

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ 2-МЕТИЛТИО-6-НИТРО-7-ГИДРОКСИ-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛО-4,7-ДИГИДРО[5,1-С]-1,2,4-ТРИАЗИНИД МОНОГИДРАТА

Можаровская П.Н.¹, Ивойлова А.В.¹, Иванова А.В.¹, Козицина А.Н.¹,
Русинов В.Л.^{1, 2}

¹) Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России
Б.Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

²) Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620137, Россия, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22
E-mail: pnmozharovskaia@urfu.ru

ELECTROCHEMICAL STUDY OF 2-METHYLTHIO-6-NITRO-7-HYDROXY-4H-1,2,4-TRIAZOLO-4,7-DIHYDRO[5,1-C]-1,2,4-TRIAZINIDE MONOHYDRATE SODIUM SALT

Mozharovskaia P.N.¹, Ivoilova A.V.¹, Ivanova A.V.¹, Kozitsina A.N.¹, Rusinov V.L.^{1, 2}

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin. 620002, Russia, Yekaterinburg, st. Mira, 19.

²) I.Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IOS UB RAS), 620137, Russia, Yekaterinburg, st. Sofia Kovalevskoy, 22

The redox conversion of a potential antiviral drug was studied by voltammetry methods. It has been established that the cathode signal is due to the occurrence of an irreversible process of electroreduction of the nitro group. The number of electrons involved in the reduction reaction is 3.

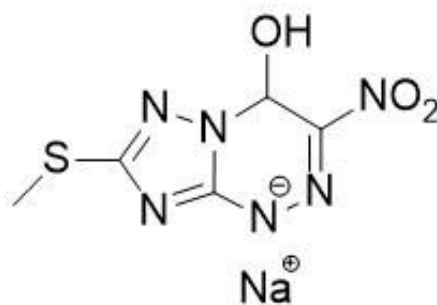


Рис. 1. Структурная формула соединения 1

Постоянная изменчивость вирусов приводит к необходимости разрабатывать новые более активные и безопасные лекарственные противовирусные препараты. Представитель нового класса соединений нитроазолоазинов - натриевая соль 2-метилтио-6-нитро-7-гидрокси-4Н-1,2,4-триазоло-4,7-дигидро[5,1-с]-1,2,4-

Модельные растворы, содержащие от 0,1 до 100 г/дм³ по Мо, готовились из соли Na₂MoO₄. Также вводился карбонат натрия, чтобы воспроизвести остаточную концентрацию соды после выщелачивания от 0 до 200 г/дм³ по Na₂CO₃.

Экстракцию проводили с помощью экстрагента – Aliquat 336. Экстрагент из товарной Cl⁻-формы переводили в CO₃²⁻-форму. Перевод экстрагента в рабочую форму проводили непосредственно контактом с раствором Na₂CO₃ с концентрацией 200 г/дм³ в течение 20 минут. После этого промывали водой до конечного pH≈9.

Одним из основных параметров, который влияет на экстракцию Мо из карбонатных растворов, является концентрация соды.

Поэтому было изучено влияния концентрации соды на процесс экстракции Мо. Для этого была приготовлена серия модельных растворов с концентрацией от 0 до 200 г/дм³ по Na₂CO₃ и с постоянной концентрацией Мо – 10 г/дм³. Эксперимент проводился при непрерывном перемешивании в течении 15 минут при соотношении В:О = 1:1 и Э:Р=40:60.

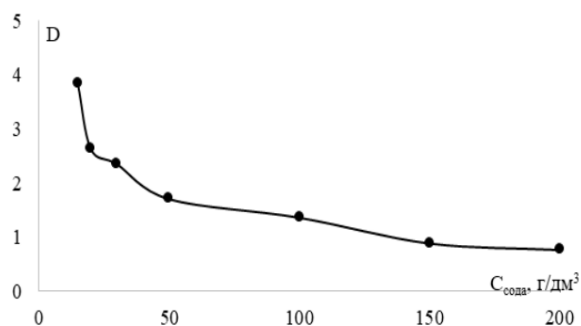


Рис. 1. Зависимость коэффициента распределения D от концентрации соды в растворе

Концентрация соды оказывает значительное влияние на экстракцию Мо, максимальный коэффициент распределения составляет 3,9 при концентрации соды в пределах до 20 г/дм³, вместе с тем видно, что реэкстракцию из Aliquat 336 можно проводить высокочастотными содовыми растворами.

1. Зеликман А.Н., Вольдман Г.М. Теория гидрометаллургических процессов. - М.:«Интермет Ижинеринг», 2003. - 422 с.
2. Колобов Г.А., Медведев А.С., Колмакова Л.П., Карпенко А.В. Новые технологии извлечения молибдена из отработанных катализаторов // Металургія, выпуск 2 (32) - 2014.
3. Медведев, А. С. Пирометаллургический способ извлечения молибдена из отработанных АКМ катализаторов нефтеочистки [Текст] / А. С. Медведев, Н. В. Малочкина, Ф. Ш. Балгаева // Химическая технология : межд. конф. ХТ'07, Москва, 17-23 июня 2007. : тез. докл. – Т. 4. – М. : ЛЕНАНД, 2007. – С. 261-263 .

ЭКСТРАКЦИЯ МО ИЗ МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ПЕРЕРАБОТКИ НИКЕЛЬ-АЛЮМО-КОБАЛЬТОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Меркучева К.А.¹, Малышев А.С.¹, Дюрягин В.В.¹, Кириллов С.В.¹,
Кириллов Е.В.¹, Бочкарева Ж.С.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: merkucheva_k@mail.ru

EXTRACTION OF MO FROM MODEL SOLUTIONS FOR PROCESSING NICKEL-ALUMINUM-COBALT CATALYSTS

Merkucheva K.A.¹, Malyshev A.S.¹, Duryagin V.V.¹, Kirillov S.V.¹, Kirillov E.V.¹,
Bochkareva Z.S.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A method of extraction of molybdenum from AMC catalysts has been developed. The kinetics of the extraction process was studied. As well as the effect of soda concentration and temperature dependence on the degree of molybdenum extraction.

Одним из важных источников вторичного сырья редких металлов являются отработанные катализаторы. В состав катализаторов, используемых в нефтехимической промышленности для гидроочистки, гидрообессеривания (гидродесульфуризации) и гидрокрекинга нефти, обычно входят редкие (Mo, V, W) и тяжелые цветные металлы (Ni, Co) в виде оксидов (и/или сульфидов), основой (носителем) обычно служит Al_2O_3 , реже – SiO_2 [1].

Одной из проблем является накопление отработанных катализаторов, большинство из которых являются токсичными для окружающей среды. Основными из таких отходов являются молибденсодержащие катализаторы марок АКМ ($\approx 4\%$ CoO и 12% MoO_3), АНМ ($3...4\%$ NiO, $12...14\%$ MoO_2) и др.[2]. Переработка таких катализаторов позволяет не только избавиться от отходов, но и реализовать их в качестве вторичного источника Mo.

Поэтому, актуальной задачей является разработка экологичного способа извлечения молибдена из отработанных катализаторов.

Выщелачивание молибдена, кобальта и никеля проводили методом спекания с содой с последующим водным выщелачиванием. Полученные продуктивные растворы, в зависимости от условий проведения процесса, содержали от 10 до 50 г/дм³ Mo (от 0,05 до 7,5 г/дм³ Al и менее 0,01 г/дм³ Co), остаточное содержание Na_2CO_3 составляло 5-30 г/дм³[3]. Из данных продуктивных растворов проводили экстракционное извлечение Mo с применением Aliquat 336.

По причине отсутствия отработанных катализаторов эксперименты по экстракции Mo проводились на молибденовых растворах.

переходе от макро к микроячейке. Показано, что исследуемый процесс соответствует первой стадии прямого электрохимического восстановления нитрогруппы в гидроксиламин; что согласуется с литературными данными [3]. Для выбора рабочих условий формирования максимального электрохимического отклика проводились исследования в режимах циклической вольтамперометрии, квадратно-волновой вольтамперометрии и дифференциально-импульсной вольтамперометрии. При выбранных рабочих условиях ток пика электровосстановления ХА линейно зависит от концентрации антибиотика в модельном растворе и потому может быть использован в качестве аналитического сигнала электрохимического сенсора. Увеличение чувствительности определения может быть достигнуто за счет применения органических и гибридных модификаторов поверхности рабочего электрода.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-392.2022.1.3

1. V. Samanidou et.al., *Analytica Chimica Acta* 914 (2016), pp. 62-74
2. M.C.V. Mamani et.al. *Food Chem.*, 117 (3) (2009), pp. 545-552
3. J. Klausen et.al., *Environ. Sci. Technol.*, 29 (1995), pp. 2396-2404

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ХЛОРАМФЕНИКОЛА НА ПЛАНАРНЫХ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОДАХ В МИКРОЯЧЕЙКЕ

Медведева М.В.¹, Козырина Ю.А.¹, Свалова Т.С.¹, Козицина А.Н.¹

¹) Кафедра аналитической химии, Химико-технологический институт, Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: medv-margarita@yandex.ru

ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF CHLORAMPHENICOL ON CARBON-CONTAINING ELECTRODES IN A MICROCELL

Medvedeva M.V.¹, Kozyrina Yu.A.¹, Svalova T.S.¹, Kozitsina A.N.¹

¹) Department of Analytical Chemistry, Chemical Engineering Institute, Ural Federal University named after the first President of Russian Federation, Yekaterinburg, Russia

The work is devoted to the study of the electrochemical behavior of chloramphenicol during the transition from a macro- to a microcell. The possibility of using the reduction of the nitro group as an analytical signal for the determination of CA in a microcell was shown.

Хлорамфеникол (ХА) – антибиотик широкого спектра действия, применяющийся в ветеринарии и медицине. Накопление ХА у животных представляет опасность для здоровья человека, что делает его мониторинг важной задачей [1]. Для определения остаточных количеств ХА в лабораторной практике используются хроматографические и спектроскопические методы анализа [2]. Наибольший интерес представляет электрохимическое определение ХА, главным образом, благодаря ультрачувствительности определения, возможности миниатюризации и перехода к портативным тест-системам. Электрохимические аналитические микроустройства имеют большие перспективы, так как поддаются массовому производству, представляя собой недорогие, одноразовые сенсорные системы. В конструкциях таких устройств, как правило, используют трехэлектродные системы, изготовленные методом трафаретной печати.

Целью данной работы было исследование особенностей электрохимического поведения ХА в условиях портативной электрохимической системы и выбор рабочих условий формирования аналитического сигнала.

В работе аналитическим сигналом служил пик восстановления нитрогруппы. Было исследовано электрохимическое поведение ХА в водной среде в буфере Бриттона-Робинсона (рН 2-10) на стеклоуглеродном рабочем электроде и в портативной микроячейке Micugh с применением трехэлектродной системы, изготовленной методом трафаретной печати. При переходе к микроячейке наблюдается сдвиг потенциала и уменьшение пикового тока, по-видимому, связанный с различиями рабочих электродов в эффективной поверхности. Предложен механизм электровосстановления ХА, проведены исследования кинетики реакции при

Способность поглощать CO_2 демонстрирует зола-уноса, полученная после циклонов Московского МСЗ № 4 [2]. Потенциал улавливания составляет ≈ 140 г/кг на сухую массу золы.

Динамика процесса карбонизации золы отличается от карбонизации чистого CaO [3]. В первом случае при подаче CO_2 наблюдается стремительное насыщение образца до определенного предела, после чего масса практически не изменяется. В случае чистого CaO процесс протекает более плавно, в нем можно выделить переходную область от кинетического к диффузионному режиму. Такое различие можно объяснить низким содержанием CaO в золе и соответственно его малым объемом в отличие от чистого CaO , где перекрытие твердого реагента продуктом еще до полного реагирования замедляет реакцию. Данная особенность позволяет использовать более простые модели конверсии, в отличие от приведенных в [4].

По результатам экспериментов будут определены необходимые константы для выбранной модели, влияние добавки пара на скорость процесса и определены оптимальные режимы карбонизации.

1. Sanna A.A., Uibu M., Caramanna G., Kuusik R., Maroto-Valer M.M., *Chemical Society Reviews*, vol. 43, p. 8049—8080, (2014)
2. Тугов А.Н. Энергетическая утилизация твердых коммунальных отходов на ТЭС. М.: ВТИ, (2017)
3. Матюхина А.К., Масленников Г.Е., Рыжков А.Ф. Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Энерго- и ресурсосбережение. Энергообеспечение. Нетрадиционные и возобновляемые источники энергии. Атомная энергетика», в память о профессоре Данилове Н.И. – Даниловские чтения. Екатеринбург, 13-17 декабря, 2021.
4. Zhenshan L. *Chemical Engineering Science*, vol. 227, p. 115902, (2020).

КИНЕТИКА КАРБОНИЗАЦИЯ ЗОЛЫ-УНОСА МУСОРΟΣЖИГАТЕЛЬНОГО ЗАВОДА ДЛЯ СЕКВЕСТРАЦИИ CO₂

Масленников Г.Е.¹, Матюхина А.К.¹, Рыжков А.Ф.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: g26m12@gmail.com

KINETICS OF MUNICIPAL SOLID WASTE FLY ASH OF FLOW ASH CARBONATION FOR CO₂ SEQUESTRATION

Maslennikov G.E.¹, Matyukhina A.K.¹, Ryzhkov A.F.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The TGA method is used to carry out experimental studies of the process of carbonization of a sample of fly ash from the MSZ with a variation in the concentration of CO₂ and H₂O. Model parameters and optimal process modes are determined.

Мировая проблема изменения климата требует разработки и совершенствования технологий улавливания и связывания углекислого газа (CO₂). В этом направлении перспективным является процесс карбонизации минерального сырья, содержащего основные оксиды, главными из которых являются CaO и MgO. В результате CO₂ переходит в стабильную при условиях окружающей среды форму карбоната, например, CaCO₃, что исключает его утечку в атмосферу. Также данный процесс предъявляет низкие требования к чистоте и давлению CO₂ (вплоть до атмосферного).

В качестве сырья-поглотителя могут выступать природные щелочные минералы, однако высокие затраты на добычу, транспортировку и последующую утилизацию делают такой вариант в настоящее время нерентабельным.

Альтернативой могут служить промышленные отходы, например, щелочные золошлаки. Данные материалы получают в результате высокотемпературных процессов, поэтому обладают большей активностью, чем природные минералы. Кроме того, в результате карбонизации снижается токсичность отходов, поскольку образующиеся кристаллы карбоната препятствуют выщелачиванию ионов тяжелых металлов. К сожалению, данный вариант можно рассматривать только как метод снижения, а не ликвидации выбросов CO₂, поскольку содержание основных оксидов в таком сырье невелико. По обзору [1] потенциал улавливания CO₂ различными твердыми отходами может составлять 60-580 г/кг.

В данной работе экспериментально исследуется использование золовых отходов мусоросжигательного завода в качестве сырья-поглотителя. Эксперименты проводятся на термогравиметрическом анализаторе NETZSCH STA 449 F3.

никелем и основными легирующими элементами сплавов – железом, молибденом, хромом. Данная работа посвящена определению термодинамических характеристик сплавов никеля с теллуром. Эксперименты по исследованию термодинамических свойств проводили в модельном расплаве на основе эвтектической смеси (Na-K-Cs)Cl.

Измерения выполняли методами поляризации и хронопотенциометрии. В работе использовали торцевые электроды из никеля; в некоторых экспериментах поверхность никеля предварительно покрывали тонкой плёнкой теллура. Исследования проводили при температурах 500–700 оС, соответствующих рабочим параметрам ЯЭУ ЖСР. Хронопотенциограммы анализировали на предмет наличия перегибов, обусловленных изменением состава сплава в поверхностном слое. Потенциалы, соответствующие характерным точкам, были соотнесены с диаграммой состояний системы Ni-Te. По значениям потенциалов рассчитывали термодинамические характеристики образующихся соединений. Используемый метод позволяет определять характеристические потенциалы с точностью $\pm 5\text{--}10$ мВ, что соответствует погрешности определения изменения энергии Гиббса около 2–3 кДж/моль.

Потенциалы характерных точек относительно никелевого электрода сравнения позволили рассчитать активность никеля в сплавах. Полученные значения хорошо согласуются с литературными данными [3]. Так для соединения, описываемого формулой Ni_2Te_3 , попадающего в гомогенную область NiTe_{2-x} , изменение энергии Гиббса образования (в расчёте на один атом никеля) составили $-66,7$ кДж/моль, $-61,8$

1. В.Л. Блинкин, В.М. Новиков. Жидкосолевые ядерные реакторы. — М.: Атомиздат, 1978.
2. Игнатьев В.В. Экспериментальное исследование теллуровой коррозии никель – молибденовых сплавов в расплаве солей фторидов лития, бериллия и урана [Текст] / Игнатьев В.В., Суренков А.И., Гнидой И.П., Углов В.С., Конаков С.А. – Атомная энергия т. 20 выпуск 6, 2016. – 326 с.
3. Roine A., Lamberg P., Mansikkaato J., et al. HSC, version 6.12. Outec Research Oy, 2007.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СПЛАВОВ НИКЕЛЯ С ТЕЛЛУРОМ МЕТОДАМИ ПОЛЯРИЗАЦИИ И ХРОНОПОТЕНЦИОМЕТРИИ

Маркелов В.И.¹, Телешев А.Ю.¹, Иванов В.А.¹, Половов И.Б.¹,
Волкович В.А.¹

¹⁾ Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: WladisM@mail.ru

THE DETERMINATION OF THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF NICKEL-TELLURIUM ALLOYS BY POLARIZATION AND CHRONOPOTENTIOMETRY METHODS

Markelov V.I.¹, Teleshev A.Yu¹, Ivanov V.A.¹, Polovov I.B.¹, Volkovich V.A.¹
¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

The present investigation is focused on the experimental investigation of tellurium thermodynamic properties in terms of possible application of molten salt nuclear reactors. The thermodynamic characteristics of nickel-tellurium alloys were measured by polarization and chronopotentiometry methods.

Проекты реакторов на расплавах солей, также известных как жидкосолевые (ЖСР), известны с 50-х годов прошлого столетия [1]. Несмотря на все преимущества и потенциальную безопасность ЖСР, проблема с выбором конструкционных материалов не позволяет разработать надежную конструкцию ядерно-энергетической установки (ЯЭУ). Причина состоит в том, что создание и эксплуатация ЯЭУ осложнена повышенной коррозионной активностью топливной соли на основе агрессивных фторидов щелочных металлов, во-многом осложненной влиянием теллура как продукта деления на стойкость конструкционных материалов по отношению межкристаллитному разрушению.

В качестве наиболее перспективных материалов для ЯЭУ ЖСР рассматриваются сплавы на основе никеля. Никелевые сплавы сочетают в себе коррозионную стойкость к агрессивным средам, приемлемые механические и технологические свойства. Однако проведенные ранее исследования применения сплавов на основе никеля выявили проблемы [2], заключающиеся в межкристаллитном растрескивании сплавов на основе никеля, причиной которых является диффузия продукта деления теллура из топливной соли в металл по границам зерен с последующим взаимодействием с компонентами сплавов, что, в свою очередь, обуславливает образование на границах зерен теллуридных включений с последующим изменением структуры сплава, а также деградации прочностных характеристик.

Для понимания причин возникновения вызванной теллуридом коррозии необходимо исследование термодинамических характеристик соединений теллура с

3. Андрианов К.А., Якушкина С.Е. – Полимеризация смешанных арил(алкил)-циклотетрасилоксанов – Высокомолекулярные соединения, 613-618 (1959).
4. K.A. Andrianov, S.A. Golubtsov, I.V. Trofimova, R.A. Turetskaia and V.D. Krylov. / Changes in the catalytic activity of silicin-copper alloys in the direct synthesis of clo-roethylsilanes, 147-154 (1956)

РАЗРАБОТКА ГИДРОФОБНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Малых М.А.¹, Жилин А.С.¹, Ребрин О.И.¹

¹⁾ Уральский Федеральный Университет
E-mail: mihailmalikh@mail.ru

DEVELOPMENT OF A HYDROPHOBIC MATERIAL BASED ON ORGANOSILICON COMPOUNDS

Malykh M.A.¹, Zhilin A.S.¹, Rebrin O.I.¹

¹⁾ Ural Federal University

Among hydrophobic materials, organosilicon compounds are one of the most promising. The main advantage of the data from the compounds is environmental friendliness. Polymer structures make it possible to create hydrophobic properties, and also have the potential to increase the melting point.

Среди гидрофобных материалов одними из представляющимися перспективными являются кремнийорганические соединения. Основное преимущество данных с соединений является экологичность. Полимерные структуры позволяют создать гидрофобные свойства, а также имеют потенциал увеличения температуры плавления.

В ходе работы был проведен анализ возможных методов получения кремнийорганических полимеров и разработана схема получения полиэтилсилоксана. Предложенный синтез состоит из четырех основных стадий. На первой стадии разрабатывается и оптимизируется получение кремний-медной контактной массы за счет восстановления хлорида меди (I) на кремнии в токе водорода. На второй стадии происходит алкилирование. Хлоралкан приводится во взаимодействие с кремний-медной контактной массой, в результате чего образуется диалкил-дихлорсилан. Третьей стадией является получение циклосилоксана путем проведения гидролиза диалкил-дихлорсилана водой. Четвертая стадия – это полимеризация циклосилоксана с образованием продукта, обладающего гидрофобными свойствами.

1. М.В. Соболевский. Свойства и области применения кремнийорганических продуктов / М.В. Соболевский, О.А. Музовская, Г.С. Попелева. – Москва: Химия. – 1975 г. – С. 296
2. Marius Rutkevicius, Tahira Pirzada, Mackenzie Geiger, Saad A. Khan. – Creating superhydrophobic, abrasion-resistant and breathable coatings from water-borne polydimethylsiloxane-polyurethane Co-polymer and fumed silica – Journal of Colloid and Interface Science. (2021)

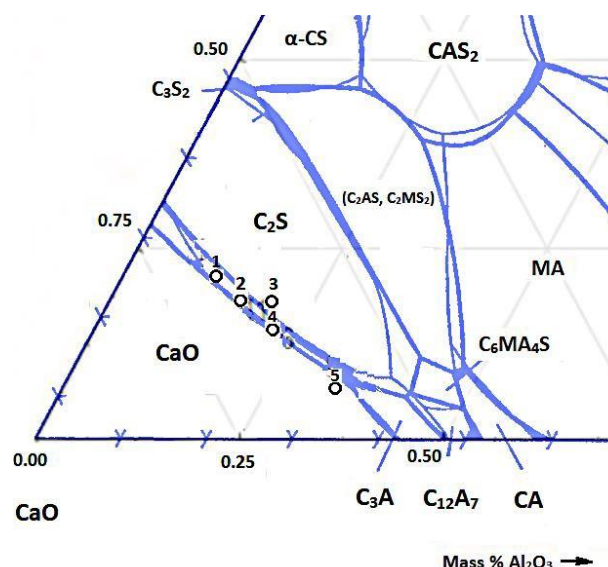


Рис. 1. Изображение составов шлака для получения клинкера и чугуна

- Шихтовые составы, открытые в исследовании (рис.) могут быть использованы для совместной и безотходной утилизации шлаков АКП и ДСП.
- Разработана и экономически обоснована технологическая схема безотходной переработки шлаков АКП и ДСП, которая может быть внедрена в производство для получения ПЦ клинкера и чугуна товарного качества.
- В данной работе основной акцент сделан на разработке технологической схемы.

з/б № 0396-2015-0083

1. Шатохин, И. М. Новый способ переработки техногенных отходов металлургического производства / И. М. Шатохин, А. Л. Кузьмин, Л. А. Смрнов, Л. И. Леонтьев, В. А. Бигеев, И. Р. Манашев // Металлург. – 2017. – № 7. – С. 19-24.
2. Дильдин, А. Н. Особенности технологии утилизации отходов сталеплавильного производства / А. Н. Дильдин, Р. Р. Гарифулин // Наука ЮУрГУ. Секции технических наук: материалы 66-й науч. конф./отв. за вып. С.Д. Ваулин; Юж.-Урал. гос. ун-т.-Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2014. – 1764 с.
3. Леонтьев, Л. И. Технологические особенности переработки сталеплавильных шлаков в строительные материалы и изделия / Л. И. Леонтьев, О. Ю. Шешуков, В. С. Цепелев, М. А. Михеенков, И. В. Некрасов, Д. К. Егизарьян // Строительные материалы. – 2014. – № 10. – С. 70-73

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛНОЙ УТИЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОПЕЧНОГО И КОВШЕВОГО ШЛАКОВ

Лобанов Д.А.¹, Шешуков О.Ю.^{1, 2}, Егiazарьян Д.К.^{1, 2}

¹) Институт Metallургии Уральского отделения Российской Академии Наук

²) Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина

E-mail: summerdanny@Yandex.ru

WASTELESS EAF AND LF SLAG UTILIZATION

Lobanov D.A.¹, Sheshukov O. Yu.^{1, 2}, Egiazary'an D.K.^{1, 2}

¹) Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

²) Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

The study presents the results of wasteless EAF and LF slag co-processing. Study revealed the chemical compositions which allow slag utilization with no waste left. The products of utilization are cast iron and product clinker. Study also proposes developed technology for that kind of utilization.

- В работе выявлены области химического состава шлаков, обеспечивающие получение портландцементного (ПЦ) клинкера.

- Определены границы составов в системе $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$, в рамках которых получают жидкоподвижные шлаки, что способствует благоприятному разделению металлической и силикатной частей, с образованием в силикатной части ПЦ клинкера [1,2].

- На основе исследований характеристик шлаковых расплавов рекомендованы химические составы шихты, обеспечивающие получение клинкера [1,3]

- Определен оптимальный диапазон температур и температурный режим, пригодный для проведения разделения и утилизации шлаков.

- Исследование подтвердило возможность одновременно получения во время утилизации не только ПЦ клинкера, но и товарного чугуна.

DEEP EUTECTIC SOLVENTS BASED ON CHOLINE CHLORIDE AND POLYOLS AS 'GREEN' EXTRACTANT FOR AZEOTROPIC MIXTURES

Liubichev D.A.¹

¹) Saint Petersburg State University
E-mail: dmitrylyubichev@gmail.com

This work presents the investigation of using DES formed by choline chloride and 1,2-ethanediol or 1,2-propanediol as extraction media for separation azeotropic mixtures of ethanol, n-propanol and n-butanol with corresponding esters.

Nowadays chemistry tries to solve actual environmental problems. Particularly, there is a certain request for an emission of different volatile compounds reduction, creating new sustainable methods of water purification and energy production. In all these cases scientists can reach the solution using deep eutectic solvents too [1]. Deep eutectic solvents (DESs) are mixtures based on donor and acceptor of hydrogen bond. Such interactions cause the much lower melting point of DES comparing with the individual components. In fact, DESs represent a new wide-spreading kind of solvents, it made mostly from quaternary ammonium salts (especially choline chloride) and different HBDs likewise glycerol, urea, and ethylene glycol. Fortunately, developing in this field of searching variety of components state the possibility to construct relevant solvent in exact conditions.

Herein we consider the ability to separate mixtures of alcohols with its acetate esters (ethyl acetate, n-propyl acetate, n-butyl acetate) using choline chloride – 1,2-ethanediol and choline chloride – 1,2-propanediol deep eutectic solvents. Tie-lines were obtained at temperatures 293.15 K and 313.15 K and atmospheric pressure. The compositions of coexisting organic and DES phases are determined by ¹H NMR-spectroscopy. The extraction performance was characterized with distribution coefficients and values of selectivity for used alcohols. NRTL model was applied to correlate LLE in these systems.

This work was supported by the Russian Science Foundation (grant 19-73-00092). The experimental work was facilitated by the equipment of Magnetic Resonance Research Centre at St. Petersburg State University.

1. Florindo C., Lima F., Ribeiro B. D., Marrucho I.M. Curr. Opin. Green Sustain. Chem., 18, 31-36, (2019).

Более высокое значение ШППВ на сорбенте MnO_2 -ТАЦ по сравнению с сорбентом MnO_2 -ПЭ объясняется диффузией Ra-224 вглубь сорбента. Результаты показали, что во всех случаях отношение площадей пиков $^{220}\text{Rn}/^{216}\text{Po}$ было довольно близким к 1 (разница не превышала 4%), что хорошо объясняется малым периодом полураспада Po-216, что приводит к тому, что его межфазное распределение полностью совпадает с таковым для радона.

Напротив, отношение площадей пиков $^{220}\text{Rn}/^{224}\text{Ra}$ составляло 0,52 – 0,53 в случае сорбента MnO_2 -ПЭ и 0,72 – 0,73 в случае сорбента MnO_2 -ТАЦ. Такой феномен можно объяснить тем, что радон — инертный газ, обладающий высокой подвижностью, особенно в условиях вакуумной камеры. Учитывая, что испускание альфа-частиц происходит равновероятно во все стороны на телесный угол 4π , в случае локализации радия-224 строго на поверхности плоского образца сорбента в среднем 50% альфа-частиц испускаются в сторону от сорбента. Соответственно, в среднем 50% ядер отдачи (радон-220) получает импульс движения, направленный в сторону сорбента и из-за явления отдачи заглубляются внутрь пленки, при этом короткий период полураспада Rn-220 ограничивает время его диффузии из сорбента в вакуумную камеру несколькими минутами. Наблюдавшееся в случае сорбента MnO_2 -ПЭ отношение площадей пиков $^{220}\text{Rn}/^{224}\text{Ra}$ близкое к 0,5 подтверждают данные соображения. В случае сорбента MnO_2 -ТАЦ поверхность сорбента покидало в среднем 33% ядер радона, что можно объяснить пористой текстурой поверхности сорбента, за счет чего распределение траекторий движения ядер отдачи становятся менее предсказуемым.

По альфа-спектру сорбента MnO_2 -ТАЦ после сорбции Ra-224 в течение 4 часов был рассчитан коэффициент диффузии радия-224 в сорбенте. Коэффициент диффузии радия-224 в сорбенте составил $3,7 \cdot 10^{-18} \text{ м}^2/\text{с}$, что вполне сопоставимо с полученным ранее коэффициентом диффузии радия-223 ($2,8 \cdot 10^{-18} \text{ м}^2/\text{с}$), что, в свою очередь, объясняется одинаковым химическим поведением различных изотопов одного элемента. Таким образом, можно сделать вывод о принципиальной воспроизводимости результатов оценки коэффициентов диффузии альфа-излучателей в плоских образцах по предложенному методу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-03-00931.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОЦЕССА СОРБЦИИ И ДИФФУЗИИ МИКРОКОЛИЧЕСТВ РАДИЯ-224 ТОНКОСЛОЙНЫМИ СОРБЕНТАМИ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА МАРГАНЦА

Куляшова Е.Н.¹, Семенищев В.С.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: elenakulyashova99@mail.ru

STUDY OF SORPTION AND DIFFUSION OF TRACE AMOUNTS OF RADIUM-224 BY THIN-LAYER SORBENTS BASED ON MANGANESE DIOXIDE

Kulyashova E.N.¹, Semenischev V.S.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin Yeltsin Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this work the sorption of Ra-224 on MnO₂-TAC and MnO₂-PE sorbents was studied. One of the main applications of planar thin-layer sorbents is to combine in one operation the sorption extraction of radionuclides and the preparation of a source for alpha-spectrometric measurements.

Одна из основных областей применения плоских тонкослойных сорбентов – объединение в одну операцию сорбционное извлечение радионуклидов и приготовление источника с хорошим разрешением для альфа-спектрометрических измерений. Наиболее важным показателем качества альфа-спектрометрического источника является энергетическое разрешение, которое измеряется через ширину пика на полувысоте (ШППВ).

Была изучена сорбция Ra-224 на сорбентах MnO₂-ТАЦ и MnO₂-ПЭ. На рис. 1. представлены соответствующие альфа-спектры.

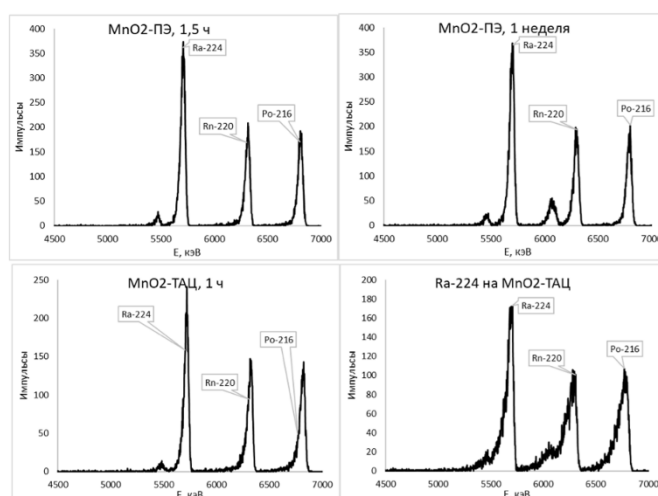
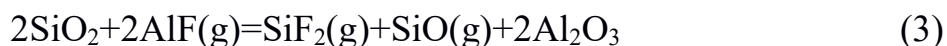


Рис. 1. Альфа-спектры сорбентов MnO₂-ТАЦ и MnO₂-ПЭ после сорбции Ra-224



Стадия 1 соответствует реакции с участием 4 молекул, что противоречит законам химической кинетики. Мы предполагаем, что она протекает с участием промежуточных метастабильных соединений, не представленных среди известных термодинамических данных.

На рисунке 1 приведён пример изменения равновесного состава продуктов реакций 1-2 в зависимости от температуры. На диаграмме не отмечены $\text{AlF}_2(\text{g})$, $\text{Al}_2\text{F}_6(\text{g})$, $\text{SiO}(\text{g})$, $\text{Si}_2\text{OF}_6(\text{g})$, Al_2SiO_5 , которые присутствуют в системе в следовых количествах.

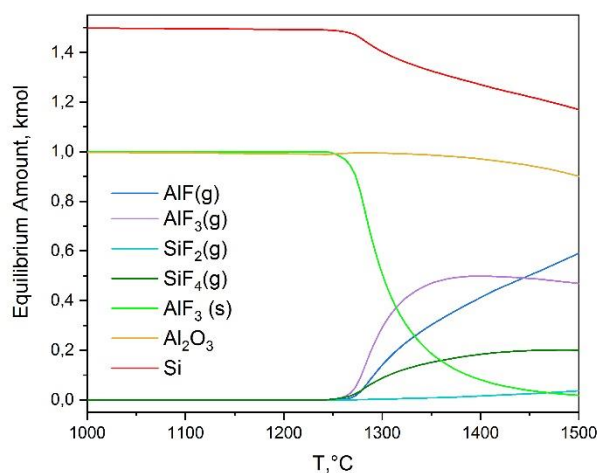


Рис. 1. Значения равновесных содержаний продуктов взаимодействия в закрытой системе «Al-AlF₃-SiO₂».

Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации (проект № МК-182.2022.1.3).

1. Shishkin R.A., Kudyakova V.S. et al., AIP Conf. Proc., 2174, 020063 (2019).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА КРЕМНИЯ

Кудякова В.С.^{1, 2}, Шишкин Р.А.^{1, 2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: v.s.kudiakova@urfu.ru

THERMODYNAMIC ANALYSIS OF THE SILICON GAS-PHASE SYNTHESIS PROCESS

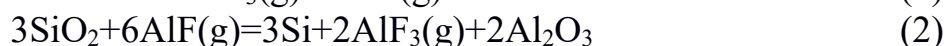
Kudyakova V.S.^{1, 2}, Shishkin R.A.^{1, 2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Solid State Chemistry UB RAS, Yekaterinburg, Russia

The thermodynamic analysis of silicon synthesis in transport reaction with aluminum fluorides was performed by HSC Chemistry program. A mechanism for the process of silicon formation, which consists of 4 stages, is proposed.

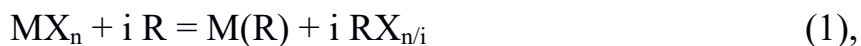
Несмотря на широкое применение кремния в современной промышленности, исследование новых технологий, которые повысят экономическую эффективность процесса синтеза и позволят получить кремний с заданной морфологией, остается актуальным вопросом. Недавно был предложен новый газофазный метод синтеза кремния из оксида за счет восстановления субфторидом алюминия в ходе транспортной химической реакции [1]. Этот метод основан на следующих превращениях:



Стоит отметить, что реакция (2) носит только формальный характер и не характеризует процессы, происходящие в реакционном пространстве, поскольку согласно законам химической кинетики, не существует реакций с молекулярностью выше трёх. С другой стороны, понимание кинетики протекания процесса синтеза важно для подбора оптимальных технологических параметров, которые позволят получать кремний с максимальным выходом при минимальных ресурсозатратах.

В настоящей работе проведено термодинамическое моделирование процессов в системе Al-AlF₃-SiO₂ с помощью программы HSC Chemistry 9.3.0, имеющей наиболее полную базу современных термодинамических взаимосогласованных данных. Предложен механизм протекания процесса образования кремния, состоящий из 4 стадий:

Кроме этого необходимо учитывать изменение солевой смеси после прохождения высокотемпературной обменной реакции (1), которая приводит к образованию фторида алюминия и фторида магния.



где $M(R)$ – лигатура, которая должна быть получена, X – фтор или хлор, R – металл-восстановитель: алюминий, магний.

Итоговая смесь солей так же должна отвечать приведенным выше требованиям.

Было выполнено термодинамическое моделирование системы, включающее расчет всех равновесных параметров, термодинамических свойств, химического и фазового состава компонентов при помощи комплекса «Астра-4» [2]. Расчеты показали, что полнота прохождения реакции (1) возрастает с увеличением концентрации фторид-ионов и ростом температуры. По предварительным оценкам температура процесса должна составлять более 800 0С. Верхний предел ее увеличения ограничен ростом упругости пара солевых и металлических компонентов смеси.

Сформулированные условия могут быть реализованы с использованием в качестве компонентов электролита-растворителя NaCl, KCl, NaF.

Был выполнен анализ и систематизация имеющихся в справочной литературе сведений о плавкости солевых композиций, включающих указанные компоненты и фториды РЗМ или магния. Приведенные данные ограничены двухкомпонентными и тройными взаимными системами, включающими хлориды натрия или калия с фторидом магния или фторидами некоторых РЗМ [3-5].

Сведения о плавкости смесей в более сложных системах отсутствуют. В связи с этим обстоятельством, были выполнены исследования плавкости солевых смесей, выбранных для проведения процесса.

1. Иванов В.А., Крылосов А.В. и др., Известия высших учебных заведений. Цветная металлургия, 2, 54 (2005)
2. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К. и др., Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. М.: Металлургия, 1994. - 352 с.
3. Ковалев Ф.В., Иоффе В.М., Капцев В.Е., Журнал неорганической химии. 9, 1684 (1964).
4. Кувакин М.А. Журнал неорганической химии. 16, 3290 (1971).
5. Кувакин М. А., Новикова З.М. Журнал неорганической химии. 18, 1356 (1973).

ВЫБОР СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОБМЕННЫХ РЕАКЦИЙ

Крылосов А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента Б.Н. Ельцина
E-mail: avkrylosov@urfu.ru

THE CHOICE OF ELECTROLYTE COMPOSITION FOR HIGH- TEMPERATURE EXCHANGE REACTIONS

Krylosov A.V.¹

¹) Ural Federal University

The selection of saline electrolyte has been carried out for high-temperature exchange reactions. Conclusions about affecting factors for conducting exchange reactions are made.

В ранее проведенных исследованиях [1] был предложен способ получения сплавов «Al-РЗМ» и «Mg-РЗМ» методом высокотемпературных обменных реакций. Предложенный метод реализуется с помощью солевого флюса, который содержит соль РЗМ, предохраняет получаемый сплав от воздействия окружающей среды, способствует более полному объединению получаемого сплава в слиток и иные технологические признаки.

В качестве соли, содержащей РЗМ, использовали смесь фторидов РЗМ или их индивидуальные фториды (YF_3 , LaF_3 , CeF_3 , PrF_3 , NdF_3 , SmF_3 , GdF_3 , DyF_3), а в качестве солевого флюса смесь на основе хлоридов натрия и калия, а также фторида натрия.

Исходная солевая смесь, пригодная для реализации металлотермического способа получения магниевого сплава с использованием фторидов РЗМ, должна отвечать ряду требований:

- иметь широкую температурную область гомогенности, в которой достигается полная растворимость фторидов РЗМ;
- состоять из недорогих, по возможности, негигроскопичных и доступных солей-компонентов;
- допускать возможность вариации мольно-долевого соотношения ионов РЗМ и фтора, влияющего на сдвиг равновесия обменной реакции восстановления фторидов РЗМ магнием;
- давать возможность изменением состава изменять соотношение плотностей сплава и солевого электролита;
- иметь в рабочем диапазоне температур невысокую упругость пара над расплавом;
- обеспечивать максимально полное объединение сплава в единый слиток.

моль/л сульфата меди(II) и 0.001–0.005 моль/л сульфата железа(II). По результатам исследований установлено, что значительное влияние на скорость окислительной деструкции анионита и катионита оказывает температура процесса. При этом увеличение концентрации каталитической добавки при определенной температуре не приводит к существенному ускорению процесса окисления смолы.

На рисунке 1 приведены сравнительные кривые скорости разложения 50 % массы катионита и анионита пероксидом водорода от температуры процесса с добавлением CuSO_4 и FeSO_4 . Следует отметить, что при окислении катионита с добавлением 0.005 моль/л CuSO_4 (1) скорость деструкции составляет 0.5 мг/мл·мин при 353 К, тогда как введение всего 0.004 моль/л FeSO_4 (3) при 348 К повышает ее в 12 раз. В процессе разложения анионита пероксидом водорода в присутствии 0.005 моль/л CuSO_4 (2) скорость окисления возрастает и составляет 4.2 мг/мл·мин при 348 К, в то время как при добавлении FeSO_4 растворяется меньше половины анионита.

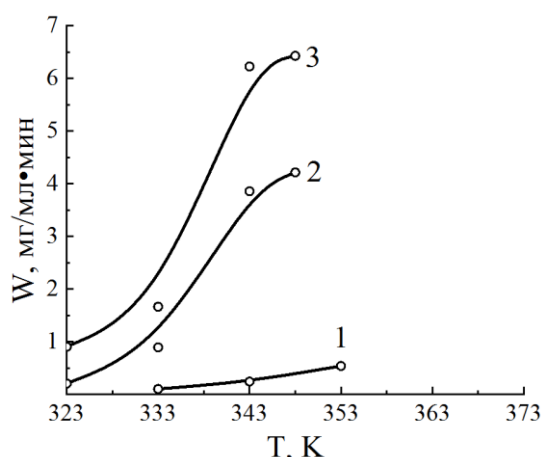


Рис. 1. Изменение скорости разложения 50 % массы катионита КУ-2×8 пероксидом водорода от температуры процесса в присутствии 0.005 ммоль/л CuSO_4 (1), 0.004 моль/л FeSO_4 (3) и анионита АВ-17×8 с добавлением 0.005 моль/л CuSO_4 (2)

Рассчитанные значения энергии активации реакции окислительной деструкции катионита пероксидом водорода с добавлением CuSO_4 составляют 89.7–115.2 кДж/моль, при введении FeSO_4 энергия активации снижается до 40.9–67.1 кДж/моль. Вычисленные значения энергии активации реакции окисления анионита с добавлением CuSO_4 находятся в диапазоне 115.7–124.3 кДж/моль. Таким образом, для окисления анионита перспективно использовать в качестве катализатора сульфат меди(II), а для разложения катионита – сульфата железа(II).

1. М.И. Смольников, В.Ф. Марков, Л.Н. Маскаева, А.Е. Бобылев и О.А. Мокроусова, Бутлер. сообщения. Т. 49, № 3, 119–134 (2017).
2. J. Wang, Z. Wan., Prog. Nucl. Energy. V. 78, 47–55 (2015).
3. A. Babuponnusami, K. Muthukumar, J. Environ. Chem. Eng. V. 2, 557–572 (2014).

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ИОНООБМЕННЫХ СМОЛ ВОДНЫМ РАСТВОРОМ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА

Козлова М.М.¹, Марков В.Ф.^{1, 2}, Маскаева Л.Н.^{1, 2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России, г.
Екатеринбург, Россия
E-mail: marina.kozlova2014@mail.ru

OXIDATIVE DESTRUCTION OF ION EXCHANGE RESINS BY AQUEOUS SOLUTION OF HYDROGEN PEROXIDE

Kozlova M.M.¹, Markov V.F.^{1, 2}, Maskaeva L.N.^{1, 2}

¹⁾ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural State Fire Service Institute of Emergency Ministry of Russia, Yekaterinburg, Russia

Comprehensive kinetic studies of the oxidation of an anion-exchange resin AV-17×8 and cation-exchange resin KU-2×8 with hydrogen peroxide have been carried out. The effect of temperature, concentration of hydrogen peroxide and catalyst on the process is estimated.

На атомных электростанциях ежегодно накапливаются значительные объемы отработанных ионообменных смол, которые представляют собой малоактивные гетерогенные отходы. Отработанные ионообменные смолы утилизируют с использованием таких традиционных технологий, как иммобилизация, пиролиз, сверхкритическое водное окисление. Однако перечисленные технологии являются дорогостоящими, характеризуются образованием взрывоопасных продуктов и трудоемкими технологическими операциями. Необходимо предложить экономичную и безопасную технологию для утилизации отработанных ионообменных смол атомных электростанций [1, 2].

Окислительная деструкция с использованием процесса Фентона может быть перспективной технологией переработки ионообменных смол. Процесс Фентона заключается в окислении органических соединений водным раствором пероксида водорода. В качестве каталитической добавки чаще всего используют соли двухвалентных переходных металлов – железа(II), меди(II) [3].

В настоящей работе проведены кинетические исследования окислительной деструкции широко применяемых на отечественных АЭС анионита АВ-17×8 и катионита КУ-2×8 с использованием процесса Фентона.

Каталитическое окисление анионита проводили 20 % пероксидом водорода с добавлением 0.001–0.005 моль/л сульфата меди(II) и сульфата железа(II) в температурном диапазоне 323–348 К. Окислительное разложение катионита 20 % пероксидом водорода осуществляли при 323–353 К в присутствии 0.001–0.009

По результатам рентгеновской дифракции структура просушенных осадков GdTbx идентифицирована, как слоистый $\text{Gd}_2(\text{OH})_5\text{NO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$. При увеличении pH упорядоченность частиц снижается вплоть до образования практически полностью рентгеноаморфных осадков при pH 9,5. Околосферичные агломераты частиц, достигая размеров ~ 40 мкм и правильной сферической формы при pH 8,0, с увеличением pH уменьшаются в диаметре и теряют форму так, что при pH 9,5 образуются частицы осколочной формы с широким распределением размеров.

Гидротермальная обработка привела к образованию гибридных слоистых структур для всех образцов GdTbx, о чём свидетельствуют рентгенограммы для GdTbxTA. Однако во всех GdTbxTA обнаружено присутствие примесной фазы, идентифицированной как $\text{Gd}(\text{OH})_3$. При этом увеличение значения pH синтеза GdTbx приводит к росту доли слоистых гибридов по отношению к гидроксиду.

Слоистые порошки GdTbx способны конвертировать УФ-излучение диапазона 250-315 нм в видимый свет с максимумом фотолюминесценции в области 540 нм. Внедрение TA^{2+} в слоистую структуру приводит к многократному усилению излучения орган-неорганического продукта. Найдено, что оптические свойства GdTbxTA зависят от pH синтеза слоистого прекурсора. Аморфные образцы, полученные при высоких pH и склонные к образованию более упорядоченных гибридов, обладают превосходными фотолюминесцентными свойствами.

1. Liang J., Ma R., Sasaki T., Photofunctional Layered Materials, Cham: Springer, 242 (2015).
2. Liu L., Yu M., Zhang J., Wang B., Liu W., Tang Y., J. Mater. Chem. C, 3, 2326-2333 (2015).
3. Kim H., Lee B.I., Byeon S.H., Chem. Commun., 51, 725-728 (2015).
4. Xiang Y., Yu X.-F., He D.-F., Sun Z., Cao Z., Wang Q.-Q., Adv. Funct. Mater., 21, 4388-4396 (2011).
5. Wang X., Chen W., Song Y.-F., Eur. J. Inorg. Chem., 2014, 2779-2786 (2014).

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА СЛОИСТЫХ ГИДРОКСИДОВ ГАДОЛИНИЯ-ТЕРБИЯ НА СВОЙСТВА ПОРОШКОВ ГИБРИДНЫХ ЛЮМИНОФОРОВ

Косых А.С.¹, Алёшин Д.К.¹, Гордеев Е.В.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: evanescence665@yandex.ru

THE EFFECT OF SYNTHESIS CONDITIONS OF LAYERED GADOLINIUM-TERBIUM HYDROXIDES ON THE PROPERTIES OF HYBRID PHOSPHOR POWDERS

Kosykh A.S.¹, Aleshin D.K.¹, Gordeev E.V.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this work, hybrid phosphors powders based on layered Gd-Tb nitrate hydroxide, synthesized by controlled double-jet precipitation, as a result of intercalation of terephthalate ions, were obtained. The influence of the pH value of the synthesis on the properties of hybrid phosphor was studied.

В последнее время получил развитие новый класс анионообменных слоистых материалов - слоистых гидроксидов редкоземельных элементов (СГ РЗЭ) [1]. Их отличительными особенностями являются композиционная вариативность с сохранением слоистости наряду с исключительными свойствами РЗЭ. Такие характеристики позволяют использовать эти соединения и их производные для получения различных функциональных материалов [2-5]. В частности, введение в структуру СГ РЗЭ органических сенсibilизаторов люминесценции позволяет получать перспективные гибридные люминофоры [2]. В данной работе исследовано влияние значения pH синтеза слоистых гидроксидов Gd-Tb на свойства порошков гибридных люминофоров с использованием терефталат-иона (TA^{2+}) в качестве сенсibilизатора.

Синтез включал последовательные стадии получения слоистого прекурсора и интеркаляции TA^{2+} . На первой стадии было синтезировано соединение $(\text{Gd}_{0,99}\text{Tb}_{0,01})_2(\text{OH})_5\text{NO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ методом контролируемого двухструйного осаждения при различных значениях pH с последующими фильтрацией, промывкой и сушкой при 50 °С. Значение pH поддерживалось на уровне 7,0; 8,0; 9,0 и 9,5 (далее GdTbx , где $x = 7, 8, 9$ и 9,5, соответственно). На второй стадии была проведена интеркаляция слоистых осадков TA^{2+} при 90 °С 12 ч с получением гибридного соединения (GdTbxTA) с фильтрацией, промывкой и сушкой при 200 °С. Структура и оптические свойства продуктов исследованы при помощи методов лазерной и рентгеновской дифракции, оптической микроскопии и люминесцентной спектроскопии, соответственно.

и эффективность экстракции пальмового масла исследовали методом гравитационного отстаивания при температуре 80-85°C. Измерение потерь масла в сточных водах проводили после центрифугирования проб при центробежном ускорении 1890g (выдержка 90 сек). Потери масла определяли гравиметрическим методом - экстракция гексаном.

При проведении тестов в лабораторных условиях наблюдали (рисунок 1): увеличение скорости экстракции масла на 14%, увеличение экстракции масла на 33% и снижение содержание масла в сточных водах на 46% (с 1,3 до 0,7%). В промышленных условиях введение BMG снизило потери масла в сточных водах на 34% (с 0,84 до 0,62%). Оценка эффективности и скорости экстракции масла при гравитационном отстаивании была затруднена рядом технологических параметров: разная производительность фабрики по количеству обработанных пальмовых фруктов, ненормируемый рабочий день, отсутствие измерительного оборудования.

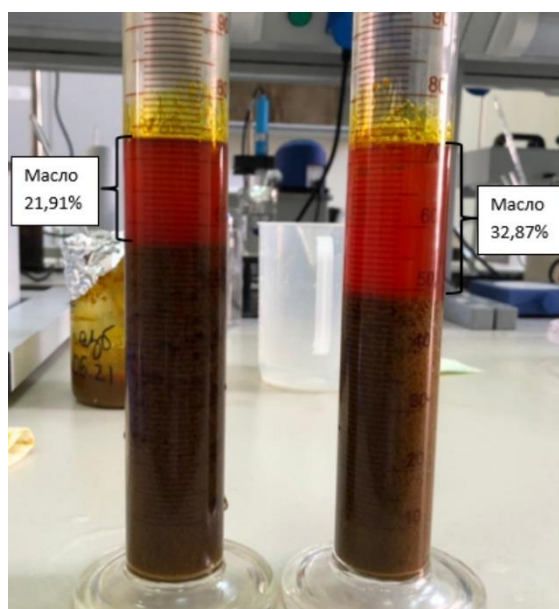


Рис. 1. Пальмовое масло на поверхности проб после гравитационного отстаивания: слева - образец без добавления BMG, справа – образец с добавлением BMG

Биомикрогели® в промышленных условиях снизили содержание масла в сточных водах на 34%, что является близким к лабораторным данным (46%). Результаты подтверждают перспективность применения BMG в производстве пальмовых масел.

1. Ho C.C., Tan Y.K., Wang C.W. 1984. Agric. Wastes 11 6171.
2. Elagyn A.A., Mironov M.A. 2019. Rus. Patent № 201891270.

ПРИМЕНЕНИЕ БИОМИКРОГЕЛЕЙ® ДЛЯ ЭКСТРАКЦИИ ПАЛЬМОВОГО МАСЛА

Косенкова А.Р.¹, Куимов В.М.¹

¹⁾ ООО «НПО БиоМикроГели», Россия, Свердловская область,
г. Екатеринбург, ул. Конструкторов, д. 5, оф. 431.
E-mail: ari-na97@mail.ru

USING OF BIOMICROGELS® FOR PALM OIL EXTRACTION

Kosenkova A.R.¹, Kuimov V.M.¹

¹⁾ «SPC BioMicroGel» Limited Liability Company, Russia, Sverdlovsk region,
Yekaterinburg, Konstruktorov str., 5, office 431.

Polysaccharides microgels (Biomicrogels®) can be used as a reagent for palm oil extraction. The paper presents the results of laboratory and industrial test. Biomicrogels® increase the palm oil extraction which leads to reduction of oil losses in wastewater.

Ежегодно заводы по производству пальмового масла создают большое количество жидких и твердых отходов. На каждую тонну произведенного масла в среднем образуется 2,5 тонны сточных вод, содержащих от 0,7 до 1,5% пальмового масла [1]. Сточные воды собираются в больших уличных бассейнах-отстойниках, что приводит к загрязнению почв и грунтовых вод маслом, а также к эмиссии парниковых газов.

Большое внимание ученых направлено на разработки новых устойчивых технологий по оптимизации производства пальмового масла. Одной из таких является применение биополимеров, повышающих экстракцию масла. Биомикрогели® (далее BMG) это модифицированные биополимеры на основе полисахаридов, модификация которых разработана в компании НПО БиоМикроГели. BMG обладают способностью к концентрации на границе раздела фаз. При ведении в водно-масляные суспензии BMG способны располагаться между каплями пальмового масла и твердыми органическими частицами. В процессах гравитационного отстаивания и центрифугирования BMG повышают коалесценцию капель масла, что приводит к повышению скорости экстракции масла.

Для успешного внедрения технологии БМГ [2] в производство пальмового масла необходимо перенести результаты лабораторных испытаний на промышленный масштаб.

Цель данной работы: сравнить эффективность BMG в лабораторных и промышленных условиях.

Были проведены лабораторные и промышленные эксперименты, с дозировкой BMG, равной 1 г/л, и концентрацией рабочего раствора BMG - 3%. В лабораторных условиях BMG вводили в образцы водно-масляной суспензии с помощью шприца, в промышленных условиях – с помощью дозирующего насоса. Скорость

и 80 мг $\text{FeCl}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, а также 2,3 г NaOH. Систему выдерживали в течение 3 мин и оставляли остывать до комнатной температуры. Полученные гетерогенные частицы промывали в дистиллированной воде на центрифуге.

Согласно результатам рентгенофазового анализа, частицы FePt представлены, в основном, A1-фазой с ОЦК решеткой. Результаты ЭДС показали, что соотношение Fe и Pt составляет примерно 1:1. Результаты ПЭМ, а также СЭМ позволили установить, что наночастицы FePt распределены по поверхности h-BN равномерно, находятся в не агломерированном состоянии, а их средний размер не превышает 3 нм.

С целью изучения адсорбционных свойств полученных материалов использовали растворы катионного органического красителя – метиленового синего. Образец диспергировали в растворе и отбирали пробу через каждые 10 мин. Анализ проб проводили на оптическом спектрометре. По изменению интенсивности пика поглощения судили о падении концентрации красителя в растворе и соответственно об эффективности адсорбента. Согласно полученным результатам снижение концентрации МС в растворе в течение первых 60 мин испытаний составило около 70%, и достигло 100% спустя 24 ч испытаний. Результаты испытаний полученных материалов на вибромагнитометре позволили установить, что величина коэрцитивной силы составила около 480 Ое. Таким образом полученные материалы проявляют выраженные магнитные свойства и являются перспективными применительно к задачам по очистке воды.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 20-79-10286).

1. Shtansky, D., Firestein, K., & GOLBERG, D. (2018). Fabrication and application of BN nanoparticles, nanosheets and their nanohybrids. Nanoscale. doi:10.1039/c8nr05027a.

РАЗРАБОТКА ГЕТЕРОГЕННЫХ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ И ДВУМЕРНОГО НИТРИДА БОРА

Конопацкий А.С.¹, Калинина В.В.¹, Барилюк Д.В.¹, Штанский Д.В.¹

¹) Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»,
Москва, Ленинский пр-кт, д.4, 119049, Россия
E-mail: konopatskiy@isis.ru

DEVELOPMENT OF HETEROGENEOUS NANOSTRUCTURES BASED ON BIMETALLIC NANOPARTICLES AND TWO-DIMENSIONAL BORON NITRIDE

Konopatsky A.S.¹, Kalinina V.V.¹, Bariluyk D.V.¹, Shtansky D.V.¹

¹) National University of Science and Technology (MISiS), Moscow, Leninsky Prospekt,
4, 119049, Russia

The development of industry leads to the emergence of new, important environmental problems. This makes it necessary to develop new types of adsorbents. Important properties of such materials are their inertia, as well as the possibility of its removal from the water for further processing.

Развитие промышленности ведет к возникновению новых, важных экологических проблем. Это обуславливает необходимость в разработке новых типов адсорбентов, способных эффективно удалять примеси органических красителей из воды. Важными свойствами таких материалов являются их инертность, т.е. сам материал не должен наносить вред окружающей среде, а также возможность его удаления из воды с целью дальнейшей переработки. Одним из наиболее эффективных и экономически выгодных способов удаления адсорбента является магнитная обработка воды после очистки. Вместе с тем многие перспективные материалы с высокой удельной поверхностью и высокой адсорбционной емкостью не обладают выраженными магнитными свойствами. Однако такие материалы могут выступать в качестве основы для гетерогенных структур, где в качестве второго компонента используются частицы с контролируемыми магнитными свойствами.

В качестве носителей были использованы наночастицы гексагонального нитрида бора (h-BN), являющегося хорошим адсорбентом катионных красителей. [1] На поверхности h-BN были синтезированы биметаллические наночастицы FePt. В зависимости от температуры и своего фазового состава наночастицы FePt могут проявлять суперпарамагнитные и ферромагнитные свойства. Навеску порошка h-BN диспергировали в 100 мл среды синтеза, путем ультразвуковой (УЗ) обработки. Производили нагрев полученной суспензии до температуры 170 °С. Среду синтеза при этом продували аргоном. По достижении рабочей температуры в среду синтеза добавляли 1 мл раствора H_2PtCl_6 с заданной концентрацией

Значение полной динамической обменной емкости (ПДОЕ) для VPA-G1 и VPA-2 составило 26,1 кг/м³ и 23,9 кг/м³, соответственно. При этом полное насыщение достигнуто при пропускании 1832 колоночных объемов раствора через слой ионита VPA-G1 и 2119 колоночных объемов - для VPA-2.

Полученные значения ПДОЕ обоих анионитов достаточно высоки и указывают на то, что данные иониты возможно применять для эффективной переработки сернокислых ПР СПВ урана с повышенным (до 0,25 М) содержанием хлорид-ионов.

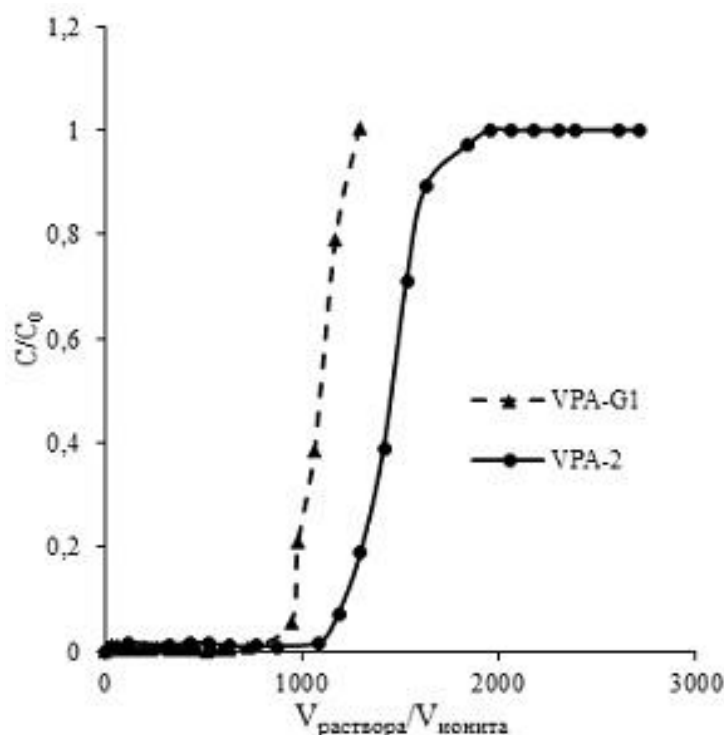


Рис. 1. Выходные кривые сорбции урана анионитами из продуктивных сернокислых растворов с повышенным содержанием хлорид-иона (0,25 М)

1. Тураев Н.С., Жерин И.И. Химия и технология урана. Учебное пособие. – Москва: ЦНИИАТОМИНФОРМ, 2005 – 409 с.

СОРБЦИЯ УРАНА ВИНИЛПИРИДИНОВЫМИ АНИОНИТАМИ ИЗ СМЕШАННЫХ СУЛЬФАТНО-ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ

Конькова А.В.¹, Новиков И.В.¹, Титова С.М.¹, Рычков В.Н.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ana_sia05@mail.ru

URANIUM SORPTION BY ANION-EXCHANGERS FROM SULFATE-CHLORIDE SOLUTIONS

Konkova A.V.¹, Novikov I.V.¹, Titova S.M.¹, Rychkov V.N.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Sorption characteristics of vinylpyridine resins VPA-G1 and VPA-2 during U recovery from sulfuric acid solutions with high content of Cl⁻ ions were determined. The value of dynamic exchange capacity at full resin saturation for VPA-G1 and VPA-2 was 26.1 kgU/m³ and 23.9 kgU/m³, respectively.

В современной промышленности в силу отсутствия богатых урановых руд для добычи урана широкое применение получил метод скважинного подземного выщелачивания (СПВ). В зависимости от геологии месторождений и условий их залегания для извлечения урана из рудоносного пласта используется метод кислотного или карбонатного выщелачивания [1].

В настоящее время ведутся работы по освоению нового уранового месторождения, которое характеризуется повышенной минерализацией, по результатам данных геологоразведки. Продуктивные растворы (ПР) СПВ, нарабатываемые с такого месторождения, будут характеризоваться высоким содержанием хлорид-ионов (до 0,25 М). Традиционно для выделения урана из ПР, полученных в ходе сернокислотного выщелачивания, используют метод анионного обмена. Однако, применение действующих на предприятии анионитов для переработки таких ПР невозможно в связи с конкурентной сорбцией хлорид-ионов и, как следствие, снижения емкости по урану.

Целью данной работы являлось определение емкостных характеристик винилпиридиновых анионитов VPA-2 с макропористой структурой и VPA-G1 с гелевой структурой по отношению к урану при сорбции из сернокислых ПР СПВ с повышенным содержанием хлорид-ионов.

Эксперимент вели в динамическом режиме. В лабораторную вертикально установленную колонку загружали 90 см³ набухшего ионита, фильтрацию ПР через слой ионита вели при фазовом соотношении Т:Ж=1:5. Продуктивные растворы содержали 25,23 мг/дм³ U, 5 г/дм³ H₂SO₄ и 0,25 М хлорид-ионов. Процесс вели до уравнивания концентраций урана на входе и выходе из колонки. На рисунке 1 изображены выходные кривые сорбции урана.

