

I S S N 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ

ФИЗИКА

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

ФИЗИКА МАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ

11·2025

ИЗДАНИЕ
ТОМСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ISSN 0021–3411

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ
ФИЗИКА

IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

Том 68

Ноябрь, 2025

№ 11 (816)

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., акад. 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 Оронцио, 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., Academician 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
Sarandin A.A., Corr. Member RAS, Vladivostok, Russia
Surzhikov A.P., Professor, Tomsk, Russia
Sukhanov D.Y., Professor, Tomsk, Russia
Tao Wen-Quan, Academician of the Chinese Academy
of Sciences, Xi'an, China
Uglov V.V., Professor, Minsk, Republic of Belarus
Ushakov V.Ya., Professor, Tomsk, Russia
Tchaikovskaya O.N., Professor, Tomsk, Russia
Cherepanov V.N., Professor, Tomsk, Russia
Chumlyakov Y.I., Professor, Tomsk, Russia
Shapovalov A.V., Professor, Tomsk, Russia
Shipilov S.E., Professor, Tomsk, Russia

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

КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

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

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Бобровников С.М., Горлов Е.В., Жарков В.И., Мурашко С.Н., Михайлов Ю.М. Одновременное дистанционное обнаружение поверхностных следов органоfosфатов и нитросоединений.....	7
Кудряшова О.Б., Грузнов В.М., Кихтенко А.В., Балдин М.Н., Ворожцов А.Б., Михайлов Ю.М. Миграция паров от закопанных в землю боеприпасов.....	16
Вражнов Д.А., Князькова А.И., Третьяков А.К., Шипилов С.Э., Кистенев Ю.В. Нейросетевая предиктивная модель для количественного анализа данных абсорбционной ИК-спектроскопии атмосферных газов	27
Дёмин В.В., Юдин Н.Н., Половцев И.Г., Зиновьев М.М., Кузнецов В.С., Кулеш М.М., Слюнько Е.С., Подзывалов С.Н., Баалбаки Х. Алгоритм восстановления голограммических изображений дефектов на основе модернизированного быстрого преобразования Фурье	35
Димов М.А., Шипилов С.Э., Цепляев И.С., Зеар А. Коррекция аппаратных амплитудно-фазовых искажений в фазированных антенных решетках.....	47
Панченко Ю.Н., Алексеев С.В., Андреев М.В., Пучкин А.В., Лубенко Д.М., Бобровников С.М., Михайлов Ю.М. Узкополосный александритовый лазер с внешним селективным резонатором	54
Распопин Г.К., Паулиш А.Г., Михайлов Ю.М., Шкуринов А.П., Кистенев Ю.В. Экспериментальное исследование многопроходной газовой ячейки с изменяемой длиной оптического пути для абсорбционного ТГц-спектрометра.....	60
Борисов А.В., Николаев В.В., Кистенев Ю.В. Метод квазинепрерывного контроля частоты акустического резонанса фотоакустического детектора на основе кварцевого резонатора	68
Вражнов Д.А., Князькова А.И., Снегерев М.С., Распопин Г.К., Кистенев Ю.В. Разведочный анализ спектров поляризационного комбинационного рассеяния кристаллов ZnGeP ₂ методами машинного обучения.....	75
Князькова А.И., Снегерев М.С., Вражнов Д.А., Распопин Г.К., Кистенев Ю.В. Регистрация фононных мод кристалла ZnGeP ₂ с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния	85
Снегерев М.С., Князькова А.И., Вражнов Д.А., Распопин Г.К., Кистенев Ю.В. Предсказание частот фононных мод халькопиритов с использованием графовой нейронной сети	92
Третьяков А.К., Николаев В.В., Кистенев Ю.В. Определение концентрации летучих молекулярных маркеров эвтрофикации водоемов с использованием терагерцовой спектроскопии и методов машинного обучения	99

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

Гаенко О.И., Кудряшова О.Б., Титов С.С., Клименко В.А., Муравлев Е.В., Букреев И.Б., Соколов С.Д. Нейтрализация выбросов вредных газов в помещении с помощью быстро распыленных мелкодисперсных частиц порошков	109
--	-----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Григорьев М.В., Егошин В.А., Ахмадиева А.А., Савченко Н.Л., Ермолаев Е.В., Ахметгалиев Р.Ш., Шугаев Ш.Н., Жуков И.А. Влияние процесса формирования анонитных включений на фазовый состав, структуру и физические свойства корундовой керамики	118
Ахмадиева А.А., Хрусталёв А.П., Валихов В.Д., Хмелёва М.Г. Исследование влияния термообработки на структуру, фазовый состав и механические свойства сплава МЛ12 с добавкой наночастиц AlN	128
Марченко Е.С., Гарин А.С., Скрипняк В.А. Влияние поровой структуры на упругие характеристики сплавов NiTi, полученных методом СВС	136
Сагун А.И., Сенькина Е.И., Лернер М.И. Применение порошковых композиций изnano- и микрочастиц оксида алюминия для аддитивного формования деталей сложной формы экструзионным методом	144
Матвиенко О.В., Данейко О.И., Хрусталёв А.П., Валихов В.Д., Жуков И.А. Исследование релаксации напряжений вследствие несоответствия коэффициентов теплового расширения матрицы и упрочняющих частиц в композитах на основе алюминия.....	151
Ахмадиева А.А., Хрусталёв А.П., Григорьев М.В., Жуков И.А. Влияние состава исходных порошков и температуры спекания на структуру и свойства керамики на основе оксида алюминия.....	161
Криницын М.Г., Сенькина Е.И., Сагун А.И., Рюмин Е.Е., Лернер М.И. Влияние наноразмерного оксида алюминия и полимерного связующего на структуру и механические свойства композитов на основе оксида алюминия	170

Ерошенко А.Ю., Шаркеев Ю.П., Глухов И.А., Химич М.А., Уваркин П.В., Толмачев А.И. Температурная зависимость параметров структуры и механических свойств сплава Ti–45Nb в ультрамелкозернистом состоянии	175
Турова К.А., Байгонакова Г.А., Марченко Е.С. Исследование структуры и механических свойств образцов из никелида титана, полученных методом SLM.....	185

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Третьяков А.К., Николаев Р.В., Кистенев Ю.В., Шипилов С.Э. Применение модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекулы OCS.....	192
Бондарчук И.С., Клименко В.А., Ворожцов А.Б. Идентификация размера и концентрации субмикронных частиц на основе модели рэлеевского рассеяния	196

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Bobrovnikov S.M., Gorlov E.V., Zharkov V.I., Murashko S.N., Mikhailov Yu.M. Simultaneous remote detection of surface traces of organophosphates and nitrocompounds	7
Kudryashova O.B., Gruznov V.M., Kikhtenko A.V., Baldin M.N., Vorozhtsov, Mikhailov Yu.M. Migration of vapors from buried ordnance	16
Vrazhnov D.A., Knyazkova A.I., Tretyakov A.K., Shipilov S.E., Kistenev Yu.V. Neural network predictive model for quantitative analysis of atmospheric gas absorption IR spectroscopy data.....	27
Dyomin V.V., Yudin N.N., Polovtsev I.G., Zinoviev M.M., Kuznetsov V.S., Kulesh M.M., Slyunko E.S., Podzyvalov S.N., Baalbaki H. Algorithm for reconstructing holographic images of defects based on a modified fast Fourier transform.....	35
Dimov M.A., Shipilov S.E., Tsepelyaev I.S., Zear A. Correction of hardware amplitude-phase distortions in phased antenna arrays	47
Panchenko Yu.N., Alekseev S.V., Andreev M.V., Puchikin A.V., Lubenko D.M., Bobrovnikov S.M., Mikhailov Yu.M. Narrow-band alexandrite laser with external selective resonator	54
Raspopin G.K., Paulish A.G., Mikhaylov Yu.M., Shkurinov A.P., Kistenev Yu.V. Experimental study of a multipass gas cell with a variable optical pathlength for a THz absorption spectrometer	60
Borisov A.V., Nikolaev V.V., Kistenev Yu.V. The method of quasi-continuous monitoring of the acoustic resonance frequency of a photoacoustic detector based on a quartz resonator	68
Vrazhnov D.A., Knyazkova A.I., Snegerev M.S., Raspopin G.K., Kistenev Yu.V. Exploratory analysis of polarized Raman spectra of ZnGeP ₂ crystals using machine learning methods	75
Knyazkova A.I., Snegerev M.S., Vrazhnov D.A., Raspopin G.K., Kistenev Yu.V. Registration of phonon modes of a ZnGeP ₂ crystal using Raman spectroscopy	85
Snegerev M.S., Knyazkova A.I., Vrazhnov D.A., Raspopin G.K., Kistenev Yu.V. Prediction of phonon mode frequencies in chalcopyrites using a graph neural network	92
Tretyakov A.K., Nikolaev V.V., Kistenev Yu.V. Determination of concentration of volatile molecular markers of water bodies eutrophication using terahertz spectroscopy and machine learning methods	99

THERMAL PHYSICS AND HYDRODYNAMICS

Gaenko O.I., Kudryashova O.B., Titov S.S., Klimenko V.A., Muravlev E.V., Bukreev I.B., Sokolov S.D. Neutralization of harmful gases indoors by rapidly sprayed fine powder particles	109
---	-----

CONDENSED-STATE PHYSICS

Grigoriev M.V., Egoshin V.A., Akhmadieva A.A., Savchenko N.L., Ermolaev E.V., Akhmetgaliev R.S., Shugaev S.N., Zhukov I.A. Influence of the process of formation of anorthite inclusions on the phase composition, structure, and physical properties of corundum ceramics	118
Akhmadieva A.A., Khrustalyov A.P., Valikhov V.D., Khmeleva M.G. Study of the effect of heat treatment on the structure, phase composition, and mechanical properties of ML12 alloy with AlN nanoparticles added	128
Marchenko E.S., Garin A.S., Skripnyak V.A. Influence of pore structure on elastic characteristics of NiTi alloys produced by SHS method	136
Sagun A.I., Senkina E.I., Lerner M.I. Application of powder compositions from nano- and microparticles of aluminum oxide for additive molding of complex-shaped parts by extrusion method	144
Matvienko O.V., Daneyko O.I., Khrustalyov A.P., Valikhov V.D., Zhukov I.A. Study of stress relaxation due to mismatch of thermal expansion coefficients of matrix and reinforcing particles in aluminum-based composites	151
Akhmadieva A.A., Khrustalyov A.P., Grigoriev M.V., Zhukov I.A. Influence of the composition of initial powders and sintering temperature on the structure and properties of aluminum oxide based ceramics	161
Krinityn M.G., Senkina E.I., Sagun A.I., Ryumin E.E., Lerner M.I. Influence of nano-sized aluminum oxide and polymer binder on the structure and mechanical properties of aluminum oxide-based composites	170
Eroshenko A.Yu., Sharkeev Yu.P., Glukhov I.A., Khimich M.A., Uvarkin P.V., Tolmachev A.I. Temperature dependence of structural parameters and mechanical properties of Ti–45Nb alloy in ultrafine-grained state	175
Turova K.A., Baigonakova G.A., Marchenko E.S. Study of the structure and mechanical properties of titanium nickelid samples obtained by the SLM method	185

BRIEF COMMUNICATIONS

Tretyakov A.K., Nikolaev R.V., Kistenev Yu.V., Shipilov S.E. The application of modified high convergence genetic algorithm for approximation of potential energy surface of OCS molecule.....	192
Bondarchuk I.S., Klimenko V.A., Vorozhtsov A.B. Identification of size and concentration of submicron particles on the basis of Rayleigh scattering model	196

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.37

DOI: 10.17223/00213411/68/11/1

Одновременное дистанционное обнаружение поверхностных следов органофосфатов и нитросоединений*

С.М. Бобровников^{1,2}, Е.В. Горлов^{1,2}, В.И. Жарков¹, С.Н. Мурашко^{1,2}, Ю.М. Михайлов²

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

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

Обсуждается возможность одновременного дистанционного обнаружения поверхностных следов нитросоединений (НС) и органофосфатов (ОФ) методом лазерной фрагментации/лазерно-индуцированной флуоресценции. Впервые показано, что длина волны возбуждающего лазерного излучения, попадающая в область перекрывающихся вращательных линий $\gamma(0, 2)$ - и $\gamma(1, 1)$ -полос спектров поглощения соответственно NO- и PO-фрагментов, может быть использована для одновременного обнаружения НС и ОФ с возможностью идентификации класса соединения.

