октаэдрической дислокационной петли и генерацию точечных дефектов в пластически деформируемых ГЦК-кристаллах\*

Д.Н. Черепанов<sup>1,2</sup>, И.Г. Вовнова<sup>1</sup>, Ю.В. Соловьева<sup>1</sup>, В.А. Старенченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

<sup>2</sup> Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

Исследуется влияние порогов, образующихся на винтовых сегментах дислокационной петли при пересечении дислокаций некомпланарных систем скольжения, на динамику расширения дислокационных петель, испускаемых источниками Франка – Рида, и генерацию точечных дефектов при волочении этих порогов в ГЦК-кристалле. Модель движения сегментов расширяющейся дислокационной петли, учитывающая влияние порогов на сопротивление движению дислокационных сегментов винтовой ориентации, представлена в виде трех дифференциальных уравнений, два из которых описывают динамику движения петли, а третье – кинетику порогов. Уравнение кинетики порогов содержит постоянную среднюю плотность порогов в качестве параметра. Показано, что степень разориентированности дислокационной структуры приводит к различию в динамике накопления порогов, в значениях средней плотности порогов на винтовых сегментах и скорости движения винтовых и краевых сегментов на различных стадиях деформации.

**Ключевые слова:** монокристаллы, ГЦК-решетка, металлы, сдвиговая пластическая деформация, октаэдрическое скольжение, сдвиговое напряжение, математическое моделирование, точечные дефекты, дислокации, плотность порогов, дислокационный источник.

### Введение

Ступеньки на дислокациях, возникающие при пересечении отталкивающихся дислокаций некомпланарных систем скольжения, были описаны в классических работах дислокационной физики [1], и в настоящее время вызывают большой интерес [2, 3]. Прежде всего это связано с известным механизмом генерации точечных дефектов [4, 5] вследствие неконсервативного движения (волочения) ступенек на винтовых сегментах, называемых в этом случае порогами.

Гипотеза о том, что при испытаниях на растяжение, сжатие и сдвиг большинство образующихся ступенек пересечения должны порождать межузлия [6], была проверена для ГЦК-кристаллов на ранней стадии деформирования [7, 8]. Однако оказалось, что с ростом плотности дислокаций количество порогов, порождающих межузлия, приближается к числу порогов, порождающих вакансии [8].

Кинетику порогов в случае термически активируемого движения дислокации с постоянной скоростью исследовали Nicholas J.F. [9], Mott N.F. [10], Hirsch P.V. [11], Инденбом В.Л. [12], Orlov A.N. [13]. Основным результатом исследований был вывод о том, что на винтовой дислокации образуется стационарная плотность порогов [14]. Интенсивность накопления порогов зависит от их способности двигаться вдоль линии дислокации, взаимодействовать и аннигилировать друг с другом, а также от интенсивности взаимодействия порогов с другими дефектами на линии дислокации [13].

Выражение для стационарной плотности порогов [14, 15] было использовано для исследования генерации и накопления точечных дефектов в условиях термически активируемой сдвиговой деформации ГЦК-металлов с использованием математической модели [16], основанной на концепции упрочнения и динамического возврата, которая связывает упрочнение с образованием дефектов кристаллического строения, а отдых – с их исчезновением в результате взаимодействий или с самоорганизацией скоплений дефектов в низкоэнергетические субструктуры.

Несмотря на имеющиеся экспериментальные данные [17, 18] по концентрации точечных дефектов, их сравнение с данными математического моделирования [16, 19, 20] по-прежнему затруднено, поскольку моделирование проводится в условиях, отличных от условий эксперимента. В частности, для эксперимента используются образцы с субструктурой, далекой от задаваемой на-

\* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

УДК 53.091

DOI: 10.17223/00213411/68/8/9

**Влияние механической активации на синтез трисилицида пентаниобия\***О.А. Шкода<sup>1</sup><sup>1</sup> *Томский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, г. Томск, Россия*

Исследовано влияние совместной механической активации компонентов для получения трисилицида пентаниобия в режиме теплового взрыва. Эксперименты проводили на смеси порошков ниобия и кремния стехиометрического состава  $Nb_5Si_3$ . Определены условия механической активации и температурные характеристики последующего самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, который проходит в твердофазном режиме с образованием однофазного продукта.