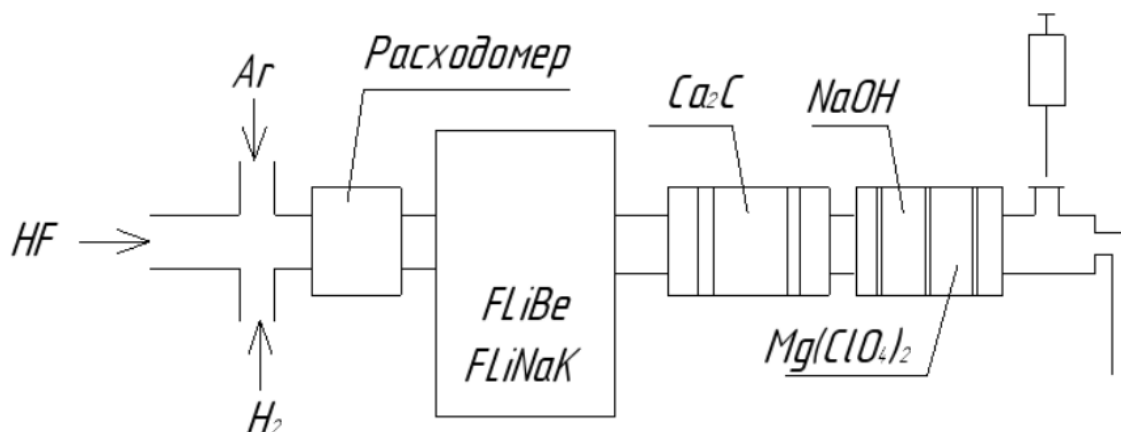


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для определения влажности газообразных систем

Газовая смесь поступала в систему с установленной скоростью. Проходя через измельченный карбид кальция, закрепленный синтетической ватой, вода преобразуется в ацетилен. Так как хроматографические колонки изготовлены из кварца необходимо отчищать газовую смесь от фтороводорода. Для этого в систему помещали аскарит. Далее газовый поток дополнительно осушали с применением перхлората магния.

Для проведения анализа использовали газовый хроматограф с масс-спектрометром Perkin Elmer Clarus 600, капиллярную колонку Restek Rt-Q-BOND с неподвижной фазой – дивинилбензол (L:30; ID:10; DF:0,32). Скорость потока гелия – 1 мл/мин. Ионизация осуществлялась электронным ударом. Анализ проводили в изотерме, температура термостата составила 35 °C. Ввод пробы в газовый хроматограф осуществлялся с применением шприца для газообразных проб, объем вводимой пробы - 50 мкл.

1. Guoqiang Zong, Zhi-Bing Zhang, Jia-Hong Sun, Ji-Chang Xiao. Preparation of high-purity molten FLiNaK salt by the hydrofluorination process // Journal of Fluorine Chemistry 197, 134-141 (2017).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОДЫ В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ГАЗАХ

Хорькова А.Н.¹, Данилов Д.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: arina.khorkova@gmail.com

DETERMINATION OF WATER IN TECHNOLOGICAL GASES

Khorkova A.N.¹, Danilov D.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Method determination water in aggressive gaseous media as mixture of hydrogen fluoride and hydrogen was applied. The analysis was carried out by reaction gas chromatography with mass spectrometry. The technique is also applicable for determining the oxygen in salts.

В качестве теплоносителя для жидкосолевых реакторов в атомной энергетике используются расплавы фтористых солей легких металлов (лития, натрия и калия или лития и бериллия). Наличие примесных компонентов в используемых расплавах влияют на температуру плавления топливной соли и растворимость фторидов в расплаве, а также они могут служить нейтронными поглотителями. Кислород в этих системах влияет на коррозионную стойкость солевой системы, изменяет ионный состав растворенных делящихся материалов, поэтому его содержание необходимо снижать и контролировать.

В работе [1] описано использование смеси фтористого водорода с водородом для отчистки солевых расплавов от примесных компонентов, где для фторирования использовали герметичный сосуд из промышленно чистого никеля. При отгонке образовавшихся газов примесный кислород удалялся в виде воды.

Для контроля протекания такого рода процессов необходимо измерять содержание влаги как в исходных газах, так и в отходящих. Известные методики по определению воды в газах не пригодны для агрессивных сред, а методики созданные для фтороводорода трудоемки в исполнении. Данный подход позволяет так же определять содержание кислорода в расплаве соли, что является более чувствительным и независимым методом контроля.

Целью данной работы является определение влажности газов методом реакционной газовой хроматографии с масс-спектрометрией.

Контроль влажности возможен с применением реакционно-газохроматографического определения с использованием карбида кальция, который при взаимодействии с водой образует ацетилен. Для осуществления определения была собрана установка, рис 1.

фазу Fe_3O_4 с использованием раствора гидроксида натрия. Для синтеза композита ММ:ПАВ использовали 50% водный раствор катионного ПАВ - хлорида додецилдиметилбензиламмония. Для синтеза композита ММ: Fe_3O_4 :ПАВ к 100 мл раствора золя композита ММ: Fe_3O_4 добавляли 50% раствор ПАВ в соотношении 10:1 [2].

ММ: Fe_3O_4 :ПАВ показал лучшую степень сорбции мышьяка(III) по сравнению с другими вариантами сорбента.

Определены оптимальные условия сорбции: $\text{pH}=4$, масса сорбента - 0,25 г на 25 мл раствора, время сорбции 30 мин. При оптимальных условиях степень сорбции мышьяка(III) из раствора концентрацией 1 мг/л достигает более 95%. Были построены изотермы сорбции, которые были обработаны с использованием моделей Фрейндлиха и Ленгмюра. Установлено, что для описания процесса сорбции мышьяка(III) на сорбенте ММ:ПАВ: Fe_3O_4 лучше подходит модель Ленгмюра.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий.

1. Liu B., Kim Ki-H., Kumar V., Kim S. A review of functional sorbents for adsorptive removal of arsenic ions in aqueous systems // Journal of Hazardous Materials. - 2020. - V. 388. - P. 121815.
2. Ordinartsev, D. P., Pechishcheva, N. V., Estemirova, S. K., Kim, A. V., Shunyaev, K. Y. Removal of Cr (VI) from wastewater by modified montmorillonite in combination with zero-valent iron // Hydrometallurgy. - 2022. - V. 208. – P. 105813.

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИИ МЫШЬЯКА(III) НА МОНТМОРИЛЛОНИТЕ

Холманских И. А.^{1,2}, Белозерова А.А.¹, Ординарцев Д.П.¹, Печищева Н.В.¹,
Шуняев К.Ю.¹

¹⁾ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Института металлургии Уральского отделения РАН

²⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина

E-mail: i.a.kholmanskikh@mail.ru

STUDY OF THE SORPTION OF ARSENIC(III) BY MONTMORILLONITE

Kholmanskikh I. A.^{1,2}, Belozerova A.A.¹, Ordinartsev D.P.¹, Pechishcheva N.V.¹,
Shunyaev K. Yu¹

¹⁾ Institute of Metallurgy Ural branch of the Russian Academy of Sciences

²⁾ Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin

The possibility of arsenic(III) sorption on composite sorbents created by modification of montmorillonite was studied. Montmorillonite modified with Fe₃O₄ nanoparticles and cationic surfactant showed a better degree of arsenic sorption compared to other modifications.

В современном мире одна из актуальных проблем - это загрязнение водных сред органическими и неорганическими веществами. Одним из наиболее опасных загрязнителей является мышьяк, который может попадать в грунтовые и сточные воды в результате деятельности горно-обогатительных и предприятий цветной металлургии, а также естественным путем из горных пород и минералов.

Сорбционные методы является одним из наиболее часто используемых методов очистки воды от мышьяка по причине их экономической эффективности, простоты конструкции и простоты эксплуатации [1].

Целью данной работы было изучить возможность сорбции мышьяка(III) на композитных сорбентах, созданных модификацией монтмориллонита. Монтмориллонит (ММ) - это высокодисперсный слоистый алюмосиликат, представляющий собой трёхслойный пакет (2:1): два слоя кремнекислородных тетраэдров, обращённые вершинами друг к другу, с двух сторон покрывают слой алюмогидроксильных октаэдров [2].

Для исследования использовали а) немодифицированный ММ, б) ММ, модифицированный катионным ПАВ, в) ММ, модифицированный наночастицами Fe₃O₄, г) ММ, модифицированный и катионным ПАВ, и наночастицами Fe₃O₄.

Для приготовления золя сорбента использовали монтмориллонит марки ВР-183-FJ в.ч. Основой синтеза сорбента ММ:Fe₃O₄ заключался во внедрении частиц железа в межслоевое пространство адсорбента. Для этого к золю ММ добавляли стехиометрическое количество хлоридов железа(II) и железа(III) и после тщательного перемешивания формировали в межслоевом пространстве сорбента

Обычно боратные системы рассматриваются как π -электронные системы [2]. Самая высокая занятая молекулярная орбиталь является несвязывающим уровнем π -типа симметрии. Эта орбиталь относится к кислороду, поэтому наблюдаемые спектры можно отнести к переносу заряда с мостикового кислорода на атомную орбиталь ионов лития $O_m \sigma \rightarrow Li\ 2p$ в надструктурных единицах расплава $Li_2O-B_2O_3$. Здесь O_m это мостиковый кислород в связи $B^{III}-O-B^{IV}$ и $B^{IV}-O-B^{IV}$.

Необходимо отметить, что в боратном расплаве, содержащем $x = 35$ мол. % Li_2O основные структурные единицы – это тетраборатные и диборатные группы, включая группы с немостиковыми связями, т.е. BO_2^- . Спектр переноса заряда в кольцевых группировках реализуется с тех же мостиковых кислородов, что и в предыдущем случае.

В кольцах с немостиковыми связями из-за локализации электрона энергия молекулярной несвязанной орбитали повышается. Это приводит к появлению дополнительной полосы на 35110 см^{-1} .

Стоит отметить, что полоса переноса заряда с немостикового кислорода на p орбиталь иона Li близка к соответствующей полосе переноса заряда с мостикового кислорода диборатной группы. Ниже 26000 см^{-1} выделяется полоса, положение которой слабо зависит от температуры и состава расплава. Это полоса относится к дефектам сетки расплава, которые представляют собой разрушенные связи $B-O$ четырех координированных группировок бора. Эти связи обычно трактуют как элементарное возбуждение (конфигуроны), которые формируют в расплавах перколяционный кластер. Незначительные изменения интенсивности поглощения квазичастиц вызваны двумя противоположными процессами: увеличением их концентрации с температурой и снижением их из-за температурной конверсии группировок BO^{IV} на $B\emptyset_2O^-$.

1. А. А. Осипов, Л. М. Осипова В. Н. Быков Спектроскопия и структура щелочноборатных стекл, Миасс: УрО РАН (2009)
2. H. KAWAZOE, H. HOSONO, T. KANAZAWA J. Non-Crystalline Solids 29, 159-171(1978).

ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ЛИТИЕВОБОРАТНЫХ РАСПЛАВОВ

Хохряков А.А.¹, Арсланов К.П.¹¹) Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: arslanov.kirill@mail.ru

OPTICAL SPECTRA OF LITHIUM BORATE MELTS

Khokhryakov A.A.¹, Arslanov K.P.¹¹) Institute of metallurgy Ural branch of RAS, Yekaterinburg, Russia

Borate melts $x\text{Li}_2\text{O}-(100-x)\text{B}_2\text{O}_3$, where $0 < x < 35$ mole % of Li_2O , were studied by the method of reflection-absorption spectroscopy. We have established a relationship between charge transfer spectra and polyborate groups in the melt and suggested the formation of quasiparticles (configurons).

В литиевоборатных расплавах при $x = 1$ мол. % Li_2O (см. рисунок) широкая полоса в области $27000-43000\text{ см}^{-1}$ распадается на две гауссовские компоненты с максимумами при 31370 и 38090 см^{-1} и на три при $x = 35$ мол. % с максимумами при 31300 , 35110 и 38200 см^{-1} . Из данных по колебательной спектроскопии [1] известно, что борокислородная сетка ($x = 1$ мол. %) состоит из кольцевых триборатных групп и не кольцевых группировок (цепочечного типа). Это позволяет связать наблюдаемую полосу поглощения с суперпозицией полос надструктурных единиц расплава.

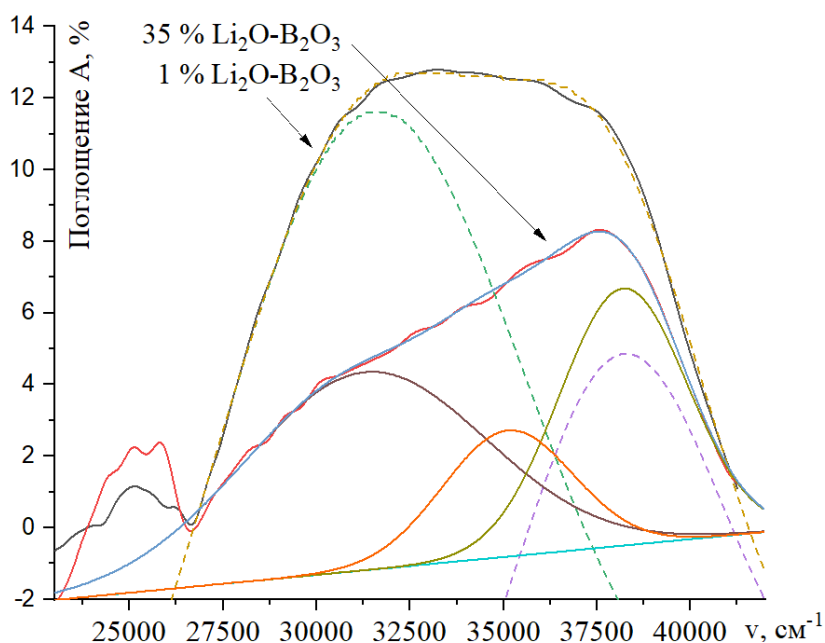


Рис. 1. Оптические спектры поглощения расплавов $x\text{Li}_2\text{O}-(100-x)\text{B}_2\text{O}_3$ с концентрацией $x = 1$ мол. % и 35 мол. % при температуре 1228 К .

Исследование влияния технологических параметров для аналитического контроля кислорода во FLiNaK осуществляли на газоанализаторе Horiba EMGA 620W. Навески эвтектической смеси фторидов отбирались, помещались в оловянные капсулы и запечатывались. Все работы проводили в боксе с инертной атмосферой. Измерения осуществлялись в графитовом тигле, который дважды дегазировался при 3000°C (35 секунд) и 2500°C (20 секунд). В режиме автоматической загрузки проба сбрасывалась в предварительно разогретый до 2800°C тигель и анализировалась. В режиме ручной загрузки проба помещалась в графитовый тигель, оснащенный крышкой.

В работе было проведено исследование влияния температуры, массы навески и применения графитовой крышки на точность определения содержания кислорода во FLiNaK.

1. Molten Salt Reactors // World Nuclear Association URL: <https://world-nuclear.org/information-library/current-and-future-generation/molten-salt-reactors.aspx>
2. Ignatiev V., Feynberg O., Transactions of ANS, v. 104, p. 722-723 (2011)
3. Блинкин В. Л., Новиков В. М., Жидкосольевые ядерные реакторы, Атомиздат (1978) - 112 с.
4. Jan Uhliř, Journal of Nuclear Materials, v. 360, p. 6-11 (2007)
5. Вассерман А.М., Кунин Л. Л., Суровой Ю. Н. Определение газов в металлах, Наука (1976).

КОНТРОЛЬ СОДЕРЖАНИЯ КИСЛОРОДА ВО ФТОРИДАХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Карташова Е.С.¹, Данилов Д.А.¹, Ившина А. А.¹, Половов И. Б.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина
E-mail: k543lena5@yandex.ru

MONITORING THE OXYGEN OF ALKALI METAL FLUORIDES BY THE CARRIER GAS HOT EXTRACTION

Kartashova E.S.¹, Danilov D.A.¹, Ivshina A. A.¹, Polovov I. B.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin

The influence of technological parameters on the results of determination of low oxygen contents in the eutectic mixture LiF - NaF - KF (FLiNaK) by carrier gas hot extraction was investigated.

Введение в эксплуатацию жидко-солевых реакторов (ЖСР) является одной из основных задач в атомной энергетике в мире на настоящий момент. ЖСР рассматривается в качестве многообещающей перспективы для обеспечения переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ)[1] и теплового реактора, не требующего частой перегрузки топлива[2].

Концепция реактора на расплавленных солях заключается в том, что делящийся материал находится в растворенном состоянии в фторидном расплаве, таким образом активная зона реактора является гомогенной. Это позволяет удалять продукты деления из системы прямо во время кампании и обеспечивать очень глубокие степени выгорания топлива. Требованиям к солевым топливным композициям удовлетворяют расплавленные фторидные соли легких металлов. Наиболее подходящими теплоносителями являются смеси фторидов Li, Na, K [3].

FLiNaK рассматривается в качестве возможного растворителя в первом контуре реактора. Необходимо контролировать соответствие его физических свойств требованиям, в том числе содержание кислорода, т. к. его присутствие увеличивает коррозионную активность соли по отношению к конструкционным материалам реактора и может привести к появлению твёрдых соединений, что неблагоприятно влияет на работу ЖСР [3, 4].

Метод восстановительного плавления в токе газа-носителя на данный момент является самым перспективным и непрерывно развивается. Метод основан на выделении кислорода из пробы и его взаимодействии при высоких температурах с углеродом тигля с образованием монооксида углерода (CO), который транспортируется инертным газом к ИК-детектору [5].

- органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук, 2019, С. СД-31.
2. Кокунов Ю.В., Ковалев В.В., Кискин М.А., Бородкин С.А., Попов Л.Д., Еременко И.Л. Биядерный циклический комплекс серебра(I) с анионом 4-[(2-дифенилфосфанилфенил)метиленамино]бензойной кислоты: синтез, структура и оптические свойства, Координационная химия, 2018, Т.44, №3, с. 184-188.
 3. Долотова Е.П., Сайфутяров Р.Р., Барканов А.Д., Тайдаков И.В., Аветисов И.Х. Новые люминофоры на основе платины(II) с гетероциклическими лигандами для технологии органических светоизлучающих диодных структур. Успехи в химии и химической технологии, 2018, Т.32, № 3 (199), с. 46-48.

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ Ag(I) С 1,10-ФЕНАНТРОЛИНОМ И БЕНЗОТРИАЗОЛОМ

Камышева А.А.¹, Асанова М.С.¹, Жилин А.С.¹, Ребрин О.И.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: anna.kamysheva.00@mail.ru

IR SPECTROSCOPY OF MIXED LIGAND Ag(I) COMPLEXES WITH 1,10-PHENANTHROLINE AND BENZOTRIAZOLE

Kamysheva A.A.¹, Asanova M.S.¹, Zhilin A.S.¹, Rebrin O.I.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The subject of this work is the preparation of mixed-ligand coordination compounds of phenanthroline and benzotriazole with silver (I). These compounds have great opportunities to build different ligand environments, which allows us to obtain different emission properties as a result.

Работа направлена на поиск и разработку разнолигандных координационных соединений серебра (I) с 1,10-фенантролином и бензотриазолом. Эти соединения имеют большие возможности построить разное лигандное окружение, что позволяет в итоге получать разные эмиссионные свойства.

В работе были получены комплексные соединения Ag (I) с бензотриазолом и 1,10-фенантролином следующих составов, отнесенных на 1 моль металла: $[Ag(L_1)]NO_3$; $[Ag(L_2)]NO_3$; $[Ag(L_1)(L_2)]NO_3$. Состав фаз определяли методом элементного анализа и спектроскопией с индуктивно-связанной плазмой.

Для доказательства наличия координационных связей использовали колебательную спектроскопию в инфракрасной области. ИК спектры 1,10-фенантролина, бензотриазола и полученных фаз записаны на ИК Фурье спектрометре с помощью приставки нарушенного полного внутреннего отражения с алмазным кристаллом в диапазоне 4000-450 cm^{-1} .

Совокупность наблюдаемых изменений, а именно увеличение частот полос поглощения, соответствующих плоскостным колебаниям и уменьшение частот полос поглощения внеплоскостных колебаний, свидетельствует о координации ионов металла к атомам азота. Интенсивные полосы поглощения в области 1370-1320 cm^{-1} характерны для валентных колебаний нитрат-аниона.

1. Гордеев Е.В., Машковцев М.А., Берсенева М.А., Поливода Д.О. Современные синтетические методологии для создания лекарственных препаратов и функциональных материалов (MOSM2019). Сборник тезисов. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Институт

На рисунке 1 приведены СЭМ-изображения частиц MoS_2 , синтезированных на углеродной подложке при разных температурах. Из рисунка 1,а видно, что при температуре 600°C на поверхности активированного угля формируются субмикронные глобулярные частицы MoS_2 . При увеличении температуры синтеза до 700°C , средний размер частиц MoS_2 увеличился и на их гладкой поверхности образовались наноразмерные листы. ЭДС анализ полученных образцов выявил атомное соотношение $\text{Mo}:\text{S} = 1.4:3.2$ (ат. %), это подтверждает образование стехиометрических частиц MoS_2 .

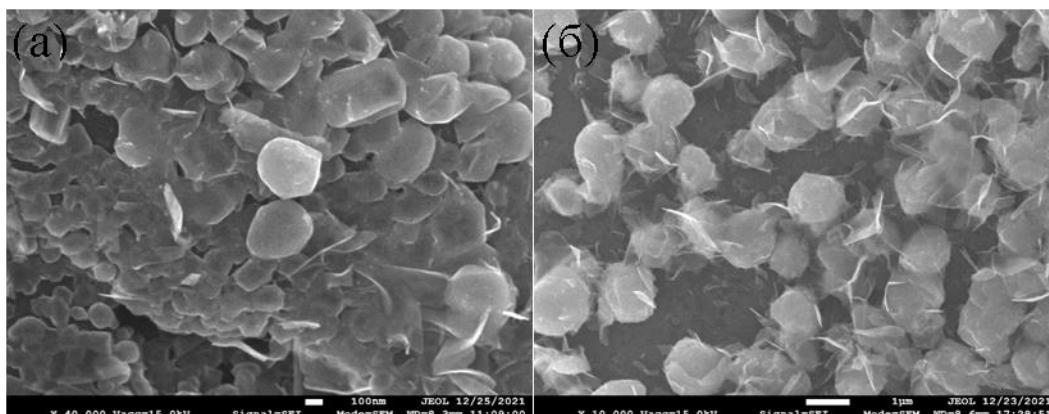


Рис. 1. СЭМ-изображения полученных образцов: синтез при 600°C (а), синтез при 700°C (б)

Результаты анализа полученных материалов методом рамановской спектроскопии показал, что на спектре присутствуют пики при 380–415 нм, что характерно для колебания связей в MoS_2 , что подтверждает результаты СЭМ.

Таким образом, было установлено влияние температуры CVD синтеза на морфологию наноструктур MoS_2 , формирующихся на поверхности активированного угля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 21-49-00039).

1. Zhou, J., Qin, J., Zhao, N., Shi, C., Liu, E.-Z., He, F., ... He, C. (2016). Salt-template-assisted synthesis of robust 3D honeycomb-like structured MoS_2 and its application as a lithium-ion battery anode. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(22), 8734–8741. doi:10.1039/c6ta02565j
2. Tian, Y., Ge, L., Wang, K., & Chai, Y. (2014). Synthesis of novel $\text{MoS}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ heterojunction photocatalysts with enhanced hydrogen evolution activity. *Materials Characterization*, 87, 70–73. doi:10.1016/j.matchar.2013.10.020
3. Lee, Y.-H., Zhang, X.-Q., Zhang, W., Chang, M.-T., Lin, C.-T., Chang, K.-D., ... Lin, T.-W. (2012). Synthesis of Large-Area MoS_2 Atomic Layers with Chemical Vapor Deposition. *Advanced Materials*, 24(17), 2320–2325. doi:10.1002/adma.201104798.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ СИНТЕЗА НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ MoS₂ НА ПОВЕРХНОСТИ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ

Калинина В.В.¹, Конопацкий А.С.¹, Барилук Д.В.¹, Штанский Д.В.¹

¹) Национальный Исследовательский Технологический Университет «МИСиС»,
Москва, Ленинский пр-кт, д.4, 119049, Россия
E-mail: vladakalinina98@gmail.com

RESEARCH OF THE EFFECT OF SYNTHESIS TEMPERATURE ON THE FORMATION OF THE MoS₂ STRUCTURE ON THE SURFACE OF ACTIVATED CARBON

Kalinina V.V.¹, Konopatsky A.S.¹, Bariluyk D.V.¹, Shtansky D.V.¹

¹) National University of Science and Technology (MISiS), Moscow, Leninsky Prospekt,
4, 119049, Russia

Two-dimensional 2D materials have attracted wide attention in recent years due to their unique physicochemical properties, such as high specific surface area, electromagnetic properties, etc.

Перспективным 2D материалом для применения в различных областях науки и техники является дисульфид молибдена (MoS₂). [1, 2] Наиболее изученным методом синтеза MoS₂ является химическое осаждение из газовой фазы (CVD), с использованием гладкой и плоской подложки. [3] На структуру и свойства частиц MoS₂ влияют следующие факторы: температура синтеза, время синтеза, соотношение исходных прекурсоров, тип подложки и методы обработки подложки. Материалы с развитой поверхностью (например, активированный уголь) представляют интерес как носители для каталитически активных частиц. Таким образом, целью данной работы было исследование влияния температуры синтеза на формирование структуры MoS₂ на поверхности активированного угля.

Синтез частиц MoS₂ производился методом CVD в высокотемпературной трубчатой печи (Nabertherm), с использованием потока аргона в качестве транспортного газа. В качестве подложки были использованы углеродные гранулы (burnt coconut shell). В качестве прекурсоров были использованы порошки MoO₃ и элементной серы (S). С целью более однородного распределения MoS₂ на углеродной подложке, перед синтезом, MoO₃ был нанесен непосредственно на С путем диспергирования в спирте. Для исследования влияния температуры на особенности формирования структуры дисульфида молибдена, были синтезированы два образца при температурах 600 и 700 °С. Исследование структуры образцов и их химический состав осуществлялись методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС) и рамановской спектроскопии.

растворы (ПР) после выщелачивания направляли на количественный элементный анализ методом ICP-AES. Также все ПР направляли на измерение pH, определение остаточной концентрации кислоты после выщелачивания.

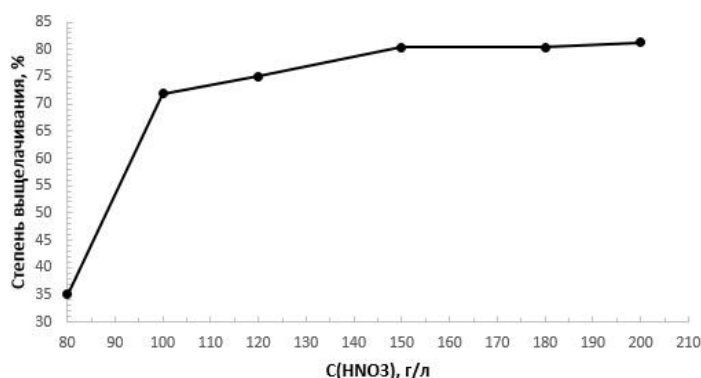


Рис. 1. Зависимость степени выщелачивания урана из шлама конверсионного производства от концентрации азотной кислоты в выщелачивающем растворе

По результатам экспериментов построили график зависимости степени выщелачивания от концентрации азотной кислоты в выщелачивающем растворе, приведенный на рис. 1.

Таким образом, оптимальной концентрацией азотной кислоты в выщелачивающем растворе было принято 150 г/л для данных условий выщелачивания и данного вида шлама, так как дальнейшее увеличение исходной концентрации кислоты не давало значительного прироста в степени выщелачивания урана. При этом остаточное содержание азотной кислоты в продуктивном растворе составило 43,67 г/л, величина pH продуктивного раствора равна 0,22; концентрация урана в ПР составила 349,27 мг/л, и степень выщелачивания урана равна 80,38 %.

Так, можно сделать вывод, что применение азотной кислоты для выщелачивания урана из шламов конверсионных производств достаточно эффективно. Дальнейшие исследования и выбор прочих технологических параметров позволят увеличить степень извлечения урана в ПР.

1. Галкин Н. П., Судариков Б.Н., Верятин У.Д. и др. Технология Урана. Учебное пособие для химикотехнологических вузов и факультетов. – Москва: «АТОМИЗДАТ», 1964. – 400 с.

ПЕРЕРАБОТКА УРАНОСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ КОНВЕРСИОННОГО ПРОИЗВОДСТВА МЕТОДОМ АЗОТНОКИСЛОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ

Кабаков А.С.¹, Титова С.М.¹, Наливайко К.А.¹, Скрипченко С.Ю.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kavaev40@mail.ru

PROCESSING OF URANIUM-CONTAINING WASTE OF CONVERSION PRODUCTION BY METHOD OF NITRIC ACID LEACHING

Kabakov A.S.¹, Titova S.M.¹, Nalivaiko K.A.¹, Skripchenko S.Yu.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The possibility of extracting uranium by leaching with nitric acid solutions with different initial acid concentrations has been studied. The degrees of uranium leaching were determined, and the optimal concentration of nitric acid solution was chosen for further experiments.

В настоящее время атомная энергетика стремительно развивается, вместе с тем растет спрос на уран. Следует отметить, что кроме наличия природных месторождений урана, есть и техногенные источники, к которым и можно отнести шламы конверсионных урановых производств. В большинстве случаев, урана в таких отходах содержится не менее 0,15 %, следовательно, разумно ставить вопрос об их переработке. Основные методы переработки – гидрометаллургические, например, ионный обмен, экстракция, электролиз, извлечение из растворов, выщелачивание и др. Чаще всего используют комбинированные методы, сочетающие в себе пиро-, гидрометаллургию и флотацию, обеспечивающие более полное извлечение ценных компонентов.

Так как на начальном этапе переработки таких отходов необходимо извлечь уран из твердой фазы, то можно обратиться к методу выщелачивания [1]. Чаще всего в технологии выщелачивания урана используются минеральные кислоты. В наших экспериментах в качестве выщелачивающего агента опробована азотная кислота.

Выщелачивание урана вели в агитационном режиме. Для каждого эксперимента брали навеску шлама массой 100 г. Концентрацию азотной кислоты в выщелачивающих растворах варьировали в диапазоне 80 – 200 г/л.

Каждый из данной серии опыт проводился при идентичных условиях: скорость перемешивания 300 об/мин, температура 80 °С, при соотношении фаз Т:Ж = 1:3 и времени контакта фаз – 3 ч. После выщелачивания нерастворимый остаток промывали посредством распульковки, фильтровали и отправляли на сушку. Образцы высушенных кеков растворяли в царской водке и направляли пробы на анализ для дальнейших расчетов степени выщелачивания. Продуктивные

близок к процессам в реакторах идеального смешения. Использование катализаторов Циглера-Натта обеспечивает более высокий выход продукта.

Несмотря на то, что ПЭВД уступает по показателям прочности ПЭНД, изделия из него возможно изготовить с требуемым уровнем прочности за счет толщины материала. Эта особенность и привлекательный внешний вид изделий из ПЭВД обеспечивают его конкурентоспособность по сравнению с ПЭНД. В связи с этим потребность в нем растет с каждым годом.

Для России ПЭВД является традиционным видом полиэтилена. Основные мощности по производству гранул вводились во времена СССР, когда ПЭНД и ЛПЭНП еще не получили достаточного распространения, при этом доступ к зарубежным технологиям был ограничен.

Крупнотоннажный синтез ПЭНД производится практически всеми ведущими мировыми нефтяными и газовыми концернами. В России полиэтилен производится на нефтехимических заводах «Лукойла», СИБУРа, «Роснефти», «Газпрома», на «Казаньоргсинтезе» и «Нижнекамскнефтехиме». Сейчас в России существует пять крупных производителей ПЭВД: Томскнефтехим (СИБУР), Уфаоргсинтез, Казаньоргсинтез, Ангарский завод полимеров (Роснефть), Газпром Нефтехим Салават.

1. ЮНИТРЕЙД [Электронный ресурс]: История создания полиэтилена – URL: <http://unitreid-group.com/poleznoe/istoriya-sozdaniya-polietilena/> (дата обращения: 30.09.2021).
2. Волкова А.В. Рынок крупнотоннажных полимеров [Электронный ресурс] / А.В. Волкова. – электрон. текст. дан. – М.: ВШЭ, 2020. – 74 с.
3. ИТС 32-2017. Производство полимеров, в том числе биоразлагаемых. – М.: Бюро НТД, 2017. – 401 с.

ИСТОРИЧЕСКОЕ РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПРОМЫШЛЕННОГО ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛИОЛЕФИНОВ

Иванцова М.Н.¹, Нейн Ю.И.¹

¹) Химико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: m.n.ivantsova@urfu.ru

HISTORICAL DEVELOPMENT OF TECHNOLOGIES FOR THE INDUSTRIAL PRODUCTION OF POLYOLEFINS

Ivantsova M.N.¹, Nein Yu.I.¹

¹) Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University. Ekaterinburg, Russia

Various technologies for the industrial synthesis of polyolefins (PE) were considered, a comparative description of modern methods for the production of various PE and characteristic of the properties dependence of PE on the chosen production method were given in the course of this research work.

В настоящее время полиэтилен является самым используемым и крупнотоннажным полимером [1]. На долю полиэтилена (ПЭ) в общем числе выпускаемых в мире полимеров приходится более 31,5 %. Такая востребованность полиэтилена объясняется его физико-механическими характеристиками, универсальностью применения и простотой технологии изготовления изделий.

В зависимости от метода синтеза выделяют полиэтилен низкого давления (ПЭНД), или полиэтилен высокой плотности (ПВП); полиэтилен высокого давления (ПЭВД) или полиэтилен низкой плотности (ПНП), а также полиэтилен среднего давления (ПСД) или полиэтилен средней плотности.

За десятки лет производства полиэтилена разработано большое количество технологий с целью выпуска сотен марок ПЭ, а также добавок и красителей для придания продукции из него всевозможных потребительских качеств [2]. Долговечность изделий из ПЭ зависит как от свойств исходного полимера, так и от качества получаемых из него изделий и условий эксплуатации.

В результате работы были рассмотрены основные промышленные методы производства полиэтиленов разного давления [3]. Несмотря на разнообразие промышленных методов синтеза ПВП, технология INNOVENE™ S является наиболее перспективной. Это связано с тем, что технология имеет такие достоинства как: хорошо отработанная двухреакторная система; получение широкого ассортимента полиэтилена; гибкость технологии; эффективность реакторного контроля и управления процессом; высокая конверсия. Производство полиэтилена низкой плотности имеет существенно более низкие капитальные вложения и металлоемкость элементов установок, вследствие отсутствия необходимости использования реакторов высокого давления. Процесс получения ПНП в аппаратах

частиц на финальной стадии осаждения и распределение частиц по размерам после прокаливания при 950°C для образцов Zr-4 и Zr-5. Показано, что для образцов Zr-4 и Zr-5 в ходе осаждения средний диаметр частиц возрастает с 16,6 до 18,6 и с 20 до 30,2 мкм соответственно (рис. 1-а). Дисперсия размеров частиц всех образцов снижается в ходе осаждения и к концу осаждения составляет 1,21 для образца Zr-4 и 1,13 для образца Zr-5 (рис. 1-б). По оптическим изображениям видно, что частицы представляют собой агломераты окосферической формы небольших размеров с четкими границами. При этом частицы образца Zr-4 обладают наименее сглаженной поверхностью (рис. 1-в) по сравнению с частицами образца Zr-5 (рис. 1-г).

После прокаливания форма частиц всех образцов существенно не изменяется, при этом частицы уменьшаются в диаметре почти в 2 раза и для них характерно узкое распределение частиц по размерам (рис. 1-д). Таким образом, при изменении значения pH осаждения в ходе КДО можно получать порошок оксида циркония со сфероидальной формой частиц и узким распределением частиц по размеру.

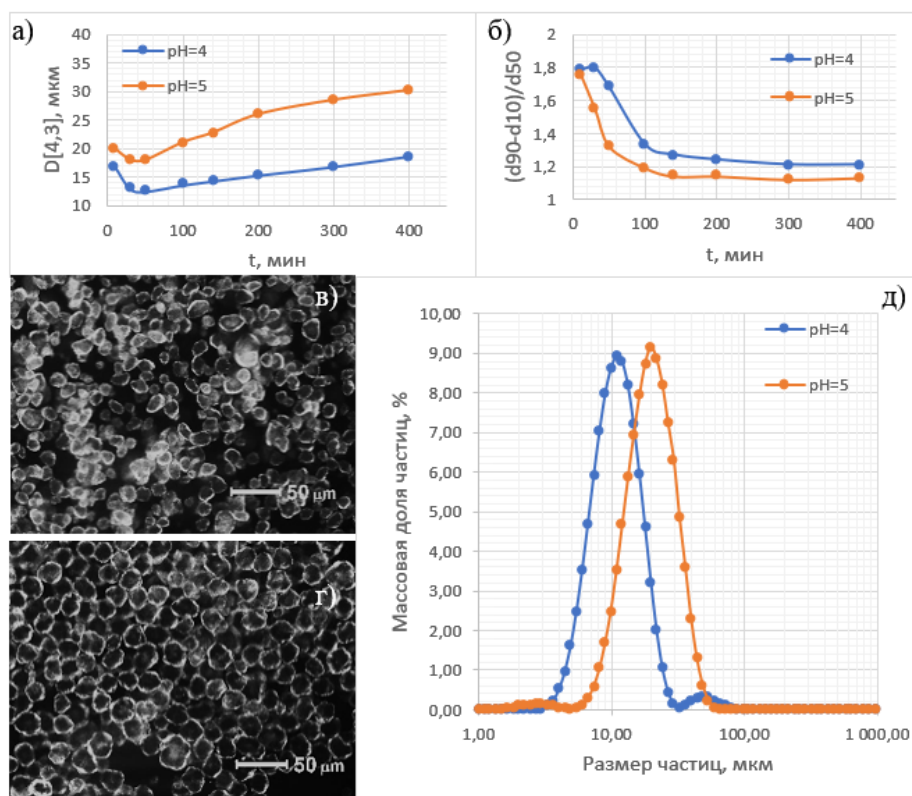


Рис. 1. Изменение среднего диаметра частиц в ходе осаждения - а); изменение дисперсии размеров частиц - б); оптические изображения частиц в конце осаждения при значениях pH 4 и 5 соответственно - в) и г); распределение частиц по размерам после прокаливания - д).

1. Высокоогнеупорные материалы из диоксида циркония / Д. С. Рутман, Ю. С. Торопов, С.Ю. Плинер и др. М.: Металлургия (1985)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗНАЧЕНИЯ pH ОСАЖДЕНИЯ НА СВОЙСТВА ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Исмагулов Д.Б.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: ismagulovdzafar@gmail.com

STUDY OF THE EFFECT OF VALUE pH PRECIPITATION ON THE PROPERTIES OF ZIRCONIUM DIOXIDE

Ismagulov D.B.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is aimed at studying the influence of the pH value of precipitation of hydrated zirconia. It was shown that the precipitation pH affects the morphology and particle size distribution of the obtained oxides.

Материалы на основе диоксида циркония широко применяются в различных отраслях промышленности в качестве керамики, медицинских изделий, термобарьерных покрытий (ТБП). Это обусловлено такими свойствами, как тугоплавкость, химическая устойчивость, термальная стабильность, хорошая механическая прочность и так далее [1]. Так, например, в пределах керамического производства применяются такие методы, как измельчение материалов, приготовление масс различного типа и формование из них изделий. Свойства изделий из ZrO_2 зависят от свойств исходного порошка. Целью исследования является изучение влияния значения pH осаждения на свойства конечного порошка диоксида циркония.

В качестве прекурсора для синтеза диоксида циркония методом контролируемого двухструйного осаждения (КДО) использовали раствор нитрата цирконила, который получали растворением карбоната цирконила в азотной кислоте. Далее была установлена концентрация раствора нитрата цирконила, среднее значение концентрации 285,83 г/л. Полученный раствор разбавляли водой до установления концентрации 100 г/л. Осаждение проводили в стеклянном реакторе объемом 3 л при комнатной температуре в течение 400 мин при постоянных значениях pH=4 и pH=5 (далее образцы будут обозначаться как Zr-4 и Zr-5 соответственно), скорость перемешивания составляла 600 об/мин. В качестве осадителя использовали 10% раствор аммиака. Полученную суспензию фильтровали на вакуумном нутч-филт্রে, сушили при 40°C в течение 12 часов и затем прокаливали в муфельной печи при 950°C. Свойства образцов исследовали при помощи лазерного анализатора частиц и оптического микроскопа.

На рисунке 1 представлены изменение среднего диаметра частиц и изменение дисперсии размеров частиц в течение осаждения, оптические изображения

1. Hu Z. Hydrodynamics numerical simulation of a vertical falling film evaporator for ionic liquid systems / Z. Hu, Junnan Wang, H. Dong, S. Hussain, S. Zeng, Y. Nie, X. Zhang, S.Zhang // Chemical Engineering Science. Vol. 237. 2021. P. 1-8
2. Marangoni C. Falling film distillation column with heat transfer by means of a vapor chamber – part I: isothermal operation / C. Marangoni, A.P. Meneguelo, J.G. Teleken, L.O. Werle, K.W. Milanez, M.B.H. Mantelli, M.B. Quadri, A. Bolzan, M.C. dos Santos, L.C. Medina, R.A.F. Machado // Chemical Engineering Communications. 2019. № 206. P. 994-1005.
3. Khomyakov A.P. Investigation of two-phase flow hydrodynamics of heat exchange tube outlet falling film evaporator // Khomyakov A.P., Gushshamova V.N., Mordanov S.V. / IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. 2021. № 864. DOI: 10.1063/5.0068409
4. Khomyakov A.P. Mathematical model of two-phase flow processes in heat exchange tubes of the falling film evaporator / Khomyakov A.P., Gushshamova V.N., Mordanov S.V., Khomyakova T.V. // AIP Conference Proceedings. 2021. № 2388. DOI: 10.1088/1755-1315/864/1/012037.
5. Khomyakov A.P. Investigation of hydrodynamic parameters distribution in heat exchange tubes of falling film evaporator / Khomyakov A.P., Gushshamova V.N., Mordanov S.V., Khomyakova T.V. // AIP Conference Proceedings. 2021. № 2388. DOI: 10.1063/5.0068408.

3. Интенсивность орошения теплообменной трубки $3,2 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/(\text{м} \cdot \text{с})$, что соответствует расходу исходного раствора 150 л/ч.

Получено распределение локальных значений абсолютного давления по длине теплообменной трубки для различных значений полезной разности температур (рис.1). Изменение абсолютного давления по длине трубки обусловлено общими потерями давления, которые определяются тремя составляющими: потери на трение жидкой пленки о стенку теплообменной трубки; потери на трение вторичного пара о поверхность жидкой пленки; потери на изменение скоростного напора двухфазного потока.

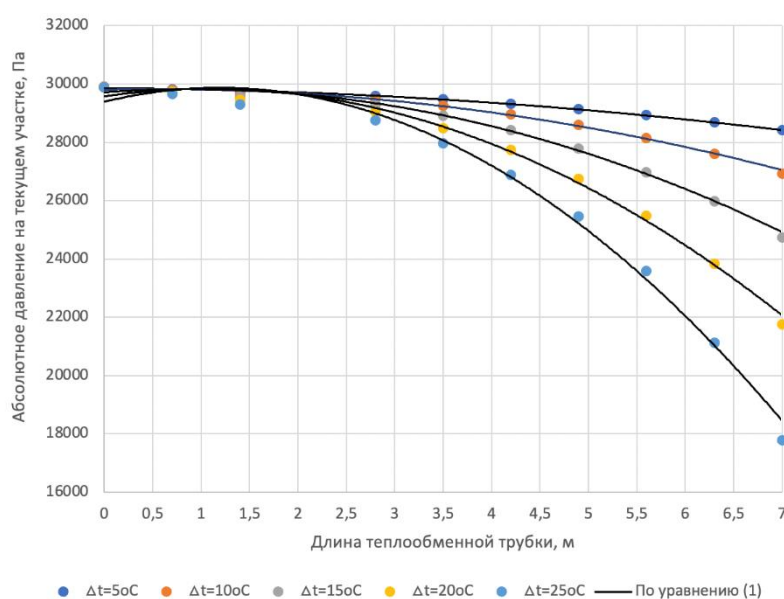


Рис. 1. Распределение локальных значений абсолютного давления в зависимости от значений полезной разности температур и длины теплообменной трубки

Получена аппроксимирующая функция для определения абсолютного давления в теплообменной трубке с учетом потерь давления в зависимости от значений полезной разности температур и длины трубки:

$$P = 29856 + (-0,52 \cdot \Delta t^2 + 0,022 \cdot \Delta t - 14,23) \cdot L^2 + (1,63 \cdot \Delta t^2 - 7,75 \cdot \Delta t - 17,49) \cdot L - 0,94 \cdot \Delta t^2 + 4,94 \cdot \Delta t \pm 1,5\%$$

Установлено, что абсолютное давление снижается по длине теплообменной трубки при всех рассматриваемых значениях полезной разности температур. Также, показано, что абсолютное давление снижается интенсивнее с увеличением значений полезной разности температур. Лимитирующим фактором снижения абсолютного давления являются потери давления на трение вторичного пара о поверхность жидкой пленки.

Снижение абсолютного давления в теплообменной трубке приводит к уменьшению температуры кипения раствора, и увеличению значений полезной разности температур по длине теплообменной трубки. Это положительным образом сказывается на эффективности выпаривания.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОЛЕЗНОЙ РАЗНОСТИ ТЕМПЕРАТУР НА ИЗМЕНЕНИЕ АБСОЛЮТНОГО ДАВЛЕНИЯ В ТЕПЛООБМЕННОЙ ТРУБКЕ ВЫПАРНОГО АППАРАТА ПЛЕНОЧНОГО ТИПА

Гушшамова В. Н.¹, Хомяков А. П.¹, Морданов С. В.¹, Хомякова Т. В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина
E-mail: 89126634949@yandex.ru

INVESTIGATION OF THE USEFUL TEMPERATURE DIFFERENCE EFFECT ON THE CHANGE IN ABSOLUTE PRESSURE IN THE HEAT EXCHANGE TUBE OF THE FALLING-FILM EVAPORATOR

Gushshamova V. N.¹, Khomyakov A. P.¹, Mordanov S. V.¹, Khomyakova T. V.¹

¹) Ural Federal University

The effect of the useful temperature difference on the absolute pressure change in the heat exchange tube of the falling-film evaporator is investigated. Distributions of local absolute pressure values along the length of the heat exchange tube are obtained.

Исследования гидродинамики двухфазного потока в теплообменных трубках выпарного аппарата пленочного типа являются актуальной задачей [1-5], поскольку полученные данные исследований целесообразно использовать при разработке новых и модернизации существующих вертикальных выпарных аппаратов пленочного типа.

В настоящее время нами проводится комплекс исследований по изучению изменений гидродинамических параметров двухфазного потока по длине теплообменной трубки методом численного математического моделирования [3-5].

Целью данной работы является исследование влияния полезной разности температур на изменения абсолютного давления в теплообменной трубке при движении двухфазного потока в трубном пространстве вертикального выпарного аппарата с падающей пленкой.

Исследование гидродинамики двухфазного потока при движении его сверху вниз по теплообменной трубке проводилось с помощью математического численного моделирования для вертикального выпарного аппарата пленочного типа, оснащенного теплообменной трубой диаметром $\varnothing 38 \times 2$ мм и длиной $L=7$ м. Данные были получены по длине теплообменной трубы с шагом $\Delta L=0,1$ м.

Для моделирования использовались следующие технологические параметры работы выпарного аппарата:

1. Полезная разность температур: $\Delta t=5^\circ\text{C}$; $\Delta t=10^\circ\text{C}$; $\Delta t=15^\circ\text{C}$; $\Delta t=20^\circ\text{C}$; $\Delta t=25^\circ\text{C}$.

2. Давление в верхней растворной камере 30400 Па;

Таким образом показана перспективность использования масс-спектрометрических методов анализа в применении к пищевой промышленности в качестве универсальных технологий для анализа пищевых продуктов, напитков, а также материалов, контактирующих с пищевыми продуктами, с преимуществами высокой чувствительности, высокой селективности и наименьшего времени отклика.

1. Shiby V. K., Mishra H. N. Fermented milks and milk products as functional foods—A review //Critical reviews in food science and nutrition. – 2013. – Т. 53. – №. 5. – С. 482-496.
2. А.Г. Кузьмин, Е.И. Ткаченко, Л.С. Орешко, Ю.А. Титов, А.С. Балабанов. Метод масс-спектрометрической экспресс-диагностики по составу выдыхаемого воздуха.// Медицинский академический журнал, том 16, №4, 2016, с. 106-107.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ КОНТРОЛЯ ГАЗОВОГО СОСТАВА ФЕРМЕНТИРОВАННОЙ ПРОДУКЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ КВАДРУПОЛЬНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Губина Е.В.¹, Чередникова А.А.², Зайцева А.Ю.², Титов Ю.А.², Кузьмин А.Г.²

¹) Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

²) Институт Аналитического приборостроения РАН
E-mail: gubina.z@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A METHODOLOGY FOR CONTROLLING THE GAS COMPOSITION OF FERMENTED PRODUCTS USING A QUADRUPOLE MASS-SPECTROMETER

Gubina E.V.¹, Cherednikova A.A.², Zaitceva A.Yu.², Titov Yu.A.², Kuzmin A.G.²

¹) Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, St.Petersburg, Russia

²) Institute for Analytical Instrumentation RAS

In this work, the samples of the gas composition of fermented products were investigated. The analysis of the sample gas composition was performed on a small-size quadrupole mass spectrometer MS7-200 with direct sample introduction at atmospheric pressure, developed at IAP RAS.

Качественный состав пищевых продуктов имеет первостепенное значение для полноценного развития глобальной экономики и формирования здорового человека и гражданина. Ферментированные молочные продукты и напитки имеют множество питательных и терапевтических свойств. Молочнокислые бактерии играют важную роль в определении положительного воздействия на здоровье человека [1]. Ранее был предложен способ предварительного анализа газового состава выдыхаемого воздуха путем масс-спектрометрического анализа [2]. В настоящей работе были исследованы пробы газового состава ферментированной молочной продукции. Анализ состава проб производился на малогабаритном квадрупольном масс-спектрометре MS7-200 с прямым вводом пробы при атмосферном давлении, разработанном в ИАП РАН. Отбор проб производился в специальном образом подготовленные медицинские шприцы емкостью 20 мл.

Были проведены экспериментальные исследования двух видов ферментированной молочной продукции. Первая группа была представлена йогуртами из коровьего и козьего молока, вторая группа кефирами из коровьего молока.

Было показано, что основными компонентами газового состава ферментированной молочной продукции являются ацетон и уксусная кислота [2]. Полученные в результате измерений масс-спектры имели существенные особенности. В обеих группах ферментированной продукции зафиксировано существенное повышение концентрации уксусной кислоты, а также были обнаружены некоторые дополнительные компоненты.

материалы: оксисульфат иттрия-европия (LYH:Eu-DS) и гибридные люминофоры иттрия европия (LYH:Eu-TA-0,21; LYH:Eu-TA-0,71; LYH:Eu-TA-2,43; где цифра – это молярное отношение терефталат-иона к нитрат-ионам во время интеркаляции).

Полученные люминофоры были исследованы с помощью метода фотолюминесцентной спектроскопии. Спектры люминесценции были получены при возбуждении излучением с длиной волны 250 нм. Эти спектры представлены на рисунке 1.

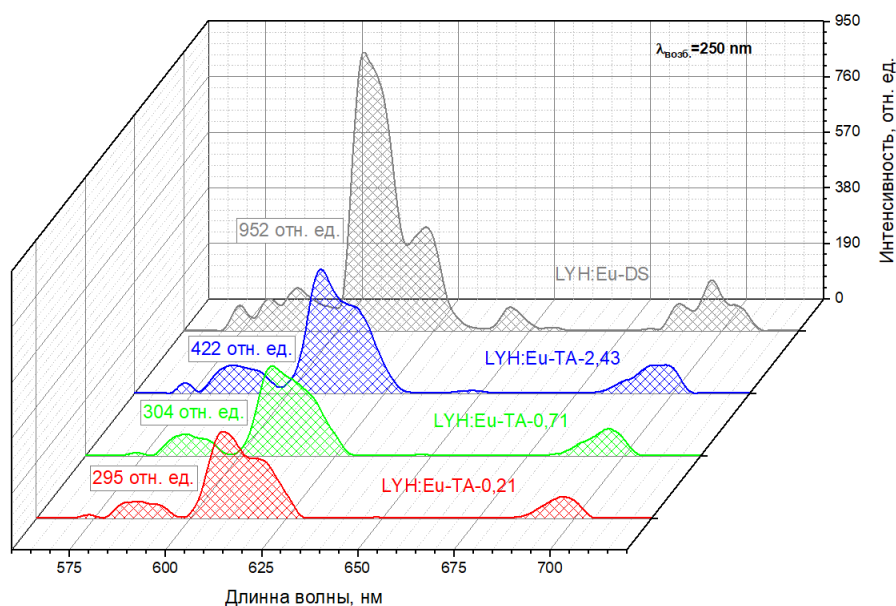


Рис. 1. Спектры люминесценции образцов: LYH:Eu-DS; LYH:Eu-TA-0,21; LYH:Eu-TA-0,71; LYH:Eu-TA-2,43

Наибольшей интенсивностью люминесценции обладает оксисульфат иттрия-европия. Это связано с высокой степенью кристалличности, которая была достигнута термообработкой при более высокой температуре, относительно гибридных образцов. Чем больше отношение терефталат-ионов к нитрат-ионам во время интеркаляции, тем больше интенсивность люминесценции у гибридных порошков. Это может быть связано с количеством терефталат-ионов в межслоевом пространстве. Дальнейшие исследования будут направлены на синтез прозрачных плёнок из полученных материалов и сравнение оптических свойств с аналогичными порошковыми материалами.

Работа частично поддержана проектом FEUZ-2020-0059 Минобрнауки РФ.

1. E. V. Gordeev, M. A. Mashkovtsev, M. A. Berseneva and D. O. Polivoda, AIP Conference Proceedings, Soc. 2280, Iss. 1, 040018 (2020).
2. D. K. Aleshin, M. A. Mashkovtsev, Y. A. Kuznetsova, V. N. Rychkov, A. F. Zatsepin and E. V. Gordeev, Journal of Alloys and Compounds, Soc. 805, 258–266 (2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИСУЛЬФАТОВ И ГИБРИДОВ НА ОСНОВЕ Y-Eu

Гордеев Е.В.¹, Гордеева М.А.¹, Косых А.С.¹, Харисова К.А.¹, Поливода Д.О.¹,
Машковцев М.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: egorgrodeev1998@mail.ru

INVESTIGATION OF THE OPTICAL PROPERTIES OF OXYSULPHATES AND HYBRIDS BASED ON Y-Eu

Gordeev E.V.¹, Gordeeva M.A.¹, Kosykh A.S.¹, Kharisova K.A.¹, Polivoda D.O.¹,
Mashkovtsev M.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In the present work, powders based on yttrium-europium were synthesized: oxysulfate and hybrids based on terephthalic ions. Phosphors in the oxysulfate form emit light more intensely than hybrids.

Слоистые гидроксиды редкоземельных элементов – класс слоистых соединений, обладающий способностью к интеркаляции и эксфолиации. Благодаря этим свойствам, слоистые гидроксиды редкоземельных элементов используют для создания гибридных материалов в виде плёнок и порошков [1]. Гибриды на основе слоистых гидроксидов редкоземельных элементов являются относительно новыми материалами, что делает исследование их свойств актуальной задачей. Целью настоящей работы является исследование фотолюминисцентных свойств оксисульфатного и гибридного люминофора на основе иттрия-европия.

Синтез гибридов и оксисульфатов на основе иттрия-европия состоит из трёх этапов: осаждения слоистого гидроксида редкоземельного элемента, интеркаляции слоистого гидроксида редкоземельного элемента и термической обработки интеркалированного порошка. Слоистый гидроксид иттрия, с молярным содержанием европия 5 мол. %, синтезировали методом контролируемого двухструйного осаждения при pH=8 [2]. Полученные порошки подвергали интеркаляции: по 2 г порошка помещали в 0,5 дм³ раствора додецилсульфата натрия с концентрацией 0,011 моль/дм³, и в раствор натриевой соли терефталевой кислоты с концентрацией 0,002; 0,008 и 0,028 моль/дм³. Полученные суспензии выдерживали в автоклаве при температуре 90 °С в течение 9 часов. Суспензии после гидротермальной обработки фильтровали, а полученный осадок промывали последовательно водой и абсолютным изопропиловым спиртом. После промывки порошок интеркалированный додецилсульфатом натрия прокаливали при 600 °С в течение 2 часов, а порошки интеркалированные натриевой солью терефталевой кислоты сушили при 200 °С в течение 6 часов. В результате были получены следующие

на стадии насыщения экстрагента, концентрации ТБФ, кислотности исходного раствора РЗЭ, концентрации РЗЭ.

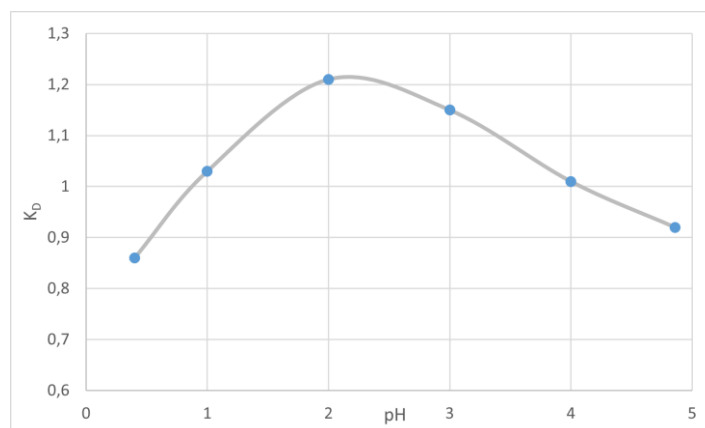


Рис. 1. Зависимость экстракции актиния трибутилфосфатом от pH нитратного раствора РЗЭ

На рисунке 1 представлен график зависимости коэффициентов распределения актиния от кислотности нитратного раствора РЗЭ с концентрацией 400 г/дм³.

График зависимости коэффициента распределения актиния от pH раствора имеет максимум при pH = 2. С повышением кислотности наблюдается понижение коэффициентов распределения актиния, что объясняется конкурентной экстракцией азотной кислоты экстрагентом.

1. Системная альфа-радиотерапия радием-223 (Ксофиго) пациентов с метастатическим кастрационно-резистентным раком предстательной железы (мКРРПЖ). Клинический опыт применения препарата в ГАУЗ СО СООД, Екатеринбург / А. С. Кулакова, Д. Л. Бенцион, В. Г. Епишев, В. А. Ветров // Фарматека. – 2021. – Т. 28. – № 11. – С. 47-51. – DOI 10.18565/pharmateca.2021.11.47-51.
2. Kosynkin, V. D. Cleaning rare earth elements from actinium / V. D. Kosynkin, S. D. Moiseev, V. S. Vdovichev // Journal of Alloys and Compounds. – 1995. – Vol. 225. – No 1-2. – P. 320-323. – DOI 10.1016/0925-8388(94)07132-2
3. Патент № 2736600 С1 Российская Федерация, МПК G21G 4/08. Способ получения радионуклидного генератора актиния-228 : № 2019120525 : заявл. 02.07.2019 : опубл. 19.11.2020 / В. С. Семенищев, В. Н. Рычков, Е. В. Кириллов, И. В. Кириченко ; заявитель Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина".

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭКСТРАКЦИИ НА ПРОЦЕСС ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЛАНТАНА И АКТИНИЯ ИЗ КОЛЛЕКТИВНОГО РАСТВОРА РЗЭ

Гордеева М.А.¹, Кириллов Е.В.¹, Кириллов С.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maryanaberseneva@mail.ru

STUDY OF THE INFLUENCE OF EXTRACTION PARAMETERS ON THE PROCESS OF EXTRACTION OF LANTHANUM AND ACTINIUM FROM A COLLECTIVE REE SOLUTION

Gordeeva M.A.¹, Kirillov E.V.¹, Kirillov S.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Extraction of lanthanum and actinium from a model REE solution was carried out by extraction methods using a neutral tributyl phosphate extractant. The influence of extraction conditions on the process of extraction of lanthanum and actinium from a REE nitric acid solution has been studied.

Активный-227 является востребованным радионуклидом для ядерной медицины [1]. До недавнего времени считалось, что получение данного изотопа в необходимых количествах из урановых руд является малоперспективным процессом вследствие его очень низкого содержания [2]. Главной проблемой использования актиния-227, полученного из урановой руды, является сложность его полного отделения от редкоземельных элементов (РЗЭ) как макропримесей.

В настоящее время для получения соединений индивидуальных РЗЭ высокой степени чистоты применяют, в основном, жидкостную экстракцию, которая является наиболее распространенным, исключительно гибким и высокопроизводительным методом разделения близких по свойствам элементов. Широкое практическое применение для разделения лантаноидов получили нейтральные фосфорорганические экстрагенты, среди которых наиболее известным является – трибутилфосфат (ТБФ).

Данная работа нацелена на изучение экстракции ионов актиния и РЗЭ трибутилфосфатом, влияния условий экстракции: концентрации экстрагента, кислотности раствора и концентрации РЗЭ на степень извлечения и разделения данных элементов.

Для изучения экстракции готовили нитратный раствор лантаноидов с концентрацией от 50 до 400 г/дм³ по сумме РЗЭ. Для получения актиния был изготовлен генератор Ас-228 в соответствии с работой [3].

В результате работы были получены данные о влиянии на степень извлечения и разделения РЗЭ и актиния трибутилфосфатом концентрации азотной кислоты

очищается от CO_2 и CH_4 в аппарате короткоцикловой адсорбции (КЦА). На выходе из КЦА чистота водорода составляет 99,999%.

Технологическая схема установки для производства водорода смоделирована в программе DWSIM. Расчет парового риформинга метана выполнен по одномерной кинетической модели с заданием кинетики реакции по литературным данным. Расчет шифт-реактора проведен по термодинамическому равновесию методом минимизации энергии Гиббса. Параметры потоков в промежуточных точках схемы определены по материальному и тепловому балансу. Для расчета параметров состояния использовано уравнение Соаве-Редлиха-Квонга. Валидация модели выполнена по данным с действующей промышленной установки. Проведен расчет установки с варьированием соотношения природный газ/пар на входе в риформер. При снижении этого соотношения с текущих 3-3,5 до 2-2,5 потребление природного газа на выработку водорода уменьшается на 5-10% при увеличении производительности установки в 1,2-1,3 раза.

1. M. Jafari et al., *Renew. Sust. Energ. Rev.* 158, 112077 (2022).
2. R. Yukesh Kannah et al., *Bioresour. Technol.* 319, 124175 (2021).

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТАНОВКИ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ВОДОРОДА ПРИ ПАРОВОМ РИФОРМИНГЕ МЕТАНА В ПРОГРАММЕ DWSIM

Голдобин Т.А.¹, Никитин А.Д.¹, Рыжков А.Ф.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: tifev.moget@gmail.com

SIMULATION OF A HYDROGEN PRODUCTION PLANT FOR METHANE STEAM REFORMING IN THE DWSIM PROGRAM

Goldobin T.A.¹, Nikitin A.D.¹, Ryzhkov A.F.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The plant for hydrogen production by methane steam reforming was calculate in the DWSIM program with varying steam/methane ratio at the inlet to the reformer. When this ratio is reduced to 2-2.5, the consumption of methane is reduced by 5-10%, the productivity of the plant is increased by 20-30%.

Основной целью, стоящей перед промышленностью и энергетикой, является снижение воздействия на климат, в частности замедление глобального потепления. Достижение поставленной цели предполагается за счет полной декарбонизации энергетики к 2050 г – переходу к водородной энергетике [1]. Переведенные на производство водорода возобновляемые источники энергии, несмотря на их бурное развитие, не смогут обеспечить потребности человечества в водороде из-за недостаточного энергетического потенциала. Для атомных электростанций остается открытой проблема утилизации ядерных отходов. Основным источником водорода, по-видимому, станет ископаемое топливо (природный газ) [2]. В настоящее время промышленно освоена технология производства водорода в результате парового риформинга природного газа. Однако требуется дальнейшее совершенствование технологии (повышение эффективности и производительности) и, главное, интеграция с системой улавливания и захоронения углерода.

В данной работе рассматривается технология парового риформинга природного газа фирмы Linde. Природный газ (метан) из газопровода сжимается газовым компрессором до давления около 2 МПа, подогревается в ходе регенерации теплоты синтез-газа, очищается от соединений серы, и смешивается с паром из котла-утилизатора. Смесь подогревается дымовыми газами и поступает в риформер, где осуществляется паровая конверсия метана на никелевом катализаторе при температуре 600-750°C с внешним нагревом от газовой горелки. Выходящий из риформера синтез-газ (H_2 , CO, CO_2 , CH_4 , H_2O) охлаждается в котле-утилизаторе и поступает в шифт-реактор для конверсии CO. Затем пар из синтез-газа конденсируется в аппарате воздушного охлаждения, а охлажденный синтез-газ

использовали этанол, ацетон, ацетонитрил в соотношении 3:2. Соотношение растворителей выбрано экспериментально, исходя из растворимости обоих компонентов модельных растворов. В качестве ПАВ использовали СТАВ, Triton X-100, SDS, Brij-35 в концентрации, определенной ранее ($C_{ПАВ}=5$ мМ).