Ключевые слова: нитросоединения, органофосфаты, следы, лазерная фрагментация, оксид азота, NO-фрагменты, оксид фосфора, PO-фрагменты, лазерно-индуцированная флуоресценция.

Введение

В задачах антитеррористической деятельности выявление любого проявления взрывного устройства (ВУ) может иметь решающее значение в предотвращении возможных трагических последствий. Именно поэтому во многих странах не прекращаются работы по модернизации существующих и разработке новых методов и технологий обнаружения взрывных устройств как по прямым демаскирующим признакам (пары и следы используемого взрывчатого вещества), так и по косвенным (характерные составные элементы ВУ, форма и т.п.).

Основным направлением развития технологий обнаружения является повышение чувствительности методов при сохранении высокой устойчивости к ложным срабатываниям (селективности). Высокая чувствительность обеспечивает быстроту и надежность обнаружения, а достаточная селективность позволяет выделять сигнал на фоне множества возможных мешающих факторов и осуществлять процесс непрерывного мониторинга безопасности объекта, не отвлекаясь на сигналы ложной тревоги [1]. Вышесказанное справедливо и в отношении технических средств химической разведки, используемых для своевременного выявления опасности химического заражения и оперативного принятия мер по его ликвидации [2].

В настоящее время системы мониторинга воздушной среды и состояния поверхности объектов в основном базируются на использовании методов и средств контроля локального типа (спектрометрия ионной подвижности, газовая хроматография, масс-спектрометрия и др.). Применение таких методов, как правило, предусматривает предварительный пробоотбор, что делает невозможным проведение с их помощью оперативной диагностики состояния опасного загрязнения воздушной среды или поверхности объекта в режиме реального времени. Более того, процедура отбора проб может оказаться невозможной из-за физической недоступности объекта контроля.

В связи с этим средства дистанционного обнаружения отравляющих веществ (ОВ) и взрывчатых веществ (ВВ) могут рассматриваться в качестве составной части системы средств обеспечения безопасности, позволяющей повысить эффективность мероприятий по оперативному выявлению обстановки на безопасном расстоянии [1, 3]. Среди перспективных методов контроля стоит прежде всего выделить оптические (лазерные), принципиально отличающиеся возможностью дистанционных измерений [2, 4]. Некоторые из них (лазерно-искровая эмиссионная спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния, метод лазерной фрагментации/лазерно-индуцированной флуоресценции) воплощены в экспериментальных приборных разработках и испытаны в реальных

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

Миграция паров от закопанных в землю боеприпасов*

О.Б. Кудряшова¹, В.М. Грузнов², А.В. Кихтенко²,
М.Н. Балдин², А.Б. Ворожцов¹, Ю.М. Михайлов¹

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

² Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Проблема гуманитарного разминирования актуальна из-за неразорвавшихся боеприпасов, которые невозможно обнаружить стандартными методами. Один из способов – поиск следовых количеств веществ в воздухе и почве с помощью химических датчиков. Предложена математическая модель диффузии паров взрывчатых веществ через почву. Исследовано влияние влажности на скорость диффузии и введено характеристическое время обнаружения паров над почвой. Проведены оценки концентрации паров RDX, PETN и TNT в зависимости от глубины и продолжительности залегания вещества. Обнаружено, что рост концентрации паров нелинейный.

Ключевые слова: неразорвавшиеся боеприпасы, миграция паров, взрывчатые вещества, диффузионная модель, обнаружение паров.

Введение

Гуманитарное разминирование – это комплекс мероприятий, направленных на поиск, обнаружение и обезвреживание взрывоопасных предметов, таких как мины и неразорвавшиеся боеприпасы. Эти действия необходимы для защиты гражданского населения, восстановления безопасного использования земель для сельского хозяйства, строительства и других целей, а также для снижения экономических и социальных последствий после окончания боевых действий или в мирное время. Более ста миллионов таких опасных предметов осталось после военных конфликтов в 68 странах мира [1, 2]. В то время как ежегодно обезвреживается более ста тысяч мин, устанавливается около двух миллионов новых [3].

Поиск и обнаружение закопанных мин и неразорвавшихся боеприпасов – сложная техническая задача. Традиционно используются технологии поиска металлических предметов, но они имеют ограничения: ложные тревоги, неспособность обнаружить неметаллические боеприпасы, ограниченная глубина обнаружения, помехи от металла и электромагнитных излучений. Таким образом, необходимы сенсоры, регистрирующие пары взрывчатых веществ (ВВ), так как все мины и боеприпасы содержат взрывчатые компоненты. Перспективным направлением является разработка технологий дистанционного детектирования паров ВВ, мигрирующих из закопанных объектов к поверхности почвы. Однако низкая равновесная концентрация паров многих ВВ и сложность процессов их транспорта в природных средах создают значительные трудности.

Ключевой проблемой математического моделирования является адекватное описание миграции паров в пористой среде, в особенности влияние влажности почвы. Предыдущие модели часто содержали упрощения и некорректно описывали фундаментальное различие в скорости переноса вещества в сухих и водонасыщенных грунтах, что приводило к значительным погрешностям в прогнозах.

Цель данной работы – развитие более полной и точной диффузионной модели миграции паров взрывчатых веществ, нацеленной на устранение указанных недочетов. Новая модель призвана более корректно учсть влияние вариаций влажности почвы на параметры переноса. Для проверки адекватности модель верифицирована путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными. Ожидается, что предлагаемый подход позволит лучше прогнозировать диапазон возможных поверхностных концентраций паров ВВ для различных условий и типов источников, что необходимо для оценки принципиальной возможности их обнаружения.

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

Нейросетевая предиктивная модель для количественного анализа данных^{*} абсорбционной ИК-спектроскопии атмосферных газов

Д.А. Вражнов¹, А.И. Князькова¹, А.К. Третьяков¹, С.Э. Шипилов¹, Ю.В. Кистенев¹

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

Предложены предиктивные модели для оценки концентрации малых газовых примесей атмосферы на основе обучающей выборки модельных данных абсорбционной ИК-спектроскопии. Спектры таргетных газов взяты из базы HITRAN. Исследованы следующие методы машинного обучения: регрессии опорных векторов и на основе случайного леса, LASSO, искусственная нейронная сеть прямого распространения. Предложен новый конвейер машинного обучения на основе искусственной нейронной сети, превосходящий по точности остальные методы. Полученные модели могут быть использованы для оценки концентрации таргетных газов в атмосфере по данным абсорбционной ИК-спектроскопии.

Ключевые слова: ИК-спектроскопия атмосферы, машинное обучение, количественный анализ, малые газовые составляющие атмосферы, индустриальные выбросы.

Введение

Промышленные поллютанты антропогенного происхождения, попадая в атмосферный воздух, водные ресурсы и почвенный покров, оказывают прямое негативное воздействие на здоровье населения. Высокие концентрации опасных соединений коррелируют с ростом риска возникновения ряда патологий, а также со снижением показателей продолжительности и качества жизни [1]. Примерами технологических газовых загрязнителей, образующихся при сжигании ископаемых видов топлива, являются CO, CO₂, CH₄, SO₂, NO₂, N₂O [2, 3]. Примером индустриальных загрязнений, эмитируемых сельскохозяйственными предприятиями, является карбонилсульфид (OCS) [4].

Разработка экономичных и простых в применении методов детекции и количественного определения таких веществ представляет собой актуальную научно-практическую задачу. Одним из перспективных направлений в данной области является абсорбционная ИК-спектроскопия [5]. Одной из проблем количественного анализа данных ИК-спектроскопии атмосферы является перекрытие линий поглощения различных компонент. При этом задача разрешения спектральных криевых становится крайне трудной из-за наличия множества решений, сильной корреляции между значениями интенсивности сигнала на разных частотах. Для решения таких задач перспективны методы машинного обучения (МО), позволяющие предсказать по снятому спектру смеси и известным спектрам чистых веществ концентрацию отдельной компоненты смеси [6]. Однако вопрос выбора оптимального метода с точки зрения точности нахождения концентрации малых газовых компонент остается открытым.

В данной работе были исследованы следующие методы МО: регрессия опорных векторов, регрессия на основе случайного леса, Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO), искусственная нейронная сеть прямого распространения (табл. 1).

Таблица 1
Преимущества и недостатки исследованных методов МО

Название метода	Преимущества	Недостатки
Регрессия на основе случайного леса (PCSL) [7, 8]	Ансамбли регрессоров позволяют достигать высокой точности моделей и обладают хорошей работоспособностью к выбросам и шуму. Возможность работы с нелинейными зависимостями между входными и выходными данными. Встроенная оценка важности входных данных. Метод позволяет работать с мультиколлинеарными данными	Высокие вычислительные затраты при больших данных. Тенденция к переобучению на шумных данных. Чувствительность к несбалансированным данным. Требует оптимизации гиперпараметров

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).

Алгоритм восстановления голограмических изображений дефектов на основе модернизированного быстрого преобразования Фурье*

В.В. Дёмин¹, Н.Н. Юдин^{1,2,3}, И.Г. Половцев¹, М.М. Зиновьев^{1,2,3}, В.С. Кузнецов^{1,2},
М.М. Кулеш¹, Е.С. Слюнько^{1,2}, С.Н. Подзывалов^{1,2}, Х. Баалбаки¹

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

² ООО «Лаборатория оптических кристаллов», г. Томск, Россия

³ Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, Россия

Разработан прототип голограмической камеры, позволяющий определять местоположение и размеры объемных дефектов в полупроводниковых материалах. Для эффективной работы голограмической камеры, помимо оптимизации оптической схемы, был разработан алгоритм ускорения процесса восстановления изображений дефектов из цифровых голограмм, поскольку объем получаемых голограмических данных значителен и требует существенного повышения производительности обработки голограмических изображений. Разработанный алгоритм основан на быстром преобразовании Фурье со смешанным основанием, что позволяет более чем в 2 раза сократить время восстановления цифровых голограмических изображений по сравнению со стандартными алгоритмами.

Ключевые слова: цифровая голограмма, ZnGeP₂, объемные дефекты, полупроводниковые материалы, быстрое преобразование Фурье.

Введение

Цифровая голограмма используется для обнаружения, идентификации и измерения частиц различной природы в различных средах. Макет голограмической камеры был разработан для регистрации цифровых голограмм объема оптических и/или полупроводниковых материалов, содержащих объемные дефекты; последующей послойной, с заданным шагом, численной реконструкции голограмических изображений поперечных сечений исследуемого объема; обнаружения сечений, содержащих сфокусированные изображения дефектов (продольная цифровая фокусировка, аналогичная фокусировка в микроскопии), и определения продольных, поперечных координат, размеров, форм частиц и их распознавания.

Цифровая голограмма представляет собой дискретный двумерный массив оцифрованных значений интенсивности картины интерференции опорной и предметной волн, которые в осевой голограммии частиц представляют собой рассеянную на частицах и нерассеянную часть излучения, просвечивающего объем с частицами [1]. Этот массив принимается за распределение (с точностью до константы) поля в плоскости голограммы. Это распределение используется в качестве исходного, а численный расчет [2] дифракционного интеграла позволяет рассчитать распределение поля (а затем интенсивности) в плоскости на заданном расстоянии от плоскости голограммы, т.е. в соответствующем поперечном сечении исследуемого объема. При этом появляется возможность идентифицировать плоскость расположения дефекта в трехмерном пространстве.