**Ключевые слова:** механическая активация, синтез, тепловой взрыв, трисилицид пентаниобия, слоистый агломерат, структура, ниобий, кремний, характеристические температуры.

**Введение**

Силициды находят широкое применение в различных областях науки и техники, обеспечивая реализацию технологических процессов и создание новых материалов [1, 2]. Особую востребованность демонстрируют дисилициды тугоплавких металлов. Это объясняется их комплексом таких ценных свойств, как высокая жаростойкость и термическая стойкость, сохранение механических характеристик в широком интервале температур, высокая электропроводность, устойчивость в среде других металлов [3, 4]. Дисилициды тугоплавких металлов применяют в аэрокосмической промышленности, для изготовления нагревательных элементов высокотемпературных печей и в качестве защитных высокотемпературных покрытий [5, 6].

В современной разработке жаропрочных материалов наблюдается тенденция замены никелевых сплавов на интерметаллидные естественно-композиционные материалы, особенно на основе системы Nb–Si. Эти композиты состоят из пластичной ниобиевой матрицы, упрочненной силицидом ниобия  $Nb_5Si_3$ , что обеспечивает снижение плотности на 20–25% (до 7.2–7.5 г/см<sup>3</sup>) и повышение рабочей температуры до 1350 °С по сравнению с никелевыми сплавами. Такая комбинация улучшенных характеристик делает актуальным изучение этих материалов и новых возможностей их получения. В данной работе исследуется возможность получения силицида ниобия  $Nb_5Si_3$  самораспространяющимся высокотемпературным синтезом (СВС) с использованием механической активации. СВС-метод имеет такие преимущества, как низкое энергопотребление, простое оборудование, высокая производительность, чистота продуктов и экологическая безопасность. Использование предварительной механической активации (МА) позволяет иметь дополнительную возможность для влияния на синтезированный продукт.

В низкоэнергетических системах, таких как Nb–Si, механическая активация играет ключевую роль в обеспечении протекания самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. МА позволяет аккумулировать энергию в шихте и снизить кинетические ограничения для массопереноса, что делает возможным инициирование СВС при последующем нагреве. Без МА системы, подобные Si–C и Nb–Si, не способны поддерживать самораспространяющуюся реакцию. В частности, для системы Nb–Si, как низкоэнергетической, предварительная активация является необходимым условием для проведения СВС [7–11].

Существующие способы получения силицидов ниобия разнообразны и обладают как преимуществами, так и недостатками, включая высокие температуры и длительное время синтеза [7, 12–14]. В работе [10] изучалось влияние механической активации на послойный СВС. Были определены оптимальные параметры механоактивации для инициирования СВС, а также проанализирован фазовый состав исходной, механоактивированной шихты и конечного продукта. Описаны условия синтеза однофазного  $NbSi_2$  в различных режимах горения [11]. Значительное внимание уделяется изучению механических свойств силицидов ниобия. В [15] установлена связь между концентрацией кремния и механическими свойствами соединений Nb–Si. Показано, что фаза

\* Работа выполнена в рамках государственного задания ТНЦ СО РАН (проект № FWRF-2024-0009).

## ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194:535.37

DOI: 10.17223/00213411/68/8/10

**О физических механизмах формирования и особенностях интерпретации Стоксова сдвига в молекулах органических соединений\***Г.В. Майер<sup>1</sup>, О.Н. Чайковская<sup>1</sup>, О.К. Базыль<sup>1</sup>, Е.Н. Бочарникова<sup>1</sup>, Н.П. Безлепкина<sup>1</sup><sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Рассматриваются особенности протекания совокупности процессов электронной релаксации и безызлучательной конверсии в результате поглощения света в молекулах органических соединений. Обсуждается физический механизм флуоресценции как спонтанного излучения из равновесного состояния. На примере ряда органических молекул (анилин, сульфаниламид и сульфатуанидин) проводится обсуждение особенностей формирования и интерпретации Стоксова сдвига. Предлагается отнесение электронного зарядового распределения к физическому проявлению волн де Бройля.