Введение СТАВ приводит к образованию осадка. При использовании SDS и Brij-35 наблюдалась низкая воспроизводимость результатов. Использование ацетона в качестве растворителя, вероятно, приводит к частичному осаждению комплексов железа, что выражается в длительном установлении равновесия системы и отсутствии стабильного потенциала. Системы ФБ-Этанол (3:2) и ФБ-Ацетонитрил (3:2) в присутствии Triton X-100 являются гомогенными, воспроизводимость результатов анализа достаточно высокая. При определении АОЕ АК линейная зависимость наблюдается в диапазоне концентраций (0.05-0.5) мМ в обеих средах, при определении АОЕ α -ток в смеси с этанолом - (0.05-0.5) мМ, в смеси с ацетонитрилом – (0.05–0.3) мМ. Значения АОЕ модельных смесей АК и α -ток в разных соотношениях в среде этанола и ацетонитрила соответствуют введенным концентрациям с учетом стехиометрических коэффициентов. Recovery составили (87.65-99.99)% в смеси с этанолом, (88.96-96.77)% в смеси с ацетонитрилом.

Таким образом, использование смешанных растворителей с добавлением ПАВ позволяет увеличить диапазон анализируемых концентраций, воспроизводимость результатов анализа, что является важным при определении АОЕ реальных объектов.

1. A.V. Ivanova, E.L. Gerasimova, Kh.Z. Brainina, Crit. Rev. Anal. Chem. 45, 311-322 (2015).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИОКСИДАНТНОЙ ЕМКОСТИ СОЕДИНЕНИЙ РАЗЛИЧНОЙ ГИДРОФИЛЬНОСТИ ПРИ СОВМЕЩНОМ ПРИСУТСТВИИ НА ПРИМЕРЕ ВИТАМИНОВ С И Е

Газизуллина Е.Р.¹, Старчеусова В.А.¹, Герасимова Е.Л.¹, Иванова А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: e.r.gazizullina@urfu.ru

DETERMINATION OF THE ANTIOXIDANT CAPACITY OF COMPOUNDS OF DIFFERENT HYDROPHILICITY IN THE COMBINED PRESENCE ON THE EXAMPLE OF VITAMINS C AND E

Gazizullina E.R.¹, Starcheusova V.A.¹, Gerasimova E.L.¹, Ivanova A.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Determination of the antioxidant capacity of different hydrophilicity compounds (phytamines C and E) was carried out by the potentiometric method using mixed solvents with a surfactant. The Phosphate Buffer-Ethanol and Acetonitrile (3:2) with Triton X-100 selected as promising for analysis.

Антиоксиданты представляют большой класс соединений разной химической природы, обладающие разной растворимостью в воде. Кроме того, в организме человека антиоксиданты, обладающие разной гидрофильностью, могут являться синергистами, например, аскорбиновая кислота (АК) и α -токоферол (α -ток). Изучение антиоксидантных свойств подобных систем *in vivo* следует проводить совместно. Главной задачей при изучении антиоксидантных свойств соединений разной гидрофильности является выбор условий, позволяющих перевести в раствор гидрофильный и липофильный компоненты системы. Для решения подобных задач чаще всего используют различные поверхностно-активные вещества (ПАВ) для солюбилизации липофильного компонента в водный раствор. Еще одним вариантом является использование смеси растворителей, например, этанол-вода и др.

Ранее нами был предложен способ определения витаминов С и Е в совместном присутствии с использованием ПАВ Triton X-100 ($C_{\text{ПАВ}}=5$ мМ) и в смеси этанол – фосфатный буфер (ФБ) pH 7.4 (2:3). Антиоксидантную емкость (АОЕ) модельных растворов определяли потенциометрическим методом с использованием системы Fe(III)/Fe(II) [1]. Полученные данные достаточно воспроизводимы, правильность определения АОЕ подтверждена методом «введено-найденно». Однако диапазон определяемых концентраций составил ($C=0.05-0.1$) мМ, что недостаточно для изучения реальных объектов.

Для увеличения диапазона определяемых концентраций было предложено использование смешанных растворителей с добавлением ПАВ. В смеси с ФБ

оптического микроскопа и лазерного анализатора частиц ANALYSETTE 22 NanoTec.

На рисунке 1 представлена зависимость диаметра наиболее представленной фракции частиц от длительности осаждения.

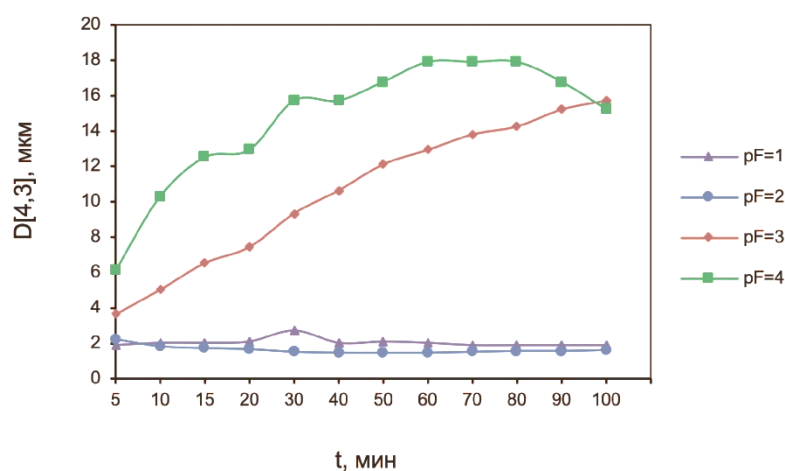


Рис. 1. Динамика изменения диаметра наиболее представленной фракции частиц фторида неодима в зависимости от рF осаждения

Показано, что образцы фторида неодима, полученные в ходе осаждения при концентрации фторид-ионов 10^{-1} моль/л и 10^{-2} моль/л, имеют неустойчивую гелеобразную структуру. Эти частицы при проведении анализа с ультразвуком распадаются на более мелкие фракции.

Максимального размера достигают частицы, полученные в ходе осаждения при равновесной концентрации фторид-ионов 10^{-3} моль/л и 10^{-4} моль/л. Диаметр наиболее представленной фракции частиц фторида неодима составляет 16 мкм.

Также были проведены серии опытов по осаждению фторида неодима при изменении следующих параметров: концентрации солевого фона (хлорида аммония), скорости перемешивания во время осаждения, значения рН исходного раствора хлорида неодима и стартового объема. В результате проведенных исследований были определены их оптимальные значения, получен крупнодисперсный хорошо фильтруемый осадок фторида неодима.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОСАЖДЕНИЯ НА КРУПНОСТЬ ЧАСТИЦ ФТОРИДА НЕОДИМА В УСЛОВИЯХ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Гасимова А. Ф.¹, Щетинский А.В.¹, Дедюхин А.С.¹, Машковцев М.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: a.f.gasimova@gmail.com

INFLUENCE OF PRECIPITATION PARAMETERS ON PARTICLE SIZE OF NEODYMIUM FLUORIDE DURING CONTROLLED DOUBLE-JET PRECIPITATION

Gasimova A.F.¹, Shchetinskiy A.V.¹, Dedyukhin, A.S.¹, Mashkovtsev M.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Influence of equilibrium concentration of fluoride ions, concentration of ammonium chloride, stirring velocity, pH value and starting volume on forming process of neodymium fluoride was studied. Sedimentation size of neodymium fluoride particles was determined by laser diffraction.

В современной технике неодим находит все более широкое применение: использование в качестве легирующих добавок при изготовлении специальных конструкционных сплавов, производство специальных стекол и лазерных материалов и ключевая по важности область его использования – это производство высококоэрцитивных постоянных магнитов (ВкПМ).

Но кроме металлического неодима нашли свое применение в технике и его соединения, например, фторид неодима используются в изготовлении высококачественного оптоволокна для волоконной оптики.

В связи с вышеизложенным представляет интерес изучение процессов осаждения фторида неодима, и влияние на этот процесс различных параметров для определения их оптимальных значений и получения крупнодисперсного, хорошо фильтруемого осадка.

Целью данной работы является исследование влияния на процесс формирования и крупность осадков фторида неодима следующих факторов: равновесной концентрации ионов фтора, концентрации солевого фона, скорости перемешивания, значения pH исходного раствора хлорида неодима и стартового объема.

В качестве неодимсодержащего раствора был выбран раствор хлорида неодима, полученный путем растворения соответствующего оксида в соляной кислоте. Источником ионов фтора являлся раствор фторида аммония. Осаждение проводили путем одновременного дозирования растворов в общий объем реактора при постоянном значении pH. Свойства образцов исследовали при помощи

лауриновой кислоты на термическую стабильность твердых растворов. Были проведены сравнительные испытания образцов, синтезируемых по технологиям с применением ИПС, с добавлением лауриновой кислоты и без различных ПАВ.

Исследование показало, что композиция на основе Се, Zr, Y и La с применением ИПС обладает высокой удельной поверхностью после старения при 1000 °С в течение 4-х часов на уровне 56 м²/г, с применением HL – 48 м²/г, без применения различных ПАВ – 22 м²/г. Таким образом, положительное воздействие различных ПАВ на значение удельной поверхности очевидно. Так, твердые растворы, синтезируемые с применением лауриновой кислоты, уступают по удельной поверхности порошкам, синтезируемых по технологии с ИПС, однако разница этих значений приемлема для оптимизации процесса на производстве.

1. Машковцев М.А. Синтез, физико-химические свойства и применение твёрдых растворов Zr_{0,5}Ce_{0,4}Ln_{0,1}O_x: диссертация кандидата химических наук: 05.17.02 – Екатеринбург, 2013. – 105 с.
2. Пат. 2610080 Российская Федерация, МПК С 01 G 25/02, С 01 F 17/00, В 01 J 21/06, В 01 J 23/10, В 01 D 53/94. Композиция на основе оксидов церия, циркония и другого редкоземельного металла с высокой восстановительной способностью, способ получения и применение в области катализатора/ Ифра С., Роар Э., Эрнандес Ж. и др.; заявитель и патентообладатель РОДИА ОПЕРАСЬОН (FR). - № 2014101338; заявл. 13.06.2012; опубл. 07.02.2017, Бюл. № 4 – 22 с.
3. Пат. 2753046 Российская Федерация, МПК С 01 G 25/00, С 01 F 17/32, В 01 D 53/94, В 01 J 21/06, В 01 J 23/10, В 01 J 35/10, В 01 J 37/04, F 01 N 3/10. Смешанный оксид на основе церия и циркония/ Жоржи Коэлью Маркеш Р., Ифра С., Шабер Б.; заявитель и патентообладатель РОДИА ОПЕРАСЬОН (FR). - № 2018141236; заявл. 25.04.2017; опубл. 11.08.2021, Бюл. № 23 – 24 с.
4. Пат. 2746315 Российская Федерация, МПК С 01 F 17/235, В 01 D 53/94, В 01 J 23/10, В 01 J 35/10. Частицы оксида церия и способ их получения/ Охтаке Н., Окампо Ф., Жоржи Коэлью Маркеш Р.; заявитель и патентообладатель РОДИА ОПЕРАСЬОН (FR). - № 2018144616; заявл. 17.05.2017; опубл. 12.04.2021, Бюл. № 11 – 17 с.
5. Пат. 2407584 Российская Федерация, МПК В 01 D 53/94, С 01 G 25/02, В 01 J 23/10, В 01 J 37/03. Состав на основе оксида циркония и оксида церия с повышенной восстановительной способностью и стабильной удельной поверхностью, способ получения и использование для обработки выхлопных газов/ Вердье С., Лярше О., Роар Э.и др.; заявитель и патентообладатель РОДИА ОПЕРАСЬОН (FR). - № 2008141699/05; заявл. 19.03.2007; опубл. 27.12.2010, Бюл. № 36 – 15 с.

СИНТЕЗ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{CeO}_2\text{--ZrO}_2\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--La}_2\text{O}_3$ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЛАУРИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Галиаскарова М.Р.¹, Машковцев М.А.¹, Бакшеев Е.О.¹, Степанова М.Ю.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, 620002, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Sherlocked221b69@mail.ru

SYNTHESIS OF SOLID SOLUTIONS $\text{CeO}_2\text{--ZrO}_2\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--La}_2\text{O}_3$ WITH THE USE OF LAURIC ACID

Galiaskarova M.R.¹, Mashkovtsev M.A.¹, Baksheev E.O.¹, Stepanova M.Y.¹

¹) Ural Federal University, 620002, Yekaterinburg, Russia

The work is devoted to the synthesis of a composition based on oxides of cerium, zirconium, yttrium and lanthanum with high thermal stability, using lauric acid as a structuring additive.

Проблема загрязнения окружающей среды токсичными соединениями в выхлопных газах автомобилей, количество которых с каждым годом лишь растет, остается актуальной. Одним из способов решения этой проблемы является создание высокоэффективных трехмаршрутных катализаторов. Важным компонентом таких катализаторов являются композиции на основе церия и циркония, обладающих высокой кислородной емкостью (OSC-материалы). На данный момент известна технология синтеза твердых растворов оксидов Ce, Zr, Y и La с применением изопропилового спирта (ИПС) для замещения влаги в синтезируемом порошке [1]. Однако, ИПС – легковоспламеняющаяся жидкость, его применение в технологическом процессе является нежелательным.

В патентах компании РОДИА ОПЕРАСЬОН [2 – 5], авторы добавляют к суспензии гидратированных оксидов структурирующую добавку, функцией которой является контроль пористости смешанного оксида. Структурирующая добавка содержит полярные химические группы, которые взаимодействуют с химическими группами на поверхности осадка. Позднее структурирующую добавку удаляют на стадии обжига. Помимо спиртов авторы также рассматривают различные карбоновые кислоты, в частности, лауриновую кислоту. Поэтому целью данной работы являлось исследование возможности синтеза композиции на основе оксидов церия, циркония, иттрия и лантана, обладающей высокой термической стабильностью, с применением лауриновой кислоты в качестве структурирующей добавки.

Образцы твердых растворов CeZrYLaO_x были синтезированы методом контролируемого двухструйного осаждения при различных условиях синтеза. В ходе работы были исследованы влияния условий гидротермальной обработки, отмывки осадков от сопутствующих солей, а также количества введенной

Таким образом, возможным вариантом снижения содержания сульфидных капель в шлаках при плавке сульфидных материалов – это продувка шлака газом и уменьшение его вязкости путем добавления флюса в исходную шихту.

Для проведения опытов выбрано два флюса – кальцит и флюорит. Кальцит при нагреве диссоциирует с образованием газа CO_2 . Этот газ не будет окислять сульфидные капельки и будет осуществлять продувку шлака. Шлаки с флюоритом имеют невысокие значения поверхностного натяжения, температуры плавления и вязкости [3]. Благодаря понижению вязкости расплава, скорость осаждения сульфидных капель в нем увеличится.

В качестве опытного образца для установления влияния кальцита на изменения содержания золота, платины и цветных металлов (Cu, Ni, Co) в шлаке после плавления сульфидного материала выбрана Cu-Ni сульфидная руда. Для изучения влияния флюса флюорита использовалась смесь Cu-Ni-Fe штейна и модельного шлака ($\text{CaO/SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 40/40/20$) в соотношении 5:3. Эксперименты проводились в печи сопротивления с графитовым нагревателем в корундовых тиглях, в атмосфере воздуха при температуре 1300°C , время выдержки 30 мин.

Результаты экспериментов показали, что после добавки кальцита в количестве 5-10 масс.% произошло существенное снижение содержания серы в шлаке в 4 раза. Это в свою очередь привело и к снижению золота в шлаке в 2 раза, цветных металлов в 3-5.5 раз. Содержание платины в шлаке упало с 2.15 до 2.06 г/т. Количество выделившегося при плавке газа соответствует его расходу более 0.2 л/мин. Добавка флюорита 10-12 масс.% заметно уменьшила содержание серы, цветных металлов в 1.5-2 раза. Золото в шлаке не обнаружено. Влияние флюорита на количество платины в шлаке не установлено, вероятно, из-за недостаточной точности ее определения применяемой методикой.

На основании данных опытов предложен способ по повышению извлечения золота и платины в штейн при плавке сульфидных материалов, который включает в себя применение разработанного устройства для продувки шлака инертным газом и добавлении в исходную шихту флюорита в количестве не более 12 масс.%. Это позволит снизить потери благородных и цветных металлов со шлаками в 1.1-5.5 раза.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №18-29-24081\20.

1. A. M. Amdur, S. A. Fedorov, V. V. Yurak. Metals 11 (10), 1-14. (2021).
2. A. Amdur, E. Selivanov, S. Fedorov, V. Pavlov, S. Krasikov. JMMB 57 (2), 209-215 (2021).
3. S.N. Zherebtsov, E.A. Chernyshov. Proceedings of the NSTU 1 (112), 228-235 (2016).

СНИЖЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ЗОЛОТА И ПЛАТИНЫ В ШЛАКЕ ПРИ ПЛАВКЕ СУЛЬФИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Амдур А.М.¹, Федоров С.А.^{1, 2}

¹) Уральский государственный горный университет

²) Институт металлургии УрО РАН

E-mail: saf13d@mail.ru

REDUCTION OF GOLD AND PLATINUM CONTENT INTO SLAG DURING THE MELTING OF SULFIDE MATERIALS

Amdur A.M.¹, Fedorov S.A.^{1, 2}

¹) Ural State Mining University

²) Institute of Metallurgy UrB RAS

Based on the experiments performed, it was shown that slag blowing with an inert gas and the addition of fluorite to the initial charge can reduce the content of gold, platinum and non-ferrous metals in the slag by 1.1-5.5 times during the melting sulfide materials.

При плавлении сульфидных материалов на штейн часть золота и платины переходят в шлак. Это приводит к потерям металлов. Известно [1], что благородные металлы в шлаках находятся в сульфидных каплях. Одной из причин наличия этих капель в шлаке является их флотация газовыми пузырьками вследствие разложения сульфидов и других минералов при нагреве и плавлении исходного материала [2]. Однако, флотация служит и одним из основных механизмов укрупнения дисперсных сульфидных капель: пузырек, пройдя от границы шлак-штейн до поверхности шлака, захватит на своем пути тысячи сульфидных микрокапелек, объединив их в одну крупную (рис. 1).

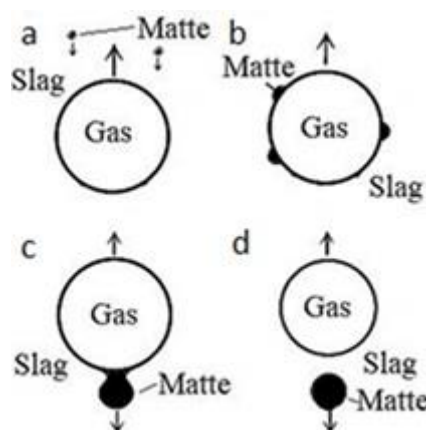


Рис. 1. Схема движения сульфидных капель (Matte) и пузырька (Gas) в шлаке (Slag): а – движение пузырька и капелек навстречу друг к другу; б – собирание пузырьком капелек; в – объединение капелек в одну крупную и ее отрыв от пузырька; д – движение укрупненной капли в сторону штейна и всплытие пузырька.

полония эффективно протекает при $\text{pH} = 2$ (рис. 1 а, б). Альфа-спектр Po-210 на сорбенте CdS-ПЭ (рис. 1в) имел энергетическое разрешение близкое к идеальному (53 кэВ) за счет малой толщины сорбционного слоя. Таким образом, сорбент CdS-ПЭ перспективен для разработки метода анализа полония в природных пробах.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ТОНКОСЛОЙНЫХ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ СУЛЬФИДА КАДМИЯ

Ермолаева В.Д.¹, Семенищев В.С.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург
E-mail: Lera4kaae@yandex.ru

SYNTHESIS AND STUDY OF SORPTION PROPERTIES OF THIN- LAYER SORBENTS BASED ON CADMIUM SULFIDE

Ermolaeva V.D.¹, Semenishchev V.S.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin,
Ekaterinburg

A method for synthesis of cadmium sulfide using for the sorption process has been developed. The concentration of the precipitated component on the films after synthesis was calculated. Sorption of polonium and uranium on these sorbents was evaluated.

Тонкослойные сорбенты (ТС) на плоских носителях используются в практике анализа альфа-излучающих изотопов для совмещения в одну операцию селективного выделения радионуклида и приготовления тонкослойного источника для спектрометрии. Объектом исследования в данной работе являлись тонкие пленки сульфида кадмия, полученные путем химического жидкофазного осаждения на полиэтилен, полиэтилентерефталат и триацетатцеллюлозу. Результат с наибольшим значением CdS был получен на полиэтилене (ПЭ): содержание CdS в сорбенте CdS-ПЭ составило 13,4 мкг/см².

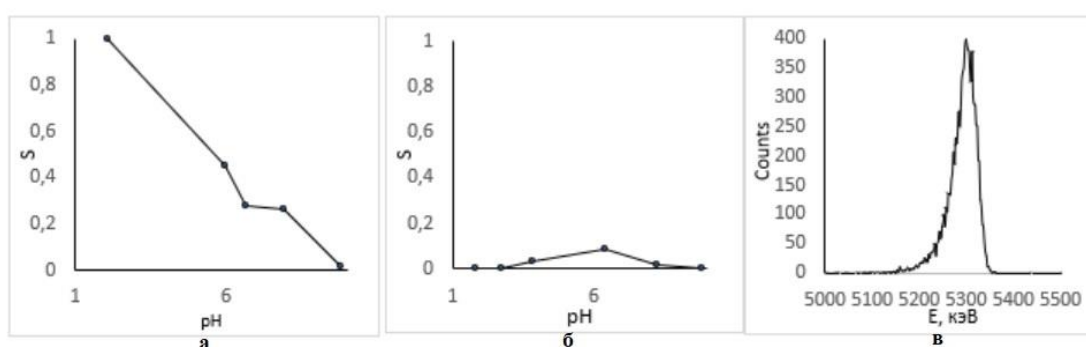


Рис. 1. Зависимость сорбции Po-210 (а) и U-233 (б) от pH и пример альфа-спектра Po-210 (в) на сорбенте CdS-ПЭ

Для сорбента CdS-ПЭ была изучена зависимость сорбции Po-210 и U-233 от pH раствора для системы 20 мл раствора – 4 см² сорбента. Было определено, что сорбция урана незначительна в интервале pH от 1,8 до 9,8, тогда как сорбция

Fig. 1. An effective method for obtaining QD with multiple ZnS shells with pure color radiation (FWHM less than 20 nm, even after coating with 3 monolayers)

Preliminary data of experimental research. Experimental results with a modification of the authors' methodology (1) showed the following: injection of TOP between the stages of the introduction of molecular precursors acts as an activator of successful shell buildup, allows you to build up a layer of more than three, without building up an intermediate layer from CDs; injection of shell precursors of 100 $\mu\text{l}/\text{min}$, allows you to get a high QY value, as well as an exposure of 10 minutes between injections of precursors, etc. It is shown that this is an effective method for obtaining QD with multiple ZnS shells with pure color radiation (FWHM less than 20 nm, even after coating with 3 monolayers), figure 1, precisely controlled radiation and high QY (>50%). The wavelength of radiation λ can be continuously adjusted by simply changing the radiation of nanocrystals by changing the d nuclei and h shells. In addition, the knowledge gained in the course of this study allowed us to better form a proposal for measuring the PV measurement QD at the next stage, it became possible to obtain a synthesis of QD for LED technology with high color saturation.

1. Cuiling Ren, Junjie Hao, Hongli Chen, Kai Wang, Dan Wu, Prepare core–multishell CdSe/ZnS nanocrystals with pure color and controlled emission by tri-n-octylphosphine-assisted method // Applied Surface Science 353 (2015) 480-488.

ADAPT AND MAKE ACCESSIBLE THE TRI-N-OCTYLPHOSPHINE-ASSISTED SILAR METHOD

Eralieva A.A.¹, Ospanova A.K.¹, Abdillaeva A.¹, Kagazbek A.¹, Kainarbay A.Z.¹

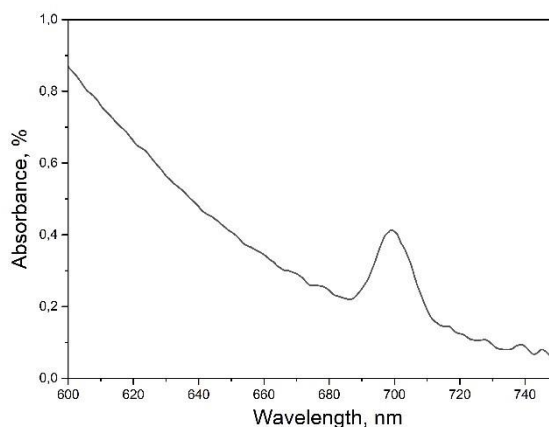
¹) L.N. Gumilyov Eurasian national university
E-mail: aygerime62@gmail.com

To meet the needs of light-emitting equipment and related technology, LEDs, fluorescent solar concentrators, it is necessary to prepare high-quality quantum dots of semiconductors of the core-shell type. We conducted a set of sequential studies, testing existing QD synthesis techniques.

Semiconductor nanocrystals, or QD with a multilayer shell, have great potential. However, their use is severely limited due to the large value of FWHM (determines the purity of the color), the inaccurate controlled wavelength of radiation λ (determines the position of the radiation band) and the decrease in the quantum yield of luminescence QY (determines the brightness of the radiation) as the number of shell layers increases. Thus, there is still a big problem to improve the photoluminescent properties of QD. This provision determines the relevance of the topic of this study. The obtained research results will be used in the production of QLED prototypes.

Research methodology. The most widely used method for performing such work is the SILAR method. However, internal dislocation deformations, shell defects cannot be completely eliminated by this technique. To get a core-shell QD with a high QY, you have to sacrifice FWHM. Thus, the synthesis of core-multi-shell QD with an improved FWHM value is still a big problem. To solve this problem, we conducted a set of sequential studies, testing existing QD synthesis techniques to obtain the desired quality of QD.

Experimental research. In this work, the method (1) based on tri-n-octylphosphine was used to obtain CdSe/3ZnS QD with a narrow FWHM, strictly regulated position of the radiation band, the influence of experimental conditions on the photoluminescent properties of QD with several zinc sulfide shells was investigated.



составе пленок CdPbS обнаруживается только спустя 60 мин от начала процесса. Однако при концентрациях CdCl_2 в диапазоне 0.04 – 0.1 моль/л и длительности синтеза, равного 15 минут, слои достаточно обогащены кадмием, содержание которого варьируется от 5.8 (0.04 моль/л) до 22.4 ат. % (0.1 моль/л). С ростом концентрации хлористого кадмия в реакционной ванне при проведении осаждения в течение 30, 45 и 60 минут наблюдается монотонное увеличение доли кадмия в образцах CdPbS. При равном содержании солей CdCl_2 и PbAc_2 в реакционной ванне установлено максимальное количество кадмия 9.4 и 13.7 ат. %, соответствующие 90 и 120 минут.

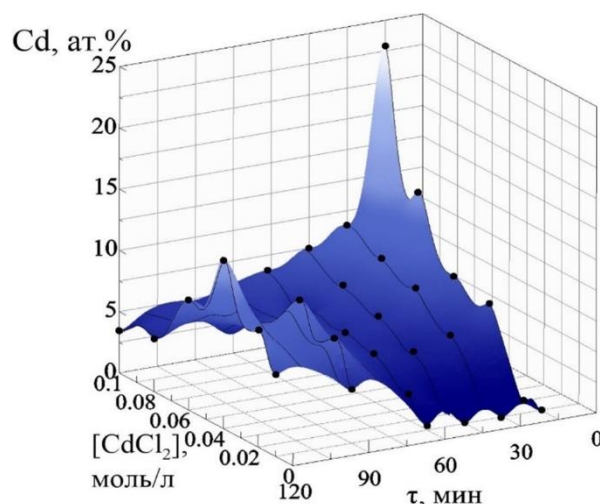


Рис. 1. Зависимость содержания кадмия в трехкомпонентных соединениях CdPbS от концентрации CdCl_2 в реакционной смеси и длительности химического осаждения

Полученные результаты исследования состава слоев CdPbS позволяют сделать заключение о том, что на начальных стадиях синтеза (до 30 минут) и начальной концентрации ионов Cd^{2+} , равной или превышающей концентрацию Pb^{2+} , кадмий более активно входит в состав пленок. При таких же концентрациях спустя 90 и 120 минут сульфид кадмия осаждается в объеме реактора в виде осадка, не закрепляясь на поверхности пленок, вследствие чего содержание кадмия в пленках снижается. Результаты, полученные в приведенном исследовании, позволяют проводить контролируемый синтез полупроводниковых слоев CdPbS с требуемыми характеристиками.

1. Hernandez-Borja J., Vorobiev Y.V., Ramirez-Bon R. Thin film solar cells of CdS/PbS chemically deposited by an ammonia-free process. Sol. Energy Mater. and Sol. Cells. 2011. Vol.95. No.7. P.1882-1888.
2. Ahmada S. M., Kasima S. J., Latif L.A. Effects of thermal annealing on structural and optical properties of nanocrystalline $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ thin films prepared by CBD. Jordan J. of Physics. 2016. Vol.9. No.2. P.113-122.

СОСТАВ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ ПЛЕНОК CdPbS

Селянина А.Д.¹, Дёмина Д.А.¹, Поздин А.В.¹, Маскаева Л.Н.^{1, 2},
Марков В.Ф.^{1, 2}

¹) Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Россия, Екатеринбург

²) Уральский институт ГПС МЧС России, Россия, Екатеринбург
E-mail: dyominadar@mail.ru

COMPOSITION OF CHEMICALLY DEPOSITED CdPbS FILMS

Selyanina A.D.¹, Dyomina D.A.¹, Pozdin A.V.¹, Maskaeva L.N.^{1, 2}, Markov V.F.^{1, 2}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia

In this work, we studied the composition of CdPbS thin films obtained by chemical deposition for 15–120 min and at varying from 0.01 to 0.1 mol/l CdCl₂. At the initial stages of the process (up to 30 minutes), cadmium is actively included in the CdPbS layers.

Пленки твердых растворов в системе CdS - PbS – известные полупроводниковые соединения, нашедшие применение как в опто- и наноэлектронике, так и в сенсорике и гелиоэнергетике [1-2]. Функциональные свойства этих полупроводниковых соединений зависят от соотношения кадмия и свинца в составе пленочных образцов. Одним из перспективных методов синтеза трехкомпонентных слоев CdPbS является химическое осаждение из водных сред, но этот процесс осложнен протеканием двух конкурирующих реакций – образованием CdS и PbS. Еще одной особенностью обсуждаемого процесса является конденсация твердой фазы CdPbS не только на подложке в виде пленки, но и порошкообразного осадка в объеме реакционной смеси. Перераспределение сульфидов свинца и кадмия между осадком и пленкой зависит от состава реакционной ванны и условий химического осаждения. Поэтому представляло интерес исследовать содержание кадмия в пленочном слое CdPbS в зависимости от содержания CdCl₂ в реакционной смеси и длительности химического осаждения.

Трехкомпонентные слои CdPbS получены из реакционных ванн, содержащих фиксированные концентрации PbAc₂ (0.04 моль/л), Na₃Cit (0.35 моль/л), NH₄OH (4.0 моль/л) и N₂H₄CS (0.06 моль/л) при варьировании хлорида кадмия от 0.01 до 0.1 моль/л. Синтез проводили при 353 К в интервале от 15 до 120 мин. Исследование элементного состава осажденных слоев проводили с использованием растровой электронной микроскопии с энергодисперсионным анализом EDX.

Изменение содержания кадмия в составе пленок CdPbS от концентрации соли кадмия в реакционной ванне и длительности процесса химического осаждения демонстрирует рис. 1. При концентрациях 0.01 и 0.02 моль/л CdCl₂ кадмий в

эффективного преобразования солнечной энергии» комитета науки МОН РК за 2020-2022 гг.

1. Synthesis of narrow blue emission gradient ZnSeS quantum dots and their quantum dot light-emitting diode device performance
2. Protocol on synthesis and characterization of copper-doped InP/ZnSe quantum dots as ecofriendly luminescent solar concentrators with high performance and large area.

СИНТЕЗ КТ ДОПИРОВАННЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ

Дуйсенбай Б.А.¹, Дауренбеков Д.Х.¹, Мыктыбаева М.Б.¹, Акжалбекова А.Е.¹

¹ Евразийский Национальный Университет им.Л.Н.Гумилева
E-mail: b.duisenbay@mail.ru

SYNTHESIS OF QDS DOPED WITH RARE-EARTH IONS

Duisenbay B.A.¹, Daurenbekov D.Kh.¹, Myktybayeva M.B.¹, Akzhalbekova A.E.¹

¹ L.N.Gumilev Eurasian National University

The synthesis of AIBVI quantum dots is one of the important problems in science today. As they are very important for the world of microelectronics, because they can bring a big breakthrough in this field. Studying the synthesis as well as testing new synthesis methods is very important.

Для применения квантовых точек из групп AIBVI имеется ряд проблем. Так как квантовый выход люминесценции таких КТ будет изменяться при изменении свойств окружающей среды. Также существенной проблемой является стабильность «ядер» в водных растворах. Нестабильность связана с поверхностными «состояниями», которые выступают в виде безызлучательных центров рекомбинации или же в виде «ловушек» для e-h пар.

Для того, чтобы улучшить состояние солнечной энергетики и сопровождающих их технику, солнечные элементы, необходимо получить качественные КТ с допированными редкоземельными ионами.

Широко известным методом для таких работ является метод синтеза коллоидных КТ в неполярных средах. В таком виде синтеза выделяют три главных этапа: 1) нуклеация; 2) рост зародышей; 3) этап созревания Освальда;

Здесь проблему вызывает именно третий этап. Так как именно в этом этапе большие частицы продолжают расти за счет растворения более мелких частиц. За счет этого наблюдается дефокусировка. Но если реакцию быстро остановить на этом этапе, частицы будут разных размеров. По этой причине на стадии созревания Освальда невозможно получить моодисперсные частицы. Размер оставшихся после полного исчезновения пересыщения частиц может достигать микрометров, поэтому нанокристаллы с хорошим распределением по размерам можно получить лишь при взрывной нуклеации и остановке реакции быстро после ее окончания и до начала созревания Освальда. Поэтому это является проблемой для получения моодисперсных КТ.

Для решения данной проблемы, мы рассчитываем провести последовательно координированный комплекс исследований.

Работа выполнена в рамках научного проекта IRN AP08856436 «Синтез и исследование люминесцентных квантовых точек допированных редкоземельными ионами для

алюминия, активной фазой – оксиды кобальта (4,31 % масс.) и молибдена (20,52 % масс.). Количество десорбируемого аммиака по результатам ТПД – 802 мкмоль/г.

На основании анализа продуктов реакции, для превращений системы «н-декан – толуол» на катализаторе наиболее выраженными были реакции изомеризации, крекинга и образования ароматических углеводородов.

Для превращений системы «декалин – толуол» на катализаторе гидроочистки наиболее выраженными были реакции дегидрирования с образованием нафталина и его производных.

Были рассчитаны константы скорости реакции образования нафталина в системе «декалин – толуол». По константам скорости реакции образования нафталина при различных температурах на исследуемом катализаторе была рассчитана энергия активации, которая составила 136,1 кДж.

Нафтеновые углеводороды могут выступать в роли донора водорода и создавать парциальное давление водорода в зоне реакций, что подавляет реакции крекинга, но с другой стороны становится возможным прохождение полезной реакции гидродесульфуризации при наличии серы в сырье.

Возможность исследуемого катализатора в процессе крекинга нефтяных остатков в присутствии донора водорода способствовать реакциям переноса водорода при подавлении реакций коксообразования с увеличением селективности процесса, делает вариант использования данного катализатора в процессе термического крекинга с суспендированным слоем катализатора технологически перспективным.

1. Dehkissia S., Larachi F., Chornet E. Catalytic (Mo) upgrading of Athabasca bitumen vacuum bottoms via two-step hydrocracking and enhancement of Mo–heavy oil interaction. *Fuel*. 2004. № 83. P. 1323-1331.
2. Хаджиев С.Н. Наногетерогенный катализ новый сектор нанотехнологий в химии и нефтехимии (обзор). *Нефтехимия*. 2011. №1. С. 3-16.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕВРАЩЕНИЙ МОДЕЛЬНОГО НЕФТЯНОГО СЫРЬЯ НА ОТРАБОТАННОМ КАТАЛИЗАТОРЕ ГИДРООЧИСТКИ

Докучаев И. С.¹, Максимов Н. М.¹

¹ Самарский государственный технический университет
E-mail: e2.71@mail.ru

INVESTIGATION OF TRANSFORMATIONS OF MODEL PETROLEUM RAW MATERIALS ON A SPENT HYDROTREATING CATALYST

Dokuchaev I. S.¹, Maximov N. M.¹

¹ Samara State Technical University

Experiments were carried out to investigate the physicochemical properties and catalytic activity of the regenerated spent catalyst on model mixtures and conclusions were drawn about the prospects of using catalysts of this type in the process of thermal cracking in the presence of a catalyst.

Сокращение запасов традиционных легких нефтей все больше подталкивает нефтяную промышленность к переработке более тяжелых нефтей и остатков. Актуально создание альтернативных дорогостоящим процессам каталитического крекинга и гидрокрекинга технологий по переработке вакуумного газойля и нефтяных остатков [1].

Одним из перспективных направлений переработки нефтяных остатков являются термокatalитические процессы с использованием высокодисперсных систем. Главной задачей технологов является подбор оптимального катализатора, который бы способствовал благоприятному протеканию реакции крекинга, при этом он должен быть относительно дешевым и иметь большую сырьевую базу [2].

В данной работе было предложено использование отработанного алюмокобальтмолибденового катализатора гидроочистки в процессе термического крекинга с суспендированным слоем катализатора.

Целью исследований является изучение роли данного образца катализатора и доноров водорода в процессе крекинга.

В качестве реактивов для модельных соединений использовались следующие углеводороды: н-додекан (х.ч.), декалин (х.ч.), изопропилбензол (х.ч.), толуол (х.ч.).

Испытания проводились на установке с микропроточным реактором под давлением 1,6 МПа в интервале температур 400-440 °С, объемная скорость подачи сырья в интервале 1-3 ч⁻¹, а кратность циркуляции водорода составляла 300 нм³/м³. В реактор загружали отработанный катализатор гидроочистки после прокаливания при 470 °С в количестве 4,0 см³, носителем в котором является оксид

°С в течение 3 часов. В результате был наработан продуктивный раствор с рН 0,21 и содержанием урана 245 мг/л.

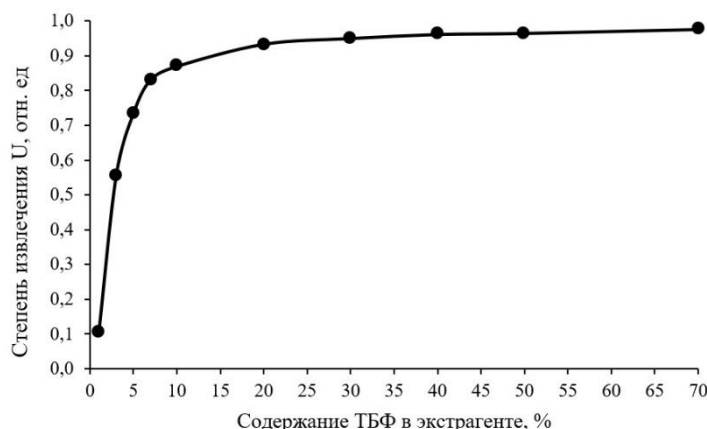


Рис. 1. Зависимость степени извлечения урана от содержания ТБФ в экстракционной смеси

Экстракция урана из полученного продуктивного раствора вели смесью ТБФ и инертного растворителя Shellsol D60, варьируя долю трибутилфосфата в экстракционной смеси в интервале от 1% до 70%. Соотношение органической и водной фаз составило 1:1. Время контакта фаз при постоянном перемешивании – 15 мин. По окончании эксперимента фазы разделяли и анализировали рафинаты на содержание урана методом ICP-AES. На рис. 1 приведена зависимость степени извлечения урана из продуктивного раствора от содержания ТБФ в экстракционной смеси. Применение экстракционной смеси 10% ТБФ + 90% Shellsol D60 позволяет извлечь уран из азотнокислого продуктивного раствора на 87%. При этом концентрация урана в органической фазе составила 215 мг/л. Дальнейшее увеличение содержания ТБФ нецелесообразно, так как приводит к незначительному увеличению как степени извлечения урана, так и концентрации металла в органической фазе.

Таким образом, азотнокислое выщелачивание и последующая экстракция урана ТБФ являются эффективным способом переработки шламов конверсионного производства.

1. Тураев Н.С., Жерин И.И. Химия и технология урана: Учебное пособие для вузов. – Москва: ЦНИИАТОМИНФОРМ, 2005. – 407 с.

ПЕРЕРАБОТКА УРАНСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ КОНВЕРСИОННОГО ПРОИЗВОДСТВА МЕТОДОМ ЭКСТРАКЦИИ

Демидов Р.М.¹, Титова С.М.¹, Наливайко К.А.¹, Скрипченко С.Ю.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: pomazaha@yandex.ru

RECYCLING OF URANIUM-CONTAINING WASTES FROM CONVERSION PRODUCTION BY EXTRACTION METHOD

Demidov R.M.¹, Titova S.M.¹, Nalivaiko K.A.¹, Skripchenko S.Yu.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The way to recycle uranium-containing wastes from conversion production was found during presented work. This method included uranium leach by nitric acid solutions from sludge at the first stage and the uranium extraction from pregnant solution by 10% TBP + 90% Shellsol D 90 at the second stage.

Тенденция перехода к «зеленой» энергетике прослеживается по всему миру. Все больше стран отдают предпочтение добыче электроэнергии путем использования АЭС. Основным топливом для реакторов является уран-235, и в настоящее время месторождения природного урана понемногу исчерпывают себя. В то же время техногенные месторождения элемента становятся если не достаточным, то хотя бы экономически выгодным источником урана-235 (содержание ~0,15 мас. %), и проблема извлечения его из шламов и прочих отходов производства стоит как никогда остро.

Существует еще одна проблема – радиоактивные отходы хранятся на поверхности, и с течением времени уран и продукты его распада могут попасть в грунтовые воды, что может вызвать радиационное отравление окружающей среды [1]. Дренажи и укрепления хвостохранилищ не решают проблему хранения отходов в полной мере, и самым эффективным методом остается удаление отходов с поверхности путем их переработки методами гидрометаллургии.

Комбинирование таких методов, как выщелачивание и экстракция, позволяет извлечь целевой компонент из отходов с необходимой степенью очистки. Обычно в качестве выщелачивающего агента применяют серную кислоту либо карбонатные растворы, однако, в представленной работе для извлечения урана из шлама была использована азотная кислота. Полученные азотнокислые продуктивные растворы затем направляли на переработку методом жидкостной экстракции с применением нейтрального экстрагента трибутилфосфата (ТБФ).

На первом этапе осуществляли выщелачивание урана из шлама следующим образом. Навеску шлама массой 500 г приводили в контакт с раствором азотной кислоты с массовой концентрацией 150 г/л. Выщелачивание проводилось при 80

Chemistry and Technology, M. Gaune-Escard and G.M. Haarberg, Editors, John Wiley & Sons Inc., Hoboken, 2014, p. 257-281.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ИОНОВ ВАНАДИЯ В ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВАХ МЕТОДАМИ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ

Чернышов М.В.¹, Ребрин О.И.¹, Половов И.Б.¹

¹) Кафедра РМиН, ФТИ, УрФУ
E-mail: mvchernyshov@gmail.com

STUDY OF THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF VANADIUM IONS IN CHLORIDE MELTS USING VOLTAMMETRY METHODS

Chernyshov M.V.¹, Rebrin O.I.¹, Polovov I.B.¹

¹) Department of Rare Metals and Nanomaterials, Ural Federal University (Russia)

The electrode processes involving vanadium species were studied at 690-860 oC in NaCl-KCl-based melts employing various electrochemical methods. Analysis of the red-ox processes in chloride melts showed that V(II) and V(III) complex chloride ions are stable in these media.

Электродные реакции с участием ионов ванадия были изучены в расплавах на основе NaCl-KCl с использованием различных электрохимических методов в широком диапазоне температур и концентраций.

Анодное растворения металлического ванадия при плотностях тока менее 1 А/см² приводит к образованию ионов ванадия (II), кинетика реакции контролируется диффузией образующихся продуктов реакции. При более высоких плотностях тока анодный процесс сопровождается различными видами солевой пассивации. Комплексы V (II) могут обратимо окисляться на стеклоуглеродном аноде до V (III). Эта реакция также контролируется массопереносом.

Катодное восстановление ванадия в расплавах VCl₃-NaCl-KCl состоит из двух этапов: одноэлектронного восстановления $V^{3+} \rightarrow V^{2+}$ и двухэлектронного процесса $V^{2+} \rightarrow V$. При постоянно приложенном токе обе стадии диффузионно-контролируемы. В ходе вольтамперометрических измерений механизм электродных реакций остается неизменным при скоростях поляризации ниже 200 мВ/с. Коэффициенты диффузии ионов V (II) и V (III) определяли по результатам измерений циклических вольтамперограмм. Также было установлено, что вольфрам реагирует с ионами V (III) и, следовательно, не может быть использован в качестве материала электрода для изучения электрохимической реакции $V^{3+} \leftrightarrow V^{2+}$.

Катодное восстановление ванадия в расплавах VCl₂-NaCl-KCl протекает в одну двухэлектронную стадию, контролируемую массопереносом. Было показано, что при высоких катодных плотностях тока образование щелочного металла может повлиять на вольтамперометрические измерения.[1]

1. I. B. Polovov, M. E. Tray, M. V. Chernyshov, V. A. Volkovich, B. D. Vasin, O. I. Rebrin, "Electrode processes in vanadium-containing chloride melts", in Molten Salts

превращений парамагнетик – антиферромагнетик (ферримагнетик) редуцируются с ростом содержания ионов европия и принимают значения 78.7, 71.5, 50.5 К. Подобная тенденция обусловлена снижением роли ферромагнитного двойного обмена в парах Mn^{3+} - Mn^{4+} с ростом x . Следует отметить, что исходное соединение EuMnO_3 демонстрирует несоизмеримое антиферромагнитное упорядочение спинов Mn при $T_N \approx 53$ К, которое сопровождается переходом в антиферромагнитное упорядочение А-типа при $T_1 \approx 48$ К [2]. Температурные зависимости намагниченности в FC и ZFC модах в соединении $\text{Eu}_{0.94}\text{Mn}_{1.06}\text{O}_3$ демонстрирует интересное и необычное поведение, связанное с инверсией намагниченности при низких температурах. Различные сценарии подобного явления анализируются в обзорной работе [3].

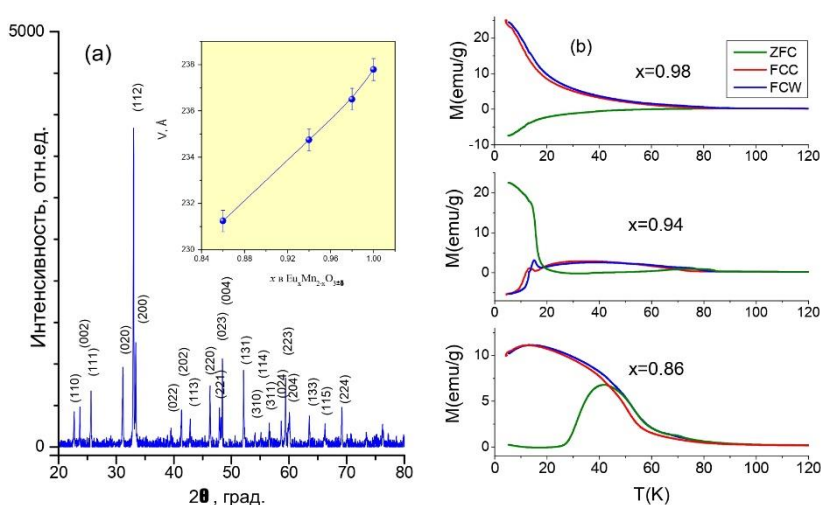


Рис. 1. Дифрактограмма EuMnO_3 и концентрационная зависимость объема элементарной ячейки от x в $\text{Eu}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ (a); температурные зависимости намагниченности в ZFC, FCC, FCW модах во внешнем магнитном поле $M_{0H}=1$ Т (b).

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий по теме 0369-2019-0001 с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

1. О.М. Федорова, В.Ф. Балакирев, Ю.В. Голиков, Неорган. материалы. Т. 43. № 9. С. 1109-1112. (2007).
2. A.A. Mukhin, V.Yu. Ivanov, V.D. Travkin, A.S. Prokhorov, A.M. Balbashov, J. Hemberger, A. Loidl. J. Magn. Magn. Mater. V. 272–276, 96-97 (2004).
3. A. Kumar, S.M. Yusuf. Physics Reports, V. 556. P. 1-34. (2015).

КАТИОННАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{Eu}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$

Черепанова Л.А.¹, Эстемирова С.Х.^{1,2}, Митрофанов В.Я.^{1,2}, Упоров С.А.¹

¹) Институт металлургии Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: freefly88@mail.ru

CATION NONSTICHIOMETRY, CRYSTAL STRUCTURE, AND MAGNETIC PROPERTIES OF $\text{Eu}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$

Cherepanova L.A.¹, Estemirova S.Kh.^{1,2}, Mitrofanov V.Ya.^{1,2}, Uporov S.A.¹

¹) Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

²) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The features of the formation of crystalline and magnetic subsystems in $\text{Eu}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ manganese were studied by X-ray diffraction and magnetometry. The nature of the magnetic ordering has been established, the temperatures of magnetic phase transitions have been determined as a function of the Eu/Mn.

Наличие протяженных областей гомогенности по катионам в составах LnMnO_3 объясняется высокой растворимостью марганца, как в перовскитоподобных, так и в гексагональных манганитах [1]. Причиной этого может быть образование ионов марганца с различными степенями окисления по реакции: $2\text{Mn}^{3+} = \text{Mn}^{2+} + \text{Mn}^{4+}$, и последующее заселение несвойственных им позиций Ln. Магнитная подсистема таких твердых растворов оказывается чувствительной не только к наличию разновалентных ионов Mn, но и к их концентрации.

Однофазные образцы $\text{Eu}_x\text{Mn}_{2-x}\text{O}_3$ ($x=0.00, 0.98, 0.94, 0.86$) были синтезированы по керамической технологии при $T=1300^\circ\text{C}$ из оксидов Eu_2O_3 и Mn_2O_3 . Рентгеноструктурный анализ показал (рис. 1а), что с увеличением концентрации марганца объем элементарной ячейки (V) уменьшается. Закономерное уменьшение V может быть объяснено на основе правила Вегарда с учетом реакции диспропорционирования марганца следующим образом. Во-первых, в позиции Eu встраиваются ионы Mn^{2+} , эффективный радиус которого меньше иона Eu^{3+} , следовательно, средний радиус катиона в позиции Eu понижается. Во-вторых, узлы марганцевой подрешетки содержат не только Mn^{3+} , но и Mn^{4+} , что также приводит к понижению среднего радиуса катиона в позиции Mn.

Магнитные измерения соединений $\text{Eu}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ ($x=0.98, 0.94, 0.86$) были выполнены в интервале температур 5-300 К во внешнем магнитном поле $M_0H=0.1$ Т. Температуры магнитных фазовых превращений определялись из экстремумов dM/dT или $d(1/x)/dT$, где x - магнитная восприимчивость соединений в магнитном поле $M_0H=0.1$ Т. Соответствующие значения температур магнитных

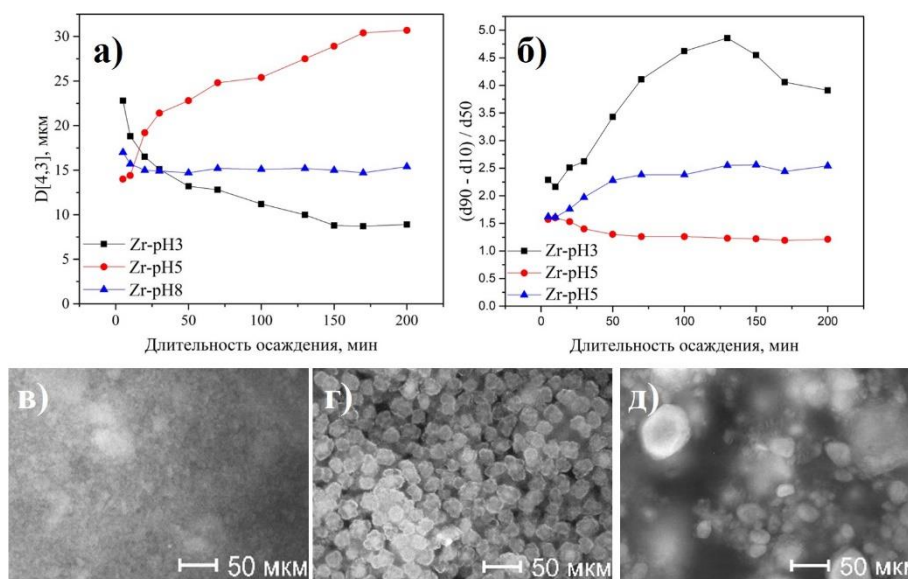


Рис. 1. Изменение среднего диаметра частиц в ходе КДО – а); изменение дисперсии размеров в ходе КДО – б); оптические изображения частиц на финальном этапе КДО для образцов Zr-pH3, Zr-pH5 и Zr-pH8 – в), г) и д) соответственно.

На рисунке 1-а показано, что для образца Zr-pH3 характерно постоянное снижение среднего диаметра частиц, для образца Zr-pH5 наблюдается постоянное увеличение среднего диаметра частиц, тогда как для образца Zr-pH8 изменение среднего диаметра практически не происходит. Для образца Zr-pH5 характерно получение однородных узкодисперсных сфероидальных частиц, как видно на рисунке 1-б, г. С начальных минут осаждения происходит формирования первичных агрегатов, которые увеличиваются в размерах за счет послойной агрегации. Образцы, полученные при значениях pH=3 и 8 характеризуются образованием частиц с широким распределением размеров, которые отличаются неоднородной формой (рис. 1-б, в, д). Для этих образцов наблюдается увеличение дисперсии размеров на всем протяжении осаждения. В работе [4] было показано влияние значения pH на свойства частиц гидроксида циркония в ходе КДО из нитратного раствора. В рамках этой работы показано, что использование в качестве прекурсора солянокислого раствора циркония существенно не оказывает влияние на свойства частиц. Таким образом, при формировании частиц гидроксида циркония методом КДО самым важным параметром в первую очередь является значение pH осаждения.

1. H. Muhr, R. David, J. Villiermaux, P.H. Jezequel, Chemical Engineering Science 50(2), 345–355, (1995).
2. Gareth R Williams, Dermot O'Hare, Journal of Materials Chemistry 16, 3065–3074 (2006).
3. D.K. Aleshin, M.A. Mashkovtsev, Y.A. Kuznetsova, V.N. Rychkov, A.F. Zatsepin, E.V. Gordeev, Journal of Alloys and Compounds 805, 258–266, (2019).
4. S. Buinachev, M. Mashkovtsev, N. Zhirenkina, D. Aleshin, A. Dankova, International Journal of Hydrogen Energy 46(32), 16878–16887 (2021).

ВЛИЯНИЕ ЗНАЧЕНИЯ pH НА СВОЙСТВА ГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ

Буйначев С.В.¹, Поливода Д.О.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина
E-mail: iammaggot55@yandex.ru

INFLUENCE OF THE pH VALUE ON THE PROPERTIES OF ZIRCONIUM HYDROXIDE DURING CONTROLLED DOUBLE-JET PRECIPITATION FROM CHLORIDE SOLUTIONS

Buinachev S.V.¹, Polivoda D.O.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

In this work, precipitates of zirconium hydroxide were obtained from zirconium chloride by the controlled double-jet precipitation method. A comparison was made with precipitation from nitric acid solutions at constant pH values.

Метод контролируемого двухструйного осаждения (КДО) нашел широкое применение для синтеза кристаллических осадков с контролируемыми свойствами. Метод нашел применение для производства галогенидов серебра [1], комплексных и смешанных гидроксидов [2], а также слоистых гидроксонитратов РЗЭ [3]. В основе метода - контролируемое смешение реагентов при постоянном значении pH и концентрации компонентов в реакционной зоне. За счет этого возможно контролировать распределение размеров частиц, форму, фазовый состав, что позволяет получать материалы с различными свойствами. Целью данной работы является исследование влияния значения pH на свойства частиц гидроксида циркония при контролируемом двухструйном осаждении из хлоридных растворов.

Осаждение проводили в 3-х литровом реакторе, в качестве прекурсора использовали раствор хлорида цирконила с концентрацией 1 моль/л. Дозирование раствора осуществляли перистальтическим насосом со скоростью 5 мл/мин. Перемешивание осуществляли верхнеприводной мешалкой, в качестве осадителя использовали 10% аммиак. Осаждение проводили при постоянных значениях pH=3, 5 и 8 (далее образцы Zr-pH3, Zr-pH5 и Zr-pH8 соответственно). В ходе осаждения отбирали пробы суспензии для анализа гранулометрического состава и формы частиц методами лазерной дифракции и оптической микроскопией соответственно.

управлении проектами является одним из основных сценариев развития для компаний, стремящихся обеспечить свою стабильность и инвестиционную привлекательность в будущем.

Научная проблема исследования заключается в разработке методологии принятия решений и координации деятельности в области реализации концепции устойчивого развития в компании с использованием комплексной оценки социально-экологической устойчивости проектов и процессов управления проектами.

В рамках изучения проведенного исследования были изучены технологии производства водорода. Проведен сравнительный анализ по критериям: источника энергии, КПД (%) процесса, температуры, стоимости. Наибольшей стоимостью отмечен децентрализованный электролиз получения водорода, наименьшей стоимостью – централизованное реформирование газа. Доступность метода конверсии природного газа показала применимость в разных отраслях промышленности.

Изученные технологии в ходе исследования:

1) SMR (Steam methane reforming) – паровой риформинг, когда чистый водяной пар используется как окислитель. Реакция требует введение тепла («эндотермический»);

2) HTCR (Steam methane reforming) – конвекционный риформинг, происходит с высокой степенью утилизации тепла за счёт особой конструкции реактора;

3) POX (Partial oxidation) – частичное окисление, в этом методе используется кислород или воздух. В процессе выделяется тепло («экзотермический»).

1. Акимова Т.А.. Экономика устойчивого развития, ЗАО «Издательство «Экономика» (2009).

ВОДОРОДНЫЕ ИНИЦИАТИВЫ В КОНТЕКСТЕ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ

Бичевина Е.А.¹

¹) Студент, Тюменский Индустриальный университет
E-mail: katyabichevina@mail.ru

HYDROGEN INITIATIVES IN THE CONTEXT OF SUSTAINABLE DEVELOPMENT OF THE OIL AND GAS INDUSTRY

Bichevina E.A.¹

¹) student, Tyumen Industrial University

The concept of sustainable development emerged from the combination of three main elements: economic, social and environmental. This concept is a process of development, where the consumption of the planet's resources, the direction of scientific and technological developments and investment changes.

Увеличение интереса к всемирным экологическим и гуманитарным проблемам со стороны человечества и аппарата управления способствует расширению контроля за деятельностью компаний и предприятий, значит критерии оценки эффективности в рассматриваемой области с каждым годом начнут принимать более жесткие рамки [1].

Проведенные исследования крупнейших банков, таких как (Морган Стэнли, Уэлс Фарго, TDBank), рейтинговых агентств в области рационального инвестирования подтверждают особую связь доходов производств и компаний и их инициативность в рамках устойчивого развития с акцентом на экономические и экологические практики.

Так исследование SAM AlfafromSustainability указывает на то, что в течение 2011 г. компании, наиболее ориентированные на устойчивое развитие, превосходили компании, уделяющие меньше внимания факторам устойчивого развития, в том числе и по финансовым показателям.

Таким образом, социальные и экологические аспекты деятельности, а также практика корпоративного управления влияют на рыночную стоимость торгующихся на бирже компаний.

Популяризируют концепцию устойчивого развития, принятые национальные стандарты и руководства в данной области, а также рост количества публикаций отчетов об устойчивом развитии, которые с 2012 г. стали обязательными для российских государственных компаний.

Осознавая необходимость перехода к новой концепции управления, компании испытывают недостаток инструментов и методов реализации концепции устойчивого развития на практике. В силу того, что основные изменения в компаниях реализуются посредством проектов, учет принципов устойчивого развития в

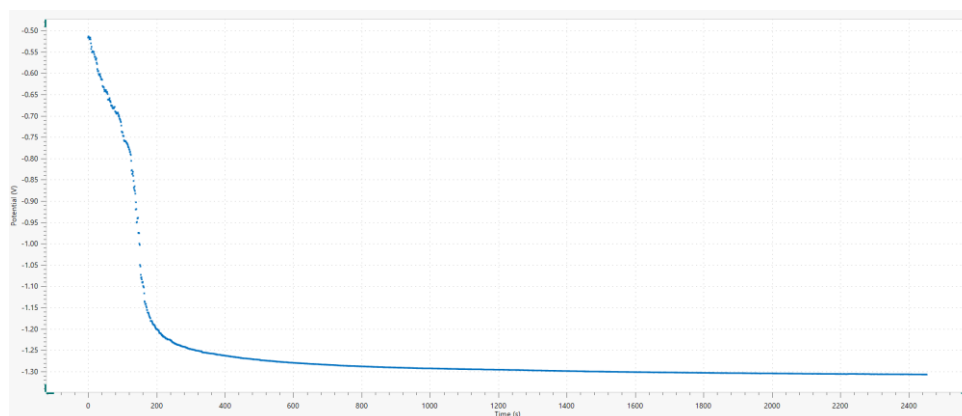


Рис. 1. Зависимость электродного потенциала между хлорным и серебряным электродами, полученная при температуре 823 К в расплаве NaCl–KCl–CsCl (AgCl – 5%).

По завершении эксперимента производили отбор пробы электролита для определения содержания ионов серебра.

1. Labrie R.J., Lamb V. A. A porcelain reference electrode conductive to sodium ions for use in molten salt systems. - J. Electrochem. Soc., 1959, 106, p. 895-899.
2. Yang L., Hudson R.G. Some investigations of the Ag/AgCl in LiCl-KCl eutectic reference electrode - J. Electrochem. Soc., 1959, 106, № 11, p. 986-990.
3. Littlewood R. A reference electrode for electrochemical studies in fused alkali chlorides at high temperatures. - Electrochim. Acta, 1961, 3, p. 270-278.
4. Shirai O., Nagai T., Uehara A., Yamana H. Electrochemical properties of the Ag⁺/Ag and other reference electrodes in the LiCl-KCl eutectic melts. - J. Alloys Comp., 2008, 456, p. 498-502.
5. Волкович В.А., Данилов Д.А., Васин Б.Д., Хохряков А.А. Спектроскопическое исследование рения в расплавах галогенидов щелочных металлов. – Расплавы, 2006, No 4, с. 21–28

ЭЛЕКТРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ СЕРЕБРА В ЭВТЕКТИЧЕСКОМ РАСПЛАВЕ NaCl–KCl–CsCl

Бессонова Д.А.¹, Иванов А.Б.¹, Волкович В.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: chivasch@yandex.ru

ELECTRODE POTENTIALS OF SILVER IN NaCl–KCl–CsCl EUTECTIC MELT

Bessonova D.A.¹, Ivanov A.B.¹, Volkovich V.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The electromotive force measurements method was applied for determining electrode potentials of silver in the ternary NaCl–KCl–CsCl eutectic mixture based melts at 823–1073 K.

В ранних работах [1–4] рассмотрено влияние температуры на стандартный электродный потенциал серебра в хлоридных расплавах. В качестве электролитов были использованы смеси солей LiCl–KCl, NaCl–KCl, NaCl.

В данной работе были определены электродные потенциалы серебра в расплавах на основе тройной эвтектической смеси NaCl–KCl–CsCl (30–24.5–45.5 мол. %). Измерения выполняли с методом потенциометрии нулевого тока с использованием гальванического элемента, состоящего из хлорного и серебряного электродов:



ЭДС гальванического элемента определяли в интервале температур от 823 до 1073 К. Концентрацию серебра в расплаве варьировали от 0.1 до 4.0 мас. %. Для измерений использовали потенциостат-гальваностат AUTOLAB PGSTAT 12/30/302.

Электролит на основе тройной эвтектической смеси NaCl–KCl–CsCl (30–24.5–45.5 мол. %) находился в тигле из стеклоуглерода. Методика подготовки исходных солей описана ранее [5]. Тигель с электролитом находился в кварцевой ячейке, заполненной высокочистым аргонном (марки ВЧ, чистотой 99.998%). Серебряным электродом служила пластинка из серебра (99.95%), закреплённая на молибденовом токоподводе.