Для эффективной работы такой голограмической камеры, помимо оптимизации оптической схемы устройства, оптимального подбора лазерного источника и матричного приемника [3], имеется потребность в алгоритмах, способных значительно ускорить процесс восстановления изображений частиц из цифровых голограмм, так как объем получаемых голограмических данных весьма значителен и требует кратного увеличения производительности обработки голограмических изображений.

Для вышеупомянутого расчета дифракционного интеграла применяются алгоритмы прямого дискретного преобразования Фурье (ДПФ) и обратного (ОДПФ). В ДПФ количество требуемых операций имеет степенную зависимость от размерности вычисляемого массива данных (в нашем случае оцифрованных значений интенсивности в плоскости записи голограммы), для восстановления изображения частицы из цифровой голограммы, записанной ПЗС-матрицей с высоким разрешением, требуется значительное число операций [4, 5]. Поэтому на практике часто используют различные алгоритмы быстрого преобразования Фурье (БПФ). Данные алгоритмы требуют значи-

* Результаты получены (выполнены) при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-557 от 25.04.2024).

Коррекция аппаратных амплитудно-фазовых искажений* в фазированных антенных решетках*

М.А. Димов¹, С.Э. Шипилов¹, И.С. Цепляев¹, А. Зеар¹

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

Описан алгоритм повышения точности синтеза диаграммы направленности фазированных антенных решеток путем коррекции аппаратных искажений управляющих элементов. Продемонстрировано, что цифровые аттенюаторы и фазовращатели при каскадном включении вносят значительные погрешности, в частности, фазовый сдвиг до 60° , не связанный с работой фазовращателя. Предложенный метод компенсации основан на использовании расчетной калибровочной таблицы, сформированной по результатам измерений. Вместо независимого подбора управляющих кодов алгоритм осуществляет поиск их оптимальной пары, минимизирующую ошибку для амплитудно-фазового распределения. Эффективность подхода подтверждена электродинамическим моделированием. Показано, что предложенная коррекция позволяет снизить максимальный уровень боковых лепестков синтезированной диаграммы направленности на 3.4 dB, что представляет практический интерес для проектирования антенных систем.

Ключевые слова: фазированная антenna решетка, амплитудно-фазовое распределение, электродинамическое моделирование, фазовращатели, аттенюаторы.

Введение

Фазированные антенные решетки (ФАР) широко востребованы в радиосвязи и радиолокации. Перспективным направлением использования ФАР является их интеграция в беспилотные летательные аппараты (БПЛА), где в условиях ограниченных размеров и веса они предлагают возможность электронного управления лучом, что особенно ценно в ситуациях, когда механическое сканирование антенн затруднительно или нежелательно. Методы расчета амплитудно-фазового распределения (АФР) определяют конфигурацию и возможности ФАР, что делает актуальным поиск и совершенствование таких методов. Формирование многолучевых диаграмм направленности (ДН) – перспективное направление применения ФАР [1–4]. Существуют различные методы расчета АФР для ФАР, отличающиеся реализацией и возможностями формирования ДН или распределения поля. Например, в [5] предложен полуаналитический метод для фокусировки в ближней зоне, где амплитудное распределение оптимизируется для снижения боковых лепестков. В [6] генетический алгоритм синтезирует ДН с узким лучом и низкими боковыми лепестками, но сложен в реализации и не гарантирует оптимальность. Аналитический метод [7] подавляет боковые лепестки линейной ФАР, требуя задания как амплитудного, так и фазового распределения. В [8] использование нечетных функций позиций элементов позволяет синтезировать асимметричные ДН с пониженными боковыми лепестками. В [9] сверточные нейронные сети применяются для фокусировки излучения, компенсируя «неидеальность» ФАР, однако, как и генетические алгоритмы, не гарантируют оптимального решения и сложны в реализации.

Для решения задачи синтеза АФР в данной работе используется метод наименьших квадратов (МНК) [10], позволяющий получить аналитическое решение и его численное приближение для оптимального амплитудно-фазового распределения при заданной ДН. Переход от теоретического расчета к практической реализации всегда сопряжен с аппаратными ограничениями. Во-первых, реальные управляющие элементы – цифровые аттенюаторы [11] и фазовращатели [12] – являются дискретными, что вносит погрешность квантования при аппроксимации заданного АФР. Во-вторых, что более критично, эти элементы вносят взаимные искажения, а именно: изменение управляющего кода фазовращателя влияет на амплитуду проходящего сигнала, а изменение кода аттенюатора – на фазу сигнала. Традиционные подходы к реализации АФР, как правило, корректируют амплитуду и фазу независимо, игнорируя это взаимное влияние, что приводит к существенному расхождению синтезированной ДН и расчетной. Подходы к коррекции подобных перекрестных искажений также разрабатываются в современных исследованиях по ФАР [13].

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

Узкополосный александритовый лазер^{*} с внешним селективным резонатором

Ю.Н. Панченко¹, С.В. Алексеев¹, М.В. Андреев¹, А.В. Пучикин¹,
Д.М. Лубенко¹, С.М. Бобровников^{2,3}, Ю.М. Михайлов³

¹ Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия

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

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

Представлены результаты экспериментальных исследований параметров лазера на александrite. Показана возможность формирования узкополосного излучения с возможностью перестройки длины волны генерации в составном резонаторе, включающем в себя внешний селективный резонатор. Рассмотрены зависимости поведения выходной энергии излучения от длины резонатора и температуры александритового кристалла. Определены условия достижения энергии генерации 20 мДж при ширине спектральной линии 15 пм с плавной перестройкой длины волны генерации в спектральном диапазоне 730–780 нм.

Ключевые слова: александритовый лазер, узкополосное излучение, внешний селективный резонатор, дисперсионные элементы.

Введение

В настоящее время наиболее распространенным перестраиваемым источником когерентного излучения в ближнем ИК-диапазоне (~ 700 – 1000 нм) является лазер на кристалле Ti:Sapphire ($\text{Ti}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$) [1–3]. Однако сложность конструкции подобных систем ограничивает их практическое применение, что стимулирует поиск более простых и надежных решений.

Наиболее близким по спектральным характеристикам флуоресценции к кристаллу александриита ($\text{Cr}^{3+}:\text{BeAl}_2\text{O}_4$) является вибронный кристалл – Cr:LiCAF ($\text{LiCaAlF}_6:\text{Cr}^{3+}$). При этом александрит в случае применения высоких удельных мощностей накачки обладает рядом преимуществ, таких как более длительное время жизни верхнего лазерного уровня (~ 250 мкс), высокий порог лазерного разрушения (~ 270 Дж/см²), а также высокой теплопроводностью и механической прочностью. Однако сильно выраженная анизотропия и термозависимость кристалла александриита требуют решения ряда задач для обеспечения необходимых условий формирования высокоэнергетического когерентного лазерного излучения.

Известно, что для формирования узкополосного излучения с малой расходимостью в лазерах необходимо использовать дисперсионные резонаторы [4]. Наибольшее распространение получили схемы с использованием малоапertureных резонаторов, включающих в себя интерференционно-поляризационные фильтры и диафрагмы, обеспечивающие подавление высших мод [5]. Однако в этом случае формирующийся пучок снимает только малую долю запасенной энергии в активной среде, при этом также сужается спектральный диапазон перестройки линии генерации [6, 7]. Среди широкоапertureных резонаторов следует выделить использование неустойчивых резонаторов, что позволяет получить высокоэнергетический когерентный пучок, но при этом возникает сложность перестройки длины волны без ухудшения пространственной угловой направленности и эффективности генерации излучения. Введение дисперсионных элементов (призм, дифракционных решеток) в неустойчивый резонатор критически усложняет его юстировку и стабильность работы.

Именно эти фундаментальные компромиссы между качеством пучка, энергией генерации и простотой спектральной перестройки приводят к усложнению лазерной оптической схемы: создание маломощного задающего генератора (ЗГ) и последующее усиление его излучения в одном или нескольких каскадах усилителя. Такая схема «ЗГ + усилитель» позволяет реализовать физические условия по формированию излучения, но приводит к увеличению габаритов, стоимости, сложности синхронизации и обслуживания установки.

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

Экспериментальное исследование многопроходной газовой ячейки с изменяемой длиной оптического пути^{*} для абсорбционного ТГц-спектрометра

Г.К. Распопин¹, А.Г. Паулиш², Ю.М. Михайлов¹,
А.П. Шкуринов^{1,3}, Ю.В. Кистенев¹

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

² Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Россия

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Проведено экспериментальное исследование прототипа компактной многопроходной ячейки с изменяемой длиной оптического пути. Механизм изменения длины оптического пути в диапазоне от 0.51 до 2.46 м реализован с использованием набора внеосевых параболических зеркал. Для апробации прототипа выбрана методика сравнения форм профилей поперечного сечения экспериментального и теоретического ТГц-пучков при значениях длин оптического пути 0.51 и 2.46 м. Экспериментальные результаты подтверждают работоспособность разработанной многопроходной ячейки.

Ключевые слова: абсорбционная спектроскопия, газовая измерительная ячейка, многопроходная ячейка, ТГц-спектрометр, сканирование ТГц-пучка.

Введение

Применение ТГц-абсорбционных спектрометров, основанных на использовании традиционных однопроходных газовых ячеек, в условиях измерений вне исследовательских лабораторий усложняется их габаритными размерами, весом и фиксированной длиной оптического пути (Optical Path Length, OPL) [1, 2]. Также регистрируемый спектр таких ячеек подвержен влиянию интерференционных эффектов Фабри – Перо [3, 4].

Эффективным решением проблемы габаритных размеров и фиксированного значения OPL является применение многопроходных ячеек (MultiPass Cell, MPC), таких как ячейка оптической схемы Херриотта [5]. При сравнимых с однопроходными газовыми измерительными ячейками значениях OPL последние обладают существенно меньшими геометрическими размерами и возможностью изменения OPL [6, 7].

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования разработанного прототипа многопроходной газовой ячейки оптической схемы Херриотта с изменяемой длиной оптического пути. Конструкция ячейки и элементы оптической схемы изготовлены с использованием 3D-печати по технологии послойного наплавления (Fused Deposition Modelling, FDM) из PETG-пластика, которая обеспечивает субволновую точность, малый вес и возможность изготовления ячейки сложной геометрической формы. Механизм изменения OPL реализован за счет использования набора внеосевых параболических зеркал с фиксированными значениями угла поворота оптической оси одного из параболических зеркал относительно оптической оси MPC. Изготовленный прототип MPC при сравнительно небольших габаритах (30×30 см) с учетом системы генерации и детектирования ТГц-излучения имеет возможность дискретного изменения OPL в диапазоне от 0.51 до 2.46 м.

Проверка работоспособности прототипа проводилась путем сравнения экспериментальных и теоретически рассчитанных профилей поперечного сечения ТГц-пучка при различных OPL. Для этого была разработана автоматизированная трехосевая система линейного перемещения на базе контроллера Arduino и однопиксельного пиродетектора. Проверка показала корректность работы предложенной конструкции MPC и ее пригодность для использования в качестве измерительной ячейки компактного абсорбционного ТГц-спектрометра, что важно для полевых измерений.

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).

Метод квазинепрерывного контроля частоты акустического резонанса фотоакустического детектора на основе кварцевого резонатора*

А.В. Борисов¹, В.В. Николаев¹, Ю.В. Кистенев¹

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

Предлагается подход к решению задачи непрерывной автоподстройки частоты модуляции источника оптического излучения, основанный на использовании двух близких по параметрам кварцевых резонаторов, расположенных близко друг к другу, но акустически изолированных. На примере температурных зависимостей показано, что при использовании двух акустически изолированных кварцевых резонаторов, осуществляя поиск резонансной частоты на одном, можно подстраивать частоту модуляции оптического излучения, подающегося на другой.