**Ключевые слова:** Стоксов сдвиг, поглощение, спонтанное испускание, флуоресценция, зарядовое распределение, волны де Бройля, анилин, сульфаниламид, сульфатуанидин.

**Введение**

Сравнительное исследование спектров поглощения и люминесценции органических молекул позволяет установить физические механизмы и закономерности преобразования поглощенной энергии электромагнитного поля. Одной из интегральных величин, характеризующих степень трансформации поглощенной световой энергии, является Стоксов сдвиг, канонически определяемый как разность максимумов спектра поглощения (спектра возбуждения флуоресценции) и флуоресценции (как правило, выраженных  $\text{см}^{-1}$ ). При этом нередко при интерпретации Стоксова сдвига неявно предполагается, что поглощение и флуоресценция осуществляются с участием одного и того же электронно-возбужденного состояния, что далеко не всегда является верным и может приводить к неоднозначной интерпретации и определению величины Стоксова сдвига.

Большая величина Стоксова сдвига позволяет разделить возбуждающий и испускаемый оптические сигналы, что обуславливает широкое применение таких систем в технических устройствах лазерной физики, флуоресцентной микроскопии, в биомедицинских исследованиях, инициирует создание органических люминофоров с аномально большим Стоксовым сдвигом [1]. В этой связи актуальными являются исследования элементарных релаксационных процессов, влияющих на величину Стоксова сдвига. В частности, в работе [2] достаточно подробно рассмотрены примеры фотохимических процессов, влияющих на величины Стоксова сдвига в органических соединениях. В настоящей публикации предлагается рассмотрение физических аспектов внутримолекулярных релаксационных процессов, особенностей электронных зарядовых распределений и некоторых вопросов применения квантово-химических расчетов при интерпретации Стоксова сдвига в молекулах органических соединений.

Спектр поглощения (рис. 1, переход 1) образуется вынужденным переходом в адиабатическое чисто-спиновое синглетное состояние, являющееся суперпозицией стационарных состояний молекулы [3, 4], или, в общем случае, в совокупность таких адиабатических состояний. При этом максимум спектра поглощения формируется франк-кондоновским переходом из основного стационарного  $S_0$ -состояния в состояние  $S_n^*$  (рис. 1).

Отметим очень важное, не всегда в явном виде учитываемое общее обстоятельство: для стационарных состояний любых квантовых систем (а не только простейших, таких как атом водорода, для которого Н. Бором хорошо разработаны общетеоретические представления) должны в принципе выполняться условия квантования, в соответствии с которыми на длине окружности, соответствующей орбите электрона, должно укладываться целое число длин волн де Бройля [5].

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

УДК 537.632.5:535.34

DOI: 10.17223/00213411/68/8/11

## Влияние паров ацетона и меркаптанов на измерение концентрации паров ртути анализатором на основе поперечного эффекта Зеемана\*

В.В. Татур<sup>1</sup>, А.А. Тихомиров<sup>1</sup><sup>1</sup> *Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, г. Томск, Россия*

Исследовано влияние ацетона ( $C_3H_6O$ ) и смеси сероводорода с меркаптанами ( $H_2S + CH_3SH + C_2H_5SH$ ) на результаты работы анализатора концентрации паров ртути на основе поперечного эффекта Зеемана, линии излучения которого попадают на электронно-колебательные полосы поглощения этих газов в УФ-диапазоне ( $\lambda = 253.7$  нм). Отдельно оценено влияние перечисленных газов на результаты показаний анализатора при введении их в измерительную кювету прибора, а также на изменение его показаний при измерении известной концентрации паров ртути при плавном добавлении в измерительную кювету различных порций  $C_3H_6O$  и смеси ( $H_2S + CH_3SH + C_2H_5SH$ ). Пары ацетона, в зависимости от их концентрации, приводят как к увеличению, так и к уменьшению показаний анализатора, измеряющего концентрацию Hg; пары смеси сероводорода с меркаптанами в основном уменьшают измеряемую концентрацию ртути.