На рисунке 1 приведен пример зависимости электродного потенциала.

равновесий в системе « $\text{PbAc}_2 - \text{MnCl}_2 - \text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2 - \text{Na}_3\text{Cit} - \text{N}_2\text{H}_4\text{CS}$ » нами показано, что при стандартной температуре 298 К невозможно получить твердую фазу, содержащую одновременно сульфиды свинца и марганца. На предварительно обезжиренной ситалловой подложке из реакционной смеси, содержащей постоянные концентрации солей ацетата свинца и цитрата натрия, водного раствора аммиака, тиомочевины при варьировании хлорида марганца от 0.05 до 0.15 моль/л. проведено химическое осаждение PbS при температуре 353 К. Для изучения морфологии синтезированных соединений были проведены электронно-микроскопические исследования (рис.1), а их элементный состав определен с привлечением энергодисперсионного анализа. Поверхность сульфида свинца, легированного марганцем, имеет однородную структуру, состоящую из хорошо ограненных кристаллитов, размер которых несущественно отличается, лишь незначительно меняется их форма. Проведенный локальный элементный анализ показал, что в легированной пленке PbS наблюдается незначительное отклонение от стехиометрии при содержании 50.6 ± 5.1 ат% свинца и 49.4 ± 5.0 ат% серы, а концентрация легирующего элемента (Mn) не превышает 0.3 ат%.

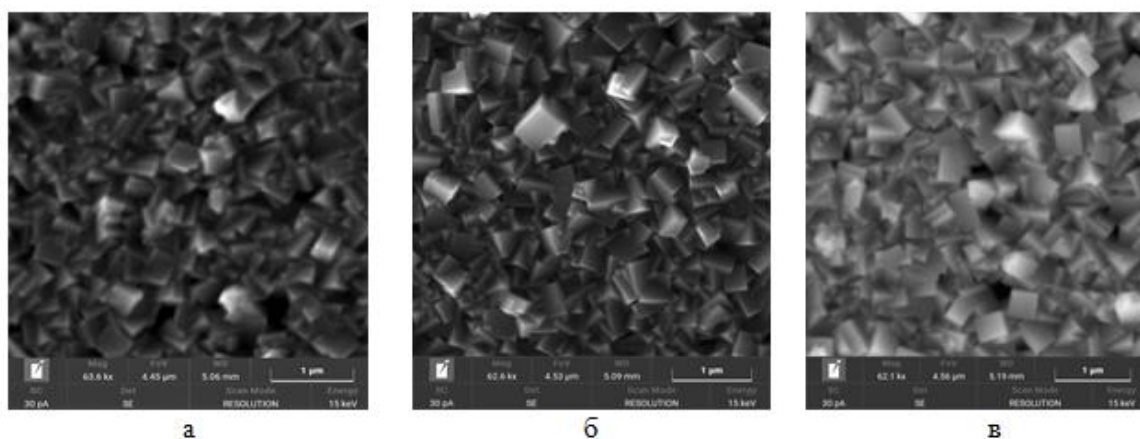


Рис. 1. Микроизображения пленок PbS (Mn), полученных химическим осаждением из реакционной смеси, содержащей хлорид марганца MnCl_2 , моль/л: 0.05 (а), 0.1 (б), 0.15 (в)

1. Марков В.Ф., Маскаева Л.Н., Иванов П.Н. Гидрохимическое осаждение пленок сульфидов металлов: моделирование и эксперимент. Екатеринбург: УрО РАН (2006).

ЛЕГИРОВАНИЕ ПЛЕНОК СУЛЬФИДА СВИНЦА МАРГАНЦЕМ Mn^{2+}

Бельцева А.В.¹, Маскаева Л.Н.^{1,2}, Марков В.Ф.^{1,2}, Поздин А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский институт ГПС МЧС России, Россия, Екатеринбург
E-mail: avbeltseva@mail.ru

DOPING OF LEAD SULFIDE FILMS WITH MANGANESE Mn^{2+}

Beltseva A.V.¹, Maskaeva L.N.^{1,2}, Markov V. F.^{1,2}, Pozdin A.V.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

²) Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Yekaterinburg, Russia

An analysis of the literature showed that lead sulfide has found great application in technology due to its unique properties. Doping with manganese PbS during chemical deposition ensures the production of films formed from more uniform, well-faceted crystallites with a dopant content of 0.3 at.%.

Тонкопленочный сульфид свинца имеет сочетание электрофизических и фотоэлектрических характеристик, используется в фотоприемниках, солнечных батареях, химических сенсорах. Фоточувствительные пленки сульфида свинца получают с методами: термического вакуумного испарения, молекулярной эпитаксии, сплавления свинца и серы, химического осаждения из водных растворов. Технологически простым и легко управляемым является химическое осаждение из водных растворов. Обеспечение получения требуемых фотоэлектрических свойств пленок сульфида свинца идет через введение в раствор оксидантов или других кислородсодержащих соединений, а также использование различных допантов в виде солей металлов и оксидов. Добавка легирующей примеси в реакционный состав вносит изменения фоточувствительных свойств чистого сульфида свинца и изменение спектрального диапазона. Легирующая добавка марганца влияет на фотолюминесценцию, температурную зависимость фотолюминесценции и магнитных свойств. Включение Mn^{2+} приводит к сглаживанию пика излучения фотолюминесценции, делая излучение фотолюминесценции настраиваемым в диапазоне длин волн ближнего ИК-диапазона (850-1200 нм) и свидетельствуя об образовании легированных наночастиц $(PbMn)S$. Легирование ионами Mn^{2+} представляет огромный интерес, поскольку в литературных источниках недостаточно сведений о свойствах сульфида свинца, легированного ионами марганца. Средний размер кристаллов сульфида свинца уменьшается с увеличением концентрации марганца примерно от 21 до 11 нм [1]. Эту тенденцию связывают с заменой ионов свинца с большим радиусом (0.126 нм) на ионы Mn^{2+} с меньшим радиусом (0.091 нм) и образованием твердых растворов на основе сульфидов свинца и марганца. Термодинамическим анализом ионных

паузой 5 сек. Оценены изменения структуры, морфологии, размера частиц, произошедшие под действием высокоэнергетического размолла.

Установлено, что высокоэнергетический размол значительно улучшил способность диоксида титана удалять As(III) из водных растворов, вероятно, в первую очередь по причине увеличения удельной площади поверхности. Так, при pH = 3 степень сорбции As(III) – 19.5%, а после 8 часов размолла она составила более 90 %. Максимальная адсорбция As(III) наблюдается при pH = 2 – 3. На основании сопоставления зависимостей сорбции от pH и диаграмм состояния мышьяка в водных растворах можно предположить, что без освещения As(III) предварительно окисляется растворенным кислородом и сорбируется в виде As(V) (в виде иона H_2AsO_4^-). Под действием освещения жестким УФ сорбция As(III) на размолотом диоксиде титана становится еще более полной (более 99 % при pH = 2 у образцов, размолотых в течение 8 часов).

Исследование поддержано проектом РНФ 21-73-20039.

1. Rajakovic B. L., Rajakovic-Ognjanovic V. Arsenic in Water: Determination and Removal. In book: Arsenic - Analytical and Toxicological Studies. Chapter 2. (2018).
2. Guan X., Du J., Meng X.et. al. Application of titanium dioxide in arsenic removal from water: A review // Journal of Hazardous Materials. V. 215-216. P.1-16. (2012).

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЙ РУТИЛ И ЕГО СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ As(III)

Белозерова А.А.¹, Печищева Н. В.¹, Валеева А.А.², Сушникова А.А.¹,
Петрова С.А.¹, Шуняев К.Ю.¹, Ремпель А.А.¹

¹) Института металлургии Уральского отделения РАН

²) Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН

E-mail: aa_belozerova@mail.ru

As(III) SORPTION ON NANOSTRUCTURED RUTILE, PREPARED BY HIGH-ENERGY MILLING

Belozerova A.A.¹, Pechishcheva N.V.¹, Valeeva A.A.², Sushnikova, A. A.¹,
Petrova S.A.¹, Shunyaev K.Yu.¹, Rempel A.A.¹

¹) Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

²) Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

In this work, we studied the sorption properties of nanostructured TiO₂ of rutile modification before and after high-energy milling with respect to As(III) ions without irradiation and under the action of UV radiation.

Мышьяк является опасным загрязнителем окружающей среды, обладающим канцерогенным действием. В зависимости от степени окисления мышьяк проявляет различную токсичность. Наиболее токсичными являются неорганические соединения мышьяка, где он проявляет степень окисления +3 [1].

Одним из эффективных и доступных способов очистки водных растворов от ионов As(III) на сегодняшний день является сорбция. Диоксид титана - сорбент, который нашел широкое применение для очистки водных растворов от As(III), поскольку отличается химической стабильностью, низкой стоимостью и безопасностью для окружающей среды, а также способностью действовать как фотосорбент при облучении ультрафиолетом (УФ) или видимым светом [2].

Одним из доступных методов получения наноструктурированного TiO₂ является высокоэнергетический размол крупнокристаллического диоксида титана.

В данной работе были изучены сорбционные свойства наноструктурированного TiO₂ модификации рутил (ООО «Компонент-реактив») до и после высокоэнергетического размола по отношению к ионам As(III) без освещения и под действием УФ-излучения.

Высокоэнергетический размол диоксида титана проведен в планетарной шаровой мельнице Retsch PM 200 с использованием стаканов и шаров для размола из высокопрочной керамики (ZrO₂, стабилизированный оксидом иттрия Y₂O₃) при следующих условиях: размол в изопропиловом спирте, массовое отношение шаров к порошку 10:1, скорость вращения опорного диска 500 об/мин при продолжительности размола 4, 8 и 16 ч с реверсом направления каждые 15 мин и

элюат на кювете и измеряли в условиях равновесия Sr-90 с дочерним радионуклидом Y-90 на УМФ-2000 в течение 10000 с.

Проведён анализ содержания Sr-90 в пробах поверхностных природных вод на территории Свердловской и Челябинской областей, а также пробах вод, отобранных в санитарно-защитной зоне ПХРО Свердловского отделения филиала «Уральский территориальный округ» ФГУП «Федеральный экологический оператор».

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Свердловской области в рамках проекта № 20-43-660055.

1. Voronina A.V., Betenkov N.D., Semenishchev V.S. Water Decontamination at Radioactively Contaminated Lands. D. K. Gupta, A. Voronina (eds.), Remediation Measures for Radioactively Contaminated Areas. Springer International Publishing AG. 2018. P. 223-243

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ И МОНИТОРИНГ Sr-90 В ПРИРОДНЫХ ВОДАХ

Белоконова Н.В.¹, Воронина А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nadyusha.ru2@gmail.com

DEVELOPMENT OF A METHOD FOR DETERMINATION AND MONITORING OF Sr-90 IN NATURAL WATERS

Belokonova N.V.¹, Voronina A.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A method has been developed for the determination of Sr-90 in natural waters with the concentration of Sr-90 on the T-3K sorbent. The monitoring of the content of Sr-90 in samples of natural waters on the territory of the Sverdlovsk and Chelyabinsk regions was carried out.

Большая часть населения на Среднем Урале живет в неблагоприятных условиях и страдает от повышенной химической и радиационной нагрузки. Авария на Чернобыльской АЭС, Восточно-Уральский радиоактивный след, а так же штатная деятельность предприятий ГК «Росатом» вносят значительный вклад в радиоактивное загрязнение окружающей среды [1].

Одним из радионуклидов, обуславливающих долговременное загрязнение, является ^{90}Sr с периодом полураспада 29,12 года, что вызывает необходимость контроля за его поступлением в природные воды. Для мониторинга Sr-90 необходима разработка простых методов определения с низким пределом обнаружения.

Для разработки метода определения Sr-90 и выбора оптимальных условий концентрирования стронция из природных вод исследовали сорбцию и десорбцию стронция в динамических условиях на неорганическом сорбенте Т-3К. Исследованы зависимости выхода стронция в концентрат от массы сорбента, объёма пробы, скорости пропускания воды, объёма десорбирующего раствора и условий десорбции. При выбранных условиях концентрирования выход стронция в концентрат составил $91 \pm 1\%$, что при определении Sr-90 из проб слабоминерализованных вод объёмом 1 л позволяет достичь минимально определяемой активности 0,05 Бк/л. Из проб объёмом 2 л без увеличения массы сорбента выход в концентрат составил 86%.

Для мониторинга Sr-90 были отобраны пробы природных вод из 16 источников на территории Свердловской и Челябинской областей. Концентрирование Sr-90 проводили из проб воды объёмом 1-2 литра, пропуская пробу через колонку, заполненную сорбентом Т-3К. Десорбировали Sr-90 раствором HCl, высушивали

является фторбериллат лития. Выбраны линии аналитов, свободные от наложений.

Характеризацию динамики испарения пробы выполнили по кривым выгорания при регистрации в режиме временной развертки спектра. Сравнивая временное распределение интенсивности линий для разных форм электродов и навески пробы, установили, что лучшие условия испарения обеспечивает электрод рюмка. Методом планирования на основе полного факторного эксперимента 2^3 выбраны оптимальные условия анализа. Изучено влияние следующих факторов: навеска пробы в кратере электрода, род и сила тока разряда. Параметры оптимизации – интенсивность линий аналитов (должна быть максимальной) и интенсивность молекулярных полос (должна быть низкой). Рекомендованы следующие условия возбуждения: дуговой разряд переменного тока 12 А, навеска 30 мг. Оценены метрологические характеристики методики для реальных проб в рекомендованных условиях: повторяемость, промежуточная прецизионность результатов и пределы обнаружения элементов. Алгоритм обработки результатов измерений соответствовал рекомендациям [5]. Хорошее согласование значений относительных показателей прецизионности разработанной и стандартизованных методик позволяет рекомендовать предложенную методику анализа в качестве рабочей для контроля примесного состава FLiBe.

1. Новиков В.М., Игнатьев В.В., Федулов В.И. и др. Жидкосолевые ЯЭУ: перспективы и проблемы / Атомная энергия. 2006. Т. 101. Вып. 4. С. 278-285.
2. Serrano-López R., Fradera J., Cuesta-López S. Molten salts database for energy applications. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. V. 73, November 2013, P. 87-102.
3. ОСТ 95.505. Бериллий и его соединения. Методы спектрального анализа. – 1982.
4. И 25000.00946. Литий и литий хлористый. Спектральный метод измерения массовой доли примесей с переводом проб в углекислый литий. – Новосибирск, НЗХК. 2004.
5. РМГ 61-2010 Государственная система обеспечения единства измерений. Показатели точности, правильности, прецизионности методик количественного химического анализа. Методы оценки. М.: Стандартиформ, 2012.

АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ АНАЛИЗ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ РАСПЛАВА LiF-BeF₂ В ДУГОВОМ РАЗРЯДЕ

Бекмансурова Л.И.¹, Домбровская М.А.¹, Лисиенко Д.Г.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: l-bekmansurova@mail.ru

ATOMIC EMISSION ANALYSIS OF A COMPOSITION BASED ON A LiF-BeF₂ MELT IN AN ARC DISCHARGE

Bekmansurova L.I.¹, Dombrovskaya M.A.¹, Lisienko D.G.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

A method for analyzing the fuel composition based on LiF-BeF₂ were developed. The excitation conditions of the spectra are optimized: alternating current arc discharge of 12 A, exposure time of 20 s, shot glass electrode. Metrological characteristics of the technique were evaluated.

В настоящее время является актуальной разработка технологии повторного использования отходов ядерной энергетики. Растворение U, Pu и продуктов их деления в расплавах фторидов лития и бериллия (FLiBe) – перспективный вариант реализации замкнутого ядерного топливного цикла [1]. FLiBe имеет двойное назначение: чистый расплав является теплоносителем, при растворении в расплаве UF₄ и/или PuF₄ – топливом реактора [2].

Состав расплава по основным компонентам – эвтектическая смесь LiF - BeF₂ с молярной долей солей 73 и 27 %. Контролируемыми примесями являются Al, B, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Mg, Ni, Pb, Si, и Zn с максимально допускаемой концентрации от 5 (для B) до 150 ppm (для Al). Работа посвящена разработке методики эмиссионного спектрального анализа с дуговым возбуждением топливной соли, содержащей UF₄ (массовая доля 5 %), и теплоносителя на основе расплава LiF-BeF₂. Метод позволяет определять примеси без дополнительных химических операций и длительной подготовки материалов.

В качестве базовых для установления состава FLiBe использованы действующие на предприятиях «Росатом» методики анализа Be и Li [3, 4]. Для возбуждения, регистрации спектров и обработки результатов использовали комплекс спектрального оборудования: спектрометр PGS-2 с многоканальным твердотельным детектором МАЭС, работающим в программном обеспечении (ПО) «Атом», и дуговой генератор «Везувий».

При регистрации излучения FLiBe и FLiBe + UF₄ в спектрах установлено наличие интенсивных молекулярных полос в области 282 – 330 нм. С использованием рентгенофазового анализа остатков проб из электродов на дифрактометре URD 6 в медном K_α излучении установлено, что источником молекулярных полос

На рисунке 1 представлены зависимости среднего диаметра и дисперсии частиц от длительности осаждения и оптические изображения частиц на финальной стадии осаждения.

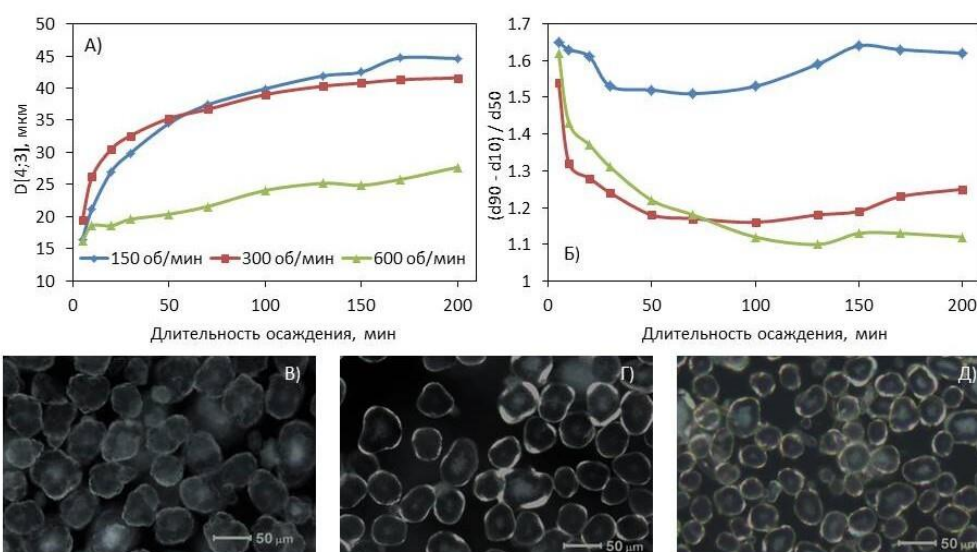


Рис. 1. Изменения среднего диаметра частиц (А) и дисперсии частиц по размерам (Б). Оптические изображения частиц в конце осаждения для образцов: 7YZr-150 (В); 7YZr-300 (Г); 7YZr-600 (Д)

Показано, что скорость перемешивания существенно влияет на размер и форму частиц. Для всех образцов характерно увеличение среднего диаметра частиц на всех этапах осаждения. Для образца 7YZr-600 об/мин средний диаметр частиц существенно ниже, чем для остальных (рис. 1. А). Для образцов 7YZr-300 и 7YZr-600 об/мин дисперсия снижается и к концу осаждения составляет 1,25 и 1,12 соответственно, тогда как для образца 7YZr-150 об/мин дисперсия существенно выше и составляет 1,62 (рис. 1. Б). Для всех образцов характерна сфероидальная форма частиц, однако для образца 7YZr-150 об/мин наблюдается шероховатая поверхность, тогда как для образцов 7YZr-300 и 7YZr-600 об/мин – гладкая.

После обжига средний диаметр частиц уменьшается, дисперсия размеров находится на уровне 1,06 - 1,19. Частицы сохраняют сфероидальную форму и не разрушаются. Насыпная плотность порошков после обжига составляет: 2,08, 2,78 и 2,50 г/см³ для образцов 7YZr-150, 7YZr-300 и 7YZr-600 об/мин соответственно. Образцы 7YZr-150 и 7YZr-300 об/мин обладают высокой текучестью: 48 и 34 с соответственно. Образец 7YZr-600 об/мин текучестью не обладает. Таким образом, варьирование скорости перемешивания в ходе КДО позволяет получать порошки с различными свойствами: размер, форма, насыпная плотность и текучесть.

1. Высокоогнеупорные материалы из диоксида циркония / Д. С. Рутман, Ю. С. Торопов, С.Ю. Плинер и др. М. : Металлургия (1985)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СКОРОСТИ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ СУСПЕНЗИИ НА СВОЙСТВА ЧАСТИЦ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ В ХОДЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ДВУХСТРУЙНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Баженова Е.С.¹, Машковцев М.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: elizbag@mail.ru

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF SUSPENSION STIRRING RATE ON THE PROPERTIES OF ZIRCONIUM DIOXIDE PARTICLES BY CONTROLLED DOUBLE-JET PRECIPITATION

Bazhenova E.S.¹, Mashkovtsev M.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is aimed at studying the effect of the suspension stirring rate on the properties of zirconium dioxide particles. It was shown that the stirring rate affects the morphology and particle size distribution of the obtained oxides.

В настоящее время материалы на основе диоксида циркония широко применяются для создания термобарьерных покрытий (ТБП). Такие покрытия должны обладать следующими свойствами: тугоплавкость, химическая устойчивость, хорошая механическая прочность, термическая стабильность, низкий коэффициент теплопроводности, антикоррозийная способность [1]. ТБП в основном формируются методом газотермического напыления, поэтому очень важно, чтобы порошок имел сферическую форму, узкое распределение по размерам, высокую насыпную плотность и текучесть. Благодаря этому порошки равномерно подаются в газоплазменную струю, равномерно оплавляются и переносятся на подложку, что обеспечивает однородность покрытий. Целью работы является исследование влияния скорости перемешивания на размер, форму, насыпную плотность и текучесть диоксида циркония в ходе контролируемого двухструйного осаждения (КДО).

Образцы были синтезированы методом КДО. В качестве прекурсоров использовали растворы нитратов цирконила и иттрия. Осаждение проводили в течение 200 мин при постоянном значении pH=5. В качестве осадителя использовали 10% раствор аммиака. Перемешивание суспензии осуществляли при помощи верхнеприводной мешалки, скорость перемешивания составляла 150, 300 или 600 об/мин. После осаждения суспензии фильтровали на вакуумном нутч-филт্রে, сушили при 40 °С в течение 12 часов и затем обжигали при 950 °С. Свойства образцов исследовали при помощи оптического микроскопа и лазерного анализатора частиц.

снижению удельной поверхности. При замещении в трехмаршрутном катализаторе Pd-содержащего компонента на оксидную систему на основе Ce и Sn, в том числе модифицированную Cu и Mn параметры каталитической активности в свежем состоянии практически не отличаются, однако в ходе старения Pd-содержащий катализатор оказался существенно активнее в реакции окисления углеводородов. Стоит отметить, что эффективность всех образцов катализаторов в реакциях окисления CO и восстановления NO_x сохраняется на высоком уровне. Таким образом, ввиду низкой термической стабильности систем на основе переходных металлов, целесообразно использовать данные системы только в составе покрытий, располагающихся в подпольных катализаторах.

1. Kaplin I.Y., Lokteva E.S., et.al. // Efficiency of manganese modified CTAB-templated ceria-zirconia catalysts in total CO oxidation // *App.Surf.Sci.* V. 485, pp 432-440., 2019// <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.04.206>
2. Gupta A., Hegde M. S., et.al. // Structural investigation of activated lattice oxygen in Ce_{1-x}Sn_xO₂ and Ce_{1-x-y}Sn_xPd_yO_{2-δ} by EXAFS and DFT calculation // *Chem. Mater.* V. 21, pp 5836-5847, 2009// DOI:10.1021/cm902466p
3. A.P. Maciel, P.N. Lisboa-Filho, et.al. // Microstructural and morphological analysis of pure and Ce-doped tin dioxide nanoparticles // *Ceram. Soc.* V. 23, pp 707-713, 2003 // DOI: 10.1016/S0955-2219(02)00190-5
4. E.M.Slavinskaya, A.V.Zadesenets et.al. // Thermal activation of Pd/CeO₂-SnO₂ catalysts for low-temperature CO oxidation // *App.Catal.Env.B* V. 277, p. 119275, 2020 // <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.119275>.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ОКСИДНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ Ce И Sn МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТРЕХМАРШРУТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Бакшеев Е.О.^{1,2}, Аликин Е.А.¹, Денисов С.П.¹, Машковцев М.А.²

¹⁾ ООО Экоальянс

²⁾ Уральский Федеральный Университет

E-mail: baksheev@eco-nu.ru

SYNTHESIS AND STUDY OF COMPLEX OXIDE SYSTEMS BASED ON Ce AND Sn MODIFIED WITH TRANSITION METALS FOR APPLICATION IN THREE-WAY CATALYSTS

Baksheev E.O.^{1,2}, Alikin E.A.¹, Denisov S.P.¹, Mashkovtsev M.A.²

¹⁾ Ecoalliance LLC

²⁾ Ural Federal University

The work is devoted to the study of promising oxide systems with oxygen capacity. The possibility of partial replacement of platinum group metals by these oxide systems without loss of exhaust gas purification efficiency was investigated.

Задача снижения содержания платиновых металлов (ПМ) в составе покрытий катализаторов очистки выхлопных газов автомобилей не теряет своей актуальности. Одним из перспективных решений является частичное замещение ПМ на сложные оксидные системы, обладающие способностью высвобождать и поглощать кислород (Oxygen Storage Capacity - OSC), на основе церия, циркония и переходных металлов, таких как Cu и Mn. [1] Также в работах [2, 3, 4] сообщается, что при введении Sn в состав OSC-материалов оказывает положительное влияние на характеристики катализаторов.

Целью работы являлось исследование перспективных оксидных систем на основе Ce и Sn, обладающих кислородной емкостью, а также проверка возможности частичной замены ПМ без потери эффективности очистки выхлопных газов. Были синтезированы образцы сложных оксидов на основе Ce и Sn модифицированные Cu или Mn методом контролируемого двухструйного осаждения с применением гидротермальной обработки. Проведено исследование физико-химических свойств полученных образцов твердых растворов, а также проведены сравнительные испытания образцов блочных катализаторов с традиционным покрытием, содержащим полноценную загрузку ПМ и покрытием с частичной заменой ПМ на сложные оксидные системы.

В ходе работы показано, что материал на основе Ce и Sn обладает приемлемой термостабильностью (23,4 м²/г после старения при 900 °С в течение 4-х часов), однако поверхностное модифицирование Cu или Mn привело к существенному

ICP-OES ELEMENTAL VARIATION ON BOTTLED DRINKING WATER

Awad H. A.¹, Zakaly H. M.^{1,2}, El-Taher A.¹

¹) Faculty of Sciences Al-Azher University, Egypt

²) Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Yekaterinburg

E-mail: hamdiawaad@gmail.com

The work describes ICP-OES elemental variation (Be, B, Al, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Mo, Ag, Cd, Sb, Ba, Sn, and Pb) in bottled drinking water.

The concentration of several inorganic metals is a limiting factor for drinking water quality, owing to their negative health consequences. Chronic diseases and the geologic environment have a connection. The geochemical environment is, without a doubt, a substantial contributor to serious health problems. Many people have suffered disease because of these heavy elements that are concentrated in drinking water in the past 20 years, which has prompted extensive research on the link between drinking water and chronic disease. The chemistry of drinking water is often identified as a contributing factor to a variety of diseases. This fact necessitates its supervision and oversight. In Saudi Arabia's Al Qassim province, the Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectroscopy (ICP-OES) facility is being utilized to quantify nineteen components in commercially bottled drinking water. A fully quantitative method was applied to check the concentration of nineteen elements (Be, B, Al, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Mo, Ag, Cd, Sb, Ba, Sn, and Pb) on the bottled water samples. The aim of the work is to check the quality of the samples under investigation.

Special thanks for stuff in Faculty of Sciences , Al-azhar university.

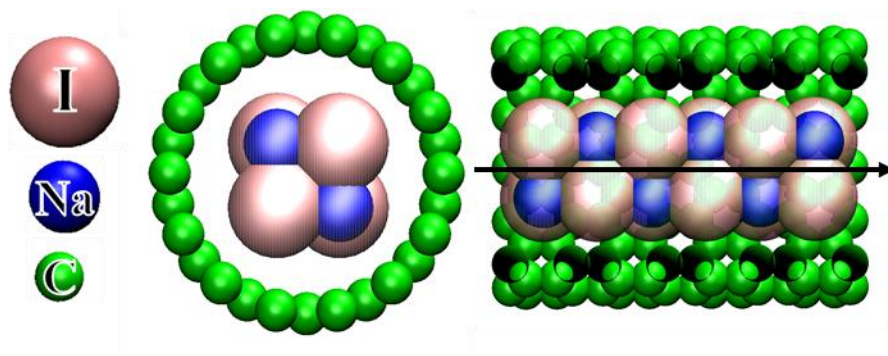


Рис. 1. Исследуемая система на примере композита NaI@ОУНТ(14;0)

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ
«ОДНОСТЕННАЯ УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА – НЕОРГАНИЧЕСКИЙ
ИНТЕРКАЛЯНТ»**

Анучин Н.М.¹, Еняшин А.Н.¹

¹) ИХТТ УрО РАН

E-mail: niko-anuchin@yandex.ru

**QUANTUM CHEMISTRY INVESTIGATION OF THE MECHANICAL
PROPERTIES OF COMPOSITES OF SINGLE-WALLED CARBON
NANOTUBES WITH INORGANIC INTERCALANTS**

Anuchin N.M.¹, Enyashin A.N.¹

¹) ISSC UB RAS

Mechanical properties of composites MX@SWCNT (MX = NaI, KCl, KI) – Young's and shear moduli, tensile strength - were studied using two levels of the density functional theory.

Свойства углеродных наноструктур вызывают значительный интерес. Сравнительно новым классом подобных материалов являются эндоэдральные комплексы «углеродная нанотрубка – неорганический интеркалянт». Несмотря на значительный прогресс в понимании механизмов образования, электронных и структурных свойств подобных композитов с ионными соединениями, как теоретические, так и экспериментальные сведения о модуляции механических свойств нанотрубок в составе таких комплексов отсутствуют. В настоящей работе теоретически рассмотрено деформационное поведение представительного класса эндоэдральных комплексов одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) с галогенидами KI, KCl, NaI. С использованием метода функционала электронной плотности в зонном варианте делается прогноз величин модуля Юнга наноструктур, как функции хиральности ОУНТ и наличия точечных дефектов в решётке интеркалянта. В кластерном варианте методом теории функционала плотности в приближении сильной связи на примере композитов NaI@ОУНТ(14,0), NaI@ОУНТ(15,0) и NaI@ОУНТ(8,8) рассмотрены деформации растяжения, изгиба, кручения: рассчитаны модули Юнга, модули сдвига и пределы прочности.

распределитель подаётся воздух, который затем барботирует через слой воды, а после этого выходит из верхнего торца установки.

Для ускорения расчёта в данной работе сетка установки представляется псевдодвухмерной, то есть одно из поперечных измерений не учитывается. Такое упрощение возможно благодаря осесимметричности геометрии установки. Псевдодвухмерная сетка имеет толщину в 1 расчётный элемент по одной из поперечных координат. Сетка структурированная, состоит из гексаэдров одного размера, построена с помощью утилиты blockMesh. Такой подход часто встречается в литературе и неплохо себя зарекомендовал у исследователей [2].

Моделирование выполнено в программе OpenFOAM 8 с помощью решателя multiphaseEulerFoam. Используемая модель основана на Эйлерово-Эйлеровом подходе, то есть для описания поведения обеих жидкостей (фаз) применяются уравнения Эйлера. Обе фазы непрерывны и взаимопроникаемы, что описывается осреднёнными уравнениями.

Результаты валидации показали удовлетворительную применимость модели для инженерных расчётов. Проведён анализ распределений скоростей воздуха, воды и давления в продольном сечении барботажной колонны.

1. Kumar S.B., Moslemian D., Dudukovic M.P., AIChE J, 43, 1414–1425, (1997)
2. Askari E. Proulx P., Passalacqua A., ChemEngineering, 2, 8, (2018)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВАЛИДАЦИЯ CFD-МОДЕЛИ ГИДРОДИНАМИКИ БАРБОТАЖНОЙ КОЛОННЫ ДЛЯ МИНЕРАЛИЗАЦИИ CO₂

Кирьянов В.А.¹, Абаймов Н.А.¹, Рыжков А.Ф.¹

¹) Уральский Федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина
E-mail: n.a.abaimov@urfu.ru

NUMERICAL MODELING AND VALIDATION OF THE CFD MODEL OF BUBBLE COLUMN HYDRODYNAMICS FOR CO₂ MINERALIZATION

Kiryanov V.A.¹, Abaimov N.A.¹, Ryzhkov A.F.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin

The CFD-model of a bubble column (water-air) was validated using published experimental data obtained on a cylindrical installation. The results of the validation showed the satisfactory applicability of the model for engineering calculations.

На сегодняшний день Свердловская область является крупным индустриальным регионом, производящим большое количество промышленных отходов. Кроме того, наличие большого числа тепловых электрических станций на органическом топливе приводит к существенным выбросам CO₂, на борьбу с которым направлены современные экологические нормы. Обе эти проблемы способны решить перспективные химические технологии, одной из которых является ускоренная карбонизация щелочных отходов. Данная технология позволяет в рамках одного комплексного технологического процесса уловить CO₂ из газообразных продуктов сгорания органического топлива (дымовых газов) и утилизировать твёрдые и жидкие щелочные отходы (золшлаки металлургии, энергетики, сточные воды промышленных предприятий) с получением товарной продукции.

Технически реализовать такой процесс возможно в колонне, наполненной суспензией из твёрдых и жидких щелочных отходов, через которую барботируют дымовые газы, содержащие CO₂.

Из-за малоизученности процесса минерализации CO₂ в барботажных колоннах существует необходимость в создании численной модели подобных установок. Метод вычислительной гидродинамики (computational fluid dynamics, CFD) позволяет моделировать не только гидродинамику, но и термохимические процессы в барботажных колоннах. Разработка любой CFD-модели связана с поочерёдной валидацией отдельных её элементов (подмоделей), начиная с гидродинамики.

В качестве экспериментальных данных для валидации использованы результаты эксперимента из работы [1]. Колонна представляет из себя цилиндр с высотой слоя воды 1 м и диаметром 0,26 м. Снизу цилиндра через газовый

СЕКЦИЯ 4
ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Таким образом, схему передачи данных по проводному кабелю с использованием QAM модуляции, можно представить в следующем порядке. Данные, получаемые с датчиков скважинных приборов кодируются в соответствии с порядком QAM в модуляторе, затем QAM символы проходят через фильтр приподнятого косинуса, отфильтрованные данные подвергаются процедуре предискажения для компенсации амплитудных искажений, после этого данные через цифро-аналоговый преобразователь поступают в кабель. На обратной стороне кабеля данные оцифровываются и проходят через согласованный фильтр приподнятого косинуса и после декодирования QAM мы получаем исходные данные.

Достижение поставленной цели потребовало решение задачи по разработке алгоритма определения и компенсации амплитудных искажений в кабеле, выполнен ряд тестов для проверки корректности его работы. Алгоритм успешно протестирован на реальном геофизическом кабеле. Показано, что скорость передачи данных увеличена в 9 раз и составила 280 кбит/с. При этом вся аппаратная часть комплекса полностью удовлетворяет всем требованиям для ее эксплуатации в скважинных условиях.

1. Hongwei Zhao, Kezhu Song, Kehan Li, Chuan Wu, Zhuo Chen. 2021. "A High-Speed Well Logging Telemetry System Based on Low-Power FPGA" DOI 10.1109/ACCESS.2021.3049799
2. Qian Cui, Kai Shuang. 2017. "Optimal Design Methodology for Frequency Compensation Circuits in Logging Cable Transmission Channel" DOI: 10.1142/S0218126618501037
3. А.Б. Сергиенко Цифровая обработка сигналов / А. Б. Сергиенко — СПб.: Питер, 2002. - 608 с.
4. Баскаков С.И. Радиотехнические цепи и сигналы. – М.: Высшая школа, 2000. – 462 с.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКОГО КАБЕЛЯ

Зиядиев Р.Р.¹, Масленникова Ю.С.¹, Шерстюков О.Н.¹

¹ Казанский федеральный университет
E-mail: Ziyadiev96@mail.ru

SOFTWARE AND HARDWARE COMPLEX FOR INCREASING THE THROUGHPUT OF A GEOPHYSICAL CABLE

Ziyadiev R.R.¹, Maslennikova Y.S.¹, Sherstyukov O.N.¹

¹ Kazan Federal University

Intensive development of downhole tools requires higher data rates to communicate with the surface. High cable resistance and harsh environmental conditions prevent the use of standard transceivers. This project is devoted to the development of a data transmission system over a geophysical cable.

Каротажный кабель вот уже много десятилетий широко применяется при геофизических исследованиях скважин, так как позволяет в режиме реального времени осуществлять контроль за скважинной измерительной аппаратурой и производить оперативный анализ регистрируемых данных. Однако развитие геофизических технологий, в частности, широкое применение метода спектральной шумометрии, требует существенного увеличения пропускной способности каротажного кабеля и высокой помехоустойчивости при сохранении возможности использования в скважинных условиях (при температуре окружающей среды до 150°C). Высокое сопротивление кабеля и жесткие внешние условия создают ограничивающую проблему для стандартных приемопередатчиков. Целью данной работы является увеличение скорости передачи данных по одножильному геофизическому кабелю, при помощи QAM модуляции (скорость передачи по данному кабелю составляет около 30 кбит/с).

В ходе выполнения работы проведен анализ электрических характеристик геофизического кабеля, определена теоретически достижимая скорость передачи данных. По теореме Шеннона-Хартли максимальная скорость, с которой информация может быть передана по 8-километровому, одножильному геофизическому кабелю, с полосой пропускания 3.5кГц, равна 40 кбит/с. Для увеличения скорости передачи данных необходимо при достаточно высоком отношении сигнал/шум компенсировать амплитудные искажения в кабеле. Имея заранее известную АЧХ кабеля, можно предсказать сигнал таким образом, что полоса пропускания системы будет увеличена. В нашем случае удалось расширить полосу пропускания до 70 кГц, что в свою очередь позволило сдвинуть теоретическую максимальную скорость до 370 кбит/с.

динамометра необходимо внести существенные конструктивные изменения в технологическую систему станка, а в случаях станков с ЧПУ установка динамометра невозможна из-за конструкции барабана резцедержателя.

Получение оперативных данных о процессе резания возможно посредством анализа спектра виброускорения – параметра, прямо связанного с силой резания, как причина и следствие. Метод, основанный на анализе вибрации лишен недостатков стойкостных испытаний и динамометрии. Адекватность полученных данных подтверждается сравнением с оптимальной температурой резания по данным Е.В. Артамонова – 780 °С [2] и оптимальной скоростью резания по данным А.Д. Макарова – свыше 140 м/мин [1].

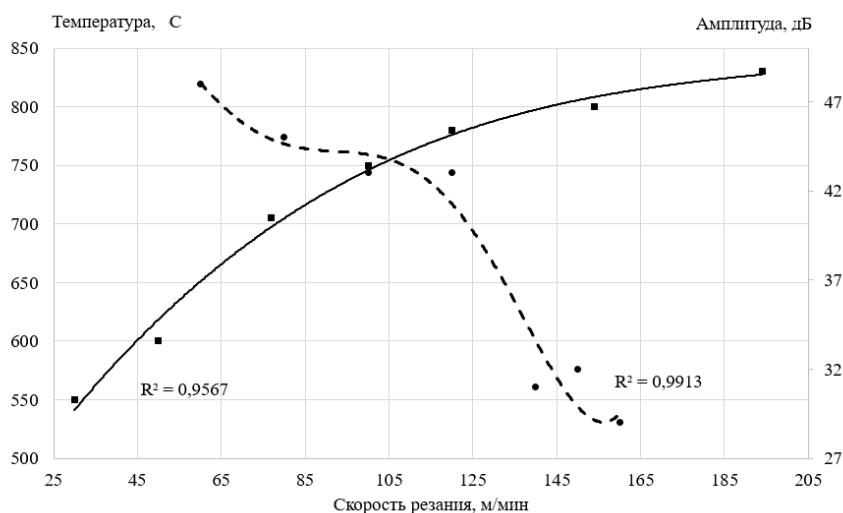


Рис. 1. Зависимость температуры в зоне резания и амплитуды спектра вибрации от скорости резания для стали 12X18H10T.

На рисунке показаны зависимости температуры в зоне резания и амплитуды спектра вибрации от скорости резания, где видно значительное снижение амплитуды виброускорения и достижения ей минимального значения при скоростях выше 140 м/мин. Таким образом, экспериментально подтверждена возможность установления оптимальной скорости резания по вибрации режущего инструмента на примере стали 12X18H10T.

1. Макаров А. Д. Оптимизация процессов резания. Москва: Машиностроение, 1976. 278 с.
2. Артамонов Е. В. Прочность и работоспособность сменных твердосплавных пластин сборных режущих инструментов. Тюмень: Вектор Бук, 2003. 190 с. ISBN 5-88465-416-2.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВИБРАЦИИ ПРИ ТОКАРНОЙ ОБРАБОТКЕ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ

Артамонов Е.В.¹, Костив В.М.¹, Воронин В.В.¹

¹) Тюменский индустриальный университет, г. Тюмень
E-mail: vladislavalbus@gmail.com

RESEARCH ON VIBRATION PARAMETERS IN STAINLESS STEEL TURNING

Artamonov E.V.¹, Kostiv V.M.¹, Voronin V.V.¹

¹) Tyumen Industrial University, Tyumen

The paper presents the results of experiments to find the relationship between the parameters of the main component of vibration acceleration in turning stainless steel 12X18H10T in order to determine the optimal cutting speed without the use of time-consuming classic resistance tests.

При точении различных материалов необходимо учитывать их рабочий диапазон температур. При разработке сталей и сплавов рассчитывается температура максимальной стойкости материала, например, жаропрочные стали созданы выдерживать высокие температуры, и применяться они будут, очевидно, при высоких температурах, следовательно, стойкость при низких температурах для них не является важной характеристикой. Высокая устойчивость материала в одних условиях и низкая – в других, подсказывает, что эксплуатировать материал необходимо в первом случае, а обрабатывать во втором. Процесс формообразования резанием следует проводить при температуре минимальной стойкости материала и максимальной работоспособности инструмента. При выполнении условия равенства температур максимальной обрабатываемости материала и максимальной работоспособности режущего инструмента ожидается наибольший непрерывный путь резания. Поиск оптимальных температур осложнен рядом факторов, в том числе, трудоёмкостью экспериментов и необходимостью модернизации оборудования для измерения и контроля температуры в зоне контакта режущего инструмента и заготовки в процессе резания.

Поиск косвенных методов контроля температуры в первую очередь приводит к тому, что наибольшее влияние на величину нагрева в зоне резания оказывает скорость резания, в меньшей степени, подача и еще меньше – глубина резания. [1]

Однако, прямое измерение скорости резания невозможно, ее величина рассчитывается косвенно, исходя из оборотной частоты и геометрических параметров заготовки. В области экспериментального исследования процесса резания наиболее распространено измерение силы резания, которое осуществляется чаще всего электрическими динамометрами. Однако, для установки

были выбраны частота (1.25 МГц) и угол ввода (37°) ультразвуковых колебаний, при которых в пластине толщиной 0.7 мм возникает нулевая симметричная мода волны Лэмба [4]. По данным расчётов наилучшим датчиком для возбуждения волн Лэмба стал наклонный пьезоэлектрический преобразователь П121-1.25-30.

При помощи данного преобразователя были проведены измерения на образцах с качественным и дефектным сварными швами и получены зависимости скорости звука и амплитуды волн Лэмба в различных направлениях сварного шва. Как видно из рис. 1а фазовая скорость волн Лэмба, прошедших поперёк дефектного шва, заметно снижается относительно скорости волн в качественном стыковом соединении.

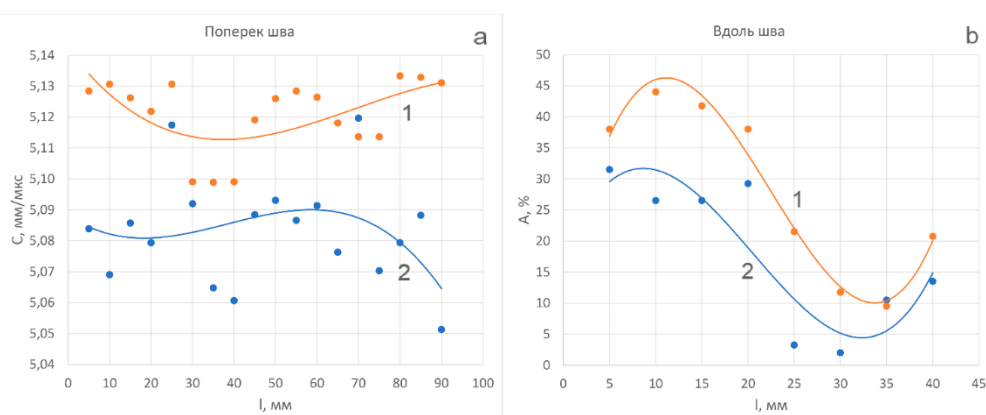


Рис. 1. Графики зависимости фазовой скорости (а) и амплитуды (б) волн Лэмба, измеренных с шагом в 5 мм при прохождении поперёк (а) и вдоль (б) качественного (1) и дефектного (2) сварного соединения.

Профиль распределения амплитуды волн Лэмба, прошедших вдоль сварных швов (рис. 1б), показывает, что как в качественном, так и в дефектном сварных швах амплитуда снижается. Однако в дефектном сварном соединении снижается заметно больше. Области термического искажения материала вблизи дефектного шва также отличаются заниженными значениями амплитуды.

Таким образом выполненные исследования показывают, что скорость и амплитуда волн Лэмба являются параметрами чувствительными к состоянию сварных швов и могут быть использованы для контроля их дефектности.

1. Гуревич С. Ю., Петров Ю. В., Божко В. Ф., Вестник ЮУрГУ, №7, 86, (2006)
2. Зацепин А. Ф., Акустический контроль. В 2 ч. Ч 1. Введение в физику акустического контроля, ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, (2005)
3. Ермолов И. Н., Алешин Н. П., Потапов А. И., Акустические методы контроля. Книга 2, "Высшая школа", (1991)
4. Вайншток И. С., Герасимов В. Г., Гурвич А. К., Приборы для неразрушающего контроля материалов и изделий. Справочник. В 2-х кн., "Машиностроение", (1976).

МЕТОДИКА КОНТРОЛЯ СТЫКОВЫХ ШВОВ В ТОНКИХ ПЛАСТИНАХ ВОЛНАМИ ЛЭМБА

Васильев А.В.¹, Бирюков Д.Ю.^{1,2}, Зацепин А.Ф.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский государственный университет путей сообщения, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: klokova.m.09@mail.ru

CONTROLLING METHOD OF BUTT WELDS IN THIN PLATES BY LAMB WAVES

Vasiliev A.V.¹, Biryukov D.Yu.^{1,2}, Zatsepin A.F.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural State University of Railway Transport, Yekaterinburg, Russia

Studies of the speed dependence of ultrasonic waves on the profiles of welded joints. Development of a reproducible technique for controlling thin plates with Lamb waves. The results showed that the speed of sound significantly deviates in the area of the defective weld.

Актуальность совершенствования контроля качества тонких сварных соединений определяется их меньшей прочностью по сравнению с толстыми изделиями и сложностью возбуждения бегущих волн, на которые рассчитано большинство методов ультразвукового контроля. Для контроля тонких изделий в большей степени подходят волны Лэмба. Такие волны связаны с волноводным механизмом распространения ультразвуковых колебаний и могут существовать в пластинах толщиной от 0,15 до 3,5 мм [1].

Скорость волн Лэмба зависит от множества факторов: скорости звука в материале пластины, частоты колебаний, толщины слоя, в том числе и от дефектности материала, в котором такие волны распространяются [2]. В этой связи целью данной работы стала отработка методики контроля стыковых швов в тонких пластинах с помощью параметров волн Лэмба таких как скорость и амплитуда. Суть методики состоит в измерении времени прохождения волн Лэмба через сварной шов для определения зависимости их фазовых скоростей от координаты ультразвукового преобразователя и последующего выявления дефектных областей сварного шва.

Для проведения исследований были использованы два образца пластин со стыковыми швами различной дефектности. Толщина пластин составляла 0.7 мм, а линейные размеры 93 на 99 мм. Область термического изменения материала вблизи дефектного сварного шва имела ширину 23 мм.

Для определения угла призмы и рабочей частоты пьезоэлектрического преобразователя (ПЭП) были использованы дисперсионные зависимости волн Лэмба для стали [3]. Исходя из дисперсионных кривых по методике, описанной в [2, 4]

в сравнении с результатами фоновых измерений, так как не представляется возможным детализировать имеющуюся информацию на конкретный район города.

Для изменения данной ситуации решено создать новые пункты измерения в различных районах города, позволяющие расширить область атмосферных наблюдений. Предпринята разработка информационной системы на основе сенсоров Panasonic PM2.5 [4], результаты измерения которых будут собраны в единую базу данных для дальнейшей обработки и визуализации. В основе новых пунктов измерения находится микрокомпьютер Raspberry Pi 3B+, позволяющий сделать конечное устройство компактным и автономным. Кроме того, планируется использовать датчики метеопараметров, необходимые для углубленного анализа концентрации мелкодисперсного аэрозоля в зависимости от характеристик окружающей среды. [5]. В обозримом будущем будет опробован метод измерения содержания аэрозольных микрочастиц на различных высотах с помощью беспилотного летательного аппарата, что также необходимо для создания более совершенных моделей распределения аэрозоля в пространстве.

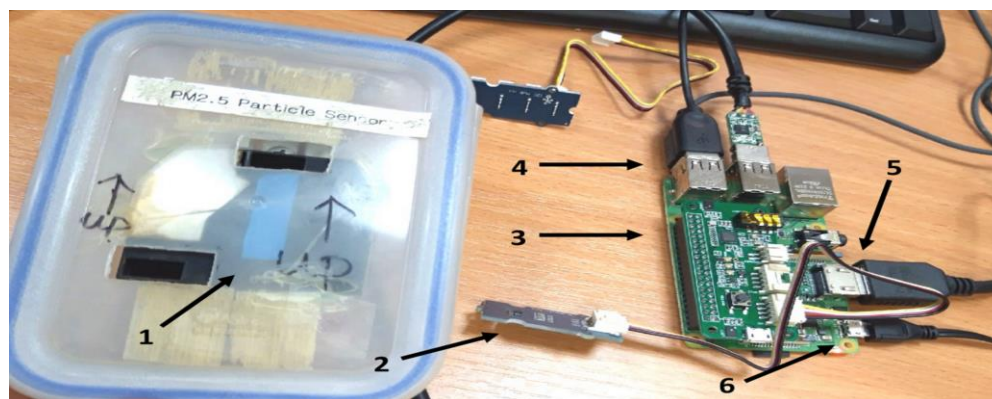


Рис. 1. Готовый прототип устройства. Цифрами обозначены: 1 – сенсор PM2.5; 2 – датчик температуры/влажности; 3 – микрокомпьютер Raspberry pi 3B+; 4,5 – порты периферийной аппаратуры; 6 – порт питания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-05-50138.

1. Сафронов А. С., Диссертация д.т.н. 05.11.13. Барнаул (2011)
2. Дудорова Н. В. и др., Сборник тезисов 28-ой конф. «Аэрозоли Сибири», 48 (2021)
3. Щелканов А. А. и др., Сборник статей 7-ой межд. конф. «Физика. Технологии. Инновации», 268 (2020)
4. Nakayama T. et al., Aerosol science and technology, 52, 2 (2018)
5. Luzhetskaya A. P. et al., Proc. SPIE 11916, 119164A (2021)

РАЗРАБОТКА ИЗМЕРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ЗА КОНЦЕНТРАЦИЕЙ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ И МЕТЕОПАРАМЕТРАМИ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ ВОЗДУХА

Васильева Д.Е.¹, Гуляев Е.А.^{1,2}, Маркелов Ю.И.^{1,2}, Поддубный В.А.^{1,2},
Щелканов А.А.^{1,2}, Гадельшин В.М.¹

¹) Кафедра технической физики, Физико-технологический институт УрФУ,
Екатеринбург, Россия

²) Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: daria_v00@mail.ru

DEVELOPMENT OF A MEASURING COMPLEX TO MONITOR THE CONCENTRATION OF ATMOSPHERIC AEROSOL AND METEOROLOGICAL PARAMETERS IN THE SURFACE AIR

Vasileva D.E.¹, Gulyaev E.A.^{1,2}, Markelov Y.I.^{1,2}, Poddubny V.A.^{1,2},
Shchelkanov A.A.^{1,2}, Gadelshin V.M.¹

¹) Dept. Technical Physics, Institute of Physics and Technology UrFU, Yekaterinburg,
Russia

²) Institute of Industrial Ecology UB RAS, Yekaterinburg, Russia

The development of a measuring complex to monitor the concentration of atmospheric aerosol PM_{2.5} and meteorological parameters of the surface air is presented. The main components of the complex are discussed, the concept of a network for environmental studies is introduced. Some results of aerosol.

Циклические измерения содержания аэрозольных микрочастиц в приземном слое воздуха населённых пунктов являются важной задачей, поскольку аэрозоли способны оказывать пагубное влияние на здоровье живых организмов. Особое внимание уделяется взвешенным частицам с характерным аэродинамическим диаметром до 2,5 мкм – PM_{2.5} [1]. Частицы такого размера легко проникают в органы дыхания, преодолевают тканевый барьер и распространяются с кровью по телу, что может снизить качество жизни организма и вызвать различные, порой неизлечимые, заболевания [2]. По этой причине во всём мире ведутся наблюдения за качеством воздуха в населённых пунктах, чтобы обеспечить безопасность жителей путём контроля за концентрацией аэрозолей в атмосфере.

Одним из основных направлений деятельности Института пром. экологии УрО РАН является наблюдение за атмосферными примесями в г. Екатеринбурге. Проводятся круглогодичные измерения содержания аэрозоля PM_{2.5} в приземном слое воздуха по принципу «город-фон»: на территории Института в Екатеринбурге («город») и на площадке Коуровской астрономической обсерватории («фон») [3]. Однако, результаты измерения в единственном городском пункте дают приблизительную оценку качества воздуха и представляют ценность только

мощности и сопротивления. Информация о состоянии нагрузки отображается на индикаторе, а также может быть передана в компьютер.

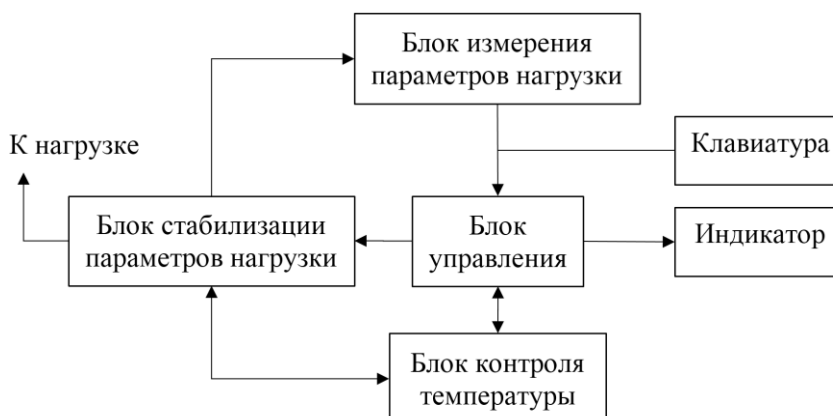


Рис. 1. Рисунок 1 – Структурная схема модульного многодиапазонного источника питания с защитой по току

Принцип работы электронной программно-управляемой нагрузки следующий: оператор с помощью клавиатуры и индикатора вводит желаемые параметры работы устройства, в результате чего микроконтроллер (МК) формирует команду блоку управления, который устанавливает заданный режим работы и величину контролируемого параметра на блоке стабилизации параметров нагрузки. Блок измерения параметров нагрузки формирует величины, пропорциональные напряжению и току в цепи нагрузки и передаёт их в встроенный аналогово-цифровой преобразователь МК. Датчик температуры измеряет и передаёт информацию о текущем состоянии блока стабилизации параметров нагрузки и, в случае его нагрева, МК включает охлаждение, при критических температурах нагрузка отключается.

Созданный экспериментальный образец программно-управляемой нагрузки реализует режимы стабилизации тока, напряжения, сопротивления или мощности, с указанными в техническом задании диапазонами напряжения и тока.

1. Кофлин Р., Дрисколл Ф. Операционные усилители и линейные интегральные схемы. -: Мир, 1979
2. Хоровиц П., Хилл У., Искусство схемотехники: В 3 тома: Т.1. Пер. с англ. – 4-е изд., перераб. и доп. – М.: Мир (1993).
3. Дедюхин А.А., Современные электронные нагрузки и особенности их использования для тестирования источников питания, Мир измерений. 2008. № 5. С. 52-53.
4. Гусев В.Г., Нефедьев А.И. Современные устройства для тестирования импульсных блоков питания, Энерго- и ресурсосбережение: промышленность и транспорт. 2020. № 2 (31). С. 50-53.

ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОГРАММНО-УПРАВЛЯЕМАЯ НАГРУЗКА

Унгвицкий Г.И.¹, Моисейкин Е.В.¹, Устьянцев Ю.Г.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: u2012gleba@gmail.com

THE PROGRAM CONTROLLED ELECTRONIC LOAD

Ungvitskii G.I.¹, Moiseykin E.V.¹, Ustiantsev U.G.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The Program controlled electronic load has been developed. The device consists of the load parameter stabilizer, the control unit, the load parameter meter, the temperature control unit and an LCD with a keyboard.

Радиоэлектронная аппаратура не может работать без источника электропитания. Перед использованием источника питания важно позаботиться о том, чтобы заявленные параметры соответствовали действительности и характеристики блока питания при различных параметрах нагрузки удовлетворяли необходимым требованиям. Для решения таких задач применяют устройства, называемые электронной нагрузкой.

Электронная нагрузка – это прибор, предназначенный для имитации различных режимов работы реальной электрической нагрузки. При этом электронная нагрузка может работать в нескольких режимах потребления, таких как режим постоянного сопротивления, тока, мощности или напряжения. Также большинство моделей электронных нагрузок поддерживают режим изменения характеристик по закону, заданному пользователем, что позволяет реализовать сложные алгоритмы тестов, максимально соответствующие работе проверяемых устройств в реальных условиях.

В результате анализа современного состояния и тенденций развития электрических источников электропитания, с учетом параметров оборудования, для которого предполагается использовать электронную нагрузку, была поставлена задача выполнить проектирование и изготовление электронной программно-управляемой нагрузки со следующими характеристиками: для постоянного напряжения $\pm 50\text{В}$ и $\pm 50\text{А}$, для переменного – амплитудой до 50В и 50А . Кроме того, необходимо было реализовать возможность выбора режима работы и задание значений параметров нагрузки.

В результате проделанной работы был изготовлен экспериментальный образец программно-управляемой нагрузки, в составе которого присутствуют стабилизатор, измеритель параметров протекающего тока и напряжения, а также ряд других вспомогательных узлов (рисунок 1). Измеритель тока и напряжения предназначен для определения текущих значений тока, напряжения и, соответственно,

ФОРМИРОВАТЕЛЬ ВЫСОКОВОЛЬТНЫХ ИМПУЛЬСОВ ЗАПУСКА ГАЗОРАЗРЯДНОГО ГЕНЕРАТОРА ПОТОКА ЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ

Торопов Ф.А.^{1,2}, Щербинин С.В.^{1,2}, Бекетов И.В.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Fedor.Toropov@urfu.me

HIGH-VOLTAGE PULSE GENERATOR FOR STARTING A GAS- DISCHARGE GENERATOR OF METAL PARTICLE FLOW

Toropov F.A.^{1,2}, Shcherbinin S.V.^{1,2}, Beketov I.V.²

¹⁾ Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg

²⁾ Institute of Electrophysics UB RAS, Yekaterinburg, Russia

The report presents the operation of the generator based on a single-stage asymmetrical half-bridge converter. The features of the circuitry of a pulse generator of microsecond duration with an amplitude of up to 20 kV, following with a frequency of up to 5 kHz, are considered.

Метод получения наночастиц с помощью электрических разрядов в газовой камере является довольно новым и перспективным, поскольку позволяет работать на частотах вплоть до десятков килогерц. Формирование высоковольтных разрядов на высокой частоте требует не только применения мощных импульсных устройств, но и обеспечения высокой надежности формирователя, подключенного к разрядному промежутку. В докладе рассмотрена работа формирователя на основе одноконтного асимметричного полумостового преобразователя. Приведены преимущества полумостового преобразователя по сравнению с другими одноконтными схемами. Расчетные параметры схемы сравниваются с данными схемотехнического моделирования, произведенного в программе Micro-Cap, а также с результатами измерений и осциллограммами токов и напряжений, полученными в результате работы формирователя. Рассмотрены особенности конструкции выходного высоковольтного трансформатора и обостряющего разрядника, позволяющих формировать импульсы микросекундной длительности амплитудой до 20 кВ, следующих с частотой до 5 кГц.

1. Семенов Б. Ю. Силовая электроника: от простого к сложному. / М.: СОЛОН-Пресс, 2005. — 416 с.
2. Высокопроизводительное получение наноразмерных частиц в импульсно-периодическом многоазорном газоразрядном генераторе / В.В. Иванов, А.А. Ефимов, Д.А. Мыльников, А.А. Лизунова, А.В. Багазеев, И.В. Бекетов, С.В. Щербинин // Письма в ЖТФ. — 2016. — № 16. — С. 95-101.

AVR, производства компании Atmel, Arduino NANO. В качестве питания используется промышленное стандартное напряжение сети 220 В 50 Гц, которое понижается при помощи трансформатора. Предусмотрен выпрямитель с фильтром для сглаживания пульсации напряжения, подаваемого на схему. Напряжение питания соленоидов составляет 80 В, что достаточно для формирования резкого фронта тока и позволяет использовать низковольтные ключевые элементы с приемлемыми характеристиками. Кроме того, трансформатор обеспечивает гальваническую развязку в установке, что делает ее безопасной для работы в лабораторных условиях.

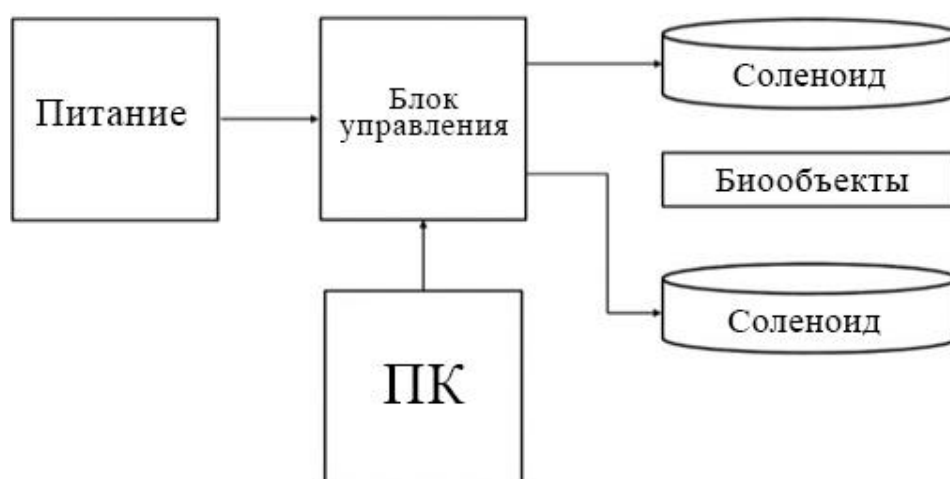


Рис. 1. Блок-схема станда МТУ

В данном лабораторном стенде магнитотерапевтического устройства формируемые в индукторах импульсы тока могут быть различной полярности и, за счет высокочастотного способа формирования импульсов, обладают коротким временем фронта и спада.

С использованием лабораторного станда магнитотерапевтического устройства будут получены, обобщены и систематизированы данные о влиянии постоянного и переменного импульсного магнитного поля заданных характеристик на клеточные культуры.

1. Пат. 2653638 Российская Федерация, МПК А61N 2/00. Стационарное устройство для воздействия низкочастотным магнитным полем на медико-биологические объекты, система управления и формирования импульсов, индуктор магнитного поля и система механического привода стационарного устройства / Волобуев А. П., Волобуев П. В., Новоселов В. П. и др.; заявитель и патентообладатель Волобуев А. П., Усков Е. Д. – № 2017120087; заявл. 30.05.17; опубл. 11.05.2018, Бюл. №14. – 22 с.
2. Силина Е.С. Влияние постоянного и переменного магнитного поля на клеточную культуру: магистерская диссертация. Екатеринбург: УрФУ, кафедра ЭФ 2021, 46 с.