Ключевые слова: камертон, фотоакустическая спектроскопия, амплитудно-модулированное оптическое излучение, подстройка частоты.

Введение

Метод фотоакустической спектроскопии с кварцевым усилением (кварцево-усиленная фотоакустическая спектроскопия – КУФАС) обладает более высокой чувствительностью по сравнению с другими вариантами фотоакустической спектроскопии [1, 2]. В данном методе акустическая волна, возникающая при поглощении амплитудно-модулированного оптического излучения, регистрируется кварцевым камертоном. Кварц является пьезоэлектриком, следовательно, при возбуждении в нем вынужденных колебаний он генерирует электрический сигнал, величина которого прямо пропорциональна концентрации газа [3]. Достоинством такого детектора является независимость сигнала от длины волны, что позволяет его использовать, например, для детектирования как колебательных, так и вращательных линий поглощения.

Существует множество конкретных реализаций метода КУФАС, например, помимо классических вариантов в работе [4], в котором резонансное возбуждение камертона достигалось за счет передачи импульса фотона путем фокусировки модулированного лазерного луча на один зубец, в работе [5] лазерный луч направляется через акустический резонатор, а камертон размещается вне акустического резонатора (в работе использовалась трубка из нержавеющей стали) для внелучевого детектирования резонансного фотоакустического сигнала. В [6] для приложений инфракрасной спектроскопии разработан фотоэлектрический детектор на основе стандартного кварцевого камертона. В работе [7] описывается метод определения концентрации газа, основанный на КУФАС и модуляции длины волны с использованием диодного лазера ближнего инфракрасного диапазона.

Подход КУФАС получил эффективное применение в ТГц-диапазоне, так как регистрация ТГц-волн при комнатной температуре проблематична для электронных детекторов из-за их высокой частоты и низкой энергии фотонов для оптических детекторов. В ТГц-диапазоне большинство газов обладает слабым поглощением, т.е. низким отношением сигнал/шум. В работе [8] описана фотоакустическая система обнаружения газов, работающая в ТГц-диапазоне и использующая специальную кварцевую камерную вилку. Для тестирования датчика использовали квантовый каскадный лазер. В работе [9] предложен фотоакустический датчик с кварцевым усилителем для обнаружения метанола с использованием кварцевого камертона, разработанного для повышения эффективности датчика в ТГц-диапазоне, получены зависимости свойств камертона для добротности в зависимости от его размера и расстояния между зубцами.

Применение КУФАС разнообразно и имеет множество ответвлений. Разрабатываются различные новые варианты кварцевых камертонов, например, в работе [10] представлен камертон с четырьмя зубцами с увеличенной площадью деформации, большим зазором между зубцами и низкой резонансной частотой, что повышает его эффективность при лазерной спектроскопии. В работе [11] сообщается о создании датчика, который может обеспечить высокий коэффициент усиления фотоакустического сигнала без необходимости прохождения лазерного луча через кварцевый камертон. В [12] представлен датчик лазерной спектроскопии на основе кварцевого

* Работа выполнена в рамках государственного задания ТГУ, тема номер FSWM-2025-0038.

Разведочный анализ спектров поляризационного комбинационного рассеяния кристаллов ZnGeP₂ методами машинного обучения*

Д.А. Вражнов¹, А.И. Князькова¹, М.С. Снегерев², Г.К. Распопин¹, Ю.В. Кистенев¹

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

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

Проведен разведочный анализ спектров поляризационного комбинационного рассеяния образцов кристаллов ZnGeP₂ методами машинного обучения. Экспериментальные данные получены на установке для регистрации спектров комбинационного рассеяния в трех конфигурациях: естественный свет, параллельно поляризованный свет и перпендикулярно поляризованный свет. Методы машинного обучения включали уменьшение размерности спектральных данных методом главных компонент, блочным методом наименьших квадратов, стохастическим вложением соседей с t-распределением. Показана разделимость данных на группы в зависимости от кристаллографического направления и поляризации кристаллов. Полученные результаты могут быть использованы для построения предиктивных моделей определения ориентаций кристаллов ZnGeP₂.

Ключевые слова: ZnGeP₂, комбинационное рассеяние света, машинное обучение, поляризация, фононные моды.

Введение

ZnGeP₂ является одним из наиболее эффективных нелинейно-оптических кристаллов, широко используемым для оптического параметрического усиления в диапазоне 3–10 мкм при накачке твердотельными лазерами (длины волн 2.05–2.94 мкм) [1], генерации второй гармоники CO и CO₂ [2], создания ТГц-излучения (0.3–10 ТГц) посредством разностной генерации частот ИК-лазеров [3]. Для достижения требуемых оптических свойств, например, при оптической параметрической генерации, необходимо тщательно выбирать положение затравочного кристалла, после чего проводить резку и обработку кристалла для достижения желаемой кристаллографической ориентации [4].

Спектры комбинационного рассеяния (КР), зависят от вибрационных мод решетки (фононов), а их активность и поляризация чувствительны к ориентации кристалла относительно направления падающего света и его поляризации. Следовательно, поворачивая образец или изменяя поляризацию лазера, можно регистрировать изменения интенсивности отдельных пиков на спектрах КР. Учитывая высокое разрешение спектров КР, трудности с калибрацией, необходимо использовать специальные вычислительные методы для их анализа. Наиболее перспективным направлением в данной области являются методы машинного обучения (МО), доказавшие свою эффективность в задачах построения предиктивных моделей, основанных на данных КР-спектроскопии. Основными трудностями при этом являются: высокая размерность данных (тысячи компонент) спектров КР, а также наличие мультиколлинеарности (сильной корреляции интенсивностей двух или более пиков в спектре). Кроме того, относительно длительное время регистрации спектров КР не позволяет собрать выборку достаточного объема для построения предиктивных моделей с высокими показателями точности.

На начальном этапе построения предиктивных моделей проводится разведочный анализ для оценки структуры, выявления закономерностей, аномалий и особенностей, которые помогут сформировать правильные гипотезы и выбрать подходящие методы МО. Визуализация взаимного расположения векторов в признаковом пространстве позволяет оценить их компактность и разделимость классов объектов. Для проведения разведывательного анализа используются методы редукции размерности на основе методов обучения без учителя, например, метод главных компонент (МГК) [5], блочный метод наименьших квадратов (в англоязычной литературе используется термин partial least squares discriminant analysis, PLS-DA) [6], итеративная кластеризация [7], стохастическое вложение соседей с t-распределением (t-SNE) [8]. Преимущества и недостатки вышеперечисленных алгоритмов представлены в табл. 1.

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Регистрация фононных мод кристалла ZnGeP₂ с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния*

А.И. Князькова¹, М.С. Снегерев², Д.А. Вражнов¹, Г.К. Распопин¹, Ю.В. Кистенев¹

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

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

С помощью поляризационно-чувствительной спектроскопии комбинационного рассеяния изучены тетрагональные кристаллы ZnGeP₂ с кристаллографическими направлениями [100] и [001]. Представлены графики интенсивностей комбинационного рассеяния кристалла для соответствующих мод в полярных координатах. Получены фононные частоты в центре зоны Бриллюэна, установлено, что экспериментальные результаты хорошо согласуются с представленными в литературных источниках теоретическими данными.

Ключевые слова: ZnGeP₂, комбинационное рассеяние света, ориентация кристаллов, поляризация, фононные моды.

Введение

Параметрическая генерация света с использованием нелинейно-оптических кристаллов в среднем ИК-диапазоне актуальна при создании систем дистанционного газового анализа и мониторинга атмосферы [1, 2]. Зависящие от ориентации и поляризации анизотропные электрические и оптические свойства кристалла ZnGeP₂ делают его наиболее эффективным кристаллом для параметрического преобразования частоты излучения [3, 4].

Кристаллы тернарного халькопирита ZnGeP₂ широко применяются в устройствах, функционирующих на принципах нелинейной оптики, например, оптических параметрических генераторов в ближней инфракрасной области, генераторах второй, третьей и четвертой гармоники в CO₂-лазерах [5, 6]. Кроме того, ZnGeP₂ обладают свойствами положительного двулучепреломления и исключительной прозрачностью в ближнем и среднем ИК-диапазонах (0.75–12 мкм). Благодаря большой нелинейной оптической восприимчивости, оптической анизотропии и высокой теплопроводности (0.35 Вт/(см·К)) высокий порог повреждения лазером (2–5 Дж/см²) делает ZnGeP₂ уникальным материалом для преобразования частоты генерации ИК-лазеров высокой мощности с перестройкой.

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) позволяет исследовать свойства кристаллов на основе детектирования оптических фононных мод – согласованных колебательных движений атомов кристаллической решетки, определяемых симметрией пространственной группы кристалла. Изучение фононного спектра в спектроскопии комбинационного рассеяния света является одним из наиболее чувствительных методов исследования структурных фазовых переходов в кристаллах. Правила отбора Лаудона позволяют найти активные колебательные моды при комбинационном рассеянии с учетом электронной поляризуемости [7]. Исследование поляризуемости при изменении пространственной ориентации кристалла дает возможность найти направление осей в нем, что может быть использовано для ориентационной резки кристаллов ZnGeP₂, выращенных с использованием вертикального варианта метода Бриджмена и градиентного замораживания [8]. Исследование поляризации кристаллов при помощи спектроскопии комбинационного рассеяния также позволяет обнаружить дефекты в кристаллах [9–11].

В данной работе представлены результаты регистрации фононных мод кристалла ZnGeP₂ на КР-спектрометре InVia Renishaw.

Материалы и методы

Для исследования использовались два образца тетрагонального кристалла ZnGeP₂, которые были вырезаны из монокристаллической були ZnGeP₂ (производство ООО «ЛОК», Томск) параллельно оптической плоскости [100] и [001]. Монокристаллическая буля ZnGeP₂ была выращена методом Бриджмена в вертикальном направлении на ориентированную затравку; рост осуществлялся

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Предсказание частот фононных мод халькопиритов^{*} с использованием графовой нейронной сети^{*}

М.С. Снегерев¹, А.И. Князькова², Д.А. Вражнов²,
Г.К. Распопин², Ю.В. Кистенев²

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

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

Квантово-химические расчеты частот фононных мод оптических нелинейных кристаллов требуют больших вычислительных затрат. В данной работе на основе графовой нейронной сети рассмотрена предиктивная модель для предсказания частот фононных мод оптических кристаллов типа «халькопирит». Для обучения нейронной сети использовались информация о структурах кристаллов типа «халькопирит» и частоты фононных мод из базы теоретических расчетов «Computational Raman Database». Показано, что коэффициент детерминации предсказания частот фононных мод разработанной модели равен 0.922.

Ключевые слова: фононные моды, графовая нейронная сеть, оптические кристаллы, халькопирит, предиктивная модель, квантово-химические расчеты.

Введение

Кристаллы со структурой типа «халькопирит» представляют собой перспективный класс материалов, которые активно используются в фотодетекторах, элементах солнечных батарей, устройствах нелинейной оптики [1, 2, 3]. Точное предсказание частот фононных мод важно для понимания структуры и свойств кристалла, к примеру, механических, тепловых, сегнетоэлектрических [4]. Хотя стандартные вычислительные методы, такие как теория функционала плотности (density functional theory, DFT) [5], теория возмущений функционала плотности [6], позволяют с высокой точностью получить частоты фононных мод, но большие вычислительные затраты делают их неэффективными для быстрого анализа. Положение частот фононных мод можно определять экспериментально, например, с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света, однако такие результаты не позволяют однозначно идентифицировать фононные моды без точного теоретического расчета.