**Ключевые слова:** анализатор концентрации ртути, поперечный эффект Зеемана, ацетон, меркаптаны и сероводород, регистрация.

### Введение

В последнее время при измерении содержания паров ртути (Hg) во многих технологических процессах, в том числе и при подготовке к транспортировке природного газа (ПГ), применяются методы атомно-абсорбционного анализа [1–4]. При этом используются анализаторы концентрации паров Hg, основанные на продольном и поперечном эффекте Зеемана [1–2, 5–11]. В этих анализаторах источником излучения служит ртутная капиллярная лампа (РКЛ), помещенная в магнитное поле, которое вызывает расщепление резонансной линии излучения  $\lambda_0 = 253.7$  нм на  $\pi$ -,  $\sigma^+$ - и  $\sigma^-$ -компоненты [1, 5], что обеспечивает реализацию методики дифференциального поглощения при измерениях концентрации Hg в газовой среде.

Наличие в составе исследуемого воздуха, кроме паров Hg, примесных газов [12], имеющих электронно-колебательные полосы поглощения в УФ-диапазоне вблизи 253.7 нм [13–19], влияет на работу анализаторов, основанных на использовании эффекта Зеемана [9, 11].

В работе [11] показано, что на результаты измерений концентрации Hg влияют такие примесные газы, как сероводород  $H_2S$ , диоксид серы  $SO_2$ , бензол  $C_6H_6$ , окислы азота  $NO_x$ , меркаптаны (метантиол  $CH_3SH$  и этантиол  $C_2H_5SH$ ). Их полосы поглощения попадают на линии излучения анализатора РА-915М, использующего в качестве источника излучения РКЛ при продольном эффекте Зеемана ( $\sigma^+$ - и  $\sigma^-$ -компоненты резонансной линии  $\lambda_0 = 253.7$  нм) [4, 5]. В [9] приведены результаты исследования влияния некоторых газов ( $NO_2$ ,  $SO_2$ ,  $C_6H_6$ ,  $C_3H_6O$  и  $O_3$ ) на работу анализатора, использующего РКЛ с естественным изотопным составом ртути при поперечном эффекте Зеемана, когда излучаются  $\pi$ -,  $\sigma^+$ - и  $\sigma^-$ -компоненты линии  $\lambda_0 = 253.7$  нм, и представлены минимальные концентрации перечисленных примесных газов, которые регистрируются этим анализатором.

В [20, 21] представлены результаты исследования влияния паров бензола ( $C_6H_6$ ) и толуола ( $C_6H_5CH_3$ ) на измерение концентрации Hg с помощью анализатора ДОГ-07 [10], использующего РКЛ с естественным изотопным составом при поперечном эффекте Зеемана. Показано, что молекулы этих газов, имеющих различную структуру симметрии, по-разному влияют на результаты измерения концентрации Hg.

Целью настоящей работы является оценка показаний анализатора ДОГ-07 при плавном введении в его измерительную кювету паров ацетона  $C_3H_6O$ , а также смеси сероводорода и меркаптанов ( $H_2S + CH_3SH + C_2H_5SH$ ), молекулы которых различны по структуре, но обладают дипольными моментами. Кроме того, оценено влияние перечисленных газов на результаты измерения концентрации паров Hg, предварительно введенных в измерительную кювету ДОГ-07, при последующем добавлении в эту кювету известных концентраций этих газов.

\* Работа выполнена в рамках государственного задания ИМКЭС СО РАН (проект № FWRG-2021-0006).