ЛАБОРАТОРНАЯ МАГНИТОТЕРАПЕВТИЧЕСКАЯ УСТАНОВКА

Баранова А.А.¹, Суворова О.И.¹, Хохлов К.О.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: hausting0@gmail.com

LABORATORY MAGNETOTHERAPY UNIT

Baranova A.A.¹, Suvorova O.I.¹, Khokhlov K.O.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

Mobile laboratory stand for the analysis of processes induced by a magnetic field at the cellular level. The stand control unit is an industrial product based on the AVR series microcontroller manufactured by Atmel, Arduino NANO. The parameters are controlled by a personal computer.

Магнитное поле определенных частот запускает такие физико-биологические процессы в опухолевых клетках, которые приводят к их гибели. Известно множество терапевтической магнитоимпульсной аппаратуры, которая используется в онкологии, физиотерапии и научных исследованиях. Одним из таких является стационарное магнитотерапевтическое устройство для воздействия низкочастотным магнитным полем на медикобиологические объекты, которое осуществляет эффективное локальное воздействие на биообъекты импульсным низкочастотным магнитным полем с регулируемыми в широком диапазоне параметрами [1]. Данное устройство имеет большие габариты, что делает его неудобным для анализа процессов, индуцируемых магнитным полем на клеточном уровне. В связи с этим на основе этой установки был разработан переносной малогабаритный лабораторный стенд, который позволяет проводить подобные исследования.

Данный стенд обладает рядом существенных недостатков, связанных с невозможностью задания параметров магнитного поля оператором, не обладающим навыками программирования, а также использованием макетной платы, вместо печатной, поэтому возникла необходимость его доработки [2]. Целью работы стала модернизация лабораторного стенда магнитотерапевтической установки. Для этого реализованы следующие задачи: разработка печатной платы лабораторного стенда, разработка программы и интерфейса для удобного задания параметров магнитного поля оператором.

Стенд содержит два соленоида, в пространство между которыми помещается исследуемый объект, блок управления, который выполняет функцию формирования импульсов тока в соленоидах, и, соответственно, импульсов магнитного поля в пространстве между катушками индуктивности, блока питания и подключается к ПК, с помощью которого выполняется выбор режима работы. В качестве блока управления выступает промышленное изделие на базе микроконтроллера серии



Рис. 1. Опыт потерь в режиме Холостого Хода

*Осотову Вадиму Никифоровичу
Давиденко Ирине Васильевне*

1. ГОСТ 11677-85. Трансформаторы силовые. Общие технические условия.
2. ГОСТ 3484.1-88. Трансформаторы силовые. Методы электромагнитных испытаний.
3. Сборник методических пособий по контролю состояния электрооборудования. Раздел 2. Методы контроля состояния силовых трансформаторов, автотрансформаторов, шунтирующих и дугогасящих реакторов. – М.: ОРГРЭС, 1997 г.

ИЗМЕРЕНИЯ РЕАЛЬНЫХ ПОТЕРЬ В СТАЛИ СИЛОВЫХ ТРАНСФОРМАТОРОВ. ПРЕДЛОЖЕНИЯ ПО ОПТИМИЗАЦИИ ИТС С УЧЕТОМ ПОЛУЧЕННОГО ОПЫТА

Суханов А.Ю.¹

¹) ООО "ХитаچیЭнерджи"

E-mail: aleksey.sukhanov@hitachienergy.com

REAL POWER TRANSFORMER LOSSES IN THE CORE. PROPOSAL FOR TCI OPTIMIZATION, BASED ON EXPERIENCE

Sukhanov A.Yu.¹

¹) Hitachi Energy Ltd.

There is not enough experience at present time to assess the real core steel losses of power transformers during tests at customer side, when nominal level test voltage is not available. Autor has spent steel losses assessment using test nominal voltage and low level test voltage.

Проведен комплекс измерений потерь в стали пяти силовых трансформаторов 125 МВА после 7 полных лет их эксплуатации. В результате проведенных работ заводом-изготовителем подтвержден заявленный уровень реальных потерь в режиме ХХ трансформатора после его эксплуатации в течение 8 лет, несмотря на динамику роста расчетных потерь по результатам измерений при малом напряжении.

Критерии оценки состояния магнитопровода трансформаторов по результатам измерения потерь ХХ при малом напряжении, разработанные для трансформаторов, изготовленных 30-50 лет назад не применимы для современных трансформаторов, изготовленных из электротехнической стали по современным интенсивным технологиям. Внести предложение по доработке критериев оценки ИТС в автоматизированной программе БИНГ-4.

Для оценки ИТС узла "магнитопровод" предложить внести изменения с целью учета результатов хроматографического анализа масла с целью выявления нагретых элементов конструкций, в том числе магнитопровода, и содержания фурановых производных в масле. Внести предложение считать нецелесообразным содержащиеся в ГОСТ 3484.1-88 критерии оценки реальных потерь в стали трансформатора по увеличению на 30% расчетных потерь относительно результатов подобных измерений в прошлый оценочный период. Установить четкие критерии оценки соответствия состояния магнитопровода с целью обеспечения нормальной эксплуатации силового трансформатора.

в ракурсе решения поставленной задачи. В итоге предлагается использовать навигационную систему, имеющую в своем составе три опорных маяка, расположенных на некотором возвышении от стенок лабиринта. При выборе метода учитывались возможность использовать недорогое и распространённое оборудование, а также возможность произвольного размещения маяков. Анализ позиции робота осуществляется по методу «angle of arrival» (АОА). Определяются углы прихода сигналов от маяков, координаты которых известны, а затем вычисляются координаты положения робота [4,5].

Вращающийся ультразвуковой приемник, расположенный на оси сервопривода позволяет определить углы на маяки, с которых приходит сигнал, относительно своей оси. В процессе прохода лабиринта роботы поочередно обмениваются текущими координатами своего положения, в результате чего при приближении к препятствию задача определения «свой-чужой» будет решена и будет возможно движение группой без столкновений между собой.

В работе рассматриваются особенности реализации взаимодействия роботов для прохождения незнакомого объекта типа лабиринт на основе выбранных методов.

1. Карпов В.Э. Коллективное поведение. Желаемое и действительное. // Современная мехатроника: Сб. научных трудов Всероссийской научной школы. - Орехово-Зуево, 2011. - С.35-51.
2. Субботин Н.В. Разработка мобильного робота для самостоятельного прохождения объекта типа лабиринт //Гагаринские чтения - 2021: Сборник тезисов докладов. - М.: Перо, 2021. - С. 739-740.
3. Субботин Н.В., Чудинова К.В. Конструктивные особенности мобильного робота на базе Arduino для самостоятельного прохождения односвязного лабиринта //Современные проблемы естествознания. Инженерный анализ объектов обеспечения авиации: Сборник статей по материалам VIII научно-практической конференции "Молодежные чтения, посвященные памяти Ю.А.Гагарина" 18-20 мая 2021 г. - Воронеж: ВУНЦ ВВС "ВВА", 2021. - С. 130-133.
4. Богомолова Е.С. Инженерная геодезия. Часть 1: Учебное пособие / Е.С. Богомолова и др. – СПб.: Петербургский гос. ун-т путей сообщения, 2006.
5. Большаков В.Д. Справочник геодезиста. Книга 2 / В.Д. Большаков и др. - М.: Недра, 1985.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ НАВИГАЦИИ ГРУППЫ РОБОТОВ ДЛЯ ПРОХОЖДЕНИЯ НЕЗНАКОМОГО ОБЪЕКТА ТИПА ЛАБИРИНТ

Субботин Н.В.¹, Чудинова К.В.¹

¹) Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина» (ВУНЦ ВВС ВВА), г. Воронеж, Россия
E-mail: tiger1511@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A NAVIGATION SYSTEM FOR A GROUP OF ROBOTS TO PASS AN UNFAMILIAR OBJECT SUCH AS A LABYRINTH

Subbotin N.V.¹, Chudinova K.V.¹

¹) Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh, Russia

The paper considers the features of the implementation of the interaction of robots for passing an unfamiliar object such as a labyrinth based on a navigation system for reference beacons.

Одним из актуальных направлений в области робототехники является групповая робототехника, суть которого состоит в разработке и координации систем группы роботов. Коллективное поведение возникает в процессе деятельности роботов в группе и их взаимодействия с окружающим миром. Сложное организованное поведение всех членов группы может сформироваться в том числе за счет правил поведения индивида. Однако главным фактором является деятельность, возникающая между членами группы, которая, в свою очередь, создаёт систему постоянного обмена данными в условиях обратной связи, имеющая целью сделать поведение всей группы адекватным в определенных условиях [1].

Актуальной задачей робототехники является обеспечение навигации роботов в пространстве, то есть анализ обстановки и выбор маршрута движения без участия человека. В работах [2] и [3] представлены результаты по разработке робота, способного проходить односвязные лабиринты. Целью данной работы является разработка роботов, способных проходить лабиринт в группе. Без пересмотра уже имеющегося результаты групповое прохождение лабиринта не представляется возможным: роботы принимают друг друга за препятствие, в следствие чего начинают двигаться хаотично, отставая от группы или уходя в противоположную сторону от выхода. Для перемещения роботов группой необходимо, чтобы каждый член группы знал положение в пространстве не только свое, но и любого другого члена группы и держался на определенном расстоянии от них, в то же время двигаясь к выбранной цели. Рассмотрены наиболее распространенные варианты определения положения робота в пространстве, а именно: 1) одометрия; 2) инерциальные системы; 3) лидар; 4) оптическая система позиционирования; 5) система навигации по опорным маякам. Обобщены их достоинства и недостатки

контрольные точки, для которых в сменном модуле предусмотреть контактные площадки, подключаемые к требуемым генераторам и аналоговым входам. Подавая необходимую последовательность сигналов на тестируемое устройство, фиксируют значения напряжения в контрольных точках и, сравнивая их с эталонными, можно сделать вывод о корректности его функционирования.

В настоящее время ведется разработка нескольких сменных модулей предназначенных для исследования схем с дискретными полупроводниковыми приборами, в том числе с управлением и контролем температуры, схем на операционных усилителях, цифровых элементах.

1. Раннев Г. Г., Суругина В. А., Калашников В. И. и др., Информационно-измерительная техника и электроника. М.: Академия, 2006.
2. Шеин А.Б., Лазарева Н.М., Методы проектирования электронных устройств, Инфра-Инженерия (2011).

- 4) формирование сигнала ШИМ с заданными параметрами;
- 5) генерацию цифровой последовательности (до 8 бит);
- 6) управление несколькими SPI-устройствами на сменном модуле;
- 7) измерение напряжения в 8 контрольных точках исследуемой схемы в диапазоне ± 12 В;
- 8) измерение напряжения в любой точке исследуемой схемы в диапазоне ± 12 В с помощью внешних щупов.

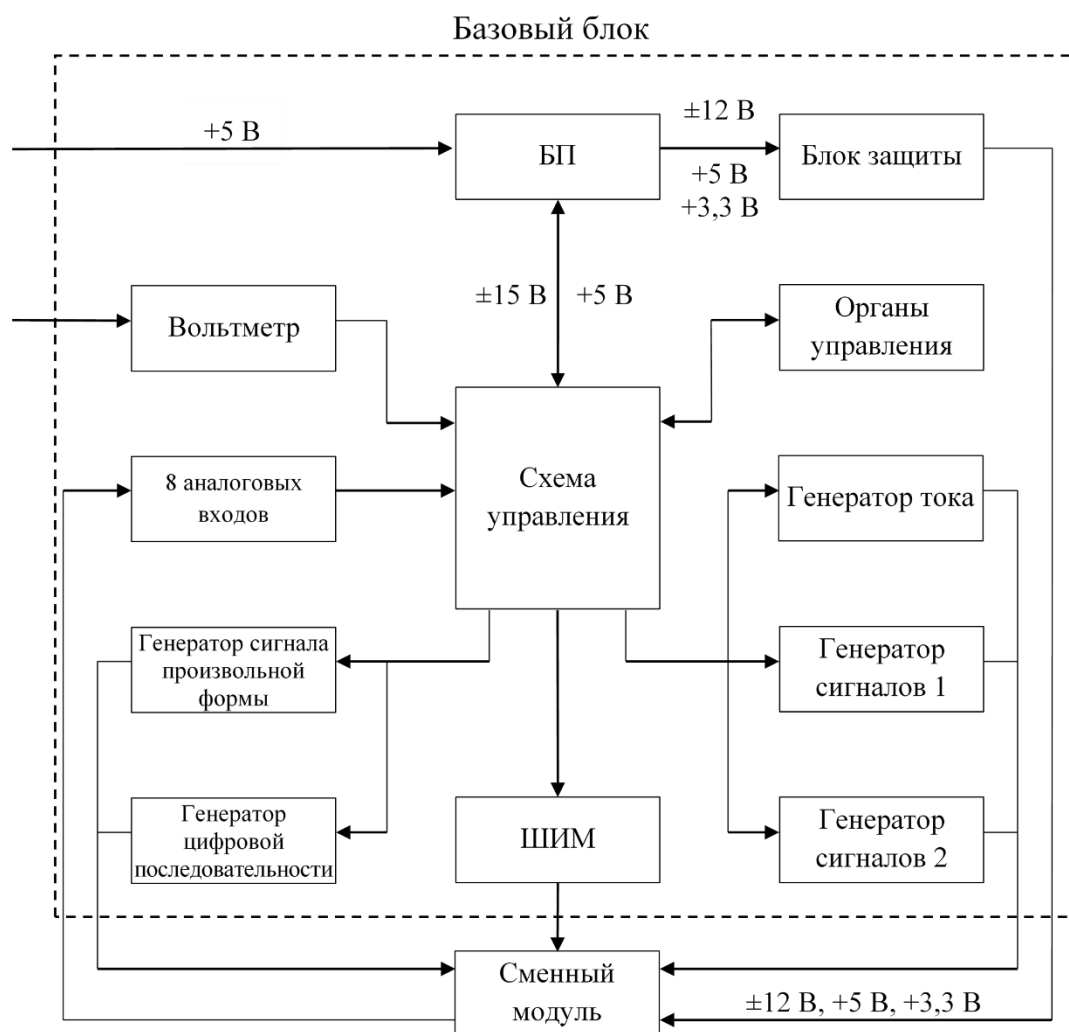


Рис. 1. Функциональная схема стенда для исследования функционирования и проведения тестирования электронных схем

С учетом функциональных возможностей базового блока студенты могут подавать требуемые сигналы на вход исследуемых схем, контролировать напряжения в заданных узлах схемы, что безусловно повысит глубину и уровень понимания функционирования электронных элементов и схем.

Кроме того, базовый блок может быть использован для проведения функционального тестирования малых электронных устройств. Для этого, при трассировке печатной платы тестируемого устройства необходимо сформировать

СТЕНД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ И ПРОВЕДЕНИЯ ТЕСТИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СХЕМ

Симонов Н.А.¹, Моисейкин Е.В.¹, Устьянцев Ю.Г.¹

¹) Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
E-mail: nykytas@rambler.ru

STAND FOR RESEARCH OF FUNCTIONING AND TESTING OF ELECTRONIC CIRCUITS

Simonov N.A.¹, Moiseykin, E.V.¹, Ustiantsev U. G¹

¹) Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin»

Stand for research of functioning and testing of electronic circuits has been developed. The device consists of microcontroller, electrical signal generator, current source, LCD and keyboard.

Современный уровень развития программного обеспечения позволяет решать задачи моделирования функционирования электронных схем на очень высоком уровне. Существуют коммерческие и бесплатные программные продукты, реализованные как в виде приложений для различных операционных систем, так и в виде веб-приложений. Однако для глубокого понимания функционирования электронных схем студентам, обучающимся по специальностям, ориентированным на разработку электронных устройств, необходимо проходить лабораторный практикум с использованием реальных электронных элементов. В связи с чем, целью данной работы являлась разработка универсального стенда для исследования функционирования электронных схем, с возможностью быстрой замены исследуемой схемы. Функциональная схема разработанного устройства показана на рисунке 1.

Обеспечение требования быстрой замены исследуемой схемы осуществляется разделением устройства на две части: базового блока и сменных модулей. Базовый блок обеспечивает формирование и генерацию электрических сигналов для проведения исследования и измерение отклика электронной схемы. Сменный модуль содержит исследуемую схему. Базовый блок позволяет выполнять следующие функции:

1) генерацию 2 независимых сигналов синусоидальной, треугольной или прямоугольной форм с регулировкой частоты (1 Гц – 1 МГц), амплитуды (± 5 В) и смещения сигнала (± 5 В);

2) формирование постоянного тока с возможностью его регулировки в диапазоне ± 24 мА;

3) генерацию сигнала с помощью ЦАП с амплитудой ± 12 В;

подмагничиванию, либо в областях максимального градиента магнитного поля при отсутствии внешнего подмагничивания.

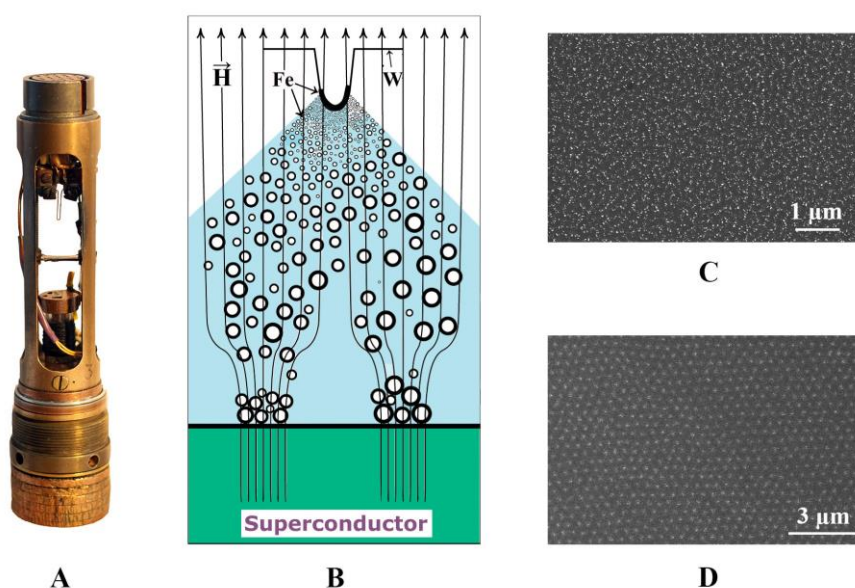


Рис. 1. Техника декорирования. А - внешний вид камеры декорирования, В - схема эксперимента, С - визуализация ферромагнитных доменов в тонкой плёнке CuNi , D - визуализация вихрей Абрикосова в ВТСП-монокристалле BSCCO .

После декорирования частицы достаточно прочно задерживаются на образце Ван-дер-Ваальсовыми силами, что позволяет сохранить картину магнитной структуры при отогреве образца до комнатной температуры и исследовать её с помощью сканирующего электронного микроскопа.

Типичный пример картины декорирования - визуализация доменной структуры тонкой ферромагнитной плёнки $\text{Cu}_{0.49}\text{Ni}_{0.51}$ (Рис. С) и вихрей Абрикосова в кристалле ВТСП (Рис. D). В настоящее время методика успешно применяется в исследованиях магнитной структуры нового класса веществ – железо-арсенидных ферромагнитных сверхпроводников, в том числе в узкой области сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма [1].

Основные характеристики методики:

- разрешение неоднородностей магнитного потока - $\leq 100\ \text{nm}$,
- температура декорирования - от $\sim 2\ \text{K}$ до $30\ \text{K}$ и выше,
- индукция постоянного магнитного поля - $\leq 0,3\ \text{Tл}$ (определяется внешним съёмным соленоидом).

1. Винников Л.Я., Вещунов И.С., Сидельников М.С., Столяров В.С., Егоров С.В., Скрыбина О.В., Джао В., Цао Г., Тамегай Т. Письма в ЖЭТФ 109 (2019), 530–534. DOI 10.1134/S0370274X19080071. English version: JETP Letters 109 (2019), 521–524. DOI 10.1134/S0021364019080137.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕХНИКА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ДЛЯ ДЕКОРИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МАГНИТНОГО ПОТОКА

Сидельников М.С.¹, Вещунов И.С.², Винников Л.Я.¹

¹) Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия

²) Токийский университет, Токио, Япония

E-mail: m.s.sidelnikov@mail.ru

HIGH-RESOLUTION BITTER DECORATION TECHNIQUE FOR LOW TEMPERATURES

Sidelnikov M.S.¹, Veshchunov I.S.², Vinnikov L.Ya.¹

¹) Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Russia

²) The University of Tokyo, Japan

We present the high-resolution technique to visualize magnetic flux structure of superconductors and magnets at low temperatures. The method is based on magnetic nanoparticles preparation in situ low-temperature experiment by magnetic matter evaporation over sample surface in helium atmosphere.

Структура магнитного потока представляет как научный интерес при исследовании веществ с магнитными неоднородностями, так и практический (например, для контроля качества или восстановления данных с жёстких дисков и прочих магнитных носителей). Для визуализации микроструктуры магнитного потока применяются такие техники, как магнито-силовая зондовая микроскопия (MFM); оптическая микроскопия с использованием магнитооптического эффекта Керра; методики электронной микроскопии, чувствительные к спиновой поляризации электронов (SEMPA); а также метод Биттера, который заключается в притяжении намагниченных частиц к областям магнитной неоднородности. Метод Биттера, в котором изначально использовались коллоидные магнитные частицы в жидкой среде, к настоящему времени претерпел существенные изменения.

В данной работе представлена установка для декорирования поверхности образца магнитными наночастицами железа (приготовленными in situ) в разреженной атмосфере гелия при криогенных температурах в магнитном поле. Установка представляет собой заливной гелиевый криостат и вставку с камерой декорирования. В камере декорирования (Рис. 1А) располагаются вольфрамовый испаритель, экран от теплового излучения испарителя, образец на столике с нагревателем и термометр. В процессе эксперимента вакуумируемая вставка заполняется газообразным гелием и охлаждается в криостате. Испаритель разогревается электрическим током, в результате этого железо испаряется. Атомы железа, соударяясь друг с другом и с атомами газа, слипаются в кластеры нанометровых размеров и оседают на поверхность образца (Рис. 1В). В зависимости от наличия внешнего магнитного поля, подмагничивающего частицы, осаждение происходит преимущественно либо в областях образца с намагниченностью, сонаправленной

2. Wei Hung-Yu. Wi-Fi, WiMAX, and LTE multi-hop mesh networks: basic communication protocols and application areas / Hung-Yu Wei. – Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Ltd, 2013. – 280 p.
3. Кукк К. И. Спутниковая связь: прошлое, настоящее, будущее / К. И. Кукк – М.: Горячая линия – Телеком, 2015. – 256 с.
4. Chen Zhi Ning. Handbook of Antenna Technologies / Zhi Ning Chen, Duixian Liu, Hisamatsu Nakano. – Singapore: Springer, 2016. – 3470 p.
5. Shishkin Mikhail S. Wideband High-Gain Dual-Polarized Antenna for 5G Communications / Mikhail S. Shishkin // XV International Scientific-Technical Conference on Actual Problems of Electronic Instrument Engineering (APEIE). – Novosibirsk, Russian Federation, 2021.

диапазонах и поддерживают несколько технологий, например, ретранслятор сигналов мобильной связи может усиливать сигналы DCS (1710–1880 МГц), UMTS (1920–2170 МГц) и LTE (2500–2690 МГц) [1,2]. Антенна для такого устройства должна иметь полосу согласования около 45%, кроме того, иметь достаточно высокий коэффициент усиления.

В работе выполнен сравнительный анализ различных конструкций многослойных печатных антенн, часть из которых показана на рисунке 1. Все конструкции были смоделированы в специальном программном обеспечении ANSYS Electronics HFSS Design. Выполнен сравнительный анализ полученных характеристик.

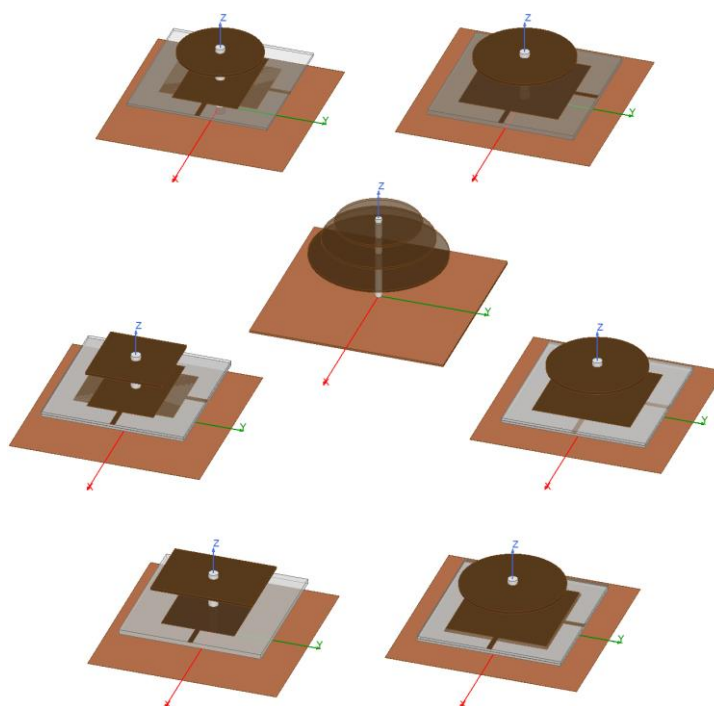


Рис. 1. Варианты конструкций широкополосных печатных антенн

Печатные антенны наиболее популярны в настоящее время. Среди их основных достоинств простота конструкции, малые объемы, масса, стоимость, хорошая воспроизводимость характеристик, возможность создания маловыступающих конструкций. Главным недостатком печатной антенны является ее узкая рабочая полоса частот, которая составляет около 2,5% [4].

Применяя многослойные структуры, можно существенно расширить рабочую полосу частот печатной антенны, при этом, сохраняя симметрию конструкции, можно добиться излучения поля в двух ортогональных поляризациях. Применяя такие излучатели в составе зеркальной антенны или антенной решетки, можно добиться высокого коэффициента усиления [4,5].

1. Sauter M. From GSM to LTE-Advanced Pro and 5G / M. Sauter. – Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Ltd, 2017. – 537 p.

АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ КОНСТРУКЦИЙ ШИРОКОПОЛОСНЫХ ПЕЧАТНЫХ АНТЕНН

Шишкин М.С.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина

E-mail: mikhail.shishkin@urfu.me

ANALYSIS OF VARIOUS DESIGNS OF WIDEBAND PRINTED ANTENNAS

Shishkin M.S.¹

¹) «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin»

Various designs of wideband printed antennas are presented; the simulation of antennas was carried out using the ANSYS Electronics HFSS Design. Based on the simulation results obtained, a comparative analysis of the characteristics of the antennas was performed.

Антенна является неотъемлемой частью любой радиотехнической системы. Необходимость в разработке новых типов антенн вызвана постоянным развитием и модернизацией существующих технологий.

Рассмотрим пример системы передачи данных, где требования к качеству и скорости передачи постоянно растут. Если около 20 лет назад популярной была система второго поколения мобильной связи GSM, которая работала в узкой полосе частот 890–960 МГц (890–915 МГц в канале uplink и 935–960 МГц в канале downlink), что составляет около 8%, то сегодня, наряду с существующими системами третьего и четвертого поколений активно развиваются технологии пятого поколения. Рабочая полоса частот современных широкополосных систем связи может достигать 20% и более (например, 5G band n78: 3300–3800 МГц или Wi-Fi: 5160–5825 МГц) [1,2].

Помимо систем наземной мобильной связи существует достаточно большое количество систем, работающих в широкой полосе частот. Например, для систем фиксированной спутниковой связи выделены частоты 5900–6400 МГц в канале uplink и 3700–4200 МГц в канале downlink, что соответствует полосам согласования 8% и около 13% соответственно. Системы подвижной спутниковой связи работают в диапазонах 1530–2700 МГц и 2700–3500 МГц (55% и 26%) [3]. Существуют также системы радиолокации, использующие широкополосные и сверхширокополосные сигналы.

Для многих систем передачи данных используется частотный дуплекс, где применение одной антенны для приема и передачи может существенно снизить вес и объем терминала связи, однако такая антенна должна обеспечить полосу согласования, покрывающую диапазоны и передачи, и приема. Более того, многие современные устройства работают сразу в нескольких независимых

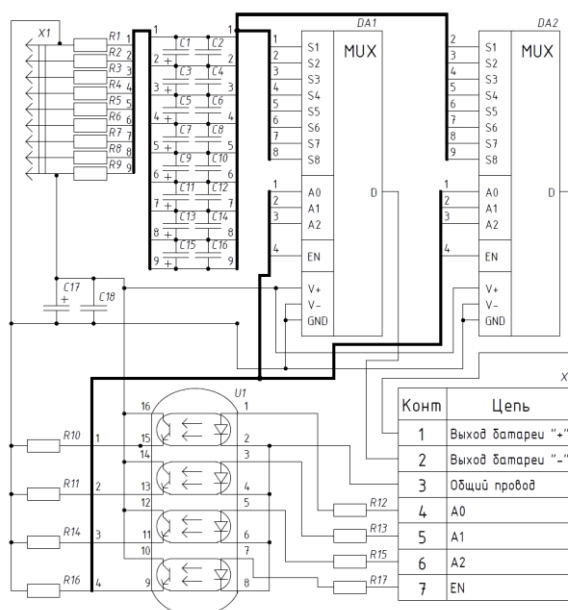


Рис. 1. Схема электрическая принципиальная платы низковольтных мультиплексоров

Для того, чтобы объединить сигналы с 4 плат низковольтных мультиплексоров, на отдельной плате используется высоковольтный мультиплексор фирмы MAXIM MAX14753. К нему можно подключить до 4 выходов с плат низковольтных мультиплексоров и поочередно переключать.

При помощи запрограммированного микроконтроллера можно управлять 4 платами низковольтных и платой высоковольтных мультиплексоров. Переключая их по специальному алгоритму, на выходе MAX14753 будет напряжение одной из 32 подключенных ячеек батареи, которое можно измерять при помощи АЦП микроконтроллера. Устройство позволяет подключать батареи с напряжением до 70 В, а значит это могут быть батареи, состоящие, например, из 16S LiPo, либо из 19S LiFePo4, или 27S ячеек LTO.

В рамках работы был разработан следующий алгоритм оценки износа ячеек. Устройство во время работы непрерывно считывает напряжения с 32 ячеек и дополнительно измеряет общий ток нагрузки батареи при помощи датчика тока ACS712. При токе $>1C$ для каждой из ячеек вычисляется плотность распределения напряжений. Для этого считается количество вхождений измеренных напряжений в заранее выбранные интервалы для каждой из ячеек. Для LiFePo4 батарей предлагается использовать интервалы 2.5-2.9-3.1-3.2-3.3-3.5. Напряжение средней точки LiFePo4 3.2-3.3 В, следовательно ячейки с наибольшим количеством вхождения в интервал 3.1-3.2 и тем более 2.9-3.1 по сравнению с остальными на батарее выдают меньшую мощность и могут рекомендоваться к замене. Интервал 2.5-2.9 не рассматривается так как это уже полная разрядка.

1. Kai G. Prognostics in Battery Health Management. 2008, DOI:10.1109/MIM.2008.4579269.

УНИВЕРСАЛЬНАЯ АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА МОНИТОРИНГА И ОЦЕНКИ СОСТОЯНИЯ АККУМУЛЯТОРОВ

Сертаков В.В.¹, Прохоров Д. Л.¹

¹) Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

E-mail: vadimsertakov23@gmail.com

MULTIPURPOSE AUTOMATED SYSTEM FOR MONITORING AND EVALUATING THE CONDITION OF BATTERIES

Sertakov V. V.¹, Prokhorov D. L.¹

¹) Moscow Aviation Institute (National Research University)

In this work, the development of a system for monitoring the voltage of battery cells, as well as algorithms for assessing the state of the battery, is being developed.

В современном мире много электронной техники использует химические источники питания – аккумуляторы(ячейки) и их сборки.

Для повышения эффективности эксплуатации аккумуляторных сборок необходимо отслеживать и оценивать параметры их работы, например, чтобы защищать от перезаряда или вовремя заменять наиболее деградированные ячейки. Одним из параметров является напряжение ячеек в сборке во время эксплуатации [1]. Необходимо отметить, что достаточно малое количество моделей BMS (Battery management system) позволяют измерять напряжение всех ячеек и выдавать его в цифровом виде во время эксплуатации. Поэтому была произведена научно-исследовательская работа с целью разработки такой системы, а также алгоритма оценки состояния ячеек.

Существует много схемотехнических решений измерения напряжений ячеек. Одним из вариантов является способ на мультиплексорах - они путем своего переключения соединяют поэтапно каждую из ячеек аккумуляторной батареи с устройством считывания напряжения – к примеру, АЦП.

На рисунке приведена одна из схем устройства - плата низковольтных мультиплексоров. Мультиплексоры DA1 и DA2 марки DG408DJ производителя Vishay. К клемме X1 подключаются ячейки батареи, до 8 штук. Управление производится через контакты 3-7 разъёма X2, выход напряжения с ячеек батареи производится с контактов 1-2. В разработанном устройстве таких плат может применяться до 4 штук, что позволяет подключать очень большое количество ячеек – до 32.

calculations of dimensionless mass gas flow rate Q^* through a linearly converging channel, a linearly diverging channel, and through a straight channel as a function of the rarefaction parameter δ for the length to height ratio 1.

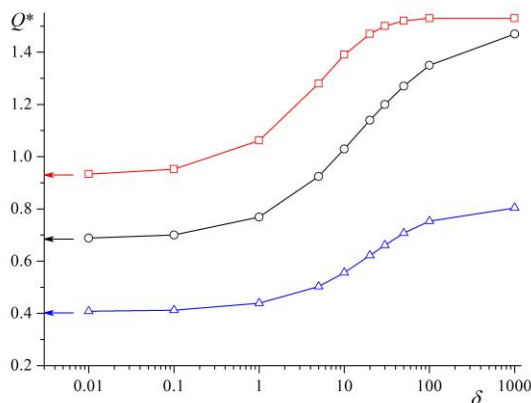


Рис. 1. The dimensionless gas mass flow rate Q^* through a linearly converging channel (triangles), a linearly diverging channel (squares), and through a straight channel (circles) as a function of the rarefaction parameter δ for the length to height ratio 1. The arrows indicate the free molecular limit.

The support by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation through the State Assignment for high educational institutions (the research project # FEUZ-2020-0057) is gratefully acknowledged.

1. Li, D. (Ed.). (2008). Encyclopedia of microfluidics and nanofluidics. Springer Science & Business Media, New York.
2. Sharipov, F., & Seleznev, V. (1998). Data on internal rarefied gas flows. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 27(3), 657-706.
3. Bird G.A. (1994). Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flow. Oxford University Press.
4. Sharipov, F. (2012). Benchmark problems in rarefied gas dynamics. Vacuum, 86(11), 1697-1700.

DIRECT STATISTICAL SIMULATION OF RAREFIED GAS FLOW IN CHANNELS OF VARIABLE CROSS-SECTION

Sazhin A.¹

¹) Sazhin O.

E-mail: oleg.sazhin@urfu.ru

Using the direct simulation Monte Carlo direct method, rarefied gas flow into a vacuum through a linearly diverging and converging channels has been studied.

Recently interest in studying rarefied gas flows is associated with the demand for a deep understanding of gas-dynamic processes occurring in micro and nanofluid devices [1]. Indeed, the operation of these devices significantly differs from the operation of its analogs. For example, inside a pressure-driven device with characteristic parameter 1 micron, the gas is rarefied even at atmospheric pressure. Description of rarefied gas flow is very different from a conventional approach based on solving Navier Stokes equations (NSE). To find a solution to the problem in a wide rarefaction range methods of kinetic gas theory should be applied, the main equation of which is the Boltzmann integrodifferential kinetic equation for the distribution function.

Traditionally rarefied gas flow has been studied in straight channels – channels with constant cross-section [2]. However, in practice, it is often the case that configurations of micro and nanofluid devices with complex geometry are in fact channels with complex geometry, mainly curved channels and channels with variable cross-section. As an example of such devices, we can name microturbines, micro and nano-separators, micro-pumps, micro-gyroscopes, thermal flow microsensors, micro heat pipes, and micro total analysis systems (or lab-on-a-chip systems).

Analyzing available literature it is possible to conclude that despite practical importance the pressure-driven rarefied gas flow through linearly diverging and converging channels has not been studied enough in both experimental and theoretical ways, in particular for rarefied gas flow into a vacuum. The purpose of the present work is to study in details the gas flow into a vacuum through a rectangular channel both with linear diverging and converging cross-sections in a wide range of rarefaction from free molecular up to near hydrodynamic flow regime. The problem will be solved in the complete geometrical setup, namely with including certain pre- and post-channel regions in the geometry under consideration. Due to a strong non-equilibrium process (outflow into a vacuum), it is appropriate to use the direct simulation Monte Carlo method [3] for solving a given problem.

One of the primary problems of rarefied gas dynamics (RGD) is the flow rate computation [4] which is why in the present work the mass flow rate through a channel is the main calculation quantity. As an example, figure demonstrates the results of

Разработанная программа выполняет расчет акустического тракта, расчет значений: напряжения на приемнике; давлений на излучателе и приемнике; коэффициента расхождения звука в изделии; отражательной способности дефекта; протяженности ближней зоны; пути звука до дефекта. Так же производится вывод значений для построения АРД диаграммы. При этом учитывается нескольких типов модельных отражателей, имеется возможность выбрать контролируемый материал из широкого списка, выбрать материал пьезопластины датчика.

На рис. 1а приведено изображение интерфейса разработанной программы с выполненными вычислениями для соответствующих преобразователя, пьезоматериала, материала изделия и отражателя.

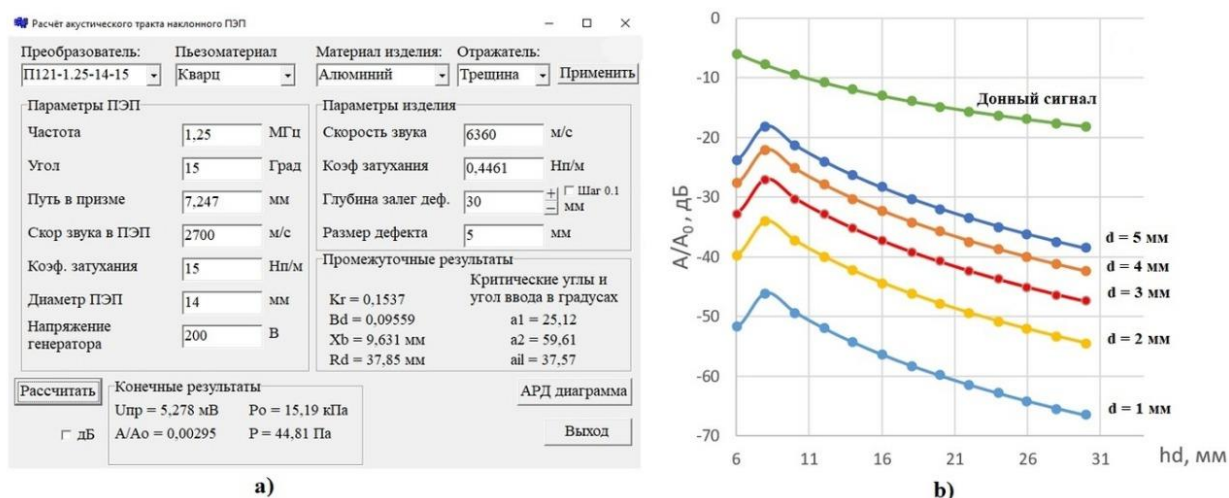


Рис. 1. Интерфейс программы с выполненными расчетами (а), АРД диаграмма, построенная по данным из программы (б).

Полученная АРД диаграмма (рис.1б) построена при измерении параметров сигнала, отраженного от трещины диаметрами 5, 4, 3, 2 и 1 мм, датчиком – П121-1.25-14-15, с материалом пьезоэлемента – кварцем, в алюминии. Так же на рисунке изображен донный сигнал. Полученные расчётные данные хорошо согласуются с физическими измерениями.

1. Неразрушающий контроль: Справочник: В 8 т. Под общ. ред. В.В. Клюева. Т. 3. И.Н. Ермолов, Ю.В. Ланге. Ультразвуковой контроль. 2-е изд., испр. М.: Машиностроение, 2008. 864 с.
2. Крауткремер И., Крауткремер Г. Ультразвуковой контроль материалов. М.: Металлургия, 1991. 340 с.

ПРОГРАММА РАСЧЕТОВ АКУСТИЧЕСКОГО ТРАКТА ДЛЯ НАКЛОННОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ В ЭХО-МЕТОДЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО КОНТРОЛЯ

Рябухин М.О.¹, Бирюков Д.Ю.^{1,2}, Зацепин А.Ф.^{1,2}

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский государственный университет путей сообщения, г. Екатеринбург,
Россия

E-mail: mor74647@gmail.com

CALCULATION PROGRAM OF THE ACOUSTIC PATH FOR THE INCLINED TRANSDUCER IN THE ECHO-METHOD OF ULTRASONIC TESTING

Ryabukhin M.O.¹, Biryukov D.Yu.^{1,2}, Zatsepin A.F.^{1,2}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Ural State University of Railway Transport, Yekaterinburg, Russia

The object of the research is the process of ultrasonic inspection of products by the echo-method. The program calculates the acoustic path of the sound wave, equipment parameters and characteristics of the sound wave. It is also possible to derive values for the construction of the DGS diagram.

Ультразвуковой контроль (УЗК) – это один из самых распространённых и информативных методов неразрушающего контроля, применимый к весьма широкому спектру различных материалов: металлов, диэлектриков, полупроводников [1, 2]. И одним из наиболее часто используемых методов УЗК является эхо-метод, представляющий собой не только метод контроля, но и метод исследования сред. Эхо-метод позволяет измерять акустические свойства сред, устанавливая корреляции состава материалов, их структуры и упругих, прочностных, акустических характеристик. В вопросах оптимального планирования эксперимента и подбора средств измерений может существенно помочь моделирование измерительного процесса при исследовании заданных материалов. Моделирование является весьма актуальным и при анализе экспериментальных результатов позволяя их корректно интерпретировать. Сравнение экспериментальных и расчётных результатов даёт возможность выбрать наиболее правильную интерпретацию из ряда возможных. Так же такие компьютерные программы, имеют важное значение и для подготовки новых специалистов в сфере неразрушающего контроля.

В связи со всем вышесказанным целью настоящей работы была разработка и апробация компьютерной программы, моделирующей работу виртуального ультразвукового эхо-дефектоскопа с наклонными преобразователями при акустических измерениях и неразрушающем контроле самых разнообразных твёрдых сред.

правило, данное программное обеспечение позволяет разработать комплексы машинного зрения для конвейерных линий с целью выявления крупных дефектов.

Решаемые задачи по проекту:

- ☐ разработать методику обнаружения и идентификации дефектов топологии печатной платы;
- ☐ разработка архитектуры нейронной сети, позволяющей производить обработку изображений от камер;
- ☐ разработка испытательного стенда для проведения исследовательских испытаний с целью подтверждения работоспособности разработанной архитектуры нейронной сети;
- ☐ доработка программного обеспечения с целью внедрения его на существующие системы управления конвейерными линиями на производствах;
- ☐ проведение опытного внедрения и апробации разработанного способа.

Для решения поставленных задач был разработан программный комплекс, позволяющий выявляющий дефекты на печатных платах с применением визуального способа контроля в полностью автоматическом режим. Апробация новых архитектур нейронных сетей для решения узконаправленных задач повлияет не только на развитие отрасли производства печатных плат, но и на научное направления глубокого обучения, машинного зрения и нейронных сетей в целом.

1. МЕТОДИКА ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОМЕХ НА ФУНКЦИОНИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СРЕДСТВ В ПРОЦЕССЕ ИХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ Ромащенко М.А., Васильченко Д.В., Рожненко С.Н. Радиотехника. 2021. Т. 85. № 6. С. 57-61.
2. Васильченко Д.В., Неклюдов А.Л., Ромащенко М.А. Программно-аппаратный комплекс тестирования электронных средств на воздействие электромагнитных помех // Радиолокация, навигация, связь: сб. тр. XXVI Междунар. науч.-техн. конф. Воронеж: Воронежский государственный университет 2020. С. 386-391.
3. Патент на полезную модель RU 189820 U1. Сканер ближнего электрического поля для двухсторонних и многослойных печатных плат/ Ромащенко М.А., Васильченко Д.В., Неклюдов А.Л., Готов В.В., Готова Т.С. 05.06.2019. Заявка № 2019108722 от 26.03.2019.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФЕКТНЫХ УЧАСТКОВ ПЕЧАТНЫХ ПЛАТ

Пухов Д.А.¹, Ромашенко М.А.¹, Васильченко Д.В.¹

¹⁾ Воронежский государственный технический университет
E-mail: puhov.dm22@yandex.ru

DEVELOPMENT OF A SOFTWARE PACKAGE FOR DETERMINING DEFECTIVE SECTIONS OF PRINTED CIRCUIT BOARDS

Puhov D.A.¹, Romashchenko M.A.¹, Vasilchenko D.V.¹

¹⁾ Voronezh State Technical University

One of the options intended for use at various stages of production and control is the use of deep neural networks and machine vision. This field of science is at the initial stage of introduction into human life, but it can allow automating the process.

Производство электронных устройств крупными партиями заставляет любое предприятие переходить к конвейерным линиям и максимальной автоматизации своего производства с целью увеличения скорости работы по выпуску продукции. Использование выборочного выходного контроля с целью оценки качества выпускаемой продукции является не эффективным способом, данный факт усугубляется влиянием «человеческого фактора». Применение человека для отбраковки на конвейерной линии, при больших скоростях работы приведет к еще большему числу пропущенных бракованных экземпляров, что связано с ограниченностью скорости реакции человека. Одним из выходов является увеличение числа контролеров, что также негативно влияет на материальные затраты и качество отбраковки. Все эти недостатки ведут к снижению продуктивности и экономической выгоды от выпускаемой продукции.

Одним из вариантов, предназначенных для применения на различных этапах производства и контроля - является применение глубоких нейронных сетей и машинного зрения. Данная область науки находится на начальной стадии внедрения в человеческую жизнь, но может позволить автоматизировать большую часть процессов, выполнение которых, до этого, могло производиться исключительно человеком.

Целью проекта является создание системы для выявления дефективных участков топологии печатной платы в процессе ее производства, а также корректировка алгоритмов работ систем управления производственной линии в режиме реального времени.

На данный момент на рынке имеется несколько компаний, занимающиеся реализацией систем машинного зрения для промышленности. Такие компании, как Baumer, Halcon, Mallinot разрабатывают различные устройства для применения их в промышленности, а также программное обеспечение для обработки. Как

позиционирования. В дежурном режиме (когда перемещение штатным устройством позиционирования уже совершено) прибор продолжает отслеживать перемещение объекта под действием каких-либо внешних воздействий. При обнаружении сдвига, устройство подает сигнал о сдвиге объекта.

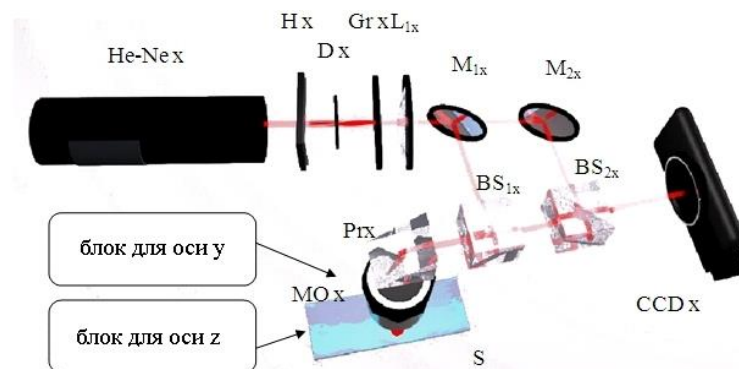


Рис. 1. Оптическая схема устройства контроля положения объекта исследований

В ходе экспериментальной проверки точности разработанного устройства использовались лазеры с длиной волны 632,8 нм. При этом была достигнута точность определения сдвига объекта исследований 5,00 нм с допуском не более 5 %. Максимальное обнаруживаемое изменение положения объекта составляет около 0,4 мм.

Разработка может осуществлять контроль позиции объекта в зондовых микроскопах.

Исследование частично профинансировано в рамках поддержанного Российским научным фондом гранта № 20-72-00065.

1. Bessel beam based optical profilometry / V. Belyi, M. Kroening, N. Kazak, N. Khilo, A. Mashchenko and P. Ropot // Proc. SPIE. – 2005. – 5964. – P. 59640L
2. Влияние амплитудных и фазовых искажений на формирование световых полей с вращением распределения интенсивности / Е.Н. Воронцов, С.П. Котова, Н.Н. Лосевский, Д.В. Прокопова, С.А. Самагин // Краткие сообщения по физике. – 2018. – 45 (3). – С. 9-14.

УСТРОЙСТВО КОНТРОЛЯ ПОЛОЖЕНИЯ ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЙ

Полетаев Д.А.¹, Соколенко Б.В.¹, Присяжнюк А.В.¹, Якубов С.И.¹

¹) Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского»
E-mail: poletaevda@cfuv.ru

DEVICE FOR MONITORING RESEARCH OBJECT'S POSITION

Poletaev D.A.¹, Sokolenko B.V.¹, Prisyazhniuk A.V.¹, Yakubov S.I.¹

¹) V.I. Vernadsky crimean federal university

In this paper a device for monitoring research object's position is proposed. A description of the design of the device, the algorithm of operation is given, the limits of applicability are highlighted.

В зондовых методах микроскопических исследований, кроме измерительного преобразователя величин, актуальную роль играют устройства позиционирования объекта. Однако даже прецизионные устройства подвержены влиянию внешних мешающих факторов. К ним относятся тряска лабораторного оборудования. Целесообразно предложить и разработать систему, предназначенную для контроля положения объекта, реагирующую на сдвиги.

Целью работы является конструирование и исследование параметров устройства для контроля положения объекта исследования.

Оптические методы анализа параметров материалов, в которых используются интерферометрия и когерентные источники света, весьма перспективны и востребованы [1]. Наиболее простыми для применения являются основанные на использовании пучков Бесселя и Лагерра-Гаусса [2]. В этих методах угол поворота распределения интенсивности «двухлепестковых полей» меняется в зависимости от глубины резкости сфокусированных спиральных пучков [2].

Сконструировано устройство, позволяющее отслеживать перемещение объекта с наномасштабным разрешением. Общая оптическая схема установки представлена на рис. 1.

Предлагаемое устройство работает следующим образом (рассматривается блок для определения координаты по оси x , блоки по осям y и z функционируют аналогично). Излучение лазера попадает на встроенный в выходную апертуру светоделительного куба фазовый транспарант, формирующий оптический вихрь. Оптический вихрь фокусируется на поверхности исследуемого объекта. При этом величина фазового сдвига оптического вихря оказывается пропорциональным перемещению объекта по оси x . В рабочем режиме устройство отслеживает перемещение объекта по всем трем координатам: x , y и z , сопоставляя значение перемещения с параметрами, задаваемыми блоком управления системой

2. A. S. Shleenkov, O. A. Bulychev, S. A. Shleenkov, D. V. Novgorodov Features and Advantages of Applying Anisotropic Magnetoresistive Field Sensors to Testing the Full Volume of Small- and Medium-Diameter Pipes // Russian journal of nondestructive testing. — 2020. — V. 56. — P. 417—425.
3. A. S. Shleenkov, A. B. Pastukhov, Ya. V. Gubanov Signal processing algorithms for increasing the resolution of magnetic flaw detection of rolled steel // AIP Conference Proceedings. — 2020. — V. 2313. — P. 40010—40015.

провести ряд экспериментальных исследований, результаты которых и приводятся в данной статье.

Образцы трубной заготовки для исследований представляют собой цилиндры диаметром 120 мм, длиной 600 мм, весом 65 кг.

Создан макет установки и выполнены исследования по изучению выявляемости поверхностных дефектов. Система измерения состоит из датчиков собранных в кассеты, многоканального предварительного дифференциального усилителя, многоканального АЦП и устройства сбора и отображения результатов на персональном компьютере. На рисунке 1 показана диаграмма сигнала одного из дефектов.

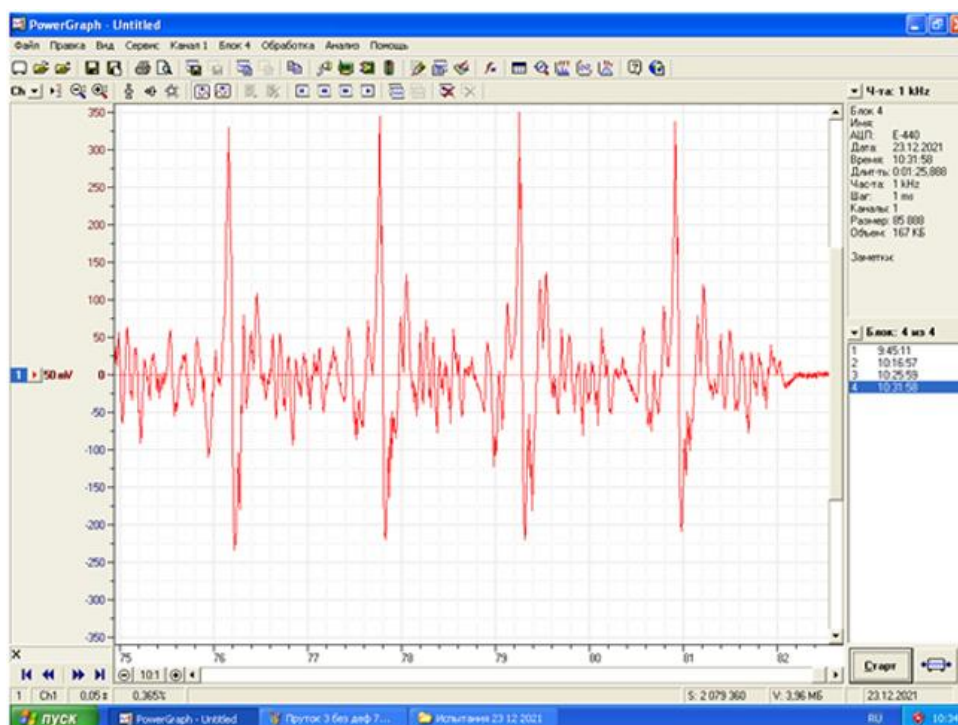


Рис. 1. Диаграмма сигнала от дефекта типа продольный задира.

Образец помещен внутри двух соленоидов, собранных по схеме и конструкции катушек Гельмгольца. Создается продольное намагничивающее поле, а различно ориентированные естественные дефекты хорошо выявляются благодаря применению высокочувствительных датчиков, производимых по специальной технологии, предусматривающей высокотемпературный отжиг пермалловых пленок на окончательной стадии их изготовления.

При обработке сигнала с использованием алгоритма, изложенного в работе [3] достигнуты положительные результаты решения данной проблемы.

1. Проектирование, изготовление и поставка установки неразрушающего контроля трубной заготовки в крупносортом цехе АО «ЕВРАЗ НТМК» // Техническое задание АО «ЕВРАЗ НТМК» от 10.06.2019.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ МАГНИТНОЙ ДЕФЕКТОСКОПИИ В ПЛАНЕ ВЫЯВЛЕНИЯ ДЕФЕКТОВ ПОВЕРХНОСТИ ТРУБНОЙ ЗАГОТОВКИ

Шлеенков А.С.¹, Пастухов А.Б.¹, Губанов Я.В.²

¹) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.
E-mail: sl1150@yandex.ru

RESEARCH THE POSSIBILITIES OF MAGNETIC FLAW DETECTION IN TERMS OF DETECTING DEFECTS IN THE SURFACE OF A PIPE BILLET

Shleenkov A.S.¹, Pastukhov A.B.¹, Gubanov Y.V.²

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia.

²) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia.

Non-destructive instrumental inspection of pipe billet surface defects is currently absent at most metallurgical plants. Only visual inspection is carried out. At the same time, this problem is very urgent and has not yet received a practical solution. The article describes the solution method.

Неразрушающий инструментальный контроль дефектов поверхности трубной заготовки, выпускаемой в соответствии с требованиями ГОСТ Р 53932-2010 на большинстве металлургических комбинатов в настоящее время отсутствует. Проводится только визуальный контроль. В то же время эта проблема является очень актуальной и до сих пор не получила практического решения [1]. В статье рассмотрен способ решения этой задачи.

Полный цикл исследований предусматривает, разработку, изготовление, поставку промышленного образца помехозащищенного дефектоскопического комплекса (далее установки) для автоматизированного неразрушающего контроля (НК) трубных заготовок, выпускаемых АО «ЕВРАЗ НТМК» по ГОСТ Р 53932-2010 в технологическом потоке их производства, а также интеграцию установки в существующую линию после дробеметной установки и ее комплексное внедрение.

Поставленная цель может быть достигнута за счет применения, разработанных и синтезированных в ИФМ УрО РАН новых однокристалльных тонкопленочных матричных преобразователей на основе анизотропных магниторезистивных датчиков типа АМРД [2] с повышенной чувствительностью к поверхностным дефектам. Для практической реализации данной программы потребовалось

характеристик фильтра, а также низкой чувствительностью к отклонению применяемых компонентов.

1. Гуревич М.М. Цвет и его измерение. Издательство Академии наук СССР, 1950г.
2. Большая советская энциклопедия, Колориметр [Электронный ресурс] (дата обращения 15.02.2022)
3. Справочник химика 21, Химия и химическая технология [Электронный ресурс] (дата обращения 15.02.2022).

этого требуется высокодобротный полосовой фильтр с большой скоростью спада АЧХ вне полосы пропускания.

Разработанный нами полосовой фильтр представлен на рисунке 1. Основные характеристики фильтра: добротность – не менее 58, центральная частота 1025 Гц, коэффициент пропускания – 0 дБ, скорость спада АЧХ – более 76 дБ/октаву.

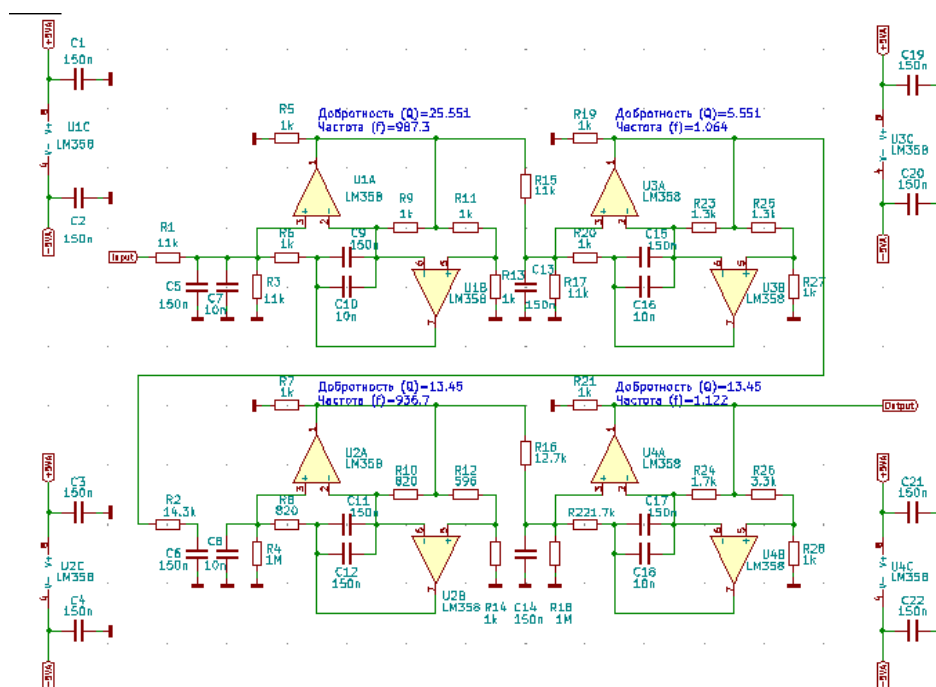


Рис. 1. Принципиальная схема полосового фильтра.

Фильтр полностью построен на операционных усилителях общего применения, что отличает его от подобных фильтров со схожими характеристиками, используемыми в более дорогих колориметрах. Выбранная схема построения обеспечивает унификацию по используемым компонентам разрабатываемого прибора. Это позволяет отказаться от дорогостоящих компонентов схемы детектирования и первичной обработки сигнала, построенных с применением специализированной элементной базы.

Применение аналоговой элементной базы также позволяет избавиться от необходимости проведения сложных математических расчетов с применением специализированных цифровых сигнальных процессоров (DSP). Вместо этого появляется возможность применять экономичные микроконтроллеры общего назначения, что ведет к снижению энергопотребления и, как следствие, увеличению времени автономной работы устройства. Также это снижает себестоимость и повышает ремонтопригодность.

Подобное решение при разработке фильтра позволяет отказаться от цифрового способа обработки первичной информации. Этим исключается необходимость ручной подстройки схемы вследствие хорошей повторяемости

РАЗРАБОТКА АНАЛОГОВОГО ПОЛОСОВОГО ФИЛЬТРА ДЛЯ ПРИБОРА ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЦВЕТА ПОВЕРХНОСТИ

Муродова С.Н.¹, Орлов А.В.², Бардюг Д.Ю.¹, Елимова Т.В.³

¹) Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова

²) ООО «Дельрус – СЗРЦ»

³) Костромской государственный университет

E-mail: murodova.s@edu.narfu.ru

DEVELOPMENT OF AN ANALOG BANDPASS FILTER FOR A SURFACE COLOR DETECTION DEVICE

Murodova S.N.¹, Orlov A.V.², Bardyug D.Yu.¹, Elimova T.V.³

¹) Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov

²) Delrus - SZRK LLC

³) Kostroma State University

The article is devoted to the development of an analog bandpass filter. The schematic diagram of the filter is considered. The advantages and disadvantages of the chosen design are analyzed. The areas of application of the device are indicated.

Одной из важных технических задач, в современных условиях, является определение цвета поверхности. Существует множество способов представления цвета в цифровом формате и его отображения [1]. Один из наиболее распространенных форматов – формат RGB.

Колориметры [2], позволяющие определять цвет поверхности, широко используются в различных отраслях человеческой деятельности. Например, в химической промышленности – для определения элементов взвеси жидкости по ее цвету [3].

Однако, современные промышленные колориметры, как правило, имеют значительные размеры и стоимость. Эти факторы ограничивают их широкое практическое применение.

В качестве альтернативы дорогим и габаритным приборам, нами была поставлена задача по разработке компактного и не дорогого колориметра, обладающего, тем ни менее, удовлетворительными характеристиками.

Преимуществом разрабатываемого прибора видится большая автономность, мобильность и возможность получать данные о цвете поверхности в виде RGB-кода.

Важнейшей частью колориметра является блок фильтрации и детектирования, позволяющий производить первичную обработку аналогового сигнала от фотодатчика, благодаря которому реализуется метод частотной селекции полезного сигнала. Таким образом, появляется возможность выделения полезного сигнала с последующим измерением его уровня на фоне внешних помех и шумов. Для

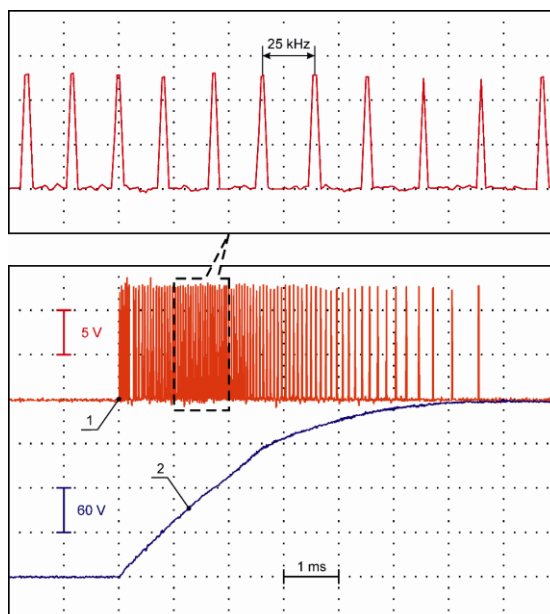


Рис. 1. Осциллограммы переходных процессов в источнике питания емкостного накопителя энергии, где 1 – управляющие импульсы, 2 – напряжение на ЕНЭ

Ко второй группе относят методы преобразования импульсов высокой частоты, который получил широкое распространение в силовой электронике [2]. Для приложений мощной импульсной техники, импульсные преобразователи дополняются специальными схемами управления и резонансными модулями (последовательными, параллельными контурами, а также цепями смешанного типа), что позволяет сократить потери энергии на ключах, задать рабочий диапазон заряжающего тока, а главное – линейно заряжать конденсаторную батарею.