Альтернативой вычислительным методам может служить применение алгоритмов машинного обучения (МО), которые позволяют реализовать точные и одновременно производительные модели-предикторы [7]. Особенностью применения МО в материаловедении является выбор способа представления кристаллической структуры в виде понятном для алгоритма. Исходя из этого, графовые нейронные сети (ГНС), основанные на геометрических особенностях кристаллической структуры, позволяют предиктивной модели учитывать локальную симметрию, определяющую частоты фононных мод. ГНС работают на основе итеративного изменения признаков между узлами и их соседями, преобразуя информацию о локальном окружении каждого атома [8]. Данный подход позволяет ГНС строить информативные векторные представления как атомов, так и всей структуры в целом, которые затем используются для предсказания целевых свойств.

В данной работе представлена предиктивная модель на основе ГНС, способная с высокой точностью предсказать частоты фононных мод кристаллов типа «халькопирит» на основе их кристаллической структуры.

Материалы и методы

Кристаллы типа «халькопирит» с формулами $A^I B^{III} C^{IV}{}_2$ и $A^{II} B^{IV} C^V{}_2$ (где A, B, C – различные типы атомов, а верхние индексы обозначают их валентность) принадлежат к тетрагональной сингонии с объемно-центрированной решеткой (пространственная группа D_{2d} ($I\bar{4}2d$), номер 122) [9, 10]. Структура подобных кристаллов изображена на рис. 1.

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

Определение концентрации летучих молекулярных маркеров эвтрофикации водоемов с использованием терагерцовой спектроскопии^{*} и методов машинного обучения

А.К. Третьяков¹, В.В. Николаев¹, Ю.В. Кистенев¹

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

Приведена оценка концентраций молекул-маркеров процесса эвтрофикации водоемов (CO_2 , H_2S , CH_4 , N_2O и PH_3) с применением алгоритма формально независимого моделирования аналогий классов (Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA). Объектом исследования являлись терагерцовые спектры многокомпонентных газовых смесей на основе атмосферного воздуха, сгенерированные в диапазоне частот $0.667\text{--}36.692 \text{ cm}^{-1}$ с разрешением 0.01 cm^{-1} . Продемонстрирована эффективность алгоритма SIMCA в определении концентраций молекул-маркеров процесса эвтрофикации.

Ключевые слова: эвтрофикация, метан, диоксид углерода, сероводород, закись азота, фосфин, терагерцовая спектроскопия, машинное обучение, SIMCA.

Введение

Антропогенное эвтрофирование внутренних водоемов представляет собой одну из наиболее распространенных и масштабных угроз для водных экосистем по всему миру [1]. Поступление избыточных количеств биогенных элементов, главным образом азота и фосфора, со стоками сельскохозяйственных угодий и коммунально-бытовых вод приводит к каскаду негативных последствий, включая массивное развитие фитопланктона (в том числе токсичных цианобактерий), снижение прозрачности воды и деоксигенацию придонных слоев [2, 3].

Количественную оценку трофического состояния водных объектов принято оценивать при помощи индекса трофического состояния (Trophic State Index, TSI), основанного на измерениях концентрации хлорофилла-а, прозрачности по диску Секки и общем содержании фосфора [4]. Диапазон значений индекса составляет от 0 до 100, при этом более высокие значения указывают на более высокую степень обогащения питательными веществами и повышенную биологическую активность. Выделяют четыре основных состояния: олиготрофное ($TSI < 40$), мезотрофное ($TSI \in [40, 50]$), эвтрофное ($TSI \in [50, 80]$) и гиперэвтрофное ($TSI > 80$) [5]. При протекании в водоеме процессов эвтрофикации значение TSI превышает 50, также наблюдаются высокий уровень питательных веществ, обильный рост водорослей и снижение прозрачности воды.

Традиционно исследования последствий эвтрофикации сфокусированы на изменениях в биоте и гидрохимическом режиме [6]. В последние годы все большее внимание уделяется роли эвтрофицированных водоемов как значимых источников парниковых газов – диоксида углерода (CO_2), сероводорода (H_2S), метана (CH_4), закиси азота (N_2O), фосфина (PH_3) и др., которые далее обозначены как молекулы-маркеры процесса эвтрофикации (МПЭ) [7–13]. Список рассмотренных в исследовании молекул МПЭ и их характерные величины концентраций при протекании процесса эвтрофикации приведены в табл. 1. Большинство существующих работ оценивают потоки газов с поверхности водоемов в целом, без детализации пространственной неоднородности, связанной с локализованными очагами эвтрофикации [8]. В частности, остаются малоизученными процессы в прибрежных зонах, наиболее подверженных антропогенной нагрузке [9].

Перспективным направлением является применение методов спектроскопии в терагерцовом (ТГц) диапазоне, который обладает уникальной чувствительностью к вращательным переходам молекул, что позволяет проводить как их идентификацию, так и количественный анализ [14]. Для анализа многокомпонентных газовых смесей, которыми являются пробы газов над эвтрофицированными водоемами, особенно эффективны методы машинного обучения с многомерной классификацией и регрессией. Одним из таких методов является алгоритм формально независимого моделирования аналогий классов (Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA) [15]. Алгоритм SIMCA осуществляет классификацию в пространстве метода главных компонент (Principal

* Работа выполнена в рамках государственного задания ТГУ, тема номер FSWM-2025-0038.

ТЕПЛОФИЗИКА И ГИДРОДИНАМИКА

УДК 614.484

DOI: 10.17223/00213411/68/11/13

Нейтрализация выбросов вредных газов в помещении с помощью быстро распыленных мелкодисперсных частиц порошков*

О.И. Гаенко¹, О.Б. Кудряшова^{1,2}, С.С. Титов¹, В.А. Клименко¹,
Е.В. Муравлев¹, И.Б. Букреев¹, С.Д. Соколов²

¹ Институт проблем химико-энергетических технологий

Сибирского отделения Российской академии наук, г. Бийск, Россия

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

Исследован метод импульсного распыления высокодисперсных порошков (оксиды Fe, Zn, Ti и др.) для нейтрализации паров органических веществ в воздухе. Определены кинетические параметры адсорбции для модельных газов (гептан, октан, изопропанол, хлороформ). Полученные данные позволяют сравнить эффективность различных сорбентов и могут быть использованы для практической разработки систем быстрой очистки воздуха от вредных выбросов.

Ключевые слова: нейтрализация, аэрозоль, импульсное распыление, нанопорошок, фотокатализ.

Введение

Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ) относит загрязнение воздуха, включая воздух внутри помещений, к одной из главных экологических угроз для здоровья человечества, называя его самым серьезным предотвратимым риском для здоровья. Загрязнение воздуха связано с инсультом, болезнями сердца, раком легких, хроническими и острыми респираторными заболеваниями, а также с преждевременной смертностью [1, 2]. В частности, летучие органические соединения (ЛОС), такие как бензол, формальдегид, толуол, являются причиной астмы, бронхитов, аллергий, инфарктов и инсультов. Многие ЛОС (например, формальдегид, 1,3-бутадиен, бензол) признаны доказанными канцерогенами. Некоторые токсичные газы и пары могут накапливаться в организме и оказывать системное токсическое действие. Обозначены и экологические последствия выбросов вредных веществ в атмосферу: образование смога, кислотные дожди, парниковый эффект. Источниками выбросов могут быть промышленные предприятия (нефтеперерабатывающие комплексы, лакокрасочные и химические заводы), транспорт, сельское хозяйство (источник гербицидов, пестицидов, удобрений, метана). Также все больше вредных газообразных веществ образуется в бытовых помещениях за счет испарений от мебели, строительных материалов, бытовой химии – все это источники формальдегида и других ЛОС в помещениях.

Для очистки воздуха используются различные методы, в том числе каталитическое окисление, регенеративное термическое окисление, биоразложение, мембранный фильтрация, фотокаталитическое окисление, а также воздушные фильтры НЕРА и гибридные технологии [3–5]. Среди различных традиционных методов наиболее часто используется адсорбция, при которой для удаления значительных объемов загрязняющих веществ из воздуха применяются активированный уголь или высокопористые материалы [6]. Традиционные методы очистки имеют недостатки: необходимость регулярной замены адсорбента (образуются опасные отходы), высокие энергозатраты, неполное удаление загрязнителей [7]. При аварийных выбросах важно максимально быстро удалить опасные газовые загрязнители из воздуха. Имеющиеся технологии не проектировались для задач быстрой нейтрализации газов. С другой стороны, технология на основе импульсного распыления порошкового аэрозоля с большой площадью поверхности частиц может решить эту задачу [8]. Частицы распыленного порошка концентрируют на своей поверхности молекулы вредных веществ из большого объема воздуха. Если при этом частицы обладают фотокаталитическими

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-69-00108, <https://rscf.ru/project/22-69-00108/>.

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК.539.5

DOI: 10.17223/00213411/68/11/14

Влияние процесса формирования анортитных включений на фазовый состав, структуру и физические свойства корундовой керамики*

М.В. Григорьев¹, В.А. Егошин^{1,2}, А.А. Ахмадиева¹, Н.Л. Савченко¹,
Е.В. Ермолаев², Р.Ш. Ахметгалиев^{1,2}, Ш.Н. Шугаевов^{1,2}, И.А. Жуков¹

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

²АО «Завод полупроводниковых приборов», г. Йошкар-Ола, Россия

Исследование направлено на изучение процессов формирования анортитных включений в темной и белой корундовой керамике, используемой для применения в металлокерамических корпусах интегральных схем. Показаны возможные причины возникновения анортита в структуре керамики и какую роль при этом играет циркон. Было предложено: исключение из состава шихты цирконового концентрата, введение карбоната магния ($MgCO_3$) и корректировка содержания $CaCO_3$. Анализ микроструктуры, фазового состава и физических свойств подтвердил снижение пористости, исчезновение анортита и повышение плотности. Результаты демонстрируют перспективность модифицированных керамик для микроэлектроники.

Ключевые слова: анортит, оксид алюминия, диэлектрическая керамика, пористость, размер зерна.

Введение

При производстве корундовой вакуумплотной керамики с содержанием минерализаторов системы $CaO-MgO-SiO_2$ до 10% сталкиваются с проблемой возникновения дефектов в виде анонтитных включений ($CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$) [1, 2]. Такая керамика находит широкое применение в науке и технике от изоляторов до подложек интегральных схем и от фильтр до режущего инструмента. Анонтит может образовываться в результате взаимодействия примесных или целевых оксидов кальция (CaO), алюминия (Al_2O_3) и кремния (SiO_2) при высокотемпературном обжиге [1–3]. Их появление обусловлено как неоптимальным составом сырья, так и недостаточным контролем температурного режима спекания.

Наличие анонтитных включений в вакуумплотной корундовой керамике может способствовать снижению диэлектрической проницаемости или дестабилизировать ее значения – анонтит обладает иными диэлектрическими свойствами (диэлектрическая проницаемость ~ 6) по сравнению с $\alpha-Al_2O_3$ (диэлектрическая проницаемость ~ 9), что приводит к неоднородности электрических характеристик материала [4]. Кроме этого, может увеличиваться тангенс угла диэлектрических потерь ($tg \delta$), особенно на высоких и сверхвысоких частотах. Это критично для применения в СВЧ-устройствах, где требуется минимальное поглощение сигнала. Анонтитные включения создают слабые границы раздела фаз, что может оказывать влияние на прочность сцепления с наносимыми проводящими покрытиями на основе вольфрама и молибдена. Это может привести к отслоению металлизированных слоев при эксплуатации. И, наконец, анонтитные включения приводят к повышенной хрупкости и снижению механической прочности из-за термических напряжений, возникающих на границах фаз $CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 / \alpha-Al_2O_3$ с разными коэффициентами теплового расширения (коэффициент теплового расширения $CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2 \sim 5 \cdot 10^{-6} / ^\circ C$, коэффициент теплового расширения $\alpha-Al_2O_3 \sim 8 \cdot 10^{-6} / ^\circ C$). Важным фактором корундовой керамики с анонтитными включениями является нестабильность ее диэлектрических и механических характеристик при изменении температуры и времени – анонтит может подвергаться полиморфным превращениям [5, 6] или выделяться в виде вторичных фаз [5, 6] при длительной эксплуатации, что ухудшает долговременную надежность компонентов.

* Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01.07.2025).

Исследование влияния термообработки на структуру, фазовый состав и механические свойства сплава МЛ12 с добавкой наночастиц AlN*

А.А. Ахмадиева¹, А.П. Хрусталёв¹, В.Д. Валихов¹, М.Г. Хмелёва¹

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

Исследовано влияние наночастиц AlN с концентрацией 0.1, 0.5 и 1 мас.% на структуру и свойства магниевого сплава МЛ12. Показано, что добавки 0.5 и 1 мас.% обеспечивают равномерную зеренную структуру (средний размер зерна 46 и 54 мкм), тогда как термообработка способствует гомогенизации без изменения среднего размера зерна. Максимальный прирост прочности (до 212 МПа) и пластичности (до 19.7%) достигается при 0.1 мас.% AlN. Установлено, что доминирующим механизмом упрочнения является дисперсное упрочнение.

Ключевые слова: магний, магниевые сплавы, нитрид алюминия, микроструктура, наночастицы, физико-механические свойства, упрочнение, термообработка.

Введение

Магниевые сплавы благодаря технологическим и эксплуатационным характеристикам, а также низкой плотности, хорошей обрабатываемости и удельной прочности являются материалами нового поколения для использования в космической, авиационной и автомобильной промышленности [1]. Существенными недостатками магниевых сплавов являются плохая формируемость, недостаточная механическая прочность и коррозионная стойкость. Создание литых магниевых сплавов с повышенными прочностными характеристиками может способствовать расширению области их применения [2].

Одним из перспективных литейных магниевых сплавов является сплав МЛ12 системы Mg–Zn–Zr, основным механизмом упрочнения в котором является твердорастворный механизм, связанный с растворимостью легирующих компонентов (Zn, Zr, Cd и др.) в магнии [3]. Наличие в сплаве циркония обеспечивает мелкозернистую структуру, так как цирконий является одним из наиболее эффективных измельчителей зерна в магниевых сплавах, не содержащих алюминий [4]. Связано это с тем, что цирконий, как и магний, имеет ГПУ-решетку со схожими параметрами, поэтому частицы циркония выступают в роли ядер магния, образуя дополнительные центры кристаллизации, а также ограничивают рост зерен при затвердевании, растворяясь в жидком магнии [5].

Структура литого сплава представляет собой твердый раствор цинка и циркония в магнии (Mg), по границам зерен которого располагаются включения интерметаллидной фазы MgZn. В результате термообработки фаза MgZn и твердый раствор на основе Zr осаждаются из пересыщенного твердого раствора, упрочняя его [6]. В многочисленных работах [7] в качестве режима термообработки сплава МЛ12 используется режим T1 (низкотемпературный отжиг при 300 °C в течение 6 ч с охлаждением на воздухе).

Известны методы увеличения механических характеристик магниевых сплавов за счет дисперсного упрочнения нано- и микроразмерными тугоплавкими частицами [8]. Нитрид алюминия (AlN) [9] выступает перспективным соединением для упрочнения магниевых сплавов, поскольку он имеет ГПУ-структурную с параметрами решетки $a = 0.312$ нм и $c = 0.4988$ нм, которые очень близки к параметрам решетки матрицы Mg ($a = 0.3209$ нм и $c = 0.5211$ нм) [10]. Использование наноразмерного нитрида алюминия в качестве армирующих частиц представляет большой интерес за счет высокой удельной прочности и низкого коэффициента теплового расширения, высокой температуры плавления и твердости [11], а также за счет незначительного увеличения себестоимости при малой добавке частиц. Ранее был показан положительный эффект при введении нитрида алюминия с содержанием 0.5 мас.% [12], но комплексные исследования влияния различных со-

* Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01/07/2025).

Влияние поровой структуры на упругие характеристики сплавов NiTi, полученных методом СВС*

Е.С. Марченко¹, А.С. Гарин¹, В.А. Скрипняк¹

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

Рассмотрено влияние поровой структуры на механические характеристики сплавов NiTi, полученных методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) при температурах предварительного нагрева реагирующей смеси Ni и Ti в диапазоне от 668 до 788 К. Исследована зависимость модуля Юнга от пористости полученных сплавов NiTi. Показано, что вариация начальной температуры реагирующей порошковой смеси приводит к изменению структурно-фазового состава и характеристик поровой структуры NiTi после СВС. Полученные в указанных условиях сплавы NiTi обладают пониженными модулями упругости и поровыми системами с объемной пористостью от 58 до 63%.

Ключевые слова: нитинол, поровая структура, модуль Юнга, самораспространяющийся высокотемпературный синтез, начальная температура реагирующей смеси.

Введение

Пористые сплавы на основе NiTi относятся к уникальному классу интеллектуальных материалов, физико-механические свойства которых могут изменяться в широких диапазонах в зависимости от фазового состава и поровой структуры. Пористые сплавы NiTi широко используются для изготовления элементов конструкций аэрокосмической и военной техники, а также медицинского оборудования, включая имплантаты и др. В настоящее время для получения пористого NiTi развиваются технологии самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), микроволнового спекания, аддитивные технологии селективного лазерного плавления и 3D-печати [1–4].

Интерес к пористым материалам на основе NiTi с трехмерной анизотропной взаимосвязанной структурой открытых пор, производимых с использованием технологии СВС, обусловлен возможностью формирования комплекса механических свойств за счет управления технологическими параметрами синтеза. Поскольку реакция СВС в порошковой смеси Ni и Ti протекает при малом изменении энталпии, для инициирования начала синтеза необходим предварительный нагрев смеси до определенной температуры, зависящей от размеров частиц порошковой смеси, пористости, наличия примесей и др. Авторы работ [5, 6] показали, что варьирование температуры предварительного нагрева порошковой смеси Ni и Ti до начала СВС позволяет получать развитую поровую структуру и многофазную структуру NiTi с дисперсными частицами Ti_2Ni , Ni_4Ti_3 , Ni_3Ti_2 и Ni_3Ti .

Пористые материалы NiTi, полученные методом СВС, демонстрируют способность псевдоупругого деформирования и обладают пониженными значениями начальных модулей упругости (модуля Юнга, модуля сдвига, модуля объемного сжатия) относительно значений модулей литых сплавов NiTi с аналогичными фазовыми составами.

Обобщающие и модельные соотношения, предложенные для описания зависимостей модулей упругости сплавов от пористости и параметров поровых структур, требуют модификации в случае материалов NiTi, полученных методом СВС. Потребность в модификации обусловлена тем, что при протекании СВС-синтеза в системе Ni–Ti одновременно с пористостью и параметрами поровых структур изменяются фазовый состав и механические свойства конденсированной части материала [7, 8].

Авторы работ [8, 9] установили, что в случае СВС при получении пористого NiTi концентрации образующихся интерметалличных частиц Ti_2Ni , Ni_4Ti_3 , Ni_3Ti_2 и Ni_3Ti изменяются в зависимости от температуры предварительного нагрева реагирующей порошковой смеси и ее структурных характеристик. Смена концентрации и пространственного распределения частиц интерметалличных фаз приводит к изменению условий протекания фазовых превращений $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$ при деформации конденсированной части пористого материала и изменению механической реакции материала на нагружение при постоянной температуре [10, 11].

* Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01/07/2025).

Применение порошковых композиций из нано- и микрочастиц оксида алюминия для аддитивного формования деталей сложной формы экструзионным методом*

А.И. Сагун^{1,2}, Е.И. Сенькина², М.И. Лернер^{1,2}

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

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

Разработана термопластичная композиция на основе нано- и микрочастиц оксида алюминия для использования в технологии экструзионного аддитивного формования. Исследовано влияние количества наночастиц оксида алюминия на реологические свойства композиций и на прочностные свойства спеченных керамических деталей, полученных методом экструзионного аддитивного формования.

Ключевые слова: аддитивное экструзионное формование, корундовая керамика, фидсток, оксид алюминия, бимодальные порошковые композиции.

Введение

Из-за высокой твердости керамических материалов их обработка является сложным и дорогостоящим процессом. Аддитивные технологии позволяют формовать керамические детали сложной геометрии за относительно короткое время без использования дополнительных форм и постобработки, что существенно снижает затраты производства [1].

Среди методов аддитивного формования керамики обращает на себя внимание способ, основанный на экструзии композиции (Material Extrusion, MEX), содержащей керамический порошок и многокомпонентное термопластичное связующее (фидсток). После изготовления так называемой «зеленой детали» связующее удаляется, а деталь спекается в высокотемпературной печи. Способ выделяется своей простотой и относительной дешевизной использующегося оборудования, что делает аддитивное формование доступным для большого числа потребителей [1].

Одной из основных проблем экструзионного аддитивного формования является сложность получения монолитных керамических деталей [2]. Фидсток состоит из керамического порошка (обычно около 40–50 об.%) и многокомпонентных полимерных связующих [2, 3]. После удаления связующего остается пористая структура, которая не позволяет получить плотное, монолитное керамическое тело после окончательного обжига. Вероятно, увеличив количество твердого компонента в фидстоке, можно увеличить плотность деталей и улучшить их физико-механические свойства.

Как правило, для изготовления керамических фидстоков используют микронные частицы с размером 0.1–1.0 мкм [2]. Вероятно, повысить физико-механические свойства спеченной детали возможно при использовании порошковых композиций из нано- и микрочастиц. Наночастицы с размерами менее 100 нм, заполняя пространство между микрочастицами, позволяют снизить шероховатость, усадку и деформацию детали при ее изготовлении [3]. Практически полное уплотнение материала при использовании бимодальных порошковых композиций показано в работах [4–7].

Цель работы – разработка фидстока на основе композиций из нано- и микрочастиц оксида алюминия и выявление физико-механических свойств деталей, изготовленных методом MEX из этого фидстока.

Материалы и методы исследований

Для разработки фидстоков на основе Al_2O_3 использовались коммерческий порошок, состоящий из микронных частиц оксида алюминия марки Mitalox A95-1.5-LS производства компании Микроинтек (далее М95) и нанопорошок оксида алюминия, полученный электрическим взрывом проволок (далее ЭВП) производства компании «Передовые порошковые технологии». По данным производителей средний размер частиц порошка М95 составлял 1.5 мкм, нанопорошка ЭВП – 70 нм.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30006-П, <https://rscf.ru/project/21-79-30006/>.

Исследование релаксации напряжений вследствие несоответствия коэффициентов теплового расширения матрицы и упрочняющих частиц в композитах на основе алюминия

О.В. Матвиенко^{1,2}, О.И. Данейко^{1,2}, А.П. Хрусталёв¹, В.Д. Валихов¹, И.А. Жуков¹

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

² Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия

Исследована релаксация термических напряжений в композитах Al–A356, упрочненных наночастицами SiC, Al₂O₃ и ScF₃. Предложена модель, учитывающая упругость частиц и вязкоупругость матрицы. Показано, что при 523 К напряжения релаксируют в течение 240 мин, становясь пренебрежимо малыми. С увеличением объемной доли упрочняющих частиц происходит увеличение термических напряжений. Этот факт связан с увеличением количества упрочняющих частиц в сплаве и, соответственно, с увеличением их вклада в упрочнение материала. При нагреве или охлаждении материала в результате несоответствия между коэффициентами теплового расширения и упругими константами матрицы и частиц термические напряжения увеличиваются. Установлено повышение предела текучести при нагреве и охлаждении материала.

Ключевые слова: деформации, релаксация напряжений, дисперсно-упрочненные материалы, наночастицы, напряжение, пластическая деформация, температурные напряжения, алюминий.

Введение

Дисперсно-упрочненные алюминиевые сплавы являются одними из передовых конструкционных материалов, разработанных для применения в аэрокосмической, оборонной, морской, а в последнее время и в автомобильной и транспортной отраслях. Это обусловлено превосходным сочетанием высокой удельной прочности и повышенной износостойкости. Эти сплавы обычно используются для изготовления компонентов двигателей внутреннего сгорания, таких как поршни и головки цилиндров, которые, как правило, работают при повышенных температурах.