## Диодная лазерная система для дистанционного зондирования углекислого газа в атмосфере\*

М.П. Герасимова<sup>1</sup>, С.А. Садовников<sup>1</sup>, С.В. Яковлев<sup>1</sup>,  
А.В. Крючков<sup>1</sup>, В.В. Филатов<sup>1</sup>, Н.С. Кравцова<sup>1</sup>,  
А.А. Маркова<sup>1</sup>, Ю.В. Кистенев<sup>2</sup>, О.А. Романовский<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

Необходимость мониторинга антропогенного загрязнения атмосферы обуславливает разработку технических средств дистанционного зондирования в городских агломерациях, вблизи частных промышленных предприятий и автомагистралей. Углекислый газ ( $\text{CO}_2$ ) при текущих значениях относят к одному из основных газовых компонентов атмосферы, оказывающих вклад в парниковый эффект и экологическую обстановку в местах проживания населения. Для решения задачи зондирования  $\text{CO}_2$  в концентрациях от фоновых (440 ppm) до предельно допустимых (ПДК – 4917 ppm) разработана диодная лазерная система, перестраиваемая в полосе поглощения  $\text{CO}_2 \sim 1572$  нм. Проведено численное моделирование спектров поглощения атмосферы в исследуемом спектральном диапазоне, которое позволило оценить влияние и вклад мешающего поглощения сторонними газами в зондирование  $\text{CO}_2$ . Калибровка положения длины волны лазерного диода с применением высокоточного измерителя при различных значениях температуры и тока потребления позволила настроить диапазон генерации лазера с перекрытием изолированной линии поглощения  $\text{CO}_2$ . На основе полученных результатов сформирован вариант технического исполнения системы, проведены эксперименты по регистрации спектров пропускания с применением газовой кюветы и зарегистрированы лидарные сигналы.

**Ключевые слова:** перестраиваемая диодная лазерная абсорбционная спектроскопия, углекислый газ, линия поглощения, дистанционное зондирование.

### Введение

Увеличение концентрации парниковых газов за счет естественного и антропогенного происхождения является определяющим фактором изменения климата и глобального потепления.

Углекислый газ ( $\text{CO}_2$ ) является сильнейшим парниковым газом после водяного пара ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Вклад  $\text{CO}_2$  в парниковый эффект достигает 25%. Парниковые газы в концентрациях выше предельно допустимых концентраций (ПДК) считаются загрязняющими веществами. Основными источниками антропогенного  $\text{CO}_2$  являются сжигание ископаемого топлива (уголь, нефть, газ) и попутного газа, производство цемента, выхлопные газы бензиновых и дизельных двигателей. Поэтому разработка новых методов и средств дистанционного измерения частных случаев выбросов  $\text{CO}_2$  в атмосферу является актуальной.

Важными особенностями систем дистанционного лазерного зондирования являются их работоспособность как в дневное, так и в ночное время суток, а также возможность измерения исследуемого газа в разных направлениях. Этот фактор является важным для мониторинга выбросов с небольших территорий, поскольку концентрация и динамика распространения этих выбросов сильно изменчивы в малых временных и пространственных масштабах.

Спектроскопические методы обнаружения газов, в частности лазерная абсорбционная спектроскопия (ЛАС) [1, 2], хорошо зарекомендовали себя в решении задач дистанционного зондирования атмосферы. В ЛАС используются лазеры, излучение которых настроено на информативные диапазоны (длины волн) зондирования и ослабляется за счет поглощения целевыми молекулами (газами) при распространении через исследуемую среду. ЛАС обладает высокой спектральной селективностью и является одним из самых чувствительных методов бесконтактного (дистанционного) газоанализа. Перечисленные свойства являются основными преимуществами по сравнению с другими контактными (нелазерными) методами и средствами зондирования.

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-557 от 25.04.2024).

*Ежемесячный научный журнал*

**ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА**  
**IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA**

**2025. Т. 68. № 8**

**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 12.08.2025. Выпуск в свет 18.08.2025. Заказ № 6419.  
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая.  
Усл. п. л. 12.09. Уч.-изд. л. 13.54. 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](mailto:rio.tsu@mail.ru)