Актуальной проблемой заряда ЕНЭ является зависимость большинства источников питания от амплитуды напряжения в бытовой сети. Разработанный импульсный преобразователь для электронного ускорителя позволяет исключить этот недостаток, так как напряжение питающей его сети влияет только на энергию импульсного пакета и время заряда, в то время как результирующее значение потенциала на ЕНЭ остаётся постоянным. В данной работе рассмотрены аспекты режимов работы резонансного преобразователя, приведены расчеты и получены зависимости выходного напряжения от применяемых методов получения резонансного режима и управления устройством.

1. Малогабаритный сильноточный импульсный источник РАДАН СЭФ-303А / В.Г. Шпак [и др.] // Приборы и техника эксперимента. – 1993. – №1. – С. 149-155.
2. Блум, Х. Схемотехника и применение мощных импульсных устройств / Х. Блум ; Хансиоахим Блум ; пер. с англ. А. М. Рабодзея. – Москва : Додэка-XXI, 2008. – (Серия Силовая электроника). – ISBN 9785941201914.
3. Соковкин С. Ю. Мощная импульсная техника: Учебное электронное текстовое издание / С. Ю. Соковкин. – Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУУПИ, 2008. – 65 с.

ПРИМЕНЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ДЛЯ ЗАРЯДА ЕМКОСТНЫХ НАКОПИТЕЛЕЙ ЭНЕРГИИ НА ПРИМЕРЕ ГЕНЕРАТОРА ВЫСОКОВОЛЬТНЫХ ИМПУЛЬСОВ «РАДАН 303»

Лисовский Д.А.¹, Осипенко Е.А.¹

¹⁾ Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: danil.lisovsky@yandex.ru

APPLICATION OF RESONANT CONVERTERS FOR CHARGING CAPACITIVE ENERGY STORAGES BY THE EXAMPLE OF THE HIGH VOLTAGE PULSE GENERATOR «RADAN 303»

Lisovsky D.A.¹, Osipenko E.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

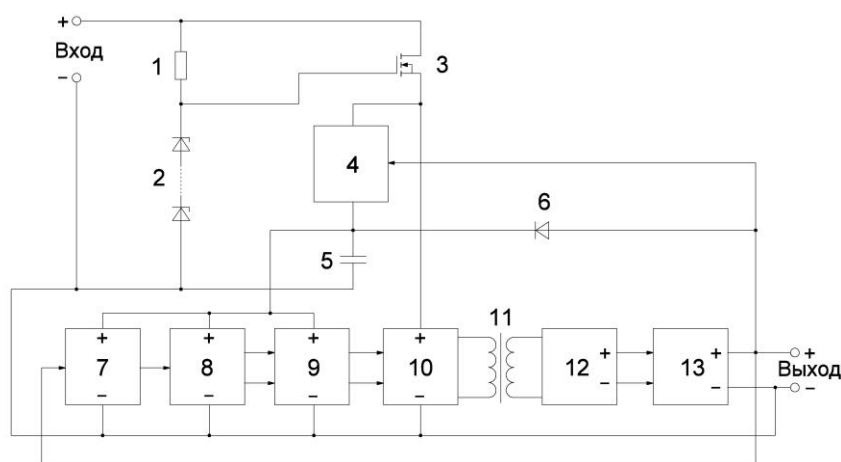
Annotation. The article discusses aspects of the operation of the resonant converter and the applied circuitry solutions to improve the stability of work of a powerful pulse generator «RADAN 303».

Для питания импульсных устройств, разрабатываемых и применяемых в мощной импульсной технике, требуются короткие, но интенсивные пакеты энергии. Такие пакеты энергии формируются генераторами мощных импульсов [1], основанных на принципе компрессии: энергия относительно медленно аккумулируется в накопителе (емкостном накопителе энергии, ЕНЭ, в нашем случае), с целью последующей более быстрой передачи в нагрузку. Скорость, с которой накопитель заряжается и разряжается, определяет частоту повторения выходных импульсов генератора и может варьироваться от 0,01 Гц для больших конденсаторных батарей до единиц – десятков килогерц для применений в лазерной технике.

Для заряда ЕНЭ применяют специальные схемотехнические решения, которые можно условно разделить на моноимпульсные и многоимпульсные.

К первой группе относятся заряд линейным током и резонансный моноимпульсный заряд. Линейный заряд имеет низкий КПД (50%), делающий невозможным применение метода в компактных электрофизических установках. Резонансный заряд через индуктивность, в свою очередь, вызывает проблемы, связанные со стабилизацией колебательных процессов. Реализация обоих методов значительно увеличивает габаритные размеры устройства, поэтому они находят применение в энергоемких комплексах.

Таким образом, для систем погружной телеметрии необходим преобразователь со стабилизированным низковольтным выходным напряжением (порядка 15 В $\pm 5\%$), который питается входным напряжением в пределах 200-1200 В и выдерживает кратковременные перегрузки по входному напряжению до 4200 В без потери работоспособности в течение длительного времени (не менее двух-трех лет). Также необходимо иметь возможность обеспечивать питающим напряжением собственные блоки преобразователя. Ввиду того, что в скважинах температура окружающей среды выше 100°C, преобразователь должен обладать высоким коэффициентом полезного действия, чтобы не производить дополнительный нагрев электронных схем и иметь высокую надежность.



Преобразователь напряжения состоит из резистивного блока 1, блока стабилизаторов 2, транзистора 3, управляемого источника тока 4, через который в момент включения заряжается конденсатор 5, после чего источник тока отключается и на конденсаторе поддерживается напряжение через диод 6. Также в схеме присутствует блок обратной связи 7, широтно-импульсный модулятор 8, драйвер полумостового инвертора 9 и инвертор 10, трансформатор 11, выпрямитель 12 и индуктивно-емкостной фильтр 13.

На представленное устройство получен патент на полезную модель.

1. Хохлов К.О., Ищенко А.В., Рубцова О.О. Описание полезной модели к патенту [Электронный ресурс] // Электронный научный архив УрФУ. – URL: <https://elar.urfu.ru/bitstream/10995/69143/1/180125.pdf>

ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ С ВЫСОКИМ ДИАПАЗОНОМ ВХОДНОГО НАПРЯЖЕНИЯ

Кузовлева А.А.¹, Хохлов К.О.¹

¹) Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н.Ельцина"
E-mail: a.a.kuzovleva@bk.ru

ELECTRICAL ENERGY CONVERTER WITH HIGH INPUT VOLTAGE RANGE

Kuzovleva A.A.¹, Khokhlov K.O.¹

¹) Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin"

Description of the developed model of an electrical energy converter with an input voltage supplied from the neutral point of a three-phase transformer with an effective voltage of 3000 V to power electronic circuits in a submersible unit in telemetry systems of oil well pumps.

Решается проблема питания электронных схем в погружных блоках для систем погружной телеметрии нефтяных скважинных насосов.

В системах погружной телеметрии нефтяных скважинных насосов используется прикрепленный к насосу погружной блок, в котором содержатся электронные схемы, необходимые для работы датчиков состояния электромоторов насосов и передачи информации на поверхность. Для питания этих схем требуется низкое напряжение 12...15 В. Трехфазное напряжение питания электромотора имеет величину действующего напряжения 3000 В частотой 50 ± 10 Гц, которое вырабатывается трехфазным трансформатором, расположенным на поверхности. Обмотки трансформатора и трехфазного электромотора включены по типу «звезда». Трансформатор на поверхности и электромотор насоса в скважине соединены трехфазным кабелем, находящимся в металлической броне. Поскольку других кабелей кроме трехфазного кабеля для электромотора система не предусматривает, положительное напряжение питания погружного блока 200 В подается на нейтральную точку соединения обмоток трансформатора, и, при условии симметричной нагрузки трехфазной системы, это же напряжение 200 В будет формироваться на нейтральной точке обмоток электродвигателя относительно заземленной металлической брони, на которую подключен отрицательный вывод источника напряжения 200 В. Однако при работе насоса возможен «перекос» фаз и симметричность нагрузки нарушается. Потенциал нулевой точки может сильно колебаться в пределах напряжения 200-1200 В, а кратковременные всплески напряжения могут достигать амплитудного значения величины фазы более 4200 В.

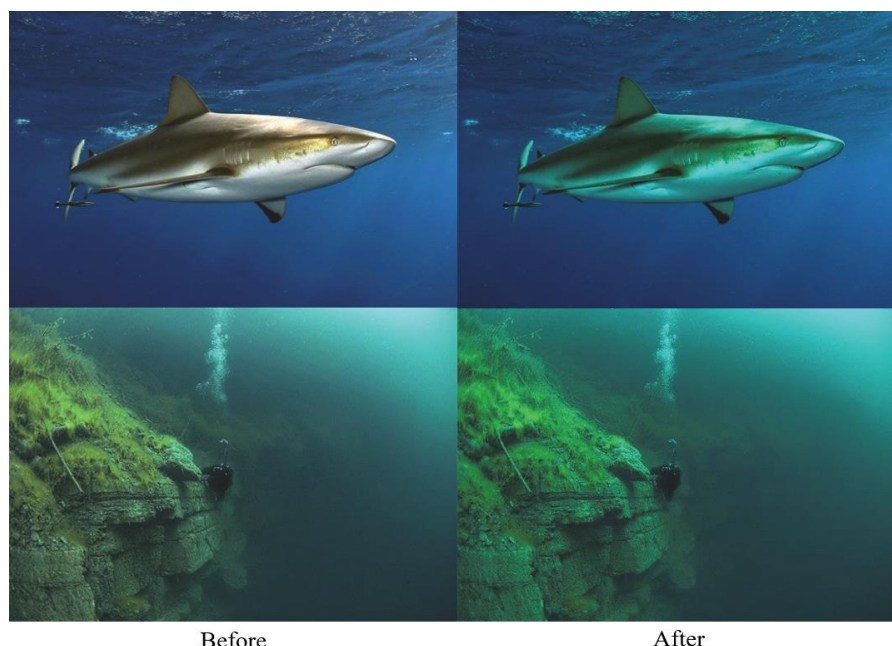


Figure 1 - Reference image and converted

The red component of images in the underwater environment is negligible. That is why the photo, exactly like the video recording, freed from the red component, is minimally distorted. In the above examples, it is noticeable that the image does not lose contrast at all, all its elements are clearly visible and accurately defined by the human eye.

Thus, the complete removal of the red component minimally distorts the image, making it possible to reduce the amount of transmitted data by at least three times. In combination with mathematical methods of compression, this method can be quite effective for transmission in a hydroacoustic communication channel with a narrow frequency.

1. Stojanovic M. Underwater acoustic communication //Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering. – 1999. – C. 1-12
2. Edelmann G. F. et al. An initial demonstration of underwater acoustic communication using time reversal //IEEE journal of oceanic engineering. – 2002. – T. 27. – №. 3. – C. 602-609
3. Zhou S., Wang Z. OFDM for underwater acoustic communications. – John Wiley & Sons, 2014.

A SIMPLE WAY OF DECREASING THE AMOUNT OF PHOTO/VIDEO DATA WHILE TRANSMITTING VIA UNDERWATER COMMUNICATION SYSTEMS

Kuznetsov V. V.¹

¹) Far Eastern Federal University
E-mail: vl.kuz.ru@gmail.com

Nowadays, it is problematic to stream video under the water. Underwater communication systems do not allow for the rapid transfer of large amounts of data. In this paper, we consider a simple way to reduce the amount of information by at least 33% and prove the effectiveness of this method.

Nowadays, autonomous underwater uninhabited vehicles (AUVs) are used to conduct scientific research in the world ocean. For their communication and navigation, it is not reasonable to use electromagnetic waves due to their rapid attenuation. Transmission of information using light pulses is not possible over long distances due to the short range of propagation of a light beam in the sea or freshwater; in addition, this method is associated with a large number of side difficulties, such as the orientation of the transmitter relative to the receiver.

Consequently, hydroacoustic waves are used to provide underwater communications and navigation for AUVs, which can propagate over long distances. However, the use of this method of signal transmission is fraught with numerous difficulties, such as the Doppler effect, reverberation, narrow bandwidth, which makes it impossible to achieve a high data transmission rate, balancing it with different methods of density compaction, the use of high-ranking manipulation methods, compression procedures, etc.

Under certain conditions, it may be necessary to transmit a video stream in real-time for control of the vehicle and provide a visual estimation of the seabed topography and its video recording. However, the bandwidth for transmitting video is not enough. Therefore, various compression methods are used.

As is known, when entering the water, electromagnetic waves of the optical spectrum have different penetrating power depending on the chemical composition fluid and on its state of the environment. Nevertheless, the regularity is obvious: the power of the long-wave part of the spectrum decreases much faster than the short-wave part.

The Byron pattern applied to the matrix of a video camera consists of green, blue, and red colors. Based on the foregoing, an assumption arises that if we reset all the bits responsible for red, removing them from their total stream, the quality of the photo or video will deteriorate minimally, while maintaining the contrast at the proper level, reducing the amount of transmitted data by at least 33 percent.

To confirm this theory, for several underwater pictures with different color schemes, the bits responsible for the red component were reset to zero, the results are presented in Figure 1.

трансформаторного масла, а также контроля температуры в условиях электромагнитных и тепловых помех.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации № МД-5324.2021.4.

1. Development of a fiber-optic probe for thermographic phosphor measurements in turbine engines / Sami Alaruri, Dawn McFarland, Andrew Brewington, Mark Thomas, Norm Sallee, // Optics and Lasers in Engineering Volume 22, Issue 1, 1995, Pages 17-31.
2. Real-time bioprocess monitoring using a mid-infrared fibre-optic sensor / Alimagham F, Alimagham F, Winterburn J, Dolman B, Domingues P.M., Everest F, Platkov M, Bassov S, Izakson G, Katzir A, Elliott S.R, Hutter T. // Biochemical Engineering Journal Том 167 March 2021 Номер статьи 107889.DOI:10.1016/j.bej.2020.107889.
3. Волоконно-оптические системы для on-line контроля промышленных процессов / Корсаков. А. С. // Международный научный форум “Бутлеровское наследие-2015”. Том: 43 Номер:8, С:127-133.

ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЕ ЗОНДЫ ДЛЯ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И ТЕРМОГРАФИИ

Тураби А.¹, Корсакова Е.А.¹, Акифьева Н.Н.¹, Корсаков А. С.¹, Жукова Л. В.¹,
Южакова А.А.¹, Салимгареев Д. Д.¹, Львов А. Е.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: korsa5555@bk.ru

FIBER OPTIC PROBES FOR IR SPECTROSCOPY AND THERMOGRAPHY

Turabi A.¹, Korsakova E.A.¹, Akif'eva N. N.¹, Korsakov A. S.¹, Zhukova L. V.¹,
Yuzhakova A. A.¹, Salimgareev D. D.¹, Lvov A. E.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this study, we present fibre-optic probes based on the AgBr-AgI crystals, suitable for thermal imaging and IR spectroscopy. They are transparent in the range from 3 to 26 μm , which is in demand for remote monitoring of physical parameters of objects located in hard-to-reach places.

Непрерывный контроль температуры важен для оценки текущего состояния оборудования и своевременного обнаружения нарушений. Существуют проблемы контроля температуры электрических установок традиционными методами с использованием термопар из-за возникновения электрических наводок, что приводит к искажению сигнала. Кроме того, тепловизионное оборудование имеет ограничение по условиям эксплуатации (внешние габариты, устойчивость к агрессивным средам) [1]. Эти недостатки можно свести к минимуму, используя длинные и гибкие каналы доставки инфракрасного излучения на основе световодов, изготовленных из кристаллов твердых растворов системы AgBr-AgI. Проведено исследование влияния внешних факторов на оптические свойства рассматриваемых световодов, а именно температуры, вибраций и электрического поля.

В данной работе освещены также области потенциального применения волоконно-оптических зондов на основе AgBr-AgI кристаллов, прозрачных в среднем инфракрасном диапазоне от 3 до 26 мкм, для реализации спектрального ИК-Фурье анализа. Ключевым преимуществом оптоволоконных технологий является возможность использования оптического волокна не только в качестве транслятора аналитического сигнала, но и в качестве датчика для получения этого сигнала от исследуемой области [2, 3]. В этой связи, разработан волоконно-оптический датчик многократного нарушенного полного внутреннего отражения (МНПВО) для исследования жидких сред. В качестве примера показана принципиальная возможность использования волоконно-оптических зондов на основе кристаллов системы AgBr-AgI для удаленного контроля состава

ферритных числах (FN). Их ограничением является необходимость в тщательной подготовке поверхности перед проведением контроля, а также значительная зависимость показаний прибора от относительного положения зонда и объекта контроля, что делает желательным применение роботизированных средств.

При содержании ферритной фазы (СФФ) более 20% почти для всех методик контроля наблюдается отклонение от линейной зависимости сигнала измерительного преобразователя от СФФ. Для компенсации данного отклонения в приборе предусматриваются поправочные коэффициенты, либо указываются кривые калибровки в случае ферритного числа, однако это не позволяет целиком устранить погрешность; кроме того, различные марки сталей имеют разные поправочные коэффициенты.

Институтом физики металлов УрО РАН ведутся исследования по разработке и внедрению приборов и методик магнитного фазового контроля аустенитно-ферритных сталей [2, 4]. Для этого, в качестве измерительных преобразователей используются преобразователи Холла, а намагничивание осуществляется постоянным магнитом из редкоземельных элементов, что позволяет создавать в зоне контроля магнитные поля порядка 4–6 кА/см, близкие к состоянию насыщения. Кроме того, проводятся поисковые работы по возможности проведения фазового контроля аустенитных сталей в малых и средних полях. Были проведены исследования на серии образцов из аустенитно-ферритных сталей различного химического и фазового состава, вплоть до 60% СФФ. Результаты измерений показали, что для целей ферритометрии возможно использование комплекса параметров частных петель магнитного гистерезиса: коэрцитивной силы, дифференциальной магнитной восприимчивости и других. Примечательно, что для этого достаточно использовать магнитные поля напряжённостью 300–600 А/см, которые не требуют для своего создания высоких токов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема «Диагностика», № АААА-А18-118020690196-3)

1. Масленков С.Б. Жаропрочные стали и сплавы, Справочник М.: Металлургия, (1983).
2. Ригмант М.Б., Дефектоскопия, № 2, с.27–40, (2018).
3. Неразрушающий контроль: Справочник: В 7 т. Под общ.ред. В.В. Клюева Т.2: В 2кн., М.: Металлургия, (2003).
4. Корх М.К., Ригмант М.Б., Давыдов Д.И., Шишкин Д.А., Ничипурук А.П., Корх Ю.В., Дефектоскопия, № 12, с.20–31, (2015).

ПРИМЕНЕНИЕ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ И СРЕДСТВ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА АУСТЕНИТНО-ФЕРРИТНЫХ СТАЛЕЙ

Кочнев А.В.¹, Трофимова С.Ю.², Ригмант М.Б.¹, Корх М.К.¹

¹) Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: kochnevav@imp.uran.ru

APPLICATION OF MODERN METHODS AND TECHNIQUES FOR PHASE COMPOSITION EVALUATION OF AUSTENITIC-FERRITIC STEELS

Kochnev A.V.¹, Trofimova S.Yu.², Rigmant M.B.¹, Korkh M.K.¹

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

²) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Review of methods and techniques, used for phase composition control of austenitic-ferritic steels was performed. Some limitations of ferrite content evaluation with different devices are shown. New methods of phase composition control of these steels for wide range of ferrite content are proposed.

Зависимость свойств аустенитных сталей от их фазового состава делает необходимым контроль содержания ферромагнитных фаз в металле [1]. Существующие приборные решения ферритометрии применяют несколько вариантов реализации работы измерительных устройств [2].

Широкое применение находят вихретоковые ферритометры, которые могут быть использованы в целях толщинометрии, дефектоскопии, измерения магнитной проницаемости, электро- и теплопроводности (МВП-2М, НПЦ «КРОПУС»), что обусловлено зависимостью выходного сигнала от нескольких параметров объекта контроля [3]. Данное преимущество является также и проблемой вихретокового метода контроля, когда показания прибора могут быть неверно интерпретированы.

Ферритометры МФ-510 и МФ-51НЦ (ООО «АКА-СКАН», г. Москва), МК-1.2Ф и МК-1Ф (ЗАО НПО «Интротест», г. Екатеринбург) индукционного типа предназначены для измерения локального и объемного содержания ферритной фазы от 0,8 до 20 % (до 80% для МФ-51Ц) в сварных швах и изделиях из нержавеющей сталей аустенитного и аустенитно-ферромагнитного классов.

Среди иностранных приборов можно выделить ферритоскопы Feritscope MP30 и Feritscope MP30E-S (Германия), измеряющие содержание феррита в

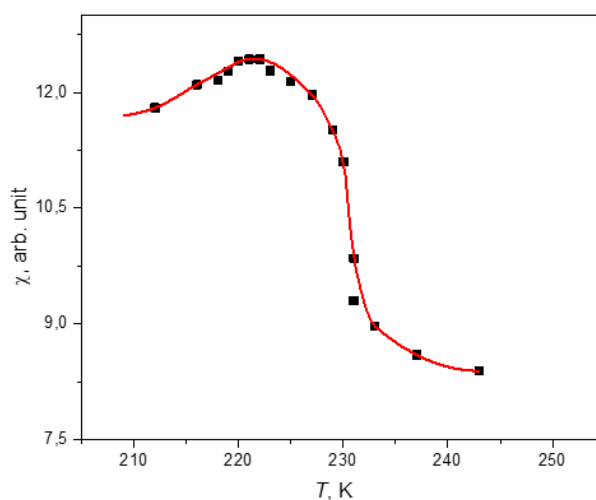


Рис. 1. Зависимость магнитной восприимчивости TbCo_2 от температуры, в области фазового перехода

Для изучения возможности использования магнитной восприимчивости в качестве термометрического параметра, нами были проведены измерения зависимости $\chi(T)$ в области фазового перехода – рисунок 1.

Использование магнитного фазового перехода может быть реализовано в условиях повышенной радиации и, кроме того, дистанционно – для контроля температуры внутри замкнутой оболочки.

1. Михеев В. П., Просандеев А. В. Датчики и детекторы: Учебное пособие. – М.: МИФИ, 2007. – 172 с.
2. Технические науки: проблемы и перспективы: материалы III Междунар. Науч. Конф. (г. Санкт-Петербург, июль 2015 г.). – СПб.: Свое издательство, 2015. – iv, 102 с.
3. Геращенко О. А. Тепловые и температурные измерения. : справочное руководство. К.: Наукова думка, 1965 – 304 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТОЧКИ КЮРИ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ (РЕГУЛИРОВАНИЯ) ТЕМПЕРАТУРЫ

Иванов И.А.¹, Савин П.А.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: ilya.iv2001@yandex.ru

USING THE CURIE POINT TO MEASURE (REGULATE) TEMPERATURE

Ivanov I.A.¹, Savin P.A.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

The work is devoted to the analysis of the possibility of using the Curie point to measure or control temperature. Possible approaches to the implementation of measurements based on the magnetic phase transition are considered.

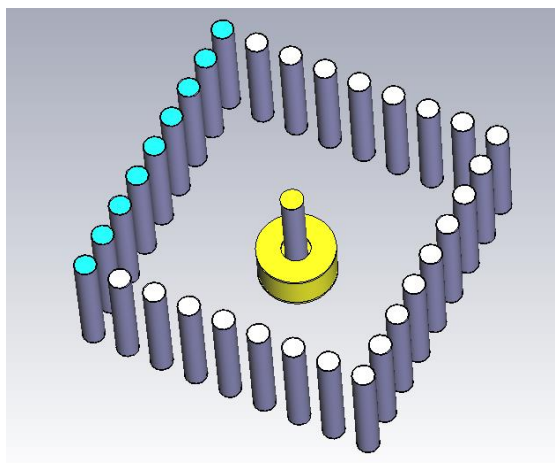
Фазовые переходы «играют» в термометрии одну из ключевых ролей. Так, например, международная температурная шкала построена на наборе фазовых переходов, позволяющем точно воспроизводить значения температуры.

Конкретные физические условия измерения температуры отличаются большим разнообразием, поэтому параллельно развиваются методы измерения температур, основанные на разных физических принципах. Одними из таких принципов измерения (регулирования) температуры, может быть использование магнитного фазового перехода ферромагнетик – парамагнетик, происходящих при достижении температуры Кюри (T_c) и, аналогичного ему, перехода сегнетоэлектрик – диэлектрик. Последние относительно широко распространены и используются в термоконденсаторах [1], [2].

Использование магнитного фазового перехода в литературе встречается в рамках следующих подходов:

1. Непрерывное измерение индуктивности (как термометрического параметра) катушки с ферромагнитным сердечником, вплоть до достижения точки Кюри. Что позволяет создавать аналоговые и пороговые датчики температуры [3].
2. Контроль высокочастотных свойств ферромагнитного проводника: измерение его импеданса, изменяющегося из-за температурного изменения магнитной проницаемости, и (или) «управление» нагреваемыми объект индукционными токами, также зависящими от магнитной проницаемости – этот принцип используется, например, в некоторых типах паяльных станций, например фирмы Metcal.

Кроме того, возможен предлагаемый нами подход: механическое размыкание упругих ферромагнитных контактов (геркон, например) при достижении температуры Кюри.



1. Anderson T., Plasma Antennas, Boston: Artech House (2011)
2. I. Alexeff, T. Anderson, S. Parameswaran, E.P. Pradeep, J. Hulloli, P. Hulloli, IEEE Transactions on plasma science, Vol. 34, №2, pp. 166 – 172 (2006)
3. G.G. Borg, J.H. Harris, N.M. Martin, D. Thorncraft, R. Milliken, Physics of plasmas, Vol. 7, №5, pp. 2198 – 2202 (2000)

РЕКОНФИГУРИРУЕМАЯ ПЛОСКАЯ РЕФЛЕКТОРНАЯ АНТЕННА НА ОСНОВЕ ПЛАЗМЫ

Баранников И.А.¹, Ischenko E.A.¹, Fedorov S.M.¹

¹) Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: 8thbar@gmail.com

PLASMA BASED RECONFIGURABLE PLANE REFLECTOR ANTENNA

Barannikov I.A.¹, Ischenko E.A.¹, Fedorov S.M.¹

¹) Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

An antenna design was developed with a plane reconfigurable plasma-based reflector. A plasma dipole acts as a radiator. It is also possible to operate the antenna in the corner reflector mode.

В данной работе производится моделирование рефлекторной антенны на основе плазмы. Плазменные элементы имеют два состояния: включенное, когда сформированная плазма является проводящей поверхностью, и выключенное, когда плазма отсутствует и емкость с газом прозрачна для электромагнитных волн. На основе этого свойства можно создать реконфигурируемый рефлектор. Его отражающая поверхность может изменять свое положение в пространстве посредством включения и выключения групп плазменных элементов.

Важным параметром, определяющим рабочий диапазон антенны является плазменная частота. Для элементов данной конструкции она составляет 3,5 ГГц.

Рефлектор представляет собой массив газоразрядных трубок (заполненных инертным газом аргоном) в форме квадрата с излучателем в центре. Каждая стенка состоит из 9 газоразрядных трубок расположенных с шагом 17 мм и имеющих те же параметры, что и у используемой в излучателе. Общая длина стенки составляет 388 мм.

Рабочий диапазон частот рефлектора расположен на частотах от 549 до 575 МГц в режиме плоской стенки. Также возможен режим работы рефлектора при включении двух соседних стенок. В этом случае они образуют угловой отражатель с углом 90°. В режиме углового отражателя антенна функционирует на частотах от 545 до 573 МГц.

приведены результаты экспериментальных исследований, подтверждающие эффективность предложенных рекомендаций.

1. О.А. Булычев, С.А. Шлеенков, В.М. Сенив, А.С. Шлеенков, Л.А. Полежаев Установка УМД-104М для контроля насосно-компрессорных труб повторного применения // Дефектоскопия. — 2015. — V. 11. — P. 3—11.
2. A. S. Shleenkov, O. A. Bulychev, S. A. Shleenkov, D. V. Novgorodov Features and Advantages of Applying Anisotropic Magnetoresistive Field Sensors to Testing the Full Volume of Small- and Medium-Diameter Pipes // Russian journal of nondestructive testing. — 2020. — V. 56. — P. 417—425.
3. О.А. Булычев, С.А. Шлеенков, А.С. Шлеенков Многоканальная магниторезистивная система магнитного контроля бесшовных толстостенных труб // Дефектоскопия. — 2018. — V. 10. — P. 58—63.

сделано технологическое отверстие, через которое электроэрозионным методом нанесены внутренние продольные дефекты глубиной 0,4 и 1,0 мм. Эти дефекты и стали объектами исследования. Внешний вид дефекта глубиной 0,4 мм показан на рисунке 1.

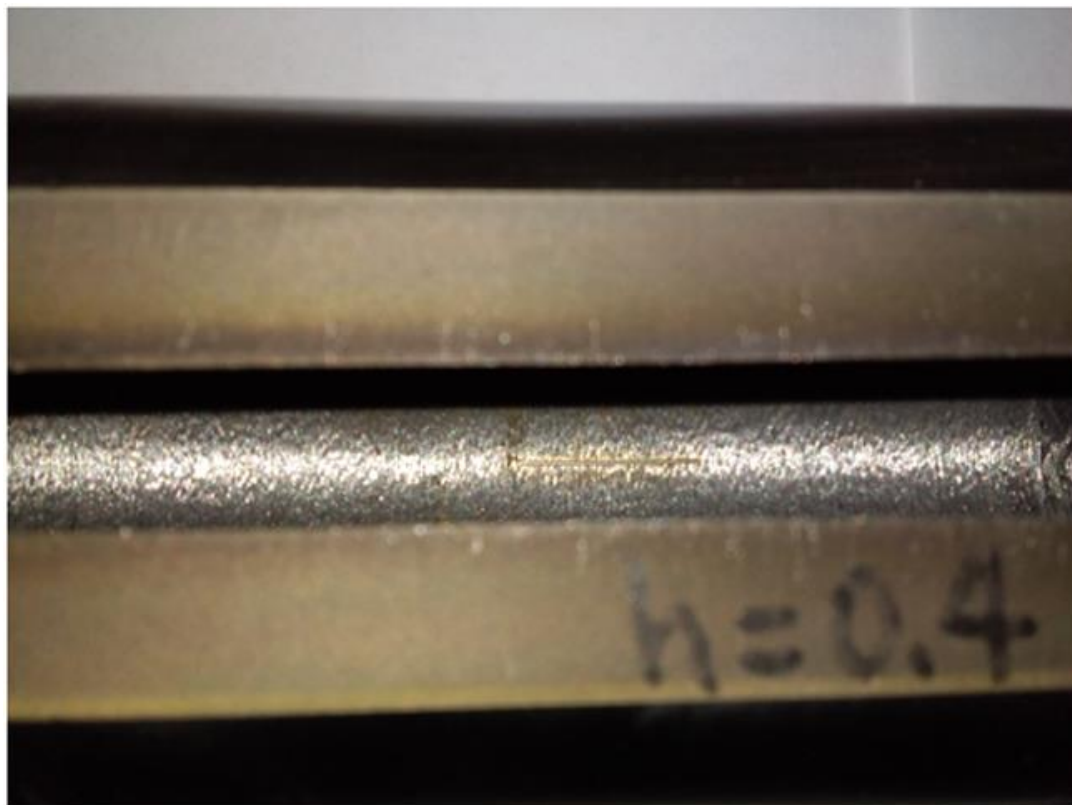


Рис. 1. Внешний вид дефекта глубиной 0,4 мм, нанесенного электроэрозионным способом на внутренней поверхности патрубка трубы НКТ диаметром 73 мм.

Достоинством такой технологии в отличие от изготовления дефектов методом фрезерования является получение искусственных дефектов заданных размеров с прямоугольными границами, повторяющими фактическую геометрию естественных дефектов, что обуславливает повышение их выявляемости при магнитной дефектоскопии реальных труб.

Другим способом повышения выявляемости внутренних дефектов является использование разработанных и синтезированных в ИФМ УрО РАН новых одно-кристалльных тонкопленочных матричных преобразователей [2,3], основанных на явлении анизотропии магниторезистивного эффекта в тонких ферро магнитных пленках (датчиков типа АМРД с повышенной чувствительностью к продольно ориентированным дефектам). На их основе была создана автоматизированная установка, позволяющая считывать топографию магнитных полей рассеяния от продольных внутренних и поверхностных дефектов труб НКТ при плавном перемещении матричных преобразователей вдоль образующей трубы со стандартными дефектами, глубиной 3,5 и 10% от номинальной толщины стенки. В статье

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПОВЫШЕНИЮ ВЫЯВЛЯЕМОСТИ ПРОДОЛЬНЫХ ДЕФЕКТОВ ВНУТРЕННЕЙ ПОВЕРХНОСТИ ТРУБ ПРИ МАГНИТНОМ МЕТОДЕ КОНТРОЛЯ

Шлеенков А.С.¹, Пастухов А.Б.¹, Губанов Я.В.²

¹) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.
E-mail: 754809@mail.ru

RECOMMENDATIONS FOR INCREASING THE DETECTION OF LONGITUDINAL DEFECTS OF THE INNER SURFACE OF PIPES WITH THE MAGNETIC CONTROL METHOD

Shleenkov A.S.¹, Pastukhov A.B.¹, Gubanov Y.V.²

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics

²) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia.

The task of increasing the detection of longitudinal internal defects during magnetic flaw detection of oil grade pipes is very relevant and has not yet received a practical solution. This is especially true of the problem of detecting defects whose depth is no more than 5% of the nominal wall.

Задача повышения выявляемости продольных внутренних дефектов при магнитной дефектоскопии труб нефтяного сортамента является очень актуальной [1] и до сих пор не получила практического решения. Особенно это касается проблемы выявления дефектов, глубина которых составляет не более 5% от номинальной толщины стенки трубы.

Учитывая, что применяемые в российских компаниях установки фирмы «Tuboscope Vetco». эксплуатируются уже не один десяток лет и основные их потребители (НК «Лукойл», ОАО «Сургутнефтегаз», ОАО «Роснефть» и др.) намерены обновить парк средств магнитного НК, целесообразно в рамках проекта по импортозамещению наладить серийный выпуск отечественных высокопроизводительных дефектоскопических комплексов для магнитного контроля качества и разбраковки труб нефтегазового сортамента. Технологическая направленность проекта заключается в повышении производительности и надежности систем контроля качества труб, бывших в эксплуатации, а также контроля НКТ и др. труб в процессе их изготовления. Для практической реализации данной программы потребовалось провести ряд экспериментальных исследований, результаты которых и приводятся в данной статье.

Образцы для исследований представляют собой патрубки трубы НКТ диаметром 73 мм, толщиной стенки 5,5 и 10 мм соответственно. На одном из образцов

В работе рассмотрена измерительная установка для решения выше обозначенных задач. Ее структурная схема изображена на рисунке 1. В состав установки входят:

- спектрометр Ocean Insight QE Pro. Детектор спектрометра выполнен на основе ПЗС-матрицы. Спектрометр обладает высокой чувствительностью и широким диапазоном времени интегрирования от 8 мс до 60 минут. Сбор данных ведется через оптоволоконно. Спектрометр также имеет возможность внешней синхронизации запуска измерений. Особенная конструкция спектрометра позволяет в режиме реального времени измерять спектры в диапазоне длин волн 200–1000 нм. Он подключается к персональному компьютеру (ПК) через порт USB;

- ПК, используемый для настройки, управления и получения данных со спектрометра;

- блок управления оптической стимуляцией, позволяющий выполнять ручную регулировку тока, протекающего через светодиоды, а также частоты, периода следования импульсов, коэффициента заполнения. Кроме того, он осуществляет временное разделение фаз стимуляции и измерения люминесценции или синхронизацию;

- светодиодная сборка с зеленым свечением ($\lambda_{\max} = 525$ нм), используемая в качестве мощного источника оптической стимуляции.

Данная измерительная установка может быть также дополнена нагревательным модулем и источником ионизирующего излучения, что позволит при их совместном использовании проводить измерения спектров термолюминесценции и радиолюминесценции.

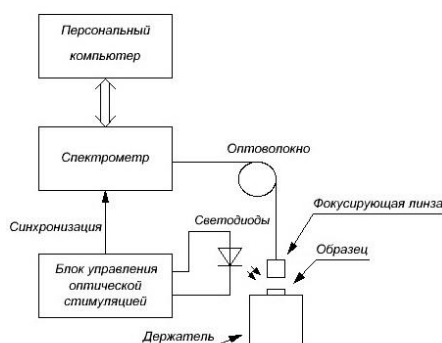


Рис. 1. Структурная схема установки для измерения спектров люминесценции

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», № 122021000030-1) при частичной поддержке РФФИ (проект № 20-48-660045).

1. М.Т. Yoshizumi, L.V.E. Caldas, Radiation Physics and Chemistry, 104, 292-296 (2014)

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРОВ ФОТО-, РАДИО-, ТЕРМО- И ОПТИЧЕСКИ СТИМУЛИРОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В ЛЮМИНЕСЦЕНТНО АКТИВНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Горев Н.Д.^{1,2}, Бояринцев А.И.^{1,2}, Абашев Р.М.^{1,2}, Сюрдо А.И.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Россий-
ской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: gorevnd@imp.uran.ru

RESEARCH FACILITY FOR MEASURING SPECTRA OF PHOTO-, RADIO-, THERMO- AND OPTICALLY STIMULATED LUMINESCENCE IN LUMINESCENT ACTIVE MATERIALS

Gorev N.D.^{1,2}, Boyarintsev A.I.^{1,2}, Abashev R.M.^{1,2}, Surdo A.I.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

The installation was created for the study of luminescent-active dosimetric materials. The installation can measure the spectra of photo-, radio-, thermo- and optically stimulated luminescence. The optical stimulation control unit was developed.

При исследовании свойств люминесцентно-активных дозиметрических материалов применяются методы, основанные на анализе спектров люминесценции [1]. Измерение таких спектров в большинстве случаев происходит последовательно в определенном диапазоне длин волн с помощью сканирующего монохроматора, выделяющего узкую спектральную область, которая регистрируется фотоприемником. Быстродействие такого метода ограничено диапазоном измеряемых длин волн и скоростью сканирования монохроматора. Поэтому регистрируемые спектры термолюминесценции (ТЛ) и оптически стимулированной люминесценции (ОСЛ) при непрерывной оптической стимуляции будут искажены, так как в ходе одного сканирования может существенно измениться спектральный состав ТЛ- и ОСЛ-сигналов. Более того, применение подобного метода для измерения спектров ОСЛ при импульсной оптической стимуляции крайне затруднительно, поскольку время сканирования полного спектра не должно превышать 100 мс.

Одним из возможных способов решения подобной задачи является применение спектрографов с ПЗС-линейками или матрицами для измерения спектров с временным разрешением. Они обладают рядом преимуществ: одновременная регистрация всего спектра в требуемом диапазоне, поддержка функции внешней синхронизации, позволяющая легко связать получение спектральных данных с внешними событиями.

необходимо устанавливать оптимальную длительность греющих импульсов, которая для каждого объекта своя.

Для устранения влияния переходных процессов применена процедура экстраполяции значений ТЧП к моменту окончания греющих импульсов. Для устранения второй причины измерялась переходная характеристика, анализ которой позволял определить оптимальную длительность импульсов. Результат измерения RT_{jc} равен 0,324 К/Вт (рис. 1а).

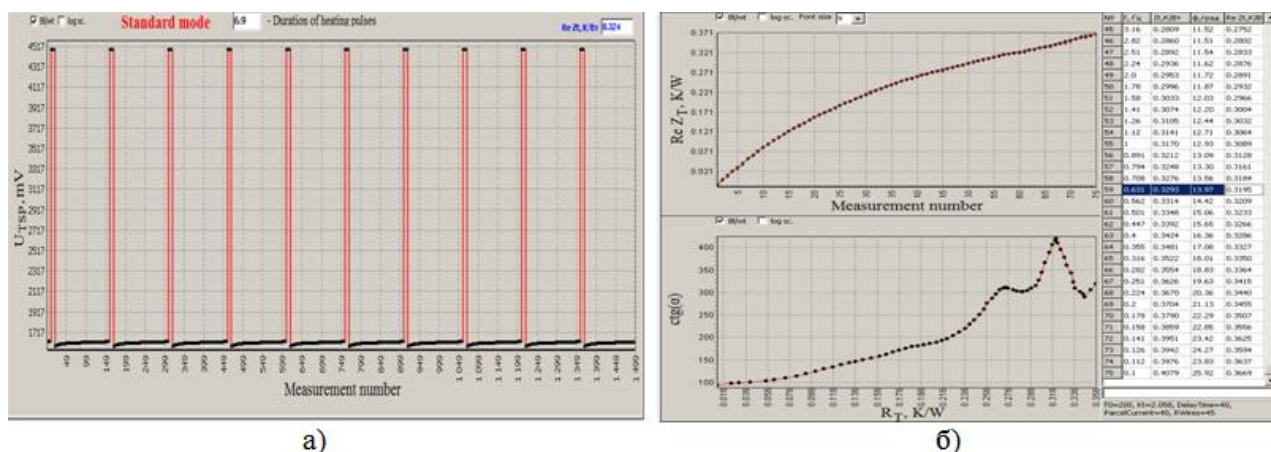


Рис. 1. Измерение теплового сопротивления: а) стандартным методом; б) модуляционным методом

Повысить точность измерения позволяет модуляционный метод, использующий нагрев объекта импульсами тока с изменяющейся по гармоническому закону длительностью [2]. Метод основан на измерении зависимости теплового импеданса от частоты модуляции греющей мощности. Выявление особенностей зависимости позволяет определить RT_{jc} , результат показан в нижнем окне на рис. 1б. Для исследуемого объекта значение RT_{jc} равно 0,320 К/Вт. Результаты измерений, полученные модуляционным и стандартным методом, в котором используется установка оптимальной длительности греющих импульсов и экстраполяция ТЧП к моменту окончания греющих импульсов, получились практически одинаковыми.

1. Smirnov V.I., Sergeev V.A., Gavrikov A.A. Apparatus for Measurement of Thermal Impedance of High-Power Light-Emitting Diodes and LED Assemblies // IEEE Trans. Electron Devices.—2018.—V. 63, No. 6, pp. 2431–2435.
2. Smirnov V.I., Sergeev V.A., Gavrikov A.A., Shorin A.M. Modulation method for measuring thermal impedance components of semiconductor devices // Microelectronics Reliability. – 2018. – V.80 – pp. 205–212.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УСИЛИТЕЛЕЙ МОЩНОСТИ

Смирнов В.И.^{1,2}, Сергеев В.А.^{1,2}, Гавриков А.А.¹

¹⁾ Ульяновский филиал Института радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова РАН

²⁾ Ульяновский государственный технический университет
E-mail: a.gavrikoff@gmail.com

STUDY OF THERMOELECTRIC PROPERTIES OF INTEGRATED POWER AMPLIFIERS

Smirnov V.I.^{1,2}, Sergeev V.A.^{1,2}, Gavrikov A.A.¹

¹⁾ Ulyanovsk Branch of Kotel'nikov Institute of Radio-Engineering and Electronics of
Russian Academy of Sciences

²⁾ Ulyanovsk state technical university

The results of studies of the thermoelectric properties of an analog IC of a microwave power amplifier are presented. Two methods for measuring the "transition-to-case" thermal resistance are proposed: standard and modulation.

Аналоговые интегральные схемы (ИС) усилителей мощности характеризуются большой рассеиваемой мощностью, что вызывает перегрев кристаллов и требует контроля качества отвода тепла. Теплоэлектрические свойства ИС характеризуются тепловым сопротивлением «переход-корпус» RT_{jc} , которое определяется приращением температуры T_j активной области при рассеивании в ней тепловой мощности.

Объектом исследований являлась аналоговая ИС СВЧ-усилителя мощности УМ-1015 (производство «АО «НПП «Пульсар»»), включающая в себя 4 кристалла мощных биполярных транзисторов. Выходная импульсная мощность усилителя 700 Вт, максимальная рабочая частота – 1,5 ГГц.

Стандартный метод измерения RT_{jc} включает в себя разогрев объекта последовательностью импульсов греющего тока и измерения температуры перехода T_j до и после воздействия каждого импульса. Данный метод реализован в аппаратно-программном комплексе [1], обеспечивающем формирование греющих импульсов постоянной или модулированной по гармоническому и логарифмическому закону длительности. Температура кристалла T_j определяется в паузах между импульсами тока $I_{гр}$ путем измерения температурочувствительного параметра (ТЧП) – π -прямое напряжение $U_{БЭ}$ при протекании измерительного тока $I_{изм}$.

Метод отличается невысокой точностью, во-первых, из-за влияния переходных электрических процессов при переключении транзистора из режима разогрева в режим измерения ТЧП. Во-вторых, для точного измерения RT_{jc}

трубы в отличие от обыкновенных способны передавать тепло на значительно большие расстояния, работать при неблагоприятных условиях гравитации и в невесомости.

Целью настоящей работы является конструирование, изготовление и исследование аммиачной контурной тепловой трубы (КТТ) длиной 6 м с высокой плотностью теплового потока в транспортной зоне, эксплуатируемой при любых ориентациях в гравитационном поле. Некоторые результаты исследований демонстрирующие возможности такой КТТ представлены на рисунке.

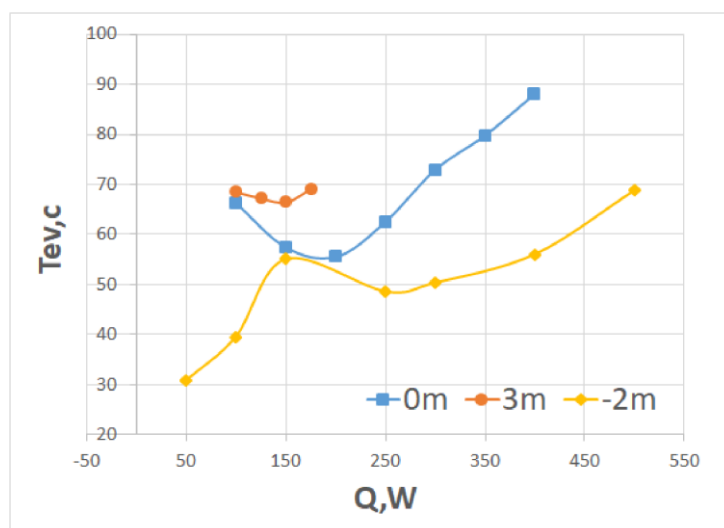


Рис. 1. Контурная аммиачная тепловая труба 6 м. Зависимость от ориентации: $\varphi = +90$ градусов (испаритель выше конденсатора), $\varphi = 0$ градусов (испаритель и конденсатор на одном уровне), $\varphi = -90$ градусов (испаритель ниже конденсатора).

Как видно из представленных данных исследуемая КТТ при благоприятных для трубы условиях ($\varphi = -90^\circ$, -2м) передает тепло мощностью до 500 Вт при аксиальной плотности теплового потока до $35 \cdot 10^6$ Вт/м². Соответственно при неблагоприятной ориентации ($\varphi = +90^\circ$, +3м) тепло транспортные возможности ухудшаются в 5 раз. Это свидетельствует о достаточно высокой чувствительности к неблагоприятным ускорениям. Создание анизотропных капиллярных структур позволяет эту ситуацию улучшать [3].

1. Дан П., Рей Д. Тепловые трубы. М.: Энергия, 1979.
2. Кисеев В.М. Физика теплопередающих систем. Екатеринбург: Изд-во Урал ун-та, 2006, С. 131
3. Кисеев В. М. Сажин О.В. Интенсификация теплопередачи в двухфазных системах с капиллярными насосами, Журнал технической физики, 2022, том 92, вып. 1. С. 22 -31.

ДВУХФАЗНАЯ СИСТЕМА ТЕРМОРЕГУЛИРОВАНИЯ С КАПИЛЛЯРНЫМ НАСОСОМ

Фоменко В.Е.¹, Кисеев В.М.¹, Судаков Р.Г.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vladynia9@mail.ru

TWO-PHASE THERMAL CONTROL SYSTEM WITH CAPILLARY PUMP

Fomenko V.E.¹, Kiseev V.M.¹, Sudakov R.G.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The experimental data for LHP 6 m are presented and the conditions operability are considered. Methods of increasing the heat transfer capacity of LHP, due to the use of anisotropic capillary structures with a decrease in pore sizes in the direction of the vaporization zone, are determined.

Развитие современной техники сопровождается интенсификацией процессов тепло- и массообмена в различных устройствах. Однако интенсификация теплообмена затрудняется из-за самой природы тепла, плохой трансформируемости теплового движения и слабой восприимчивости к внешним полям. Высокое совершенство в управлении электронными процессами при использовании твердотельных элементов позволило сократить объемы преобразователей в тысячи раз. Это привело к необходимости отводить потоки тепла, необходимые для поддержания требуемых температурных режимов твердотельных элементов, гораздо большей плотности. Изобретение тепловых труб (ТТ) [1] для этих целей оказало революционирующее влияние на развитие современной техники. Область их применения обширна: охлаждение элементов электронного оборудования, терморегулирование объектов космического базирования, также возможно применение ТТ для намораживания грунта вокруг свай в местах вечной мерзлоты.

Тепловая труба привлекает внимание прежде всего высокой эффективной теплопроводностью, достигающей 10^5 - 10^6 Вт/мК. К сравнению теплопроводность серебра 430 Вт/мК, алмаза -2600 Вт/мК, графена – 5300 Вт/мК

Среди большого разнообразия тепловых труб и систем терморегулирования на их основе специальное место занимают контурные тепловые трубы (КТТ), представляющие собой двухфазный контур с локально размещенным в нем в зоне подвода тепла капиллярным насосом. Теплопередающая способность таких КТТ зависит от многих факторов: во-первых, конструкции испарителя (капиллярного насоса), конденсатора и КТТ в целом; во-вторых, физических свойства капиллярной структуры, теплоносителя и корпуса КТТ; в-третьих, условий теплообмена в зонах подвода и отвода тепла и влияние внешних силовых полей[2]. Такие

которой была разработана автоматизированная контрольно-измерительная система и соответствующие алгоритмы обработки информации. Разработан математический аппарат по обработке получаемой информации для определения эмиттанса и распределения плотности тока пучка в фазовом пространстве.

В результате разработан диагностический комплекс для высокоточных измерений параметров пучков МЗИ в широком спектре масс. Задачей дальнейших исследований является улучшение существующих и создания новых методов диагностики ионных пучков с субмикронной точностью.

1. Zschornack G., Schmidt M. et al., CAS-CERN Accelerator School: Ion Sources - Proceedings, 007(2013).

СИСТЕМА ДИАГНОСТИКИ ПУЧКОВ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ (МЗИ)

Фофанов А.С.¹, Шмидберский П.А.¹, Шмидберская А.А.¹

¹) АО НИИЭФА им. Д.В. Ефремова» (АО «НИИЭФА»), г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: andreiinord@yandex.ru

HCI BEAM DIAGNOSTICS SYSTEM

Fofanov A.S.¹, Schmidbersky P.A.¹, Schmidberskaya A.A.¹

¹) Efremov Scientific Research Institute of Electrophysical Apparatus (NIEFA
Efremov), Saint Petersburg, Russia

The aim of this work is a high-precision measure of HCI beams parameters, taking into account the processes occurring on the sensors during the interaction of their surface with the HCI. To achieve this goal, we developed a diagnostic complex allowing to measure the parameters of HCI beams.

Ионные пучки находят множество применений в различных технологиях, диагностики структур и изделиях микро- и нанoeлектроники. В АО «НИИЭФА» проводятся работы, направленные на создание различных источников ионов и, в том числе, источников МЗИ, которые обладают свойствами, во многом отличающимися от пучков однозарядных ионов и нейтральных атомов [1]. Целью данной работы является высокоточное измерение параметров пучков МЗИ с учетом процессов, протекающих на сенсорах при взаимодействии их поверхности с МЗИ.

Для решения поставленных задач разработан диагностический комплекс, позволяющий измерять параметры пучков МЗИ в широком спектре масс. В составе такого комплекса реализованы основные классические методы диагностики ионных пучков с учетом особенностей пучков МЗИ. В качестве первичного преобразователя системы измерения величины тока ионного пучка разработан цилиндр Фарадея специальной конструкции, с минимальным током утечки возникающем в результате эффектов ион-электронной эмиссии и ионного распыления. В качестве вторичного преобразователя используется пикоамперметр А2-4, что в совокупности позволяет обеспечить высокую точность измерения. Измерение распределения плотности тока по сечению ионного пучка осуществляется методом диафрагмирования. Для измерения эмиттанса пучка МЗИ, в различных сечениях, и распределения плотности тока в четырёхмерном фазовом пространстве $J(x, y, x', y')$ используется метод четырех щелей.

Особое внимание было уделено анализу погрешностей измерений. Получены выражения для их оценки, учитывающие большинство влияющих факторов, по результатам анализа которых принят ряд конструктивных решений значительно повысивших точность измерений. Для исключения погрешностей, связанных с процессом измерения используется система автоматического управления, для

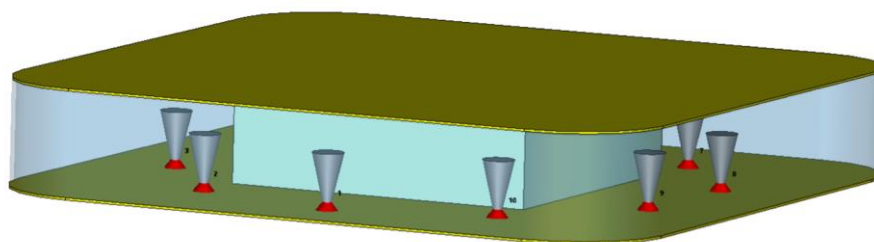


Рис. 1. Корпус неттопа с пеленгатором из 10 антенных элементов. В центре – блок печатных плат (материал Fr-4 $\epsilon=4,3$); корпус состоит из двух алюминиевых пластин и пластиковой окантовки ($\epsilon=3$)

Применение аппарата ВАР позволяет снизить влияние корпуса, а также внутренних компонентов устройства, что и позволяет так повысить точность пеленгации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-10109)

1. Quitin F., Doncker P. De, Horlin F., Tay W. P., IEEE Transactions on Vehicular Technology, Vol. 67, No. 2, pp. 1510-1520, 2018
2. Yaqoob M. A., Tufvesson F., Mannesson A., Bernhardsson B., 2013 IEEE International Conference on Communications Workshops (ICC), pp. 79-83, 2013

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ВИРТУАЛЬНЫХ АНТЕННЫХ РЕШЕТОК ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ ПРИХОДА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН

Ищенко Е.А.¹, Пастернак Ю.Г.¹, Пендюрин В.А.², Фёдоров С.М.¹

¹) Воронежский Государственный Технический Университет

²) АО НПП "АСС"

E-mail: kursk98@mail.ru

APPLICATION OF VIRTUAL ANTENNA ARRAY TECHNOLOGY TO INCREASE THE EFFICIENCY OF DETERMINING THE DIRECTION OF ARRIVAL OF ELECTROMAGNETIC WAVES

Ishchenko E.A.¹, Pasternak Yu.G.¹, Penduyrin V.A.², Fedorov S.M.¹

¹) Voronezh State Technical University

²) JSC SPE "ACS"

The paper considers a technique for improving the accuracy of determining the direction of arrival of electromagnetic waves in a nettop through the use of virtual antenna arrays. thanks to the proposed method, it is possible to significantly improve the accuracy of determining EMF characteristic.

В работе рассматривается неттоп с установленной антенной решеткой из десяти антенных элементов, предназначенных для определения направления прихода электромагнитных волн. Для повышения точности определения азимута прихода электромагнитных волн предлагается использовать аппарат виртуальных антенных решеток. Предложенная технология позволяет повысить точность настройки антенной системы с технологией формирования луча, что значительно повышает качество связи и эффективности передачи данных.

Полученные в процессе исследования результаты показывают, что использование виртуальных антенных решеток повышает точность пеленгации. Так, при использовании стандартных методов среднеквадратическое отклонение пеленга составило 182,2 (ошибка пеленга 163,9), а при использовании метода ВАР ско составило 6,2 (ошибка пеленга 4,9).

Формирование виртуальной антенной решетки выполнялось с использованием функции Ганкеля и решения с ее использованием уравнений Гельмгольца, а также напряжений, которые измерял базовый комплекс пеленгации - реальная антенная решетка. Благодаря использованию данного способа удалось значительно повысить скорость обработки сигналов, а также повысить эффективность аппроксимации поля.

Запись данных координат осуществлялась следующим образом: оператор, двигаясь с типичной для магнитной съемки скоростью по прямолинейным траекториям (направления: север-юг, запад-восток), производил одновременную запись GPS-координат с исследуемых устройств.

Впоследствии полученные исходные данные были обработаны при помощи вычислительной среды Matlab, путем преобразования исходных данных из геодезической в локальную декартову систему координат с направляющей осью Ox ориентированной вдоль направления движения исследователя. Далее был выполнен расчет СКО, в результате которого была дана оценка среднего значения отклонения координат от условной идеальной траектории в размере 1,3 метра для всех исследуемых устройств, что пригодно для пешеходной магнитометрической съемки с геопривязкой получаемых магнитных данных координатам, полученным с GNSS приемников смартфонов.

В перспективе использование более оптимальных методик получения координат с GNSS приемников смартфонов, а также последующая их программная обработка, с возможным использованием нескольких источников координат, позволит снизить погрешность измерения координат, повысить точность определения текущего местоположения исследователя и, следовательно, строить магнитные карты с большим пространственным разрешением.

1. Инструкция по магниторазведке. М-во геологии СССР. – Л.: Недра, 1981.
2. Moore, S. K. (2017). Super-accurate GPS coming to smartphones in 2018 [News]. IEEE Spectrum, 54(11), 10–11.

ПРАКТИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ GPS-ПРИЕМНИКОВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ МАГНИТОМЕТРИЧЕСКОГО КАРТИРОВАНИЯ

Евдокимов В.В.¹, Киселев В.А.¹, Сапунов В.А.¹, Нархов Е.Д.¹, Сергеев А.В.¹

¹) НИЛ Квантовой магнитометрии, ФТИ УрФУ
E-mail: vladimir.evdokimov@urfu.me

PRACTICAL COMPARISON OF GPS RECEIVERS PROMISING FOR MAGNETOMETRIC MAPPING

Evdokimov V.V.¹, Kiselev V.A.¹, Sapunov V.A.¹, Narhov E.D.¹, Sergeev A.V.¹

¹) Research Laboratory of Quantum Magnetometry, IPT UrFU

In the course of the work, a comparison was made of various GPS receivers for the spatial reference of magnetometric data. Data were collected from 5 receivers, after which processing was carried out and the standard deviation was calculated from the ideal trajectory.

Активное развитие БПЛА привело к широкому распространению магнитной съемки, при которой измерения ведутся непрерывно. Кроме того, непрерывные измерения применяются и в случаях, когда построение регулярной сетки измерений, рекомендованной в "Инструкции по магниторазведке" [1], не представляется возможным. Важным аспектом таких магнитометрических съемок является пространственная привязка магнитных данных. При использовании GPS-навигаторов для привязки, во избежание искажения магнитных аномалий, а также для корректной сшивки магнитных карт отдельных участков, необходимо иметь представление о величинах случайной и систематической ошибок таких приемников.

Данный доклад в большей степени имеет прикладной характер, а его результаты планируется использовать в процессе совершенствования магнитометров серии POS, производимых лабораторией Квантовой магнитометрии Физико-технологического института Уральского Федерального университета. На данный момент, техническое решение, реализованное в приборах серии POS, подразумевает использование в качестве GPS-приемника внешнего пешеходного навигатора Garmin 78 или внутреннего, на базе Trimble Lassen iQ.

Опубликованные в работе [2] данные, стали основанием для проведения серии экспериментов, направленных на количественную оценку параметров современных приемников, в том числе, встроенных в смартфоны. Одним из наиболее многообещающих улучшений точности определения местоположения является введение «двухчастотной» поддержки GNSS.

В качестве опытных образцов были выбраны следующие GPS-приемники: Garmin 78 (контрольный), модуль GNSS на базе Neoway G7, приемники, встроенные в iPhone XS Max и iPhone 12 Pro.

3Д-печать. Предложен меламиновый субстрат в качестве проницаемой механической поддержки для нанесения сенсорных материалов. Описаны примененные методы подавления шума изображения и схема распознавания образов для автоматического выделения соответствующих материалам областей на изображении. Рассмотрены средства автоматизации эксперимента и способ передачи и обработки данных на ПК. Охарактеризована применённая для регистрации флуоресценции камера. Рассчитаны соотношения сигнал-шум устройства. Разработанное устройство является недорогим гибким автоматизированным инструментом для реализации флуоресцентного метода по отношению к анализам в газовой фазе и сочетает простоту дизайна, портативность и программные средства обработки данных.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-37-90108.

1. Zhang A. et al., A Multi channel System for Qualitative Explosive and Drug Detection, Sensing and Imaging, 2018, Vol. 19, Art. 30.
2. Askim, J.R et al., An optoelectronic nose for identification of explosives, Chem. Sci., 2016, Vol.7, P.199-206.
3. R. Chuvashov et al., A Detection System with Low Sampling Distortion for Application in Optical Array Sensing in Gas Phase / // 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE), 2020, P. 984-988.

СЧИТЫВАТЕЛЬ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ МАССИВОВ СЕНСОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА АНАЛИТЫ В ГАЗАХ

Чувашов Р.Д.¹, Хохлов К.О.¹, Вербицкий Е.В.^{1,2}, Баранова А.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

²⁾ Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН)
E-mail: chuva.rd.13@gmail.com

GAS-PHASE PORTABLE READER FOR FLUORESCENT SENSOR ARRAYS

Chuvashov R.D.¹, Khokhlov K.O.¹, Verbitskiy E.V.^{1,2}, Baranova A.A.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the First President of Russia B.N. Yeltsin

²⁾ I.Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (IOS UB RAS)

The reader device employing the array of fluorescent sensor materials for gas-phase sensing was fabricated. The concept and construction of the device and its sensor element as well as employed software are described. The developed device is inexpensive flexible tool coupling the simplicity of the d.

Флуоресцентное обнаружение экотоксикантов с помощью анализаторов газа как метод отличается портативностью, чувствительностью и позволяет проводить экспресс-мониторинг в газовой фазе [1,2]. Базовыми элементами устройства на основе данного метода являются флуоресцирующий сенсорный материал, оптическая схема возбуждения и регистрации флуоресценции материала, и система приведения сенсорного материала в контакт с аналитом в газовой смеси. Использование массивов сенсорных материалов позволяет повысить селективность устройств через идентификацию аналитов и расширить спектр доступных к детектированию веществ.

В работе рассмотрены считыватель люминесценции и сенсорный элемент для параллельной регистрации интегральных интенсивностей флуоресценции набора твёрдых сенсорных материалов. Представленное устройство является улучшением ранее описанного устройства [3]. Основная идея конструкции заключается в применении КМОП веб-камеры для наблюдения за сенсорным элементом. Отличия представленного устройства от описанной ранее заключаются в автоматизации работы под выполнение сценариев, повышением частоты кадров, применением цифровой фильтрации шума, добавлении датчиков температуры и влажности воздуха внутри рабочего объёма, создании 3D-печатного корпуса. Описаны несущий комбинацию флуоресцентных материалов сенсорный элемент, оптическая схема регистрации изменения свечения и схема прокачки анализируемого газа через сенсорный элемент. При изготовлении устройства применялась

В ходе проведенных исследовательских испытаний была достигнута предельная температура -182°C в объеме 80 литров. Среднее время стабилизации заданной температуры с точностью $\pm 0.5^{\circ}\text{C}$ составило не более 15 минут от момента ее достижения.

This paper has been supported by the Kazan Federal University Strategic Academic Leadership Program.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета

1. M. Chipin, R. Latypov, A. Isaeva, F. Mukhametzhanov, Y. Davydov, A. Makridin, M. Popov, "Modernization of hardware and data processing methods of a coercive spectrometer", 2019 Russian Open Conference on Radio Wave Propagation, RWP 2019 - Proceedings July 2019, № 8810337, pp. 450-453.

СОЗДАНИЕ КРИОКАМЕРЫ БОЛЬШОГО ОБЪЕМА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ РАДИОУРОВНЕМЕРОВ

Чупин М.М.¹, Латыпов Р.Р.¹, Нурмухаметов Р.Р.²

¹) Казанский федеральный университет, Казань, Россия

²) Всероссийский научно-исследовательский институт расходометрии - филиал федерального государственного унитарного предприятия "Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И.Менделеева", Казань, Россия

E-mail: grey2paul@gmail.com

CREATION OF A LARGE VOLUME CRYOCHAMBER FOR STUDYING RADIO LEVEL GAUGES

Chupin M.M.¹, Latypov R.R.¹, Nurmukhametov R.R.²

¹) Kazan Federal University, Kazan, Russia

²) Russian Research Institute of Flow Metering - branch of "Russian Scientific Research Institute of Metrology named after D.I. Mendeleev", Kazan, Russia

This article describes the creation of electronics and a control system for a large volume cryochamber in order to study the properties of radio level gauges at operating temperature.

Актуальной проблемой является измерение уровня сжиженного природного газа (СПГ) в резервуарах. Для этого используются крио-радиоуровнемеры. В данной статье описывается создание электроники и системы управления для радио-прозрачной криокамеры большого объема с рабочим стабилизированным диапазоном от 0 °С до -180 °С, с целью исследований свойств радиоуровнемеров при рабочей температуре.

Охладитель камеры представляет собой емкость с нагревательным элементом в которой поддерживается постоянный уровень жидкого азота. Нагреватель испаряет азот в основную секцию криокамеры с отсеком для установки уровнемеров.

Одной из проблем при создании камеры стало изменение ее теплопроводности от температуры. Это связано с изменением геометрии камеры, приводящим к увеличению тепловых потерь, так как камера сделана из радиопрозрачного материала - пенополистирола (утеплителя).

Так же дополнительные тепловые потери вносит сам уровнемер, т.к. значительная его часть устанавливается на камеру сверху, аналогично использованию его в резервуарах СПГ.

Предлагаемым решением является использование модифицированного пропорционально-интегрально-дифференцирующего (ПИД) регулятора с автоматической коррекцией коэффициентов в зависимости от температуры внутри камеры. Был использован экспериментальный метод анализа кривой изменения температуры при переходных характеристиках для подбора коэффициентов ПИД регулятора при различных температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (Проект № 22-21-00714).

1. Chupin, I. A., Dolgii, Y. F., Sesekin, A. N., The controlling of robot with three degrees of freedom, AIP Conference Proceedings; Том 2313, (2020))
2. Долгий Ю.Ф., Чупин И.А., Импульсные управления поступательным и вращательным движениями робота, материалы XIII Всероссийской научно-технической конференции Робототехника и искусственный интеллект, 203-206, (2021)
3. Акуленко Л.Д., Болотник Н.Н., Каплунов А.А., Некоторые режимы управления промышленными манипуляторами, Изв. АН СССР. Техн. кибернетика, № 6, (1985)
4. Chernousko F.L., Bolotnik N.N., Gradetsky V.G., Manipulation Robots: Dynamics, Control and Optimization, Boca Raton: CRC Press, (1994).

СРАВНЕНИЕ РЕЛЕЙНОГО И ИМПУЛЬСНОГО УПРАВЛЕНИЙ МАНИПУЛЯТОРОМ

Чупин И.А.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: mr.tchupin@yandex.ru

COMPARISON OF RELAY AND IMPULSE CONTROL OF MANIPULATOR

Chupin I.A.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Analytical formulas for impulse control of a simplified model of manipulator are obtained. Analytical formulas for quality indicators of impulse and relay controls are revealed. Areas allowing to compare the quality of relay and impulse controls are constructed on the base of control parameters.

Управляемая модель манипулятора является существенно нелинейной. Задача управления состоит в переводе схвата манипулятора из начального положения покоя в конечное положение. В работах [1, 2] для нахождения ее аналитического решения в классе импульсных управлений использовалась теория интегрирования дифференциальных уравнений классической механики. Для существования решения достаточно ограничиться сообщением импульсов только в начальный момент времени и специальной зависимостью интенсивностей угловых и горизонтальных импульсов. В классе релейных управлений аналитическое решение удастся построить в рамках упрощенной модели манипуляционного робота с медленным вращением руки [3]. Для существования решения достаточно ограничиться зависимостью релейных управлений только от одного параметра, определяющего горизонтальную управляющую силу. Аналитические формулы для релейных управлений и упрощенной масштабированной модели манипуляционного робота приведены в [3, 4]. В работе получены аналитические формулы для импульсных управлений упрощенной масштабированной модели манипулятора. Качество управлений характеризуется временем перехода манипулятора из начального положения в конечное, а также энергией необходимой для указанного перехода. В настоящей работе в рамках масштабированной модели манипуляционного робота получены аналитические формулы для показателей качества импульсного и релейного управлений. Показатели импульсных управлений зависят от интенсивности горизонтального импульса, а релейных управлений от параметра, определяющего горизонтальную управляющую силу. На плоскости управляющих параметров построены области, которые позволяют сравнить качество релейных и импульсных управлений.

производной K_d - были определены методом проб и ошибок таким образом, чтобы реакция системы управления удовлетворяла предложенным критериям. Разработанный стенд состоит из аппаратной части и программы управления.

Экспериментальное исследование системы показало, что погрешность поддержания температуры в водяной бане в установившемся режиме не превышает $0,1^\circ\text{C}$. По сравнению с классической схемой разработанная схема позволяет экономить до 20% электроэнергии за счет эффективной системы управления.

1. Srivastava S. and Pandit V. A PI/PID controller for time delay systems with desired closed loop time response and guaranteed gain and phase margins // *Journal of Process Control*. - 2016. – Vol.37. – P.70-77.
2. Umberger M. and Humar I. Energy savings of refrigerators in shopping centers with adaptive control and real-time energy management systems // *Przegląd Elektrotechniczny*. - 2012. – Vol.88. – P.327-331.

РАЗРАБОТКА БЛОКА ЭЛЕКТРОННОГО УПРАВЛЕНИЯ ВОДЯНОЙ БАНИ НА БАЗЕ ARDUINO UNO R3

Чичигина Е.Е.¹, Лагунов А.Ю.¹

¹) Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова
E-mail: chichigina.e@edu.narfu.ru

DEVELOPMENT OF A WATER BATH ELECTRONIC CONTROL UNIT BASED ON THE ARDUINO UNO R3

Chichigina E.E.¹, Lagunov A.Y.¹

¹) Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov

The classical water bath circuit usually uses a thermostat as a temperature regulator to maintain the desired temperature in the compartment. This paper has developed a new PID controller based on the Arduino Uno R3 with application to the water bath to solve the temperature control problem.

Водяная баня может поддерживать желаемую температуру в отделении, так как в нем используется термостат, который служит регулятором включения и выключения. Однако, термостат имеет низкий показатель эффективности. Во-первых, присутствует разница между температурой включения или выключения и температурой установки, что вызывает ошибку реакции, которая может достигать до 1,5°C. Во-вторых, если дифференциал установлен на слишком маленькое значение, то водяная баня будет часто включаться и выключаться. Следовательно, это действие может вывести из строя систему нагрева и охлаждения. Кроме того, это действие требует высокого пускового тока, в 4-10 раз превышающего рабочий ток.

Для устранения этих недостатков был разработан новый контроллер включения-выключения. Однако этот способ не смог значительно уменьшить как ошибку отклика, так и потребление энергии. В ходе разработки для улучшения регулятора включения-выключения была использована концепция ПИД-регулятора [1] и концепция адаптивного управления [2]. При их реализации возникали ограничения, как по определению параметров управления, так и по компонентам управления, которые необходимы для поддержки системы регулирования температуры. Например, для перехода от системы управления "включено-выключено" к ПИД-регулированию необходимо предусмотреть добавление компонентов безопасности, чтобы избежать перегрева системы нагрева и охлаждения.

Для уменьшения влияния этой проблемы в нашей работе была разработана новая система ПИД-регулирования на базе Arduino Uno R3 с применением к водяной бане. В данном случае Arduino Uno R3 был аппроксимирован новым алгоритмом ПИД-регулятора. Параметры управления: пропорциональный коэффициент усиления K_p , интегральный коэффициент усиления K_i и коэффициент

СЕКЦИЯ 3
ПРИБОРОСТРОЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

магнитоупругой анизотропии от удлинения полимерной подложки. Методом оптической литографии изготовлен сенсор изгиба с использованием схемы моста Уитстона.

Константы магнитоупругой анизотропии оценивались по изменению формы магниторезистивной кривой при растяжении спинового клапана. График зависимости константы магнитоупругой анизотропии от удлинения гибкой подложки представлен на рисунке 1.

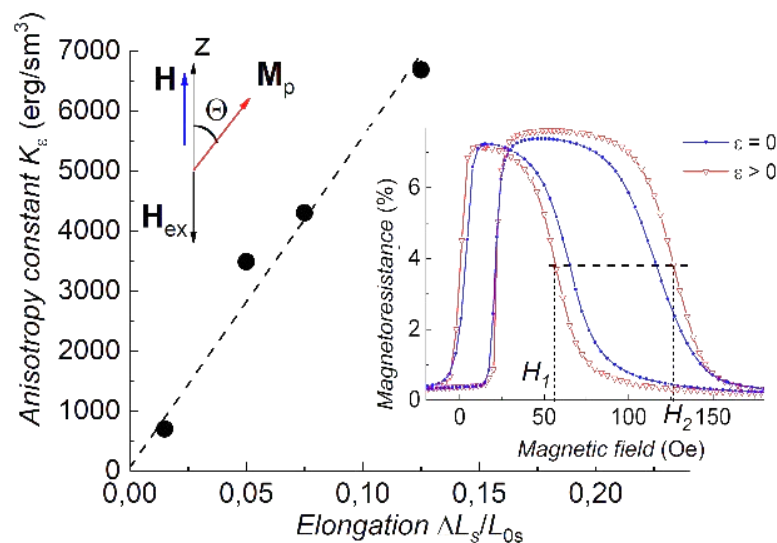


Рис. 1. График зависимости константы магнитоупругой анизотропии от удлинения гибкой подложки, где на вставке показана магниторезистивная кривая для спинового клапана исследуемой композиции с $n=5$ и шириной микрополоски 40 мкм в недеформированном и деформированном состояниях

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России по темам “Спин” АААА-А18-118020290104-2 и «Магнит» №122021000034-9 при поддержке РФФИ (грант 20-42-660018 р_а).

1. Yong Zhang, Min Zhang, et al., Metals, 9, №3, (2019)

ДЕФОРМАЦИЯ ИЗГИБА И МАГНИТОУПРУГИЕ СВОЙСТВА СПИНОВОГО КЛАПАНА НА ПОЛИМЕРНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Захаров А.А.^{1,2}, Наумова Л.И.², Миляев М.А.², Максимова И.К.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: archiyqt@gmail.com

BENDING DEFORMATION AND MAGNETOELASTIC PROPERTIES OF A SPIN VALVE ON A POLYMER SUBSTRATE

Zakharov A.A.^{1,2}, Naumova L.I.², Milyaev M.A.², Maksimova I.K.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ M.N. Miheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

We report the results of a study of bending deformation of spin valves sputtered on polyimide substrate. It was taken into account that two factors contribute to the change in the magnetoresistance. We have obtained the dependence of the magnetoelastic anisotropy constant on substrate elongation.

Проведены исследования магниторезистивных и магнитоупругих свойств, обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления, наноструктур типа «спиновый клапан» изготовленных на гибкой подложке из полиимидной (PI) пленки. Спиновый клапан представляет собой комбинацию двух ферромагнитных (ФМ) нанослоев, разделенных слоем меди, со слоем антиферромагнетика (АФМ). Слой ФМ примыкающий к АФМ связан с ним обменным взаимодействием и задает ось однонаправленной анизотропии (ООА). Второй ФМ задает ось легкого намагничивания (ОЛН). Оси анизотропии формируются при напылении наноструктуры в магнитном поле.

Объектом исследования выступали образцы следующей композиции слоев $[Ta(5)/(Ni_{80}Fe_{20})_{60}Cr_{40}(5)]_n/Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}(5.5)/Cu(2.6)/Co_{70}Fe_{10}Ni_{20}(4)/FeMn(15)/Ta(6)$, где толщины указаны в нанометрах, а число $n=2,5$ и 7 – количество повторений. Образцы изготавливались методом магнетронного напыления на PI пленке. Используемые сплавы $Co_{70}Fe_{20}Ni_{10}$ и $Co_{70}Fe_{10}Ni_{20}$ обладают нулевой и ненулевой магнитострикцией соответственно [1].

В ходе исследования деформация спинового клапана осуществлялась так, что вектор деформации и располагался параллельно приложенному внешнему полю H и осям магнитной анизотропии наноструктуры. Получены зависимости изменения магнитосопротивления спинового клапана от его изгиба. Рассмотрены вклады от двух факторов, возникающих при изгибе: изменения проекции поля на плоскость образца и изменения магнитного момента ферромагнетиков из-за эффекта Виллари. Проведена количественная оценка констант магнитоупругой анизотропии спинового клапана и построена зависимость константы

2. R. Harish, K. D. Nisha. *Applied Surface Science* 499, 143817 (2020).
3. Y. V. Kuznetsova, A. A. Rempel. *Inorganic Materials* 51 3, 215-219 (2015)

СВОЙСТВА И БИОСОВМЕСТИМОСТЬ КОЛЛОИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА КАДМИЯ

Воронцова Е.С.¹, Кузнецова Ю.В.², Улитко М.В.¹, Ремпель С.В.^{1, 2}

¹) Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина

²) Институт химии твердого тела УрО РАН
E-mail: e.s.vorontsova17@gmail.com

PROPERTIES AND BIOCOMPATIBILITY OF COLLOID CADMIUM SULFIDE NANOPARTICLES

Vorontsova E.S.¹, Kuznetsova Y.V.², Ulitko M.V.¹, Rempel S.V.^{1, 2}

¹) Ural Federal University

²) Institute of Solid State Chemistry, of RAS (Ural Branch)

This work is devoted to the synthesis of CdS nanoparticles stabilized by EDTA and to the study of the biological effect of colloidal CdS nanoparticles on cell cultures.

Уникальные люминесцентные свойства наночастиц сульфида кадмия (CdS) позволяют применять их в оптоэлектронике [1], биологии и медицине [2]. Для применения в биологии и медицине свойства растворителя имеют важное значение. Для получения коллоидных наночастиц CdS, как правило, используются токсичные органические жидкости. Перед применением такие наночастицы необходимо переводить в биосовместимый растворитель путем нескольких химических превращений. Разработка методов синтеза коллоидных наночастиц с использованием воды в качестве растворителя является важнейшей задачей. Кроме того, при использовании неорганических наночастиц остро стоит вопрос об их токсичности.

В данной работе наночастицы CdS были синтезированы методом химической конденсации в водном растворе, что позволяет применять их без дальнейших трудоемких операций. Для предотвращения агломерации и осаждения наночастиц использовалась динатриевая соль этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА) в качестве стабилизатора [3].

Методом динамического рассеяния света (Zetasizer Nano ZS (Malvern Panalytical)) при 25 °С изучены размер (D_H) и дзета-потенциал наночастиц CdS в растворе. Исследования цитотоксичности коллоидных наночастиц CdS в разных концентрациях, а также исходных растворов проводили на культурах дермальных фибробластов человека и линии HeLa. Сравнение приводилось с камтотецином.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием Института химии твердого тела УрО РАН по теме №. 0397-2019-0001

1. B.Gao, X. Zhao. Analytical Chemistry 93(2), 820-827 (2020).

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Диагностика», № 122021000030-1) при частичной поддержке РФФИ (проект № 20-48-660045).

1. Патент РФ 2747599, МПК А61N 5/10, G01T 1/10. Способ получения тонкослойных детекторов ионизирующих излучений для кожной и глазной дозиметрии: патент на изобретение / Мильман И. И., Сюрдо А. И., Абашев Р. М.; патентообладатель Институт физики металлов УрО РАН. – № 2020128125; заявл. 21.08.2020; опубл. 11.05.2021, Бюл. № 14. – 17 с.
2. SR-excited luminescence of corundum with native defects / A.I. Syurdo, V. S. Kortov, V. A. Pustovarov, F. F. Sharafutdinov, E. I. Zinin // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1998. – V. 405. – P. 408-411.

наблюдаются характерные и с близкими интенсивностями полосы с максимумами $h\nu_{em}$ при 1.70 и 1.79 эВ, связанные соответственно со следовыми количествами примесей Ti^{3+} и Cr^{3+} . Кроме того, в обсуждаемых спектрах регистрируется широкая полоса с $h\nu_{em}=4.0$ эВ и полушириной $H=1.1$ эВ, часто приписываемая девозбуждению экситоноподобных состояний, в том числе связанного на Ti^{3+} экситона [2]. Аналогичные примесные полосы наблюдаются в спектре РЛ образца $\alpha-Al_2O_{3-\delta}$. Особое внимание в спектрах РЛ обращает то, что в результате лазерной обработки образца $\alpha-Al_2O_3$ появляются две новые полосы (см. кривая 2) с $h\nu_{em}=3.75$ эВ, $H=0.43$ эВ и $h\nu_{em}=3.0$ эВ, $H=0.43$ эВ, первая из которых по своим параметрам соответствует F^+ -центрам, а вторая - F-центрам (анионная вакансия с одним и двумя электронами соответственно). Однако распределение в них интенсивностей сильно отличается от такового в спектре РЛ образца $\alpha-Al_2O_{3-\delta}$. В лазернообработанном образце $\alpha-Al_2O_3$ доминирующей в спектре РЛ является полоса свечения F^+ -центров, а в $\alpha-Al_2O_{3-\delta}$ - F-центров.

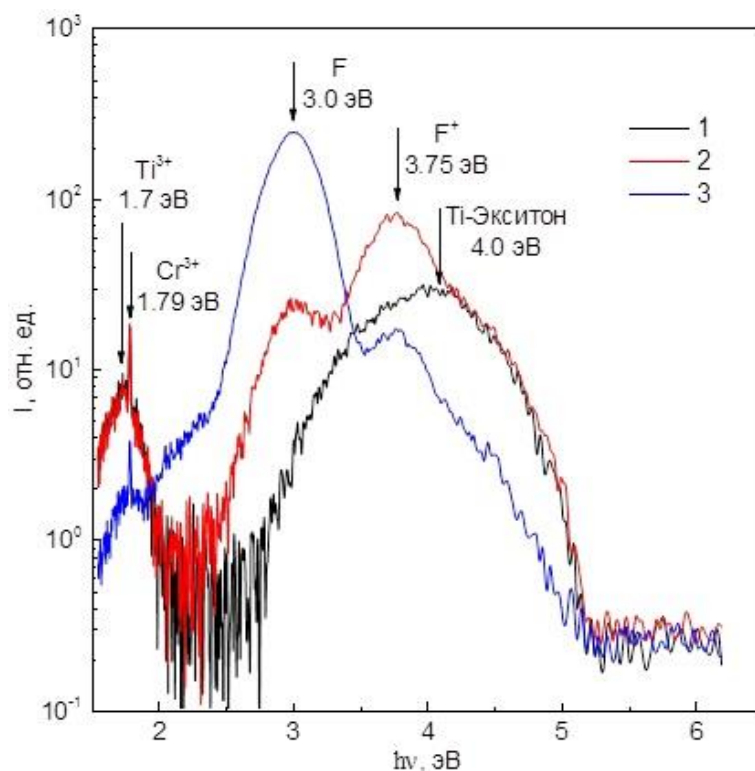


Рис. 1. Спектры РЛ образца корунда стехиометрического состава до (кривая 1) и после (кривая 2) лазерной обработки и для сравнения спектр РЛ анионодефицитного корунда (кривая 3)

Полученные результаты исследований РЛ, ФЛ, ОСЛ и ТЛ показывают, что люминесцентная активность тонких слоёв, созданных ИК-лазерной обработкой на поверхности кристаллов корунда, связана с анионной дефектностью, а именно с центрами F^+ - и F-типа.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СЛОЁВ, СОЗДАННЫХ В КОРУНДЕ ИК-ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКОЙ

Волошин А.М.¹, Сюрдо А.И.^{1, 2}, Абашев Р.М.^{1, 2}

¹⁾ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: artemiyc@list.ru

LUMINESCENT PROPERTIES OF THIN SENSITIVE LAYERS CREATED IN CORUNDUM BY IR LASER TREATMENT

Voloshin A.M.¹, Surdo A.I.^{1, 2}, Abashev R.M.^{1, 2}

¹⁾ M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The spectra of X-ray luminescence, photoluminescence, optically and thermally stimulated luminescence in thin active layers created by laser treatment on the surface of corundum crystals have been investigated. The association between luminescence activity and anion deficiency has been established.

В [1] описано, как, используя сканирующий импульсный ИК-лазерный пучок, на поверхности специальным образом подготовленных монокристаллических образцов корунда стехиометрического состава ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) можно создать люминесцентно-активные чувствительные к ионизирующему излучению слои толщиной 12-15 мкм. Выходы оптически и термически стимулированной люминесценции (ОСЛ и ТЛ) из таких слоев пропорциональны дозе облучения бета- и мягким фотонным излучениями, что может быть использовано при разработке ОСЛ- и ТЛ-детекторов для кожной и глазной дозиметрии. Целью данной работы является выяснение природы люминесцентно-активных центров, образованных при ИК-лазерной обработке в тонком поверхностном слое кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, и их роли в формировании ОСЛ- и ТЛ-свойств.

У образцов с тонкими люминесцентно-активными слоями, подготовленных при различных режимах лазерной обработки, исследованы спектры рентгенолюминесценции (РЛ), фотолюминесценции (ФЛ), ТЛ и ОСЛ, а также спектры возбуждения ФЛ для центров, активных в процессах РЛ, ТЛ и ОСЛ.

На рис. 1 приведены спектры РЛ образца $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ до (кривая 1) и после (кривая 2) лазерной обработки при подводимой энергии в импульсе 3.6 мДж, частоте 3300 Гц, скорости сканирования 0.1 м/с и плотности сканирования $s = 20 \text{ мм}^{-1}$. Для сравнения на нем также показан спектр РЛ (кривая 3) аналогичного по размерам анионодефицитного образца корунда ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_{3.8}$). Видно (см. кривые 1 и 2), что в спектрах РЛ образца $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ до и после его лазерной обработки

для приобретения механической прочности. Более подробное описание установки для синтеза нанопорошка приведено в работе [1].

Полученные нанопорошки состояли из твердого раствора на основе моноклинной фазы Y_2O_3 . Так как конечным продуктом синтеза лазерной керамики является компакт, состоящий из кристаллов с кубической модификацией, то необходимо перевести порошки из моноклинной модификации в кубическую. Для этого серию порошков подвергли термической обработке в атмосферной печи при температурах 1200 °C и 1300 °C.

Согласно результатам РФА, термообработка при 1200 °C приводит к частичному фазовому переходу для нанопорошков всех трех составов. Полный же фазовый переход происходит только при температуре 1300 °C. Причем наблюдается зависимость полноты фазового перехода от количества стабилизирующей добавки. Нанопорошки состава $Nd:(Y_{0.4}Gd_{0.6})_2O_3$ и $Nd:(Y_{0.3}Gd_{0.7})_2O_3$ переходят в кубическую модификацию полностью, а $Nd:(Y_{0.2}Gd_{0.8})_2O_3$ лишь частично.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что использование стабилизирующей добавки в виде Y_2O_3 сдвигает температуру фазового перехода состава в моноклинную модификацию в область более высоких температур, что позволяет использовать составы $Nd:(Y_{0.4}Gd_{0.6})_2O_3$ и $Nd:(Y_{0.3}Gd_{0.7})_2O_3$ для синтеза оптической керамики.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Свердловской области в рамках научного проекта № 20-48-660039.

1. V. V. Osipov, V. V. Platonov, V. V. Lisenkov, A. V. Podkin, E. E. Zakharova, Phys. Status Solidi C 10, Iss. 6, 926–932 (2013).

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $\text{Nd}:(\text{Y}_x\text{Gd}_{1-x})_2\text{O}_3$ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ АКТИВНЫХ ЛАЗЕРНЫХ СРЕД

Васин Д.А.^{1,2}, Максимов Р.Н.^{1,2}, Осипов В.В.², Шитов В.А.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: danyaia199949@gmail.com

SYNTHESIS AND STUDY OF NANOPOWDERS BASED ON $\text{Nd}:(\text{Y}_x\text{Gd}_{1-x})_2\text{O}_3$ SOLID SOLUTION FOR OBTAINING ACTIVE LASER MEDIA

Vasin D.A.^{1,2}, Maksimov R.N.^{1,2}, Osipov V.V.², Shitov V.A.²

¹⁾ Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Electrophysics UrB RAS, Yekaterinburg, Russia

The paper reports on the possibility of obtaining nanopowders based on gadolinium oxide Gd_2O_3 stabilized with yttrium oxide Y_2O_3 . The dependence of the stability of the cubic phase of gadolinium oxide Gd_2O_3 on the amount of the stabilizing additive was shown.

Твердотельные лазеры ближнего ИК-диапазона широко используются в промышленности, медицине и науке. Наиболее широкое распространение получили системы на основе алюмоиттриевого граната $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, активированного ионами Nd^{3+} . Однако мощность данных систем ограничена предельной концентрацией активной добавки неодима не более 2–3 ат.%. Для преодоления данной трудности в настоящей работе предлагается использовать матрицу с более близким ионным радиусом замещаемого иона, а именно полуторный оксид гадолиния Gd_2O_3 .

Однако синтез оптических керамик на основе Gd_2O_3 традиционными методами значительно затруднен наличием фазового перехода из кубической модификации в моноклинную при температуре выше 1300 °С. Чтобы избежать данный переход предлагается использовать порошки смешанного состава, в которых для стабилизации кубической фазы Gd_2O_3 будет использоваться полуторный оксид иттрия Y_2O_3 . В настоящей работе приводятся исследования по синтезу нанопорошков состава $\text{Nd}:(\text{Y}_{0.4}\text{Gd}_{0.6})_2\text{O}_3$, $\text{Nd}:(\text{Y}_{0.3}\text{Gd}_{0.7})_2\text{O}_3$ и $\text{Nd}:(\text{Y}_{0.2}\text{Gd}_{0.8})_2\text{O}_3$, а также фазовой трансформации при термообработке.

Порошки изготавливались методом лазерной абляции мишеней. Для изготовления мишеней использовались микроразмерные порошки Gd_2O_3 , Nd_2O_3 и Y_2O_3 чистотой не хуже 99.99%. После взвешивания порошки перемешивались в барабанном смесителе с наклонной осью вращения в течение 24 часов. Далее смесь порошков компактировалась в цилиндрическую заготовку диаметром 66 мм методом одноосного статического прессования при давлении 10 МПа. Заготовки дополнительно обжигались в атмосферной печи при 1100 °С в течение 5.5 часов

данному состоянию v, f и ε . e, m – заряд и масса электрона, f – равновесная фермиевская функция распределения, ω, k – частота и волновое число волны, p – компонента импульса электрона вдоль оси цилиндра, L – длина цилиндра. $v^2 = 2(\varepsilon_F - \varepsilon)/m$, где ε_F – энергия Ферми электрона, ε – энергия поперечного движения электрона.

Вещественная часть уравнения определяет закон дисперсии для волн. Мнимая часть в этом выражении связана с бесстолкновительным затуханием волн. Оно показывает, что в области квазиклассического бесстолкновительного поглощения волн, распространяющихся вдоль проволоки, $-k(v_F - \hbar k/(2m)) < \omega < k(v_F + \hbar k/(2m))$, благодаря квантованию поперечного движения электронов, возникают «окна прозрачности», в которых бесстолкновительное затухание отсутствует. Нами рассчитаны дисперсионные кривые и формы окон прозрачности для конкретных случаев заполнения малого числа уровней квантования.

Существование квантовых волн должно проявляться в эффектах поглощения и отражения электромагнитных волн системам, содержащими квантовые проволоки. а также в эффектах распространения электромагнитных волн вдоль квантовых проволок.

1. Демиховский В.Я., Вугалтер Г.А., Физика квантовых низкоразмерных структур, М.: Логос (2000)

ОСОБЕННОСТИ ЗАКОНОВ ДИСПЕРСИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН И ОКОН ПРОЗРАЧНОСТИ В КВАНТОВЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ

Василевский Ф.А.¹

¹) Институт Естественных Наук и Математики, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: fedorvasilevski@gmail.com

FEATURES OF THE LAWS OF DISPERSION OF ELECTROMAGNETIC WAVES AND TRANSMISSION WINDOWS IN QUANTUM NANOWIRES

Vasilevskiy F.A.¹

¹) Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University named after the first president of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

The effect of dimensional quantization of electron motion in a conducting nanowire is considered. This effect leads to the emergence of dispersion laws for emw that differ from the classical case and to the possibility of the existence of a new type of excitations in these structures - quantum waves

Интерес к наноструктурам обусловлен тем, что они являются основой практически всех современных приборов и устройств электроники, фотоники и оптоинформатики. В системах такого рода, из-за особенностей строения, действуют законы квантовой механики. Поэтому исследование и обнаружение различных квантовых эффектов в таких структурах, как проводящие нанопроволоки, имеет большие перспективы.

В квантовой нанопроволоке происходит поперечное квантование движения электронов при сохранении квазиклассического движения вдоль проволоки. В этом случае для вырожденной фермиевской системы электронов продольная скорость на поверхности Ферми принимает дискретный ряд значений, что приводит к возникновению «окон прозрачности» в области квазиклассического бесстолкновительного поглощения волн и открывает возможность распространения новых волн - так называемых квантовых волн.

В случае рассмотрения нанопроволоки, как длинного металлического цилиндра с круглым сечением, были получены волновые функции и энергетический спектр электронов. С помощью которых рассмотрена возможность существования электромагнитных волн в такой системе. В нанопроволоках возможно существование волн, удовлетворяющих уравнению:

$$1 - 4\pi e^2 / k^2 \sum L_m / (\pi k \hbar^2) \{ \ln[(\omega^2 - k^2(v - \hbar k / (2m))^2) / (\omega^2 - k^2(v + \hbar k / (2m))^2)] + i\pi [dp(f(p) - f(p - \hbar k)) \delta(\omega m / k + \hbar k / 2 - p)] \} = 0$$

Где суммирование ведется по дискретным состояниям, которые характеризуются набором чисел n, l , этими индексами маркируются соответствующие

увеличением соотношения сторон эллипсоида происходит красное смещение и уширение полосы поглощения.

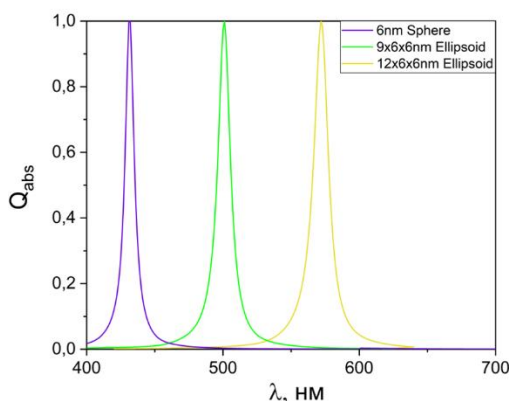


Рис. 1. Рисунок 1 – Спектры поглощения плазмонных наночастиц серебра с различным соотношением сторон эллипсоида (1, 1,5 и 2)

Полученные результаты свидетельствуют о принципиальной возможности анализа моодисперсных плазмонных наночастиц по положению пика ППР, а также селекцию плазмонных наночастиц по типу. Однако, необходимо определить референтные значения плазмонных наночастиц разных размеров и разной формы в исследуемой матрице.

"Russian Scientific Foundation (Grant № 21-12-00392)", RFBR (grants № 20-42-660012)", "Project (FEUZ-2020-0059)"

1. Khan P., Brennan G., Lillis J., Tofail S. A., Liu N., Silien C. Characterisation and manipulation of polarisation response in plasmonic and magneto-plasmonic nanostructures and metamaterials //Symmetry. – 2020. – Т. 12. – №. 8. – С. 1365.
2. Zatsepin A. F., Kiryakov A. N., Zatsepin D. A., Shchapova Y. V., Gavrilov N. V. Structural and electron-optical properties of transparent nanocrystalline MgAl₂O₄ spinel implanted with copper ions //Journal of Alloys and Compounds. – 2020. – Т. 834. – С. 154993.
3. Vagapov A. S., Kiryakov A. N., Zatsepin A. F., Shchapova Y. V. Plasmonic copper nanoparticles in MgAl₂O₄ ceramics //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2020. – Т. 2313. – №. 1. – С. 030008.
4. Vagapov A. S., Kiryakov A. N., Zatsepin A. F., Shchapova Y. V. Plasmonic copper nanoparticles in MgAl₂O₄ ceramics //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2020. – Т. 2313. – №. 1. – С. 030008.
5. Kishimoto N., Takeda Y., Umeda N., Gritsyna V. T., Lee C. G., Saito T. Metal nanocrystal formation in magnesium aluminate spinel and silicon dioxide with high-flux Cu⁺ ions //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2000. – Т. 166. – С. 840-844.

ПЛАЗМОННЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА В ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ ШПИНЕЛИ MgAl_2O_4

Вагапов А. Ш.¹, Киряков А. Н.¹, Зацепин А. Ф.¹

¹) Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина

E-mail: alexander1705q@icloud.com

PLASMONIC AG NANOPARTICLES IN MgAl_2O_4 SPINEL THIN FILM

Vagapov A. Sh.¹, Kiryakov A. N.¹, Zatsepin A. F.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

We simulated the optical absorption spectra of silver nanoparticles with different aspect ratios. The shape and position of the surface plasmon resonance band is one of the criteria for estimating the size and geometry of plasmonic nanoparticles synthesized experimentally by ion-plasma methods.

Плазмонные наночастицы на основе благородных металлов активно исследуются различными научными группами. Явление поверхностного плазмонного резонанса (ППР) проявляется в когерентном возбуждении всех электронов проводимости наночастицы в результате поглощения кванта света и применяется для усиления физико-химических эффектов в материалах, используемых различных устройствах, сенсорах и датчиках [1]. На микроуровне формой и положением полосы поглощения ППР можно управлять за счет задания необходимой геометрии плазмонным наночастицам.

Синтез несферических металлических наночастиц возможен, в результате создания сильнонеравновесной среды за счет плотного потока ионов при ионной имплантации, как показано в работе [2]. Выбор радиационно-стойкой среды при этом обеспечивает малую мобильность имплантируемых ионов. Таким образом, в результате ионной имплантации можно достичь несферической формы в синтезируемых частицах [3]. Цель настоящей работы заключается в изучении влияния размера и формы плазмонных наночастиц серебра в пленках MgAl_2O_4 на их оптические характеристики.

В работе выполнено компьютерное моделирование спектров оптического поглощения исследуемых объектов в программе COMSOL Multiphysics 5.6. Геометрические параметры плазмонных наночастиц задавались исходя из полученных в работах [3,4] данных по размеру и форме плазмонных наночастиц меди в имплантированной матрице MgAl_2O_4 .

На рисунке 1 приведены результаты расчета коэффициента поглощения сферических и эллипсоидальных серебряных наночастиц. Сферические наночастицы эффективно поглощают в синем спектральном диапазоне. Поглощение в эллипсоидальных наночастицах происходит в зеленой спектральной области. С

имеют перегиб и характеризуются областями с различной магнитной восприимчивостью.

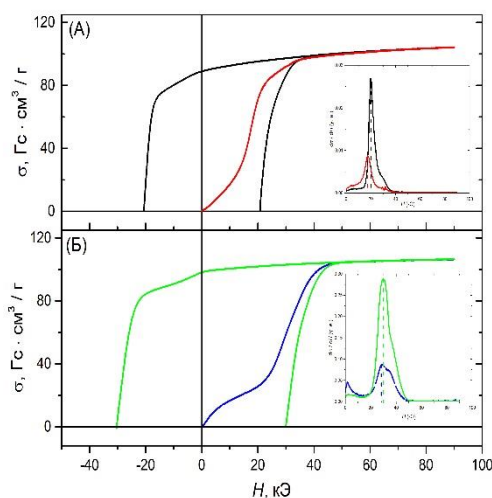


Рис. 1. Основные петли гистерезиса и общая магнитная восприимчивость образцов А и Б

В целом, процессы перемангничивания более сложны, чем исключительно пиннинг [3]. Обнаружена аномалия обратимого изменения намагниченности с увеличением поля. Аномалия присутствует и на участках кривых магнитной восприимчивости.

Предлагается модель механизма перемангничивания, нацеленная объяснить всю совокупность свойств ПМ $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Fe}, \text{Zr}, \text{Cu})_z$ [4]. Суть модели заключается в следующем. В размагничивающем поле ламели богатой Zr фазы, обменно-связанные с основной фазой $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$, перемангничиваются. Из-за относительно слабого обменного взаимодействия между этими фазами доменная граница не переходит из одной фазы в другую. Вместо этого поле зародышеобразования в фазе $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ уменьшается за счет обменного взаимодействия. Критическое поле зарождения и закрепления доменных границ на границе фазы $\text{Sm}(\text{Cu}, \text{Co})_5$ примерно одинаковы, и поэтому в разных экспериментах наблюдаются результаты, характерные для одного из этих механизмов. Предложенная модель позволит объяснить особенности резкой зависимости коэрцитивной силы магнитов $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Fe}, \text{Zr}, \text{Cu})_z$ от режимов термообработки, что пока не удавалось удовлетворительно сделать в предположении модели пиннинга.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ № 20-32-90211.

1. S. V. Vonsovsky, Ya. S. Shur, Ferromagnetism - L.: State publishing house of technical and theoretical literature 840 (1948).
2. E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth, Phil. Trans. R. Soc. A 240, 599 (1948).
3. A. N. Urzhumtsev et al, J. Phys.: Conf. Ser. 1389, 012115 (2019).
4. A. Urzhumtsev, V. Maltseva, A. Volegov, J. Magn. Magn. Mater. 551, 169143 (2022).

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В СПЕЧЁННЫХ ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Fe}, \text{Zr}, \text{Cu})_z$

Уржумцев А.Н.¹, Мальцева В.Е.¹, Волегов А.С.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: andrei.urzhumtsev@urfu.ru

MAGNETIZATION REVERSAL PROCESSES IN SINTERED PERMANENT MAGNETS $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Fe}, \text{Zr}, \text{Cu})_z$

Urzhumtsev A.N.¹, Maltseva V.E.¹, Volegov A.S.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The magnetic properties of permanent magnets $\text{Sm}(\text{Co}_{0.796-x}\text{Fe}_{0.177}\text{Cu}_x\text{Zr}_{0.027})_{6.63}$ ($x = 0.117$ and 0.131) were investigated. A model of magnetization reversal processes is proposed to explain why in some the magnets exhibit a pinning mechanism of magnetization reversal and in some a nucleation.

В условиях повышенных температур эксплуатации, где требуется высокая стабильность магнитных свойств, применяются постоянные магниты (ПМ) $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Fe}, \text{Zr}, \text{Cu})_z$ ($z = 6,5 - 8,5$). Эти материалы уже достаточно изучены, однако, механизм их перемагничивания и природа формирования их гистерезисных свойств до сих пор остаются дискуссионными.

Существует несколько концепций механизмов высококоэрцитивного состояния магнитотвердых материалов. Первой была сформулирована модель пиннинга (pinning), основная идея которой заключается в задержке движения доменной стенки [1]. Позднее, для материалов Альни и Альнико, в которых ключевую роль в коэрцитивности играет фактор формы магнитных зёрен, разработана модель Стонера-Вольфарта [2] суть которой заключается в необратимом вращении векторов намагниченности. Последней, с появлением керамических ПМ SmCo_5 , появилась модель нуклеации (nucleation), идея которой заключается в поглощении доменов с энергетически невыгодной ориентацией намагниченности доменами с противоположной ориентацией намагниченности в процессе намагничивания и «невозникновении» доменной границы в отрицательных магнитных полях.

Исследованы спечённые ПМ $\text{Sm}(\text{Co}_{0.796-x}\text{Fe}_{0.177}\text{Cu}_x\text{Zr}_{0.027})_{6.63}$, где $x = 0.078$ (образец А) и 0.117 (образец В), произведенные на ООО «ПОЗ-Прогресс» в г. Верхняя Пышма. Измерения магнитных свойств образцов проводились в полях с индукцией до 9 Тл при температуре 300 К на измерительных установках PPMS DynaCool и MPMS-XL-7 ЕС производства Quantum Design.

На рисунке 1а и 1б представлены кривые намагничивания и предельная петля гистерезиса образцов А и В вдоль оси текстуры магнита. Кривые намагничивания

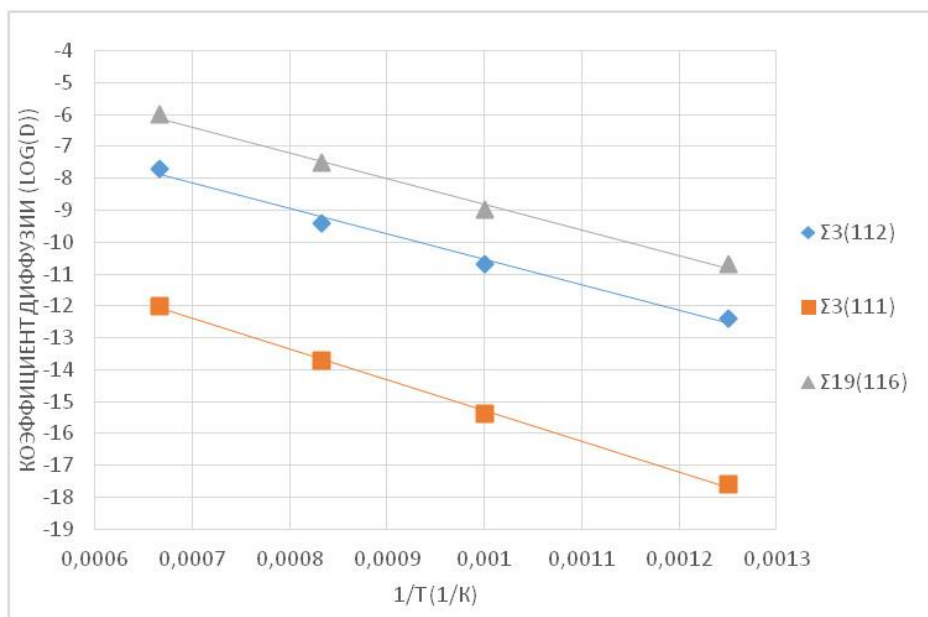


Рис. 1. Коэффициент зернограничной диффузии.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция»

номер госрегистрации г.р. № 122021000035-6).

При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

1. R. E. Stoller, A. Tamm, L. K. Béland, G. D. Samolyuk, G. M. Stocks, A. Caro, L. V. Slipchenko, Y. N. Osetsky, A. Aabloo, M. Klintonberg, and Y. Wang, "Impact of short-range forces on defect production from high-energy collisions," J. Chem. Theory Comput. 12, No. 6, 2871–2879 (2016)

САМО-ДИФФУЗИЯ ВДОЛЬ СПЕЦИАЛЬНЫХ БОЛЬШЕУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ГЦК-НИКЕЛЕ

Уразалиев М.Г.¹, Ступак М.Е.¹, Попов В.В.¹

¹) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: misha.urazaliev@yandex.ru

SPECIAL GRAIN BOUNDARY SELF-DIFFUSION IN NIKEL

Urazaliev M.G.¹, Stupak M.E.¹, Popov V.V.¹

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

An atomistic simulation of special tilt grain boundaries (GBs) in Ni has been carried out. The direct MD method was used to study the self-diffusion in GBs.

Границы зерен (ГЗ) в поликристаллах отвечают за многие свойства конструкционных металлов, такие как пластичность, прочность и диффузия. Знание структуры и поведения границ зерен, получаемое с помощью эксперимента, может быть дополнено атомистическим исследованием. Компьютерное моделирование специальных ГЗ лежит в основе атомистических исследований поликристаллической структуры и характеристик ГЗ, содержащихся в поликристалле.

Методом молекулярной статики (МС) получены модели границ зерен в градецентрированном (ГЦК) плотноупакованном никеле, соответствующие теории решетки совпадающих узлов (PCY). Полученные методом МС модели ГЗ затем нагревали и подвергали выдержке при постоянной температуре (отжигу) в рамках классической молекулярной динамики (МД), для оценки стабильности структуры каждой конкретной ГЗ. Для установки нужной температуры использовали термостат Нозе-Гувера в изотермо-изобарическом ансамбле.

Методом прямой МД были рассчитаны коэффициенты самодиффузии в ГЗ $\Sigma 3(111)[11\bar{0}]$, угол 109.5° , $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$ угол 70.5° и $\Sigma 19(116)[11\bar{0}]$ угол 26.5° в ГЦК никеле (рис.1.). В работе использовался потенциал из работы [1]. Проведено сравнение между самодиффузией в т.н. предпочтительной ГЗ $\Sigma 3(111)[11\bar{0}]$, то есть ГЗ состоящей из одного типа структурного элемента, и ГЗ $\Sigma 19(116)[11\bar{0}]$, состоящей из разных типов структурных элементов.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК ДО И ПОСЛЕ УФ-ОБЛУЧЕНИЯ

Тютрин А.А.^{1, 2}, Мартынович Е.Ф.^{1, 2}

¹⁾ Институт лазерной физики СО РАН, Иркутский филиал, 664033, Иркутск, ул. Лермонтова, 130-А

²⁾ Иркутский государственный университет, Карла Маркса 1, 664003, Иркутск
E-mail: tyutrin.aleks@gmail.com

PHOTOLUMINESCENCE OF CD'S BEFORE AND AFTER UV IRRADIATION

Tyutrin A.A.^{1, 2}, Martynovich E.F.^{1, 2}

¹⁾ Institute of Laser Physics SB RAS, Irkutsk Branch, 130-A Lermontov Str, Irkutsk, 664033, Russia

²⁾ Irkutsk State University, Karla Marksa str., 664003, Irkutsk, Russia

Photoluminescence of carbon dots (CD's) after UV-irradiation is investigated. Carbon dots were synthesized by microplasma treatment of glucose at atmospheric pressure and room temperature. It was found a significant decrease in the luminescence intensity after UV irradiation.

The photoluminescence of CD's synthesized by the plasma method [1] after prolonged UV irradiation was studied. A 40% glucose solution was used as a precursor. The purpose of this work was to study the photostability of the synthesized CD's at UV light. The spectral-kinetic properties of the synthesized CDs were studied using a MicroTime 200 confocal scanning luminescence microscope. The time-resolved fluorescence decay curve was measured by the time-correlated single photon counting (TCSPC) method. CDs have a wide emission spectrum in 400 - 800 nm range at excitation in the 375 - 532 nm range. The measurement results showed that the synthesized CD's after irradiation with a UV lamp (365 nm) for 5 hours had a weak luminescence intensity in comparison with the non-irradiated sample at excitation wavelengths of 375, 405, 470 and 532 nm. Thus, synthesized CD's have weak photostability. Presumably, this is due to deoxidation of the CD's surface states under UV irradiation. The luminescence kinetics of CD's has three exponential components, but their values change after UV exposure.

The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, the Basic Research Plan of the Russian Academy of Sciences, Project No. 0243-2021-0004, the State Assignment, Project No. FZZE-2020-0017

1. A. A. Tyutrin, R. Wang, E. F. Martynovich, AIP Conf. Proc. 2392, 040006, (2021).

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда № 20-72-10151

1. Pezze, L. et al. Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles. Rev. Mod. Phys., 90, 035005 (2018)
2. Ladd, T.D. et al. Quantum Computers. Nature, 464, 45-53 (2010)
3. He, Y.M. et al. Single quantum emitters in monolayer semiconductors. Nat. Nanotechnol., 10, 497-502 (2015)
4. Makarov, D. N. Quantum entanglement and reflection coefficient for coupled harmonic oscillators. Phys. Rev. E, 102, 052213 (2020)
5. Makarov, D. and Tsykareva, Yu. Quantum Entanglement of Monochromatic and Non-Monochromatic Photons on a Waveguide Beam Splitter. Entropy, 24, 49 (2022)

ПРОСТЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ КВАНТОВОЙ ЗАПУТАННОСТИ НЕМОНОХРОМАТИЧЕСКИХ ФОТОНОВ

Цыкарева Ю.В.¹, Макаров Д.Н.¹

¹⁾ Северный Арктический федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
г. Архангельск, Россия
E-mail: aisonoka@gmail.com

SIMPLE EXPRESSIONS FOR THE QUANTUM ENTANGLEMENT OF NON-MONOCROMATIC PHOTONS

Tsykareva Yu.V.¹, Makarov D.N.¹

¹⁾ Northern Arctic Federal University named after M.V. Lomonosov,
Arkhangelsk, Russia

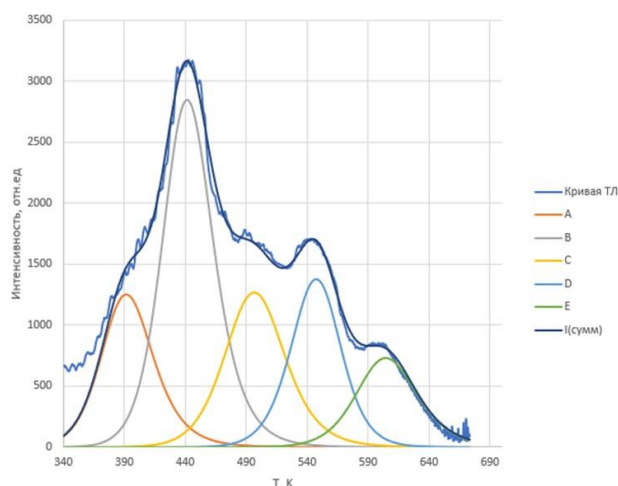
Simple expressions for the quantum entanglement of monochromatic and non-monochromatic photons on a waveguide beam splitter were found and analyzed using von Neumann entropy. It will be shown the great difference between both cases, which can be used to create large quantum entanglement.

Изучение светоделителей как источников запутанных фотонов является актуальным направлением современной физики. Такой интерес, в первую очередь, обусловлен тем, что такие источники запутанных фотонов будет иметь широкое применение во многих приложениях квантовой и нелинейной физики: квантовая метрология [1], квантовый компьютер [2] и т.д. Одним из наиболее перспективных типов светоделителя для квантовых технологий это линейный светоделитель. Такой светоделитель представляет собой два связанных волновода на подложке, где в месте максимального соприкосновения волноводов за счет наложения электромагнитных полей происходит запутывание фотонов. Этот тип светоделителей уже активно применяется в создании интегральных микросхем на основе квантовооптических технологий [3] и для конструирования оптического квантового компьютера [2].

Ранее в работе [4] уже были получены простые выражения для монохроматических фотонов, характеризующие квантовую запутанность с помощью одного параметра - коэффициента отражения R . Сам коэффициент отражения определяется параметрами исходных фотонов, представленных в виде гармонических осцилляторов. В этой работе рассмотрен случай немонохроматических фотонов [5] для линейного светоделителя, найдены простые выражения для квантовой запутанности таких фотонов, произведен сравнительный анализ случаев монохроматических и немонохроматических фотонов через энтропию фон Неймана. Показано, что полученные выражения могут иметь приложения в квантовой оптике, в частности в квантовой метрологии, для создания больших источников квантовой запутанности.

у всех исследуемых образцов смещаются в высокотемпературную область и увеличиваются по интенсивности. Отсутствие падения светосуммы с ростом скорости нагрева может свидетельствовать о том, что в исследуемых образцах не наблюдается эффект температурного тушения ТЛ.

Полученные кинетические параметры были использованы для аппроксимации кривых изотермического затухания ТЛ по формуле, представленной в работе [3]. При сравнении экспериментальных кривых изотермического затухания с теоретическими установлено, что не все кривые можно описать с помощью указанного уравнения. При $T_{отж} = 1000^{\circ}\text{C}$ данным уравнением удовлетворительно описываются кривые в диапазоне от 100°C до 260°C изотермического затухания. При $T_{отж} = 1200^{\circ}\text{C}$ можно описать кривые изотермического затухания в диапазоне от 100°C до 200°C . В работе также обсуждается применимость метода математического описания кривых изотермического затухания ТЛ в координатах $x = \ln(t)$ и $y = (I \cdot t)$ [3], где I – интенсивность, t – время, для определения кинетических параметров ТЛ исследуемых образцов.



Кривая ТЛ исходного образца, разложенная на пики А – Е при скорости нагрева $2^{\circ}\text{C}/\text{сек}$

1. Akselrod M.S., Kortov, V.S., Kravetsky, D.J., Gotlib, V.I. Highly sensitive thermoluminescence anion defective $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:C}$ single crystals detectors // Radiation Protection Dosimetry. – 1990. – V. 32. – Pp. 15-20
2. Kitis G., Gomez-Ros J. M., Tuyn J. W. N. Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for first, second and general orders of kinetics // J. Phys. D: Appl Phys. – 1998. – V. 31. – Pp. 2636 – 2641
3. Chen R., Kristianpoller, N. Investigation of phosphorescence decay using TL-like presentation// Radiat. Prot. Dosim. – 1986. – V. 17. – Pp. 443 – 446

КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ ФАЗ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Цепилов М.В.¹, Никифоров С.В.¹

¹) Уральский Федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: tsepilo@mail.ru

KINETIC PARAMETERS OF THERMOLUMINESCENCE IN TRANSITIONAL PHASES OF ALUMINUM OXIDE

Tsepilov M.V.¹, Nikiforov S.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The Kinetic parameters of thermoluminescent of samples containing a mixture in transitional phases of aluminum oxide, annealed at different temperatures, have been estimated experimentally using various methods of thermal activation spectroscopy (with linear heating and isothermal exposure)

Для регистрации высокодозных ионизирующих излучений перспективным является использование термолюминесценции (ТЛ) наноструктурных люминофоров, обладающих повышенной радиационной стойкостью.

Задача разработки высокодозного ТЛ детектора до конца не решена и требует поиска новых перспективных материалов для этих целей. Наноструктурный оксид алюминия — это перспективный материал для высокодозной дозиметрии. Наиболее подробно исследованы термолюминесцентные (ТЛ) свойства α - Al_2O_3 [1]. Что касается переходных фаз, их ТЛ свойства и пригодность для высокодозной дозиметрии недостаточно изучены.

Для выяснения механизмов ТЛ переходных фаз Al_2O_3 и разработки модельных представлений целесообразно провести комплексный анализ кинетики ТЛ с использованием термоактивационной спектроскопии при различных режимах нагрева.

Цель работы – определение кинетических параметров ТЛ переходных фаз оксида алюминия с помощью разных режимов термоактивационной спектроскопии.

Исследовались образцы диаметром 6,1 мм в форме компактов, полученных путем холодного одноосного прессования наноструктурного порошка, содержащего смесь θ и δ -фаз Al_2O_3 с размером зерна 40-190 нм. Для варьирования фазового состава образцы отжигались на воздухе в электропечи при $T = 900^\circ\text{C} - 1200^\circ\text{C}$. ТЛ возбуждалась импульсным электронным пучком (130 кэВ) дозой 15 кГр. ТЛ измерялась при линейном нагреве при помощи ФЭУ-130 с максимальной чувствительностью в диапазоне длин волн 400-420 нм.

Были получены кинетические параметры ТЛ при помощи разложения кривых по уравнению кинетики общего порядка, описанном в работе [2] для различных скоростей нагрева. Установлено, что с ростом скорости нагрева кривых ТЛ пики

В докладе приводятся данные о люминесцентных свойствах исследуемых веществ в растворе и в порошкообразном виде. Обсуждается влияние растворителя, химического состава и структурных особенностей молекул на их люминесцентные свойства. Обсуждаются механизмы возбуждения люминесценции и диссипации энергии, а также практическое применение изученных материалов для создания элементной базы гибкой электроники и оптоэлектронных устройств.

1. Berggren, M., Nilsson, D. & Robinson, N. Organic materials for printed electronics, *Nature Materials*, 6, 3–5(2007).

2. Trofimova, K.E., Ishchenko, A.V., Weinstein, I.A., Irgashev, R. A., Kazin N. A. *AIP Conference Proceedings*, 2313, 030032 (2020).

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЯДА БЕНЗОТИЕНОАЦЕНОВ

Трофимова К.Е.¹, Ищенко А.В.¹, Устюжанина Ю.Э.¹, Иргашев Р.А.²,
Вайнштейн И.А.¹

¹) НОЦ "Наноматериалы и нанотехнологии", Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²) Институт органического синтеза им. Я.И. Постовского, Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
E-mail: k.e.trofimova@urfu.ru

OPTICAL PROPERTIES OF BENZOTHIENOACENES

Trofimova K.E.¹, Ishchenko A. V.¹, Ustyuzhanina Yu.E.¹, Irgashev R. A.²,
Weinstein I. A.¹

¹) NANOTECH Centre, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation,

²) Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620137, Russian Federation

The study of the properties of thin films to produce semiconductor devices is of great interest in the field of flexible electronics. The purpose of this work is to determine the optical properties of raw materials based on benzothienoacenes in dissolved and powdered form.

Исследование свойств тонких пленок органических полупроводниковых соединений представляет большой интерес в области создания устройств гибкой электроники [1, 2]. Целью данной работы является определение оптических свойств полупроводниковых органических материалов на основе бензотиеноаценов (ВТТ: ВТТ-ОСН₃, ВТТ-ОС₂Н₅, ВТТ-2ОСН₂, В-ВТТ-2ОСН₂, ВТТ-N₂СН₃) в растворе и в порошкообразном виде. Данный класс соединений представляет особый интерес вследствие наличия в молекулах тиюфена атома серы, являющейся в данных соединениях донором электронов, что может положительно повлиять на их электрофизические свойства.

Оптические характеристики соединений в растворе определены методами абсорбционной оптической и фотолюминесцентной (ФЛ) спектроскопии. В спектрах оптического поглощения для некоторых образцов бензотиеноаценов (ВТТ-ОСН₃, ВТТ-ОС₂Н₅, ВТТ-2ОСН₂) обнаружены несколько основных полос поглощения с максимумами вблизи 250 и 325 нм. Для других образцов ВТТ (В-ВТТ-2ОСН₂, ВТТ-N₂СН₃) наблюдаются четыре полосы с максимумами вблизи 240, 260, 325 и 375 нм. По спектрах оптического поглощения проведена оценка ширины запрещенной зоны соединений.

Спектры ФЛ всех исследованных ВТТ представляют собой несимметричную полосу люминесценции с максимумом в диапазоне 400-510 нм. В спектрах возбуждения ФЛ бензотиеноаценов обнаружено три полосы с максимумами при 280, 325 и 375 нм, которые проявляются в зависимости от состава.

системы предполагалось, что структура металлической фазы должна быть аморфной, аналогично тому, что наблюдалось в композитах $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})-(\text{SiO}_2)$ и $(\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11})-(\text{Al}_2\text{O}_3)$ поскольку сплав $\text{Co}_{47}\text{Fe}_{42}\text{Zr}_{11}$ является легко аморфизирующимся. Формирование кристаллического CoFe свидетельствует о том, что атомы циркония, являющиеся аморфизатором сплава, при осаждении на поверхность растущей пленки, не входят в состав металлической фазы, а взаимодействуют с элементами диэлектрической матрицы (Mg или F), растворяясь в ней.

По данным рентгеноструктурного анализа полученные доперколяционные композиты характеризуются высокой термической устойчивостью и отжиг, проводимый при 350°C , не влияет ни на структуру, ни на магниторезистивные свойства образцов.

СТРУКТУРА ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ (CoFeZr)-(MgF)

Трегубова Т.В.¹, Стогней О.В.¹, Трегубов И.М.¹

¹) Воронежский Государственный Политехнический Университет, 394026, Московский пр-т 14, Воронеж, Россия
E-mail: ttv1507@ya.ru

THE STRUCTURE OF THIN-FILM COMPOSITES (CoFeZr)-(MgF)

Tregubova T. V.¹, Stognej O.V.¹, Tregubov I.M.¹

¹) Voronezh State Technical University, 394026, Moskovskij prospect 14, Voronzh, Russia

The structure of nanocomposites thin-film (CoFeZr)-(MgF) was studied in a wide range of metal phase concentrations ($7 \leq x$, at.% ≤ 55). The phase and elemental composition in the initial state and after annealing were studied.

Гранулированные наноконкомпозиты металл-диэлектрик (CoFeZr)_x(MgF)_{100-x} получены методом ионно-лучевого распыления составных мишеней в среде аргона. Элементный и фазовый состав образцов контролировался с помощью сканирующего рентгеновского микроанализатора JXA-840. Исследование структуры проводилось на дифрактометре BRUKER D2 Phaser.

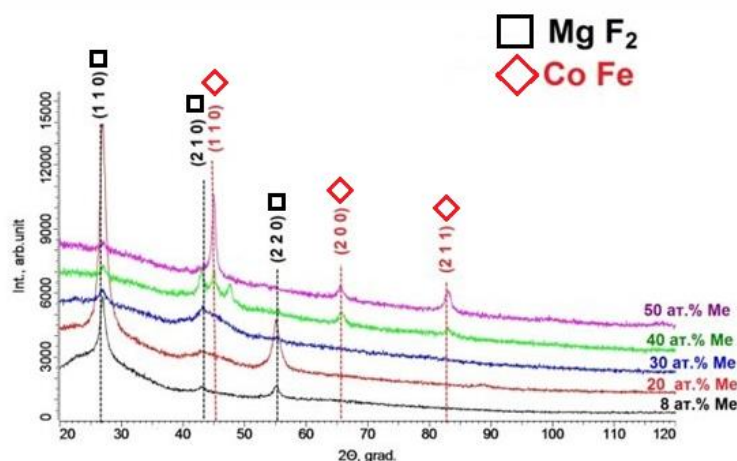


Рис. 1. Дифрактограммы системы композита (CoFeZr)-(MgF) с разной концентрацией металлической фазы. Концентрация металлической фазы (в ат. %) указывается цифрами у кривых.

Установлено, в композитах (Co₄₇Fe₄₂Zr₁₁)_x(MgF₂)_{100-x} при малом содержании металлической фазы на дифрактограммах присутствуют пики, соответствующие кристаллическому фториду MgF₂, причем, наблюдается ростовая анизотропия (пики получены преимущественно от плоскостей семейства (110) и (220)). При увеличении концентрации металлической фазы появляются пики, относящиеся к кристаллическому сплаву CoFe (рис. 1). При получении композитов данной

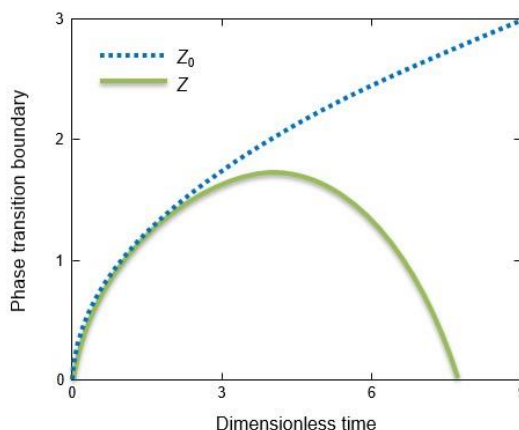


Fig. 1. The phase transition boundary as a function of dimensionless time

The analytical solution is shown in Fig. 1. The dynamics of the interface differs significantly from the particle-free case in the two-phase layer. This purely frontal case, shown by the dashed curve is described by the law of the square root of time, i.e. $Z_0(t) \sim t^{1/2}$. The nucleation and evolution of solids in the two-phase layer dramatically changes this dynamic law. Beginning at a certain point in time, the law of interface motion becomes a decreasing function of time. This is due to the fact that growing crystals release the latent heat of the phase transition, which partially reduces the undercooling in the two-phase layer and, consequently, its thickness.

Authors gratefully acknowledge financial support from the Russian Science Foundation (project no. 21-79-10012).

1. Toropova, L.V., Aseev, D.L., Osipov, S.I., Ivanov, A.A. Mathematical modeling of bulk and directional crystallization with the moving phase transition layer, Math. Method Appl. Sci., 2021. DOI: 10.1002/mma.7864
2. Alexandrov, D. V. Dynamics of the phase transition boundary in the presence of nucleation and growth of crystals. J. Phys. A Math. Theor. (2017) 50(34), 345101. DOI: 10.1088/1751-8121/aa7ab0

PHASE TRANSITION BOUNDARY DYNAMICS IN THE PRESENCE OF CRYSTALS NUCLEATION

Makoveeva E.V.¹, Zhukova, O. M.², Alexandrov D.V.², Toropova L.V.¹

¹) Department of Theoretical and Mathematical Physics, Laboratory of Mathematical Modeling of Physical and Chemical Processes in Multiphase Media, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation

²) Department of Theoretical and Mathematical Physics, Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620000, Russian Federation
E-mail: l.v.toropova@urfu.ru

The theory of motion of the solid/liquid interface in a supercooled melt is developed. Crystal nucleation and growth processes are responsible for the release of latent crystallization heat, which reduces the undercooling of the melt and narrows the thickness of the two-phase layer.

The crystal nucleation and growth in a metastable system (supersaturated solution or supercooled liquid) is well known to completely determine the dynamic behavior and properties of the phase transition layer. Such evolutionary processes can occur in a range of fields of modern science, from condensed matter physics to physical chemistry, biophysics, and the life sciences [1]. The main objective of this research is to formulate a theoretical method for solving the problem of the moving boundary of combined directional and bulk crystallization in a non-stationary regime.

The theory of motion of the solid-liquid interface in the presence of nucleation and particle growth processes in a supercooled layer is developed. Together with the developing crystals, that partly compensate for undercooling, this layer is propagating into the pure melt at a velocity that depends on the crystal growth rate and the nucleation rate. The result of this study is the dynamic law of interface motion $Z(t)=a*t^{1/2} + b*y*t^{7/2}$ (a, b are constants, y is a function determined in [2]). This law differs significantly from the case without nucleation and crystal growth, which determines the interface as $Z_0(t)=a*t^{1/2}$. A negative coefficient y [2] reduces the undercooled layer starting from a certain point in time. This is due to the effect of latent heat release, which reduces the supercooling of the melt and narrows its spatial size (the thickness of the two-phase layer).

Measurement of the excitation spectra of long-wavelength recombination emission bands showed that electron-hole trapping centers with energy distances of 4.5-4.7 eV and 3.9-4.0 eV are formed in the crystal. Thus, upon excitation in the fundamental region of the crystal, where electron-hole pairs are created, capture centers are formed, which manifest themselves in the form of recombination radiation 3.0-3.1 eV, 2.6-2.7 eV, 2.25-2, 45 eV.

1. Salikhodzha Zh.M., Nurakhmetov T.N., Akilbekov A.T., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A. Zh., Sadykova B.M., Daurenbekov D.H., Zhangylysov K.B. // Journal of Radiation Measurements 2019. V. 125. P. 19.
2. T.N. Nurakhmetov, Zh.M. Salikhodzha, M.Y. Dolomatov, B.N. Yussupbekova, A.M. Zhunusbekov, A.Zh. Kainarbay, D.H. Daurenbekov, B.M. Sadykova, K.B. Zhangylysov, T.T. Alibay, D.A. Tolekov // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials 2021, 5(2), 140-147
3. Nurakhmetov T.N., Salikhodzha Zh.M., Bakhtizin R.Z., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A.Zh., Daurenbekov D.H., Sadykova B.M., Zhangylysov K.B., Yussupbekova B.N. // J. Optik 2019. V. 185. P. 156.
4. Salikhodzha Zh.M., Nurakhmetov T.N., Akilbekov A.T., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A. Zh., Sadykova B.M., Daurenbekov D.H., Zhangylysov K.B. // Journal of Radiation Measurements 2019. V. 125. P. 19.
5. Byberg J.R.. // Journal of Chemical Physics 1986. 84(11). P. 6083.

INVESTIGATION OF THE LUMINESCENT CHARACTERISTICS OF Li_2SO_4 CRYSTAL GROWN FROM AQUEOUS SOLUTION

Tolekov D.A.¹, Nurakhmetov T.N.¹, Shamiyeva R.K.¹

¹) L.N. Gumilyov Eurasian National University 2 Satbaeva 010000, Nur-Sultan, Kazakhstan

E-mail: doszhan_ta_93@mail.ru

Vacuum ultraviolet and thermal activation spectroscopy methods have been used to study the nature of intrinsic radiation and the mechanisms of formation of electron-hole trapping centers in an irradiated Li_2SO_4 crystal.

Sulfates of alkali and alkaline earth metals are widely used in production and in scientific research as dosimeters, scintillators and various detectors. To improve the operational characteristics of dosimeters and scintillators, i.e., to increase their sensitivity to external influences, it is necessary to study the fundamental processes of transformation of the energy of high-energy electronic excitations into low-energy electronic excitations.

According to the assumption of the authors of [1], localized holes arise above the valence band as a result of their floating up from three subbands of the valence band of the $[\text{SO}]_4^-$ ion in sulfates. Holes in three subbands of the valence band are formed as a result of electron transitions from the subband in the s state of the cation to the conduction bands. Short-wavelength self-radiation bands appear in many sulfates when excited by high-energy photons.

In works [2], $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{-Cu}$ crystals were grown at a temperature of 50°C from a saturated aqueous solution by the slow evaporation method. Powdered samples were obtained by the “wet” chemical method from Li_2SO_4 (Sigma-Aldrich) with the addition of 0.01 mol% $\text{CuSO}_4\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (Sigma-Aldrich). After evaporation at 800°C for 8 hours, powdered samples $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{-Cu}$ are formed. After drying, the sample is annealed at 700°C for 1 hour. After these processes, the powder was pressed with a pressure of 0.5 MPa using a laboratory hand press. In irradiated sulfates, in addition to the main short-wavelength intrinsic emission bands of 3.7-4.3 eV, long-wavelength emission bands of 3.0-3.1 eV, 2.6-2.7 eV and 2.3-2.4 eV appear, associated with generation of electron-hole capture centers. In our works [3, 4], it was assumed that trapping centers are created during the localization of free electrons on anionic complexes according to the reaction $\text{SO}_4^{2-} + e \rightarrow \text{SO}_4^{3-}$ [5] and the localization of the hole component in the form of the SO_4^- radical (localized hole). Vacuum ultraviolet and thermal activation spectroscopy methods have been used to study the nature of intrinsic radiation and the mechanisms of formation of electron-hole trapping centers in an irradiated Li_2SO_4 crystal. The band gap for Li_2SO_4 was estimated. Based on the measurement of the excitation spectrum of intrinsic radiation, the electronic transitions that create these radiations are identified. To measure the emission spectra in the spectral region $1.5\div 6.2$ eV, a Solar CM 2203 spectrofluorimeter was used.

annealing due to very high magnetic softness and small value of the magnetic anisotropy field.

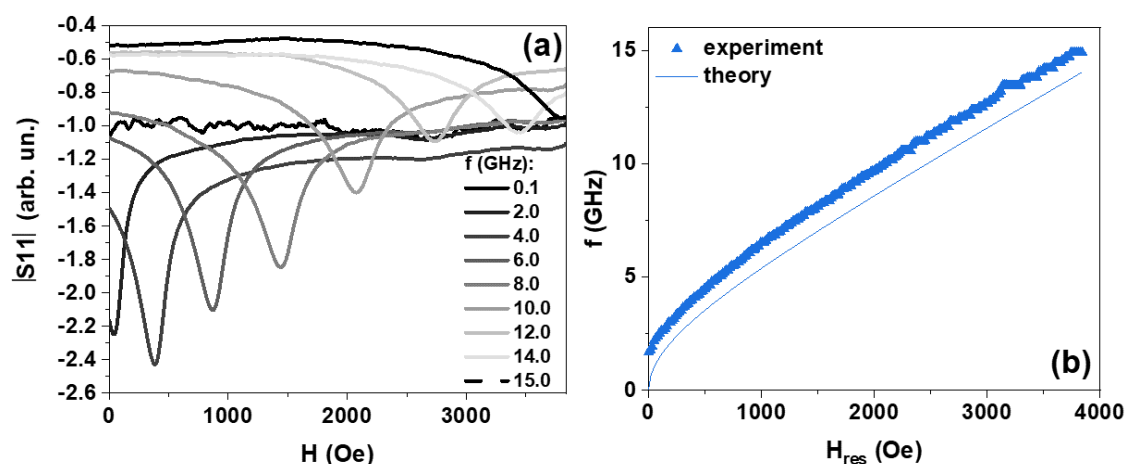


Figure 1 – Field dependence of S_{11} parameter for $\text{Fe}_3\text{Co}_{67}\text{Cr}_3\text{Si}_{15}\text{B}_{12}$ amorphous ribbon in the as-quenched state (a). Comparison of the frequency dependence of the FMR resonance fields obtained experimentally and using Kittel approximation (b).

This research was funded by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, grant number FEUZ-2020-0051.

1. S. M. Bhagat. Ferromagnetic Resonance, Metals Handbook. 10, 267, (1986).
2. G. Kurlyanskaya, V. Levit, Biosens. Bioelectron. 20, 1611, (2005).
3. R. El Kammouni, G. Infante, J. Torrejon, M. R. Britel, J. Briguei, M. Vazquez, Phys. Stat. Sol. A 208, 520, (2011).
4. C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. Wiley, New York, (1996).

BROADBAND MICROWAVE ABSORPTION IN CO-BASED AMORPHOUS RIBBONS

Timofeeva A.V.¹, Volchkov S.O.¹, Pasyunkova A.A.¹, Melnikov G. Yu.¹,
Kurlyandskaya G.V.¹

¹) Department of Magnetism and Magnetic Nanomaterials, Ural Federal University,
620002 Ekaterinburg, Russia
E-mail: selenanastya.1998@mail.ru

Ferromagnetic resonance of $\text{Fe}_3\text{Co}_{67}\text{Cr}_3\text{Si}_{15}\text{B}_{12}$ amorphous ribbons was measured using Rohde&Schwartz ZVA-67 Vector Network Analyzer in a wide frequency range 1–15 GHz.

Ferromagnetic resonance (FMR) is a powerful tool for evaluation characteristics of dynamic magnetic permeability, magnetic anisotropy, the degree of homogeneity and internal stresses of amorphous ferromagnets [1]. FMR is the selective absorption by a ferromagnet of an electromagnetic field energy at frequencies coinciding with the fundamental precession frequency of magnetic moments in an internal magnetic field. Classic technique of the FMR measurements is a cavity perturbation for which the cavity is tuned to a particular frequency. However, the study of magnetodynamic properties in a wide frequency range become more and more requested in the modern research and technological applications. One of the phenomenon dealing with the dynamic magnetic permeability in a wide frequency range is magnetoimpedance (MI) [2]. Previously, method of the measurements of FMR characteristics using a network analyzer in the frequency range up to 12 GHz was described and tested in the case of microwires and rapidly quenched wires [3]. In this work, we have tested the method for obtaining FMR spectra in a wide frequency range of 1–12 GHz in a coaxial line for Co-based ribbons interesting for MI applications.

Amorphous ribbons of $\text{Fe}_3\text{Co}_{67}\text{Cr}_3\text{Si}_{15}\text{B}_{12}$ composition were obtained by quenching on a rapidly rotating drum. Study of FMR of Co-based ribbons (width – 0.8 mm and length – 3.4 mm) was conducted using Rohde&Schwartz ZVA-67 VNA for frequencies 1–15 GHz. Both as-quenched and stress-annealed ribbons were studied. The reflection coefficient S_{11} was measured and the external magnetic field up to 4 kOe was applied parallel to the ribbon axis. Sample holders were made based on SMA S-2454 connectors, electric contacts with samples were done with conductive paint. S_{11} values corresponded to output at various values of applied magnetic field. Figure 1 shows the dependence of reflection coefficient S_{11} on the value of the applied magnetic field (here the minimum position can be associated with the resonance field H_{res}). The H_{res} according to the theory can be defined by the Kittel formula [4] (the anisotropy field of the ribbons was measured previously). The experimental results obtained by the method presented in the work correlated well with the theoretical dependence (Fig. 1b). The comparative analysis of the magnetodynamic characteristics of ribbons in the broadband range showed very close similarity for both quenched state and after stress

мА), для измерения кинетики затухания люминесценции использовался малогабаритный электронный ускоритель МИРА-2Д ($E = 120$ кэВ, $\tau_{\text{ИМП}} = 25$ нс). Измерения выполнены в лаборатории физики твердого тела кафедры экспериментальной физики, ФТИ, УрФУ.

На Рис. 1 для примера показаны спектры люминесценции при возбуждении УФ-фотонами различной энергии и рентгеновским излучением.

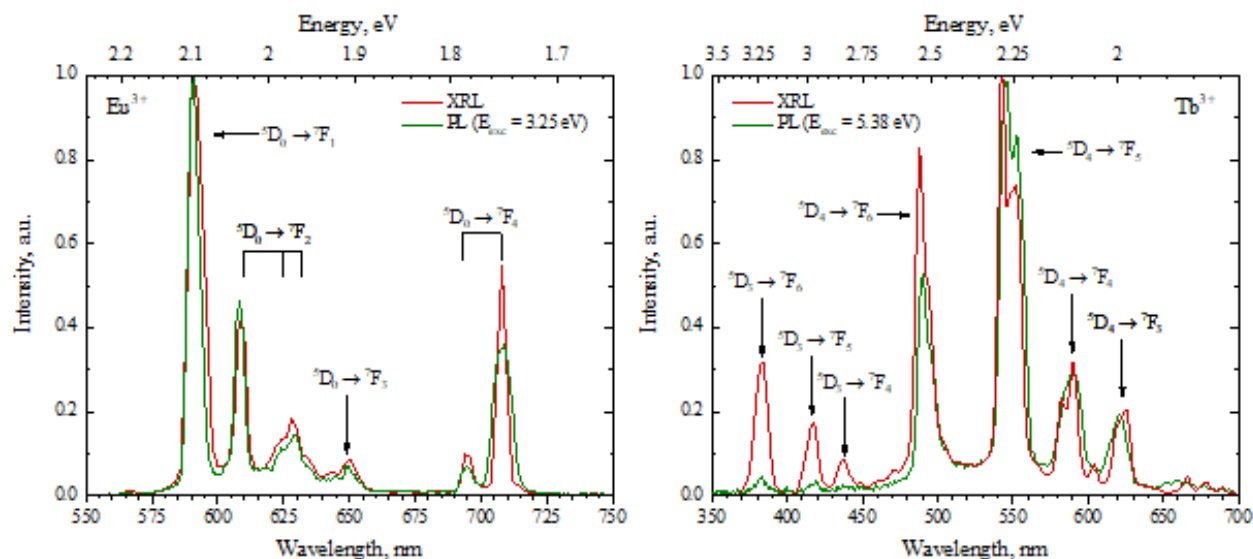


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции (PL) и рентгенолюминесценции (XRL) керамики $(\text{Gd,Y})_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$, легированной ионами Eu^{3+} (слева), Tb^{3+} (справа)

Параметризация экспериментальных кривых, а также обсуждение данных спектроскопии в сочетании с известными литературными данными позволили сделать обоснованные заключения о люминесцентных свойствах четверных гранатов, их сцинтилляционных применений.

The work was partially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (through the basic part of the government mandate, project No. FEUZ-2020-0060).

1. M. Korzhik, A. Borisevich, A. Fedorov, E. Gordienko, P. Karpyuk, V. Dubov, P. Sokolov, A. Mikhlin, G. Dosovitskiy, V. Mechninsky, D. Kozlov, V. Uglov, J. Lumin., 234 (2021), p. 117933.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЧЕТВЕРНЫХ ГРАНАТОВ, ЛЕГИРОВАННЫХ ТРЕХВАЛЕНТНЫМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ

Таврунов Д.А.¹, Досовицкий Г.², Гордиенко Е.², Коржик М.³,
Пустоваров В.А.¹

- ¹) Физико–технологический институт Уральского федерального университета,
620002, Екатеринбург, Россия
- ²) Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – ИРЕА,
123098, Москва, Россия
- ³) Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета,
220030, Минск, Беларусь
E-mail: dmitry.tavrunov@gmail.com

LUMINESCENCE SPECTROSCOPY OF QUATERNARY GARNETS DOPED WITH TRIVALENT RARE-EARTH IONS

Tavrunov D.A.¹, Dosovitskiy G.², Gordienko E.², Korjik M.³, Pustovarov V.A.¹

- ¹) Institute of Physics and Technology of Ural Federal University, 620002, Yekaterinburg, Russia
- ²) National Research Center «Kurchatov Institute» – IREA, 123098, Moscow, Russia
- ³) Institute for Nuclear Problems of Belarus State University, 220030, Minsk, Belarus

Spectroscopy and energy transport in multi-ion ceramics with garnet structure (GYAGG) doped with rare-earth ions (Ce^{3+} , Tb^{3+} , Eu^{3+}) were studied by photoluminescence (PL), cathodoluminescence (CL) and X-ray luminescence (XRL) methods.

Оптические свойства четверных гранатов широко исследуются [1], однако, не смотря на то, что люминофоры на основе этих соединений изучаются длительное время, механизм люминесценции и модели центров свечения до сих пор остаются предметом дискуссий. В связи с этим задача изучения релаксации центров люминесценции, физических процессов возбуждения и транспорта поглощенной энергии, которые определяют квантовый выход люминофора, световыход и кинетику сцинтилляций остается актуальной. Настоящая работа посвящена исследованию люминесцентных свойств керамик, имеющих структуру граната $(\text{Gd}, \text{Y})_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}$ и легированных трехвалентными ионами (Ce, Tb, Eu), при возбуждении УФ– и рентгеновским излучением, импульсным электронным пучком.

Тонкодисперсные порошки синтезированы в НИЦ «Курчатовский институт» методами соосаждения и цитратно–нитратного пиролиза. Посредством одноосного спекания изготовлены керамические образцы в виде таблеток. Спектры излучения и возбуждения фотолюминесценции измерялись в диапазоне температур 80 – 300 К с использованием дейтериевой 400 Вт газоразрядной лампы, двойных призмных монохроматоров ДМР–4 и ФЭУ R6358–10. Для получения спектров рентгенолюминесценции использовался аппарат УРС–55А (Cu–анод, 30 кВ, 10

Для моделирования таких систем используется гибридная квантово-механическая модель, включающая в себя как квантовые, так и «классические» спины. Классические спины – «входы» устройства представляются в виде трёхмерного вектора $\mathbf{K} = (0, 0, K)$ произвольной длины, параллельного оси z . Передачей сигнала считается изменение среднего значения оператора z -проекции спина «выходного» атома.

В работе рассматриваются системы, описываемые моделью Гейзенберга. Для их решения составляется матрица гамильтониана и находятся его собственные значения методом точной диагонализации.

В ходе работы было получено выражение для изменения магнитной энтропии систем, состоящих из нескольких атомов. Был разработан алгоритм введения хаотических воздействий в систему и проведено исследование устойчивости систем к различным конфигурациям модели шумового воздействия. Был введён формализм «неаккуратного эксперимента», который позволяет оценить стабильность систем к отклонению намагниченностей «входов», относительно оси z , от их «идеального» положения, благодаря чему были определены «рабочие зоны» рассматриваемых устройств.

1. Realizing All-Spin-Based Logic Operations Atom by Atom / A. A. Khajetoorians [и др.], Science — 2011. — Май.
2. R. Wiesendanger. “Spin-Polarized Scanning Tunneling Microscopy (SPSTM)”. MRS Proceedings 231 (1991), p. 37. doi: 10.1557/PROC-231-37.
3. D. M. Eigler, E. K. Schweizer. “Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope”. Nature 344 (1990), 524526. doi: 10.1038/344524a0.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ И МЕТОДОВ КОНТРОЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОВЕРХНОСТНЫХ НАНОСИСТЕМ В РЕЖИМЕ ПЕРЕДАЮЩИХ И ЛОГИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ

Кашин И.В.¹, Сырников Е.В.¹

¹) Кафедра Теоретической физики и прикладной математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира 19, 620002 Екатеринбург, Россия.

E-mail: e.syrnikov105@gmail.com

STABILITY AND BOUND STATES CONTROL RESEARCH IN RELATION TO SURFACE NANOSYSTEM BASED TRANSMITTING AND LOGICAL DEVICES

Kashin I.V.¹, Syrnikov E.V.¹

¹) Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University, Mira Street 19, 620002 Ekaterinburg, Russia.

We suggest research of surface nanosystems based transmitting and logic devices. These are systems of individual transition metal atoms adsorbed to the surface. We consider methods of bound states control and stability of the systems.

С момента изобретения электронно-вычислительных машин их мощность наращивалась путём увеличения количества транзисторов, размещаемых на кристалле интегральной схемы, и увеличения тактовой частоты процессора. Сегодня процессоры могут насчитывать до 50 млрд транзисторов в схемах, а их размер достигает нескольких нанометров.

Одним из подходов к дальнейшему наращиванию вычислительных мощностей является использование спиновых степеней свободы отдельных атомов и частиц для реализации как логических устройств, так и модулей памяти, обладающих высокой емкостью и низким энергопотреблением. Принцип работы таких устройств основан на обменном взаимодействии локализованных магнитных моментов атомов.

Целью данной работы является исследование методов контроля связанных состояний и оценка стабильности работы передающих и логических устройств, представляющих из себя системы отдельных атомов переходного металла, адсорбированных на поверхность.

Подобные устройства функционируют следующим образом: «входами» логического или передающего устройства являются ферромагнитные «островки», которые могут быть намагничены с импульсным магнитным полем. Информация о их состоянии, посредством обменного взаимодействия, передаётся через атомные цепи в область «затвора» - атома, намагниченность которого считывается. Таким образом, в зависимости от намагниченностей «входов», можно получать логические функции.

диаграммы, а в некоторых случаях установление дальнего порядка затрудняется в пользу основного состояния подобного спиновой жидкости с остаточной энтропией. Спин-жидкостные состояния, возникающие в идеальных теоретических моделях, в реальных магнетиках могут оказываться неустойчивыми из-за присутствия различных слабых взаимодействий (одноионной анизотропии, анизотропных спин-спиновых взаимодействий, взаимодействий далёких соседей, спин-решеточных связей или структурных искажений), что и приводит к разнообразным фазовым диаграммам и непредсказуемым фазовым переходам.

1. A. I. Kurbakov, A. E. Susloparova et al. Physical Review B. (2022)
2. А.Е. Суслопарова, А.И. Курбаков, ФММ (2022)
3. A. E. Susloparova, A. I. Kurbakov et al. Physical Review B. 102, 094433 (2020)

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЕМЕЙСТВА A_2MnTeO_6 ($A = Li, Ni, Ag, Tl$), ОПРЕДЕЛЁННЫЕ МЕТОДОМ НЕЙТРОННОЙ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКЦИИ

Суслопарова А.Е.^{1,2}, Курбаков А.И.¹

¹) НИЦ "КИ" – Петербургский институт ядерной физики

²) Санкт-Петербургский государственный университет

E-mail: susloparovanna@mail.ru

CRYSTAL STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE A_2MnTeO_6 FAMILY ($A = Li, Ni, Ag, Tl$)

Susloparova A.E.^{1,2}, Kurbakov A.I.¹

¹) NRC "KI" – Petersburg Nuclear Physics Institute

²) St Petersburg University

Neutron diffraction studies of powder samples from the A_2MnTeO_6 ($A = Li, Na, Ag, Tl$) family of tellurates at room and low temperatures have been carried out. The features of the crystal structure were studied and the spin structure in the ordered state was determined for all compounds.

Проведены нейтронографические исследования порошковых образцов из семейства теллуриатов A_2MnTeO_6 ($A = Li, Na, Ag, Tl$) при комнатной и низких температурах. Все образцы кристаллизуются в пространственную группу $R\bar{3}1c$, структура представляет собой сотообразные слои чередующихся между собой $(MnTeO_6)^{2-}$ и немагнитного слоя A^+ . Изучены особенности кристаллической структуры, обнаружено частичное замещение атомов Mn и Te. В результате симметричного и полнопрофильного анализа определены спиновые структуры в упорядоченном состоянии для соединений при $T = 1.6$ К. Модель представляет собой соизмеримую неколлинеарную 120-градусную треугольную структуру, лежащую в плоскости ab с вектором распространения $k = (\frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3})$ для Na_2MnTeO_6 [1] и Ag_2MnTeO_6 [2], и $k = (\frac{1}{3} \frac{1}{3} 0)$ для Li_2MnTeO_6 [3]. Нейтронографические измерения на Tl_2MnTeO_6 не показали возникновения дополнительных рефлексов, связанных с организацией дальнего магнитного порядка вплоть до $T = 1.6$ К. Проведено сравнение всех исследуемых соединений – несмотря на идентичные кристаллические структуры, обнаружено различие магнитной структуры Li_2MnTeO_6 с упорядочением в Na_2MnTeO_6 и Ag_2MnTeO_6 .

Все соединения A_2MnTeO_6 имеют треугольную геометрию расположения магнитных ионов, что, в сочетании со слоистой структурой, обеспечивает условия для возникновения фрустрированных взаимодействий в магнитной подсистеме. Подобное сочетание свойств с сильной кулоновской корреляцией и спин-орбитальным взаимодействием, может привести к появлению новых экзотических магнитных фаз в этих системах. Низкоразмерные и одновременно фрустрированные магнетики демонстрируют удивительно богатые магнитные фазовые

Olympus, Ar (488 и 514 нм), He-Ne (633 нм) лазерами и термоприставкой Linkam THMS 600.

Отработана методика разделения сигналов КРС (и/или сопутствующей люминесценции) пленки и подложки на основе послойных измерений спектров при диаметре конфокального отверстия 20-50 мкм с шагом сканирования по глубине 0.1-0.5 мкм (Рис.1). Проанализированы спектры тонкопленочного покрытия MgAl_2O_4 в зависимости от материала подложки (Al_2O_3 , SiO_2) и толщины пленки. Исследованы динамика решетки и термическая стабильность покрытий в диапазоне температур 77 - 870 К.

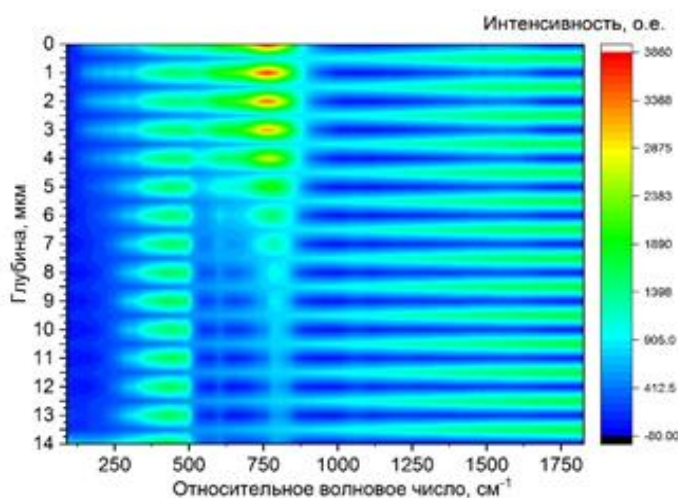


Рис. 1. 3D-массив спектров КРС, полученный при послойных измерениях системы пленка Mg-Al шпинели (толщина 2 мкм) - подложка из оксида кремния. Спектры нормированы на интенсивность линии D1 кварцевого стекла при 487 обратных сантиметрах

Работа выполнена в рамках Госзадания ИГГ УрО РАН (№АААА-А18-118053090045-8) с использованием оборудования ЦКП "Геоаналитик", дооснащение которого поддержано грантом Минобрнауки РФ (№075-15-2021-680). Получение тонкопленочных покрытий выполнено в рамках грантов РФФИ № 21-12-00392, РФФИ № 20-42-660012 и госзадания 2020-0059

1. Cynn H., Anderson O.L., Nicol M., Effects of cation disordering in a natural MgAl_2O_4 spinel observed by rectangular parallelepiped ultrasonic resonance and Raman measurements, Pure and Applied Geophysics, 1993, T. 141, №2, с. 415-444
2. Slotznick S.P., Shim S.H., In situ Raman spectroscopy measurements of MgAl_2O_4 spinel up to 1400 C, American Mineralogist, 2008, T. 93, №2-3, с. 470-476

ТОНКОПЛЁНОЧНЫЕ ПОКРЫТИЯ Mg-Al ШПИНЕЛИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОДЛОЖКАХ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ДИНАМИКА РЕШЕТКИ

Сушанек Л.Я.^{1,2}, Щапова Ю.В.^{1,2}, Киряков А.Н.¹, Сулейманов С.Х.³,
Зацепин А.Ф.¹

¹⁾ Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт Геологии и Геохимии имени академика А.Н. Заварицкого УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

³⁾ Институт материаловедения НПО "Физика-Солнце" АН Уз, пос. Солнце, Узбеки-
стан

E-mail: lev.sushanek@gmail.com

THIN-FILM COATINGS OF Mg-Al SPINEL ON DIELECTRIC SUBSTRATES: SYNTHESIS, STRUCTURE AND LATTICE DYNAMICS

Sushanek L.Y.^{1,2}, Shchapova Y.V.^{1,2}, Kiryakov A.N.¹, Suleimanov S. Kh.³,
Zatsepin A.F.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry, Yekaterinburg, Russia

³⁾ Physical-Technical Institute of SPA «Physics-Sun» Uzbekistan Academy of Sciences,
village Solntse, Uzbekistan

Thin-film coatings based on Mg-Al spinel possess high thermal, chemical and radiation durability. Thus, they make it perspective for nano- and optoelectronic applications, where those factors are critical.

Тонкопленочные материалы на основе магний-алюминиевой шпинели $MgAl_2O_4$ обладают структурой, характеризующейся высокой изоморфной ёмкостью и способностью к инверсному распределению катионов по позициям [1, 2], что позволяет целенаправленно влиять на ее оптоэлектронные свойства. Целью настоящей работы является изучение структуры и динамики решетки тонких пленок $MgAl_2O_4$, синтезированных на кристаллических и стеклообразных подложках.

Исследованы покрытия толщиной 0.055 - 2 мкм, полученные методами высокотемпературного испарения концентрированным солнечным излучением спрессованного из нанопорошка $MgAl_2O_4$ компакта в Большой Солнечной печи НПО "Физика-Солнце" АН РУз. Конденсация испаренного вещества выполнялась на подложках из кристаллического Al_2O_3 и стеклообразного SiO_2 . В качестве образцов сравнения использованы синтетическая нанокерамика и монокристаллы природной шпинели. Исследования выполнены на рентгеновском дифрактометре XRD 7000 (Shimadzu) и спектрометре комбинационного рассеяния света (КРС) LabRam HR 800 Evolution (Horiba), оснащённом конфокальным микроскопом

поле приводит к сильной деформации кристаллической решетки, что в свою очередь влияет на изменение электронной конфигурации образца и, как следствие, на его оптические свойства. Кроме того, было показано, что в фарадеевской геометрии эксперимента возможно влияние классического эффекта Фарадея (ЭФ) на магнитопоглощение, обусловленное только оптическими характеристиками измерительной установки. Однако величина вклада ЭФ в магнитопоглощение может достигать 15 %. Детально результаты исследования стрейн-магнито-оптики в феррит-шпинели CoFe_2O_4 приведены в работах [1-3].

Таким образом, авторами было создано новое направление в физике магнитных явлений – стрейн-магнито-оптика, изучающая корреляцию магнитоупругих и магнитооптических свойств магнетиков. Полученные эффекты являются важными для создания большого количества функциональных магнитооптических материалов для инфракрасной, видимой и терагерцовой областей спектра, оптическими свойствами которых можно управлять магнитным полем.

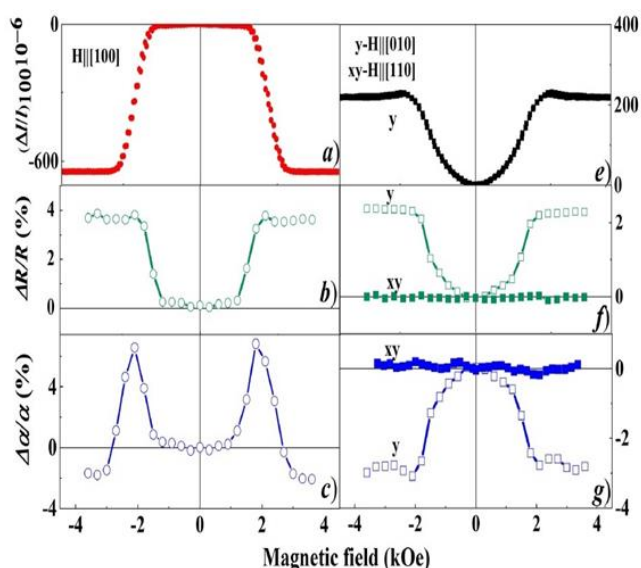


Рис. 1. Полевые зависимости линейной магнестрикции (а,е), магнитоотражения (b,f), магнитопоглощения (с,g) на длине волны 2.7 мкм для различных ориентаций магнитного поля относительно осей кристалла CoFe_2O_4 : y – $H \parallel [010]$, xy – $H \parallel [110]$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования России (тема “Спин” №АААА-А18-118020290104-2)

1. Yu. P. Sukhorukov, A. V. Telegin, N. G. Bebenin et al., Solid State Commun. 263, 27 (2017).
2. Yu. P. Sukhorukov, N. G. Bebenin, A. V. Telegin et al., Phys. of Met. and Metallogr. 119, 1167 (2018).
3. Ю. П. Сухоруков, А. В. Телегин, Н. Г. Бебенин и др., Письма в ЖЭТФ 108, 47 (2018).

СТРЕЙН-МАГНИТО-ОПТИКА В МАГНИТОСТРИКЦИОННОЙ ФЕРРИТ-ШПИНЕЛИ CoFe_2O_4

Суржиков Е.А.¹, Сухоруков Ю.П.¹

¹) Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, 620108, Екатеринбург, Россия
E-mail: surzhikov@imp.uran.ru

STRAIN-MAGNETO-OPTICS IN MAGNETOSTRICTIVE FERRITE- SPINEL CoFe_2O_4

Surzhikov E.A.¹, Sukhorukov Yu.P.¹

¹) M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of RAS, Yekaterinburg
620108, Russia

A new direction in the physics of magnetic phenomena strain-magneto-optics based on the correlation of magnetoelastic and magneto-optical properties has been created. Experimental data are important for theoretical studies of new magneto-optical properties and the creation of functional materials.

Стрейн-магнито-оптика – новый раздел стрейнтроники, изучающий взаимосвязь между магнитооптическими и магнитоупругими свойствами магнетиков. На данный момент времени, стрейн-магнито-оптические свойства обнаружены только в одном материале в ферритмагнитной шпинели CoFe_2O_4 , обладающей большими величинами магнитострикции ($\lambda_{100}=620 \cdot 10^{-6}$) и константы магнитной анизотропии ($K_1=2 \cdot 10^6$ эрг/см³) при комнатных температурах, а также малыми оптическими потерями.

Взаимосвязь между магнитооптическими и магнитоупругими свойствами феррит-шпинели отчетливо проявляется в подобии полевых зависимостей магнитострикции и эффектов магнитоотражения и магнитопоглощения (магнито-пропускания) неполяризованного света в инфракрасной области длин волн $1 \leq \lambda \leq 30$ мкм. Эта взаимосвязь проявляется также в подобии магнитоупругих и магнитооптических свойств в зависимости от ориентации магнитного поля относительно осей кристалла и направления поля относительно плоскости пластины кристалла, т.н. фоxtовская и фарадеевская геометрии эксперимента. Спектральная область стрейн-магнито-оптики в CoFe_2O_4 включает край фундаментального поглощения, примесное поглощение света и область взаимодействия света с остаточными лучами. В качестве примера, на Рис. приведены полевые зависимости магнитострикции, магнитоотражения и магнитопоглощения для $\lambda=2.7$ мкм, соответствующей интенсивной полосе примесного поглощения света. Установлено, что механизм, ответственный за корреляцию магнитооптических и магнитоупругих свойств в CoFe_2O_4 , является непрямым. Он обусловлен тем, что магнитострикция вносит аномально большой вклад в константу магнитной анизотропии, сравнимый с самой величиной константы. Таким образом, магнитное

1. Kresse G., Marsman M., Furthmüller J. VASP the GUIDE//Wien:Universität Wien. 2016. P.238., URL:<https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp.pdf>
2. Pustogowa U., Szunyogh L., Ebert H., Weinberger P.. Spin-polarized X-ray emission spectroscopy of capped thin Co films on Cu(100)// Solid State Commun. 1998. V.108. P.343-348
3. Johnson M.T., Bloemen P.J.H., den Broeder F.J.A. and de Vries J.J. Magnetic anisotropy in metallic multilayers. // Rep. Prog. Phys. 1996. V.59. P.1409.
4. Kohlhepp J., Elmers H.J., Cordes S., Gradmann U. Power laws of magnetization in ferromagnetic monolayers and the two-dimensional Ising model. // Phys. Rev. 1992. B 45, 12287

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ ПЛЕНОК КОБАЛЬТА, РАЗДЕЛЕННЫХ МЕДНОЙ ПЛАСТИНОЙ

Сухачев. Р.А.¹, Мамонова М.В.¹

¹⁾ ОмГУ им. Ф.М. Достоевского

E-mail: sukhachevruslan@gmail.com

THEORETICAL STUDIES OF THE MAGNETIC ANISOTROPY OF COBALT FILMS SEPARATED BY A COPPER PLATE

Sukhachev R.A.¹, Mamonova M.V.¹

¹⁾ Dostoevsky Omsk State University

In this work, we studied the energy and magnetic properties of the Co/Cu/Co system. Calculations have shown that for the (100) and (111) faces, direction of magnetic moments parallel to the film plane is energetically favorable. For the (110) face, a weak perpendicular magnetoanisotropy was obtained

В данной работе были проведены численные исследования энергетических и магнитных свойств системы Co/Cu/Co помощью программного комплекса Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [1], в основе расчетов которого лежит теория функционала плотности.

Проведенные расчеты разности энергий АФМ и ФМ конфигураций Co/Cu/Co в зависимости от количества слоев меди в 3-9 монослоя и кобальта в 1-3 монослоя, показали, что наиболее энергетически выгодной ферромагнитная конфигурация становится при количестве слоев подложки в 9 монослоев и магнитного материала в 3 монослоя

Исследование зависимости магнитных свойств системы от количества монослоев Co показало, что полученные в ходе расчетов значения магнитного момента хорошо соотносятся с экспериментальными данными других исследователей [2].

Из эксперимента известно [3], что структура Co/Cu характеризуется слабой магнитной анизотропией типа легкая плоскость с намагниченностью, ориентированной в плоскости пленки. Это подтверждается нашими расчетами. Для структуры Co/Cu/Co $E_{MA} = E_{\perp} - E_{\parallel} > 0$, что соответствует магнитной анизотропией типа легкая плоскость, кроме очень маленьких значений $E_{MA} = -0.05\text{eV}$ при энергетически невыгодных ФМ конфигураций граней (110) и (111). Но дополнительные измерения [4] подтвердили, что система Co/Cu(111) действительно демонстрирует слабую анизотропию перпендикулярную границе раздела.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002)

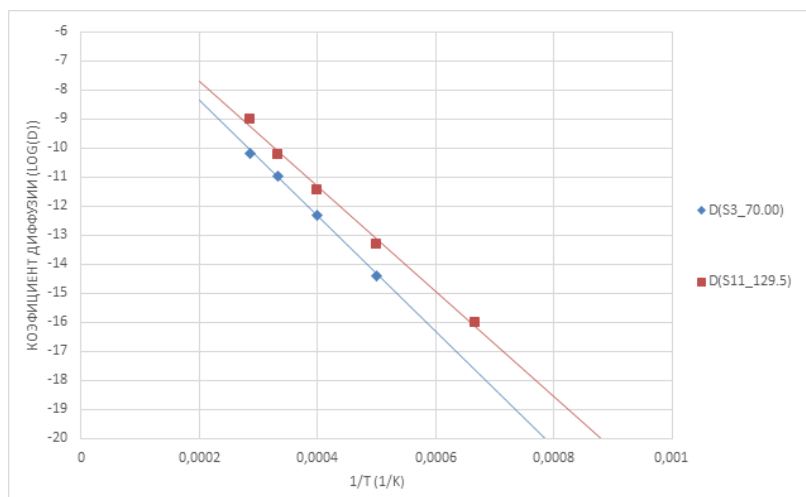


Рис. 1. Коэффициент зернограничной самодиффузии в ГЗ $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$ и $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция», номер госрегистрации г.р. № 122021000035-6).

При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

1. Plimton S., “Fast parallel algorithms for short rangemolecular dynamics” J. Comp. Phys. 117, 1–19(1995).
2. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Benc-teux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislo-cations in tungsten // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 395502.
3. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Benc-teux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislo-cations in tungsten // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 395502.
4. Ступак М.Е., Уразалиев М.Г., Попов В.В. Структура и энергия симметричных границ наклона $\langle 110 \rangle$ в поликристаллическом W // ФММ. 2020. Т. 121. № 8. С. 877–883.
5. Popov V.V. Mossbauer spectroscopy of interfaces in metals // Phys. Met. Metallogr. 2012. V. 113. № 13. P. 1257–1289.

САМОДИФФУЗИЯ ВДОЛЬ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ОЦК-ВОЛЬФРАМЕ

Ступак М. Е.¹, Уразалиев М. Г.¹, Попов В. В.¹

¹) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shay92@yandex.ru

SPECIAL GRAIN BOUNDARY SELF-DIFFUSION IN BCC-TUNGSTEN

Stupak M. E.¹, Urazaliev M. G.¹, Popov V. V.¹

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

Thermal stability of grain boundaries in tungsten has been studied by the method of molecular dynamics, and the coefficient of grain boundary self-diffusion for $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$ and $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$ boundaries has been calculated.

Методами компьютерного моделирования проведен расчет зернограницной самодиффузии в симметричных границах $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$ и $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$ поликристаллического вольфрама. Расчеты проведены с помощью программного комплекса LAMMPS [1] с использованием потенциала погруженного атома [2]. В качестве визуализатора использовалась программа OVITO [3].

В молекулярно-динамического (МД) моделирования применялся блок, содержащий границу зерен (ГЗ), полученный с помощью молекулярно-статического (МС) моделирования [4]. Для проверки термической стабильности при конечных температурах проводился термический отжиг с использованием изотермо-изобарического ансамбля (NPT) в течение 30 нс с шагом 2 фс. Для предотвращения миграции ГЗ применялись фиксированные условия на краях блока моделирования. Определена критическая температура границ зерен, при которых ГЗ теряет свою изначальную структуру.

При расчетах зернограницной самодиффузии предполагалось, что она протекает по вакансионному механизму. Данное предположение базируется на результатах проведенных ранее мессбауэровских исследований [5]. Коэффициент зернограницной диффузии рассчитывался на основании среднего квадратичного смещения. Расчет диффузии проводился в течение 20 нс, с шагом 1 фс. Коэффициенты самодиффузии по рассмотренным границам зерен представлены в виде Аррениусовских зависимостей (рис. 1).

люминесценции и возбуждения образцов MgF_2 (a) и $\text{MgF}_2\text{:W}$ (b). В обобщенном виде спектры представлены на рисунке. Люминесценция образцов $\text{MgF}_2\text{:W}$ и MgF_2 различается: полоса в $\text{MgF}_2\text{:W}$ смещена в красную область, ее интенсивность выше. Возбуждается люминесценция $\text{MgF}_2\text{:W}$ излучением ниже 290 нм, тогда как MgF_2 - ниже 250 нм. Подобные закономерности наблюдаются и для других синтезированных образцов керамики. Люминесцентные свойства активированных образцов подобны известным для $\text{MgF}_2\text{:W}$ и LiF:W , полученных другими методами.

Таким образом, посредством прямого воздействия мощного потока высокоэнергетических электронов возможно формирование вольфрам содержащей керамики из шихты без использования других веществ для введения вольфрама в решетку. Такая возможность достигается тем, что в шихте при облучении потоком электронов основная доля энергии выделяется внутри облучаемого объема, с максимумом на глубине 1.4 - 2.2 мм в зависимости от состава. При высокой скорости синтеза вольфрам не успевает покинуть зону, в которой реакция синтеза реализуется, и сохраняется в формирующейся решетке. Компенсация разницы в зарядах ионов активатора и матрицы достигается введением в решетку собственных дефектов структуры.

1. L. V. Atroshchenko, S. F. Burachas, L. P. Gal'chinetskii, et al., Scintillator Crystals and Ionizing Radiation Detectors on Their Basis [in Russian], Naukova Dumka, Kiev (1998)]
2. Bhushan P. Kore, Ashwini Kumar, Lucas Erasmus, Robin E. Kroon, Jacobus J. Terblans, Sanjay J. Dhoble, and Hendrik C. Swart. Energy Transfer Mechanisms and Optical Thermometry of $\text{BaMgF}_4\text{:Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}$ Phosphor. Inorg. Chem. 2018, 57, 1, 288–299 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b02436
3. L.A. Lisitsyna, V.M. Lisitsyn. Composition nanodefects in doped lithium fluoride crystals // Phys. Solid State. – 2013. – V.55. No.11. – P.2297–2303.
4. V.M. Lisitsyn, M.G. Golkovskii, L.A. Lisitsyna, A.K. Dauletbekova, D.A. Musakhanov, V.A. Vaganov, A.T. Tulegenova, Zh.T. Karipbayev, “ MgF_2 -Based Luminescing Ceramics,” Russian Physics Journal, V.61, Issue 10, P. 1908–1913, 2019

АКТИВИРОВАННАЯ ВОЛЬФРАМОМ КЕРАМИКА НА ОСНОВЕ ФТОРИДОВ МЕТАЛЛОВ

Стрелкова А.В.¹, Жунусбеков А.М.², Лисицына Л.А.³

¹) Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.

²) Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.

³) ФГБОУ ВО «ТГАСУ», НИУ ТПУ

E-mail: a.strelkova@nurorda.kz

TUNGSTEN ACTIVATED CERAMICS BASED ON METAL FLUORIDES

Strelkova A.V.¹, Zhunusbekov A.M.², Lisitsyna L.A.³

¹) L.N. Gumilev Eurasian national university

²) L.N. Gumilev Eurasian national university

³) FGBOU VO "TGASU", NRU TPU

This work is aimed at establishing the possibility of introducing W ions into ceramics based on alkaline earth metal fluorides by the radiation synthesis method, which differs significantly in the totality of processes from the currently used thermal methods.

Активированные поливалентными ионами материалы на основе фторидов щелочных и щелочноземельных металлов перспективны для использования в качестве сцинтилляционных материалов [1], датчиков температуры [2]. Эффективными активаторами в этих материалах являются поливалентные ионы W, U, Ti, Fe [3]. Однако, введение ионов с существенно отличающейся валентностью удастся обеспечить только в присутствии соактиваторов, компенсирующих разницу в зарядах и размерах. Введение в решетку наиболее эффективных ионов W, U затрудняется еще и тем, что при высоких температурах синтеза кристаллов, керамики фторидов металлов образуются летучие соединения гексафторидов, активаторы выводятся из расплава. Настоящая работа направлена на установление возможности введения ионов W в керамику на основе фторидов щелочноземельных металлов радиационным методом синтеза, существенно отличающимся по совокупности процессов от используемых в настоящее время термических методов. Возможность использования радиации для синтеза MgF_2 керамики была продемонстрирована в работе [4].

Реализован синтез керамики на основе MgF_2 , BaF_2 , $BaMgF_4$, активированных W. Для активации в шихту добавлялся 1% порошка WO_3 . Синтез осуществлялся путем прямого воздействия на шихту потока электронов с энергией 1.4 МэВ и плотностью мощности 18-25 кВт/см² от ускорителя ЭЛВ-6. Полное время облучения всей шихты в тигле площадью 40 см² – 10 с.

Для измерений фотolumинесценции (ФЛ) образцы керамики измельчались. Спектры люминесценции и возбуждения были измерены с помощью спектрометра CM2203 SOLAR. На рисунке приведены для примера спектры

(0,052÷237,12) Гр, результаты представлены на рисунке для керамик полученных ЦН синтезом (а) и ТФ методом (б).

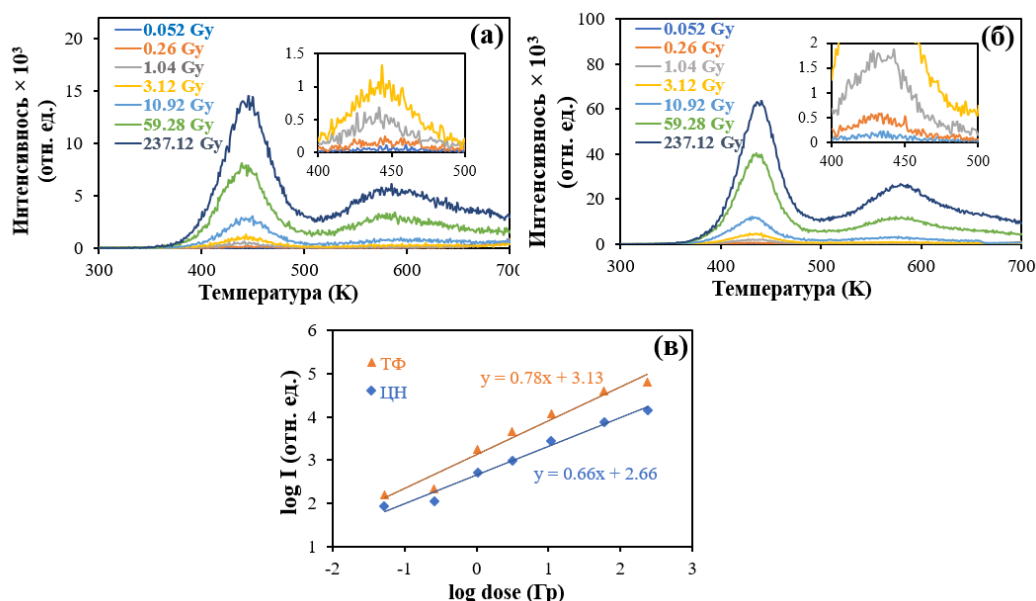


Рис. 1. Кривые ТЛ ZnAl_2O_4 полученного цитрат-нитратным (а) и твердофазным методом (б) после спекания в воздухе при температуре 1400 °С в течение 5 часов, после облучения в источнике β -излучения. Зависимость интенсивности ТЛ пика (440 К) от дозы облучения (в) для ЦН (ромб) и ТФ (треугольник)

Установлено, что керамика, синтезированная ТФ методом, является более чувствительной к излучению. Также следует отметить, что при высоких дозах, с большей скоростью увеличивается интенсивность ТЛ высокотемпературного пика. Это связано с заполнением электронами дефектов, релаксирующих при низких температурах, в то время как дефекты, ответственные за высокотемпературный пик, только начинают заполняться. Также была получена зависимость интенсивности низкотемпературного пика кривых ТЛ от полученной дозы; результаты представлены на рисунке (в).

Оба образца имеют сублинейную зависимость интенсивности пика ТЛ при 440 К от дозы ионизирующего излучения в интервале от 1 до 80 Гр, что говорит, о возможности их применения в дозиметрии.

1. Rani G., Powder technology, T. 312, C. 354-359, (2017).
2. Zvonarev, S. V., Kortov, V. S., Shtang, T. V., Ananchenko, D. V., & Petrovykh, K. A., Applied Radiation and Isotopes, T. 95, C. 44-47, (2015).

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА СИНТЕЗА НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНАТА ЦИНКА

Старостин Г.Н.¹, Звонарева И.А.^{1, 2}, Медведев Д.А.^{1, 2}, Звонарев С.В.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: gorgge23@mail.ru

THE EFFECT OF THE SYNTHESIS METHOD ON THE LUMINESCENT AND DOSIMETRIC PROPERTIES OF ZINC ALUMINATE

Starostin G.N.¹, Zvonareva I.A.^{1, 2}, Medvedev D.A.^{1, 2}, Zvonarev S.V.¹

¹⁾ Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of High Temperature Electrochemistry Ural Division of the Russian Academy of Science, Yekaterinburg, Russia

In this article, the thermoluminescence properties of zinc aluminate synthesized by solid-state reaction and citrate-nitrate auto-combustion routes were investigated. The dose dependence study of a low-temperature TL peak showed a sensitivity of ceramics to the obtained dose in the range of 1-80 Gy.

ZnAl_2O_4 – хорошо известный широкополосный полупроводниковый материал ($E_g=3,8$ эВ), обладающий достаточной термической стабильностью и механической устойчивостью, благодаря этим свойствам широко используемый в качестве оптомеханического, каталитического керамического и антитермического покрытия в аэрокосмических аппаратах и электропроводящих материалах в области ультрафиолета [1].

Керамические материалы состава ZnAl_2O_4 были получены методами твердофазного (ТФ) и цитрат-нитратного (ЦН) синтеза с использованием Al_2O_3 , ZnO ; $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ в качестве исходных реагентов. Тщательно смешанные и измельченные порошки были синтезированы при 1200°C (5 ч). Компактирование порошков производилось методом холодного статического прессования (200 Мпа) с последующим спеканием на воздухе при 1400°C (5 ч) для получения керамических образцов. Отсутствие примесных фаз было подтверждено методом рентгенофазового анализа. Кривые термолюминесценции (ТЛ) получены с использованием фотоэлектронного умножителя FEU-142 (230-700 нм) при линейном нагреве от 300 до 750 К и скорости нагрева 2 К/с после облучения на источнике β -излучения с мощностью 0,052 Гр/мин [2].

Для исследования влияния поглощенной дозы на интенсивность ТЛ, что является важным фактором для создания детекторов ионизирующих излучений, образцы были подвергнуты β -облучению различной дозы в диапазоне

можно предполагать, что размеры этих включений не превышают 2-3 нм. Увеличение толщины магниевых прослоек приводит к формированию сплошных слоев, что подтверждается резким (на порядок) уменьшением сопротивления и изменением знака термо-ЭДС с отрицательного на положительный. Таким образом, этот участок соответствует морфологическому переходу от дискретно-композитной структуры к многослойной. Третий участок зависимости характерен тем, что как сопротивление, так и термо-ЭДС наноструктуры практически не зависят от толщины слоёв магния, поскольку электронный транспорт осуществляется по проводящим слоям, а увеличение их толщины недостаточно для явного проявления размерного эффекта.

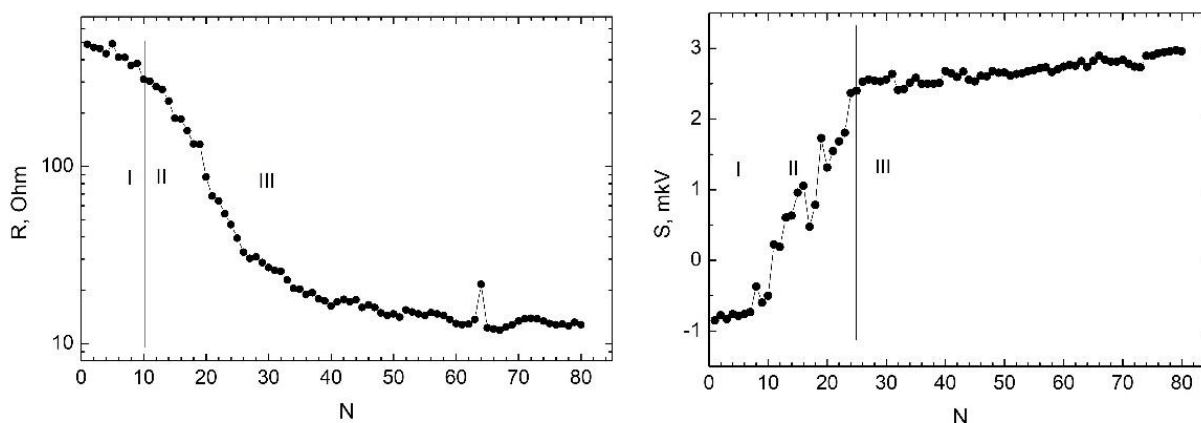


Рис. 1 – Зависимости электрического сопротивления и термоЭДС многослойной структуры Mg/C от номера образца.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки в рамках государственного задания (проект FZGM-2020-0007)

1. Стогней О.В. Термическая стабильность многослойной структуры Mg/NbO / О.В. Стогней, А.В.Ситников, А.Н.Смирнов, // Вестник Воронеж-ского государственного технического университета. 2017. Т. 13. № 6. С. 144 – 150.

ПОЛУЧЕНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР Mg/C

Смирнов А. Н.¹, Стогней О.В.¹, Касаткин Н. А.¹, Еровинков К. С.¹

¹) Воронежский Государственный Технический Университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: deadpunk@inbox.ru

PREPARATION OF MULTILAYER Mg/C NANOSTRUCTURES

Smirnov A. N.¹, Stogney O. V.¹, Kasatkin N. A.¹, Erovinikov K. S.¹

¹) Voronezh State Technical University, Voronezh, Russia

Multilayer Mg/C nanostructures were obtained and studied. The influence of the magnesium layer thickness on the electrical resistance and thermoelectric power of the multilayer nanostructures were investigated.

Многослойные наноструктуры Mg/C были получены методом ионно-плазменного распыления двух мишеней (магниевой и углеродной), с последующим осаждением материала на вращающиеся подложки. Осаждение Mg осуществлялось через экран с V-образным окном, в то время как С осаждался без экрана [1]. Это позволило создать многослойные структуры с различной толщиной магниевых слоев и одинаковой толщиной слоев углерода. Всего в полученных многослойных структурах было сформировано 18 бислоев (Mg+C).

На рентгенограммах от многослойных наноструктур Mg/C, присутствует единственный пик от гексагональной структуры магния, с увеличением толщины магниевых слоев происходит увеличение интенсивности пика Mg (200). Наличие пика наблюдается не на всех дифрактограммах, а лишь на тех, которые соответствуют многослойным структурам с толщиной бислоя, превышающей ~5нм. Это позволяет предполагать, что при меньшей толщине бислоя магниевые слои не являются сплошными, а представляют собой дискретные металлические наночастицы в объеме углеродной матрицы.

Образование сплошных слоев магния (переход от дискретной морфологии к сплошным слоям) подтверждается зависимостями электрического сопротивления и термо-ЭДС многослойной структуры Mg/C от толщины магниевых слоев (рис. 1).

Зависимость электрического сопротивления и термо-ЭДС многослойной структуры Mg/C от толщины характерна для систем с перколяционным переходом по проводимости. На зависимостях выделяются три участка. Для первого участка характерны сравнительно высокие значения сопротивления (самые высокие для данной системы) и отрицательный знак термо-ЭДС (см. рис. 1). Это свидетельствует о том, что электроперенос в данной области осуществляется через сплошную углеродную матрицу с дырочной проводимостью. Фаза магния представляет собой наноразмерные металлические включения в эту матрицу. Поскольку на дифрактограммах образцов этой группы отсутствует пик «магния»

проведения измерений термостимулированной люминесценции (ТСЛ) в диапазоне 300 – 800 К. Под воздействием УФ излучения в диапазоне 4.8 – 5.7 эВ наблюдается сине-зеленое свечение с максимумом 2.3 эВ. После проведения отжига положение максимума смещается в 2.6 эВ. Регистрируемое свечение обусловлено наличием в образце кислородных вакансий в различных зарядовых состояниях. Это же свечение проявляется при регистрации ТСЛ-сигнала. Кинетические параметры процессов ТСЛ, ответственных за пик 340 К, были рассчитаны с использованием формализма кинетики общего порядка.

Работа выполнена при поддержке научного проекта Минобрнауки FEUZ-2020-0059.

1. A. O. Shilov, S. S. Savchenko, A. S. Vokhmintsev, V. A. Gritsenko, I. A. Weinstein. AIP Conf. Proc., 2313, 030006 (2020).
2. A.O. Shilov, S.S. Savchenko, A.S. Vokhmintsev, A.V. Chukin, M.S. Karabanalov, M.I. Vlasov, I.A. Weinstein, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys., 14(2), 1–6 (2021).
3. А.О. Шилов, А. С. Вохминцев, А.М.А. Хинайш, И.А. Вайнштейн. Известия РАН. Серия физическая., (2022) (в печати).

КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НАНОТРУБОК ДИОКСИДА ГАФНИЯ

Шилов А.О.¹, Камалов Р.В.¹, Карабаналов М.С.¹, Вохминцев А.С.¹,
Вайнштейн И.А.^{1,2}

¹) НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

²) Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ao.shilov@urfu.ru

KINETIC PARAMETERS OF THERMALLY STIMULATED LUMINESCENCE IN NANOTUBULAR HAFNIA

Shilov A.O.¹, Kamalov R.V.¹, Karabanalov M.S.¹, Vokhmintsev A.S.¹,
Weinstein I.A.^{1,2}

¹) NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

²) Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia

We investigate spectrally resolved thermoluminescence of HfO_2 nanotubes. The observed emission at 2.3–2.6 eV is related to oxygen vacancies in various configurations and charge states. Kinetic parameters of the investigated TSL processes were analyzed using the general order kinetics formalism.

Структуры диоксида гафния различной размерности и морфологии обладают уникальным сочетанием механических, электрических и оптических свойств, и находят применение при создании фотокатализаторов, элементов бета-вольтаики, мемристоров, ячеек сегнетоэлектрической памяти и др. Механизмы формирования вышеперечисленных свойств, как правило, связаны с активным участием электронных и дырочных ловушек на основе различных собственных дефектов. Ранее, нами были изучены оптические свойства тонких плёнок [1] и наноструктурированного порошка [2, 3]. Данная работа посвящена исследованию люминесцентных свойств нанотубулярных массивов анион-дефицитного диоксида гафния.

Нанотрубки HfO_2 были получены методом электрохимического анодирования гафниевой фольги в потенциостатическом режиме. После синтеза был проведен отжиг при температуре 700°C в воздушной атмосфере. Аттестация структур была проведена методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгенофазового анализа (РФА) и рамановской спектроскопии. По данным СЭМ и ПЭМ в результате синтеза образуются нанотрубки диаметром 40–60 нм. РФА и рамановская спектроскопия показали, что исходные массивы являются аморфными, и переходят в моноклинную фазу после проведенного высокотемпературного отжига.

Исследование люминесцентных свойств проводилось при помощи спектрометра Perkin Elmer LS55, оснащенного высокотемпературной приставкой для

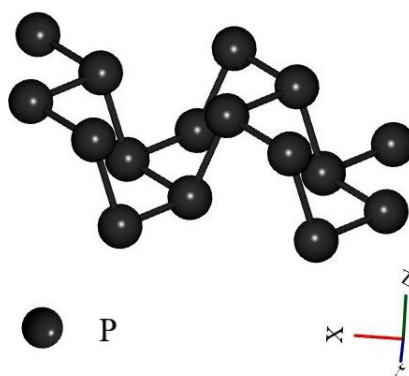


Рис. 1. Элемент кристаллической решётки фосфорена

Для листа фосфорена (система из 1296 атомов) программой LAMMPS [5] было проведено моделирование классической МД. Результаты симуляции показывают стабильность системы во времени. В качестве количественной физической характеристики была взята плотность материала, измеренное значение которой (2.72 г/см^3) очень близко к реальному (2.69 г/см^3).

1. Wang, Han; Zhang, Linfeng; Han, Jiequn; E, Weinan (2018). DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics. Computer Physics Communications. doi:10.1016/j.cpc.2018.03.016 arXiv:1712.03641v2
2. Castellanos-Gomez, Andres; Vicarelli, Leonardo; Prada, Elsa; Island, Joshua O; Narasimha-Acharya, K L; Blanter, Sofya I; Groenendijk, Dirk J; Buscema, Michele; Steele, Gary A; Alvarez, J V; Zandbergen, Henny W; Palacios, J J; van der Zant, Herre S J (2014). Isolation and characterization of few-layer black phosphorus. 2D Materials, 1(2), 025001. doi:10.1088/2053-1583/1/2/025001
3. Car, R. (1985). Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory. , 55(22), 2471–2474. doi:10.1103/PhysRevLett.55.2471
4. <https://www.quantum-espresso.org/>
5. <https://lammps.org/>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОСФОРЕНА МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

Шеин Д.В.¹, Завьялов Д.В.¹, Жариков Д.Н.¹

¹) Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, Российская Федерация
E-mail: danil.shein2013@yandex.ru

MODELING OF PHOSPHORENE WITH CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS USING DEEP LEARNING

Shein D.V.¹, Zavyalov D.V.¹, Zharikov D.N.¹

¹) Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Volgograd State Technical University", Volgograd, Russian Federation

The resulting single-layer phosphorene model created by classical molecular dynamic simulation and deep learning package has properties of the real material.

Глубокое обучение широко распространено в современных технологиях, а его использование в физике конденсированного состояния является многообещающим. Так с помощью пакета глубокого обучения DeePMD-kit [1] возможно построить модель силовых полей межатомных взаимодействий различных материалов. В данной работе была предпринята попытка построить таким методом силовые поля фосфорена [2].

Объектами обучения могут быть результаты моделирования *ab initio* молекулярной динамики (МД). В 1985 году Кар и Парринелло предложили метод МД [3], в котором система взаимодействующих электронов и ионов рассматривается совместно, причём движение ядер атомов, задаётся классически, а электронные степени свободы – квантово механическими волновыми функциями.

В пакете программ Quantum-Espresso [4] имеется возможность моделирования методом МД Кара-Парринелло. В качестве элементарной ячейки взят элемент решётки фосфорена, состоящий из 16 атомов (Рисунок 1).

Со сгенерированной моделью силовых полей становится возможным проводить моделирование методом классической МД, в котором численно интегрируются уравнения Ньютона.

структурными единицами Mn-W-B в соответствии с формулой: $W_{0,5}Mn_{0,5}B$. После этого исходная модель подгонялась к экспериментальной дифрактограмме образца методом полнопрофильного анализа Ритвельда [4]. Мониторинг конвергенции модели осуществлялся по индексам сходимости, а так же на основе визуальной оценки сближения модельного спектра и дифрактограммы образца.

После оптимизации модели уточненные параметры решетки приняли значения: $a(A)=3,1302$; $b(A)=8,1472$; $c(A)=3,0192$.

1. A. BOULTIF and D. LOUËR, Powder pattern indexing with the dichotomy method, J. Appl. Cryst. (2004), 37, 724 – 731
2. J.W. VISSER, A fully automatic program for finding the unit cell from powder data, J.App.Cryst (1969), 2, page 89
3. P.E. WERNER, L. ERIKSON & M. WESTDAHL, TREOR, a semi-exhaustive trial-and-error powder indexing program for all symmetries., J. Appl. Cryst. (1985), 18, 367 – 370
4. R.J. HILL and C.J. HOWARD, Quantitative Phase Analysis from Powder Diffraction Data using the Rietveld Method, J. Appl.Cryst. (1987), 20, 467.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ $WMnB_2$ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

Щанов В.А.¹, Чукин А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vsshchanov@mail.ru

DETERMINATION OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF $WMnB_2$ COMPOUND BY X-RAY DIFFRACTION

Shchanov V.A.¹, Chukin A.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The crystal structure of new compound