Основными проблемами для этих компонентов при работе на повышенных температурах являются релаксация напряжений, а также ползучесть материала. Понимание и анализ этих явлений имеет определяющее значение при выборе материалов.

Испытания на релаксацию напряжений и ползучесть являются двумя наиболее широко используемыми экспериментальными подходами для определения поведения материалов со свойствами, зависящими от времени, при воздействии повышенных температур. В работе [1] исследованы характеристики усталостной прочности экспериментального дисперсно-упрочненного композиционного материала на основе алюминия, полученного методом внутреннего окисления. Усталостные испытания проводятся при нагружении по «мягкой» схеме консольного изгиба вращающихся цилиндрических образцов в условиях симметричного цикла. Определен механизм зарождения и распространения усталостных трещин. Высокопрочные дисперсно-упрочненные сплавы Ag/Al с различным содержанием Al были исследованы в работе [2] в качестве кандидатов для оболочки проволоки Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x} (Bi2212). Наблюдения за микроструктурой показали, что частицы Al₂O₃ играют главную роль в упрочнении дисперсно-упрочненного сплава Ag/Al. Сплав сохраняет свою мелкозернистую структуру и прочность после термообработки.

В работах [3] была предложена физическая модель пластической деформации. Моделирование пластической деформации и деформационного упрочнения основано на концепции, согласно которой пластическое скольжение в ГЦК-сплавах с некогерентными наночастицами приводит к образованию дефектной структуры со сдвигообразующими дислокациями, призматическими дислокационными петлями вакансационного и межузельного типов, дислокационными диполями вакансационного и межузельного типов, а также межузельными атомами, моновакансиями и бивакансиями.

Подход, сочетающий методы физики пластичности и механики деформируемого твердого тела, был использован в работе [4] для изучения пределов упругого и пластического сопротивления

* Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01/07/2025).

Влияние состава исходных порошков и температуры спекания на структуру и свойства керамики на основе оксида алюминия*

А.А. Ахмадиева¹, А.П. Хрусталёв¹, М.В. Григорьев¹, И.А. Жуков¹

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

Исследовано влияние состава шихты (соотношение синтезированного/электроплавленного муллита, содержание и дисперсность корунда) и температуры спекания (1550–1650 °C) на структуру и свойства муллитокорундовой керамики. Установлено, что оптимальное сочетание прочности, плотности и усадки достигается при использовании смешанного муллитного сырья и спекании при 1650 °C. Максимальная прочность получена при содержании корунда со средним размером частиц 60 мкм ~ 18 мас.%.

Ключевые слова: муллитокорундовая керамика, огнеупорные материалы, электрокорунд, микроструктура, прочность при сжатии.

Введение

Среди всего спектра огнеупорных материалов широкое применение находят корундовые и муллитокорундовые огнеупоры, обладающие достаточно высокими значениями огнеупорности и прочности [1, 2]. На основе корунда и муллита создан широкий спектр композиционных материалов, нашедших применение в различных отраслях промышленности, включая металлургию [3]. Композиты из оксида алюминия и муллита представляют особый интерес из-за их улучшенных термических и механических свойств по сравнению с керамикой на основе чистого корунда и муллита [4, 5]. Композиты из оксида алюминия и муллита могут быть получены с использованием различного сырья – Al_2O_3 , $\text{Al}(\text{OH})_3$, солей алюминия (золь-гель-технология), SiO_2 , SiC , Si_3N_4 , предварительно синтезированного муллита, каолина и кремнийорганических соединений [3].

Эксплуатационные отклонения керамических материалов от нормированных показателей создают серьезные риски при их использовании в специальных применениях. В случае выбранной алюминосиликатной керамики наибольшим риском являются негативные изменения термомеханических свойств, такие как снижение прочности при высоких рабочих температурах более 1650 °C. Аномальные изменения объема или деформации, вызванные длительным тепловым воздействием или химической реакцией (например, с газовой атмосферой), также нежелательны.

Спекание корунда происходит при температуре более 1700 °C, что требует больших энергетических затрат, в то время как использование фазы муллита позволяет снизить температуру спекания и увеличить термомеханические свойства [6]. При этом процесс спекания таких композитов достаточно сложный, с существенным влиянием фазообразования муллита, изменяющего кинетику уплотнения материала. Кроме этого, исходный состав шихты влияет на процесс усадки и уплотнения керамики в процессе спекания системы $\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$. Все это в конечном счете влияет на микроструктуру (размер зерна, распределение и соотношение фаз муллита и корунда) и свойства керамических композитов [7].

Цель работы – исследование влияния состава исходной шихты и параметров спекания на структурные и физико-механические параметры муллитокорундовых керамических материалов.

1. Материалы и методы исследований

1.1. Исходные материалы

В качестве исходных материалов были использованы глинозем неметаллургический глубоко-прокаленный низкощелочной марки R1 (Пикалевский глиноземный завод), электроплавленный корунд (ООО «Завод абразивных огнеупорных материалов», г. Екатеринбург), электроплавленный муллит марки ПМЛП (ООО «Технокерамика»).

Для синтеза муллита были использованы металлургический технический глинозем марки Г00 (Каменск-Уральский глиноземный комбинат, Свердловская область) и кварцевый песок (Ташлинское месторождение).

* Работа выполнена в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-0010.

Влияние наноразмерного оксида алюминия и полимерного связующего на структуру и механические свойства композитов^{*} на основе оксида алюминия

М.Г. Криницын^{1,2}, Е.И. Сенькина², А.И. Сагун^{1,2}, Е.Е. Рюмин^{1,2}, М.И. Лернер^{1,2}

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

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

Исследовано влияние содержания наноразмерного Al_2O_3 (0–20%) и полимерного связующего (0–40%) на спекание, микроструктуру и механические свойства композитов на основе микронного оксида алюминия. Установлено, что синергия добавок позволяет значительно повысить прочность при изгибе (до 33 МПа) даже при остаточной пористости. Оптимальные свойства показали образцы с 30–35% полимера и 10–20% нанофазы, спеченные при 1650–1700 °C.

Ключевые слова: аддитивные технологии, фидсток, оксид алюминия, нанокомпозиты, полимерное связующее, прочностные свойства.

Введение

Высокочистый оксид алюминия (Al_2O_3) является одним из наиболее востребованных керамических материалов благодаря исключительной твердости, химической инертности и стойкости к высоким температурам. Он находит применение в широком спектре областей: от медицины (имплантаты) и машиностроения (режущий инструмент, подшипники) до аэрокосмической отрасли и электроники [1, 2]. Однако широкому распространению монолитной керамики Al_2O_3 препятствует ее основной недостаток – хрупкость и низкая трещиностойкость, что приводит к катастрофическому разрушению под нагрузкой из-за роста критических трещин [3].

Для решения этой проблемы активно разрабатываются композитные материалы на основе оксида алюминия. Одним из наиболее эффективных подходов является наноразмерное модифицирование матрицы микронного Al_2O_3 . Введение наночастиц оксида алюминия ($n\text{-Al}_2\text{O}_3$) позволяет реализовать механизмы упрочнения на субмикронном уровне: торможение движения дислокаций, измельчение зерна и переход от межзеренного к внутризеренному разрушению, что в итоге повышает прочность и пластичность материала [4].

Параллельно для улучшения технологических свойств порошковых композиций и управления процессом спекания часто используют полимерные добавки. Они выполняют роль пластификатора и связующего, обеспечивая однородную упаковку частиц и целостность заготовок до спекания, а также могут выгорать, создавая определенную пористую структуру [5]. Современные аддитивные технологии, основанные на экструзии материалов, позволяют получать изделия из наполненного полимера, где полимер выступает в качестве пластификатора.

Однако, как правило, эти два подхода – наноразмерное упрочнение и полимерное связывание – изучаются по отдельности. В то время как их совместное использование может привести к синергетическому эффекту. Вопрос о том, как одновременное варьирование содержания наноразмерной фазы и полимерного связующего влияет на процессы уплотнения, формирования микроструктуры и итоговые механические свойства композита, остается недостаточно изученным.

Цель данной работы – исследование комплексного влияния содержания наноразмерного оксида алюминия и полимерного связующего на процессы спекания, формирование микроструктуры, плотность и механические свойства композиционных материалов на основе микронного порошка оксида алюминия.

В работе была синтезирована серия образцов композитов на основе микронного Al_2O_3 с варьируемым содержанием наноразмерного Al_2O_3 и полимерного связующего. Микроструктура и фазовый состав полученных материалов исследованы методами сканирующей электронной микроскопии и рентгенофазового анализа. Проведены механические испытания на трехточечный изгиб

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30006-П, <https://rscf.ru/project/21-79-30006/>.

Температурная зависимость параметров структуры и механических свойств сплава Ti–45Nb^{*} в ультрамелкозернистом состоянии

А.Ю. Ерошенко¹, Ю.П. Шаркеев^{1,2}, И.А. Глухов¹,
М.А. Химич¹, П.В. Уваркин¹, А.И. Толмачев¹

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

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

Изучена зависимость механических свойств и особенностей структуры ультрамелкозернистого (УМЗ) сплава Ti – 45 мас.% Nb от режимов термообработки. В ходе выполненных экспериментов установлены этапы эволюции УМЗ-структурь исследуемого сплава. Показано, что отжиги в температурном интервале от 400 до 800 °C влекут за собой существенные изменения состояния структуры. Исходная УМЗ-структура характеризуется зернами основной β -фазы, выделениями α -фазы и наноразмерными частицами ω -фазы, обеспечивающими дисперсионное упрочнение сплава. Показано, что термообработка при 400 и 500 °C приводит к увеличению содержания α -фазы в сплаве. Дальнейшее увеличение температуры до 600 °C приводит к ее частичному растворению. Отмечено, что отжиг при 500 °C характеризуется переходом структуры из УМЗ-состояния в мелкозернистое и крупнокристаллическое с формированием дисперсно-упрочненных зерен β -фазы, а при увеличении температуры происходит разупрочнение исследуемого сплава, что объясняется рекристаллизацией структуры, фазовым превращением, присутствием выделений α - и ω -фаз, а также уменьшением их вклада в дисперсионное упрочнение.

Ключевые слова: сплав Ti – 45 мас.% Nb, термическая обработка, ультрамелкозернистая микроструктура, механические свойства, термическая стабильность.

Введение

Как известно, наиболее широко применяемыми металлами для создания медицинских имплантатов являются биоинертные титан, ниобий, цирконий, гафний, tantal, относящиеся к вентильной группе [1]. Их ключевыми преимуществами, в сравнении с другими материалами на металлической основе, являются хорошая биосовместимость, повышенное сопротивление коррозии, слабое температурное расширение, невыраженная токсичность и сравнительно малая плотность. Самые распространенные в области производства медицинских имплантатов сплавы к настоящему моменту – сплавы на основе титана: Ti–6Al–4V, Ti–6Al–7Nb, Ti–6Al–2.5Fe и др. Однако известно, что наличие в их составе алюминия, ванадия, молибдена и других токсичных элементов является нежелательным [2, 3]. В связи с этим на сегодняшний день отмечен повышенный интерес к бинарным сплавам системы титан – ниобий ввиду отсутствия в их составе токсичных элементов. Интенсивное внимание к данным сплавам, среди которых особо следует отметить Ti–40Nb и Ti–45Nb, обусловлено их высокими биосовместимостью и коррозионной стойкостью, а также пониженными значениями модуля Юнга [4, 5]. Известно, что сплавы титана относятся к сплавам средней прочности. Их модуль Юнга обычно составляет 100–120 ГПа, что существенно выше упругости человеческой кости. В то же время в сплавах на основе титана, в составе которых присутствует 40–45 мас.% ниobia, наблюдаются значения модуля Юнга в 55–60 ГПа. Такое поведение обусловлено стабилизированной высокотемпературной β -фазой (ОЦК-решетка) в составе сплава, которая существенно снижает упругость материала имплантата и делает ее численно сопоставимой с упругостью кортикальной кости (10–30 ГПа) [6]. Однако прочность сплавов Ti–40Nb и Ti–45Nb является недостаточной для применения в области производства медицинских имплантатов без дополнительных воздействий [7]. Интенсивная пластическая деформация (ИПД), являющаяся одним из широко распространенных видов деформационных обработок материалов, позволяет решить вышеобозначенную проблему [8]. Формирование ультрамелкозернистого (УМЗ) или наноструктурного (НС) состояния существенно улучшает механические свойства сплава, подвергаемого обработке, в частности, заметно повышает его прочность. Однако процессы, происходящие в сплавах с полученным УМЗ- и НС-состоянием при различных термических воздействиях, остаются не до

* Работа выполнена в рамках реализации мероприятий программы развития научного центра мирового уровня «Новые материалы специального назначения», соглашение о предоставлении субсидии № 075-15-2025-589 от 25.06.2025 г.

Исследование структуры и механических свойств образцов из никелида титана, полученных методом SLM*

К.А. Турова¹, Г.А. Байгонакова¹, Е.С. Марченко¹

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

Исследованы структура и механические свойства образцов из никелида титана, изготовленных методом селективного лазерного плавления, при скоростях сканирования от 200 до 1100 мм/с. Показано, что параметры селективного лазерного плавления оказывают существенное влияние на микроструктуру и прочностные характеристики материала. При низких скоростях сканирования (200 мм/с) формируется плотная структура с высокой прочностью (до 938 МПа), тогда как увеличение скорости сканирования (1100 мм/с) приводит к образованию дефектов неполного проплавления и снижению прочности до 530 МПа. Оптимальные характеристики достигаются при промежуточных скоростях сканирования (600–850 мм/с), обеспечивающих повышение деформации за счет более однородной микроструктуры. Полученные результаты позволяют оптимизировать режимы селективного лазерного плавления при изготовлении конструкций из сплавов TiNi.

Ключевые слова: TiNi, порошок никелида титана, селективное лазерное плавление, аддитивные технологии, механические параметры.

Введение

Селективное лазерное плавление (SLM) представляет собой процесс послойного плавления металлического порошка лазерным лучом, движущимся по заранее заданной траектории в соответствии с трехмерной моделью изделия. Этот метод позволяет создавать изделия сложной геометрии с контролируемыми микроструктурными и механическими свойствами [1, 2]. Технология SLM позволяет разрабатывать и изготавливать индивидуальные имплантаты с учетом анатомических особенностей пациента, что снижает риск осложнений и отторжения [3]. Метод широко применяется в медицине, в том числе в стоматологии (для изготовления коронок) и челюстно-лицевой хирургии (для реконструкции костной ткани) [4].

Одной из ключевых проблем процесса SLM остается образование дефектов – пор, пустот и трещин, существенно снижающих качество и надежность получаемых изделий. Ряд исследований [5–8] показал, что параметры лазерного воздействия (мощность, скорость сканирования, толщина слоя) оказывают значительное влияние на стабильность процесса плавления, формирование расплава и, как следствие, на микроструктуру материала. Оптимальный подбор технологических режимов позволяет снизить пористость и обеспечить равномерное формирование слоев [6–8].

Контроль дефектов остается одной из ключевых задач, поскольку их формирование определяется не только параметрами плавления, но и динамикой расплава, а также скоростью кристаллизации. Форма, размер и распределение пор оказывают значительное влияние на механические свойства материала; наиболее опасными являются крупные поры, которые могут инициировать разрушение даже при сравнительно малых нагрузках. Это подчеркивает необходимость точной настройки технологических параметров и контроля микроструктуры на всех стадиях производства [9, 10].

В настоящей работе исследуются ячеистые конструкции из никелида титана, изготовленные методом селективного лазерного плавления. Подобные структуры характеризуются высокой жесткостью при относительно небольшой массе и обеспечивают равномерное распределение нагрузки, что делает их перспективными для использования в качестве заменителей хрящевой и тонкой костной ткани [11, 12].

Большинство существующих исследований сосредоточено на изучении компактных или стохастически пористых образцов, тогда как регулярные ячеистые конструкции с направленным армированием остаются недостаточно исследованными. Подобная геометрия позволяет точнее моделировать реальные условия эксплуатации и анализировать влияние параметров процесса на формирование структуры и свойств материала. Исследование подобных структур способствует

* Исследование проводилось при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-607 от 01.07.2025).

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.194

DOI: 10.17223/00213411/68/11/23

Применение модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости для аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекулы OCS*

А.К. Третьяков¹, Р.В. Николаев¹, Ю.В. Кистенев¹, С.Э. Шипилов¹¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Приведены результаты апробации модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости (ГАПС) в задаче аппроксимации поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекулы OCS. Проведен сравнительный анализ и показано кратное превосходство ГАПС в точности при многократной аппроксимации ППЭ OCS относительно алгоритма Левенберга – Марквардта.

Ключевые слова: поверхность потенциальной энергии, машинное обучение, генетический алгоритм, алгоритмы оптимизации, итерационные алгоритмы.

Введение

Аппроксимация поверхности потенциальной энергии (ППЭ) многоатомных молекул проводится с целью получения гладкой физически подкрепленной математической функции (аппроксимирующей функции, АФ). Полученная функция играет ключевую роль в задачах оптики и спектроскопии, а именно, позволяет определять физические свойства молекулы, в особенности, рассчитывать колебательные, вращательные и электронные спектры [1].

Задача численной аппроксимации ППЭ молекулы, как правило, является глубоко параметризованной, математически нерегуляризованной и невыпуклой задачей. Существует множество подходов к формированию АФ для различных по количеству атомов и пространственной структуре молекул. Каждая отдельная АФ определяется параметрами, описывающими геометрию молекулы, параметрами, характеризующими поступательные и вращательные степени свободы молекулы, и параметрами, которые имеют сугубо математический смысл и являются подгоночными коэффициентами.

Обычно аппроксимация осуществляется в несколько этапов с разделением всех параметров аппроксимирующей математической функции на отдельные группы. К примеру, параметры, описывающие геометрию модели, могут быть оценены отдельно, путем оптимизации геометрии молекулы с помощью программ для квантово-химических расчетов [1, 2]. Но независимо от того, аппроксимируется весь набор параметров целиком или отдельно по группам параметров, возникают невыпуклые и нерегуляризованные численные задачи.

Для эффективного решения подобных задач был разработан алгоритм машинного обучения, а именно – модифицированный генетический алгоритм повышенной сходимости (ГАПС) [3–5]. Подробное описание ГАПС, его структуры и отличительных особенностей, а также сравнительный анализ его эффективности по отношению к алгоритмам Левенберга – Марквардта (ЛМ) и Adam, приведены в предыдущих работах [3, 6, 7]. Цель настоящего исследования – изучить релевантность ГАПС применительно к задаче аппроксимации ППЭ линейной молекулы карбонилсульфида (OCS) и сравнить полученные результаты с аналогичными, рассчитанными с помощью алгоритма ЛМ [2, 8, 9]. Все программы и расчеты реализованы с помощью языка программирования Python [10].

Аппроксимация поверхности потенциальной энергии молекулы OCS

Для оценки эффективности и сравнительного анализа ГАПС с алгоритмом ЛМ использована следующая АФ для ППЭ OCS [2]:

$$V(R_1, R_2, \theta, \{F_{ijk}\}, \{R_{me}, \kappa_m\}, \theta_e) = \sum_{i,j,k} F_{ijk} M_i^i(R_1, R_{1e}, \kappa_1) M_j^j(R_2, R_{2e}, \kappa_2) M_k^k(\theta, \theta_e), \quad (1)$$

$$M_{i,j}(R_m, R_{me}, \kappa_m) = 1 - e^{-\kappa_m(R_m - R_{me})}, \quad m = 1, 2,$$

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-557 от 25.04.2024 г.).

Идентификация размера и концентрации субмикронных частиц^{*} на основе модели рэлеевского рассеяния

И.С. Бондарчук¹, В.А. Клименко², А.Б. Ворожцов¹

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

² Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск, Россия

Представлен метод определения максимального размера и концентрации субмикронных аэрозольных частиц путем измерения ослабления параллельного пучка зондирующего оптического излучения. Предлагаемый метод позволяет точно определять концентрацию частиц и их максимальный размер, не требуя предварительной информации о дисперсном составе аэрозольной среды. Метод может использоваться при решении широкого круга практических задач, таких как мониторинг состояния окружающей среды, диагностика технологических процессов горения материалов и контроль загрязнений воздуха.

Ключевые слова: аэрозоль, размер частиц, концентрация частиц, оптическая плотность, теория Ми, приближение Рэлея.

Дисперсный состав частиц в аэрозольных средах является важнейшей характеристикой, которая зачастую определяет эффективность технологических процессов, а также состояние окружающей среды. При этом для исследования подобных объектов наиболее точными являются оптические бесконтактные методы. Экспериментальная информация о таких параметрах конденсированной фазы аэрозоля, как концентрация и дисперсность, позволяет оценивать степень адекватности реальному процессу принятой для его описания математической модели и используется в качестве исходных данных при проведении расчетов рабочих процессов в конкретных устройствах. Характеристика дисперсности аэрозольных частиц и скорости их генерации являются важными параметрами для разработки технологий экстренной очистки воздуха от вредных субстанций. Современные оптические методы позволяют получать экспериментальные данные о размере и концентрации частиц, однако существующие подходы требуют сложных вычислений и наличия предварительных данных о дисперсном составе частиц. Цель работы – разработка метода идентификации размера и концентрации субмикронных частиц на основе упрощенной модели рэлеевского рассеяния. Предлагаемый подход позволяет точно определять указанные параметры без предварительного знания дисперсного состава частиц.

В данной работе представлен подход, позволяющий определять массовую концентрацию и максимальный размер конденсированных частиц по данным лазерного зондирования аэрозольных образований. Согласно предлагаемому методу, измерения оптической плотности дисперсной среды производятся в нескольких точках спектрального диапазона длин волн, а границы этого диапазона выбираются исходя из информации о комплексном показателе преломления материала частиц. При прохождении монохроматического излучения с длиной волны λ через слой толщиной l , состоящий из равномерно распределенных монодисперсных частиц диаметром D с массовой концентрацией C_m , происходит его ослабление за счет рассеяния и поглощения частицами. Количественной характеристикой ослабления является спектральный коэффициент пропускания T_λ , связанный с законом Бугера [1]:

$$T_\lambda = I_\lambda / I_{0\lambda} = \exp(-\tau_\lambda), \quad (1)$$

где I_λ – поток излучения, прошедший сквозь слой; $I_{0\lambda}$ – поток излучения, поступающий на слой.

Выражение для спектральной оптической плотности τ_λ для монодисперсных частиц в рамках допущений теории Ми имеет вид [1]

$$\tau_\lambda = \frac{1.5C_m l}{\rho D} Q(\alpha, m), \quad (2)$$

где ρ – плотность материала частиц.

Входящая в уравнение (2) зависимость $Q(\alpha, m)$ безразмерного фактора эффективности ослабления носит сложный колебательный характер от параметра дифракции (параметра Ми) $\alpha = (\pi D)/\lambda$, от комплексного по-

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-69-00108, <https://rscf.ru/project/22-69-00108/>.

Ежемесячный научный журнал

ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ФИЗИКА
IZVESTIYA VUZOV. FIZIKA

2025. Т. 68. № 11

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

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

Подписано к печати 21.11.2025. Выпуск в свет 10.12.2025. Заказ № 6572.
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс». Печать цифровая.
Усл. п. л. 23.25. Уч.-изд. л. 26.04. Тираж 46 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

Цена свободная

Индекс 70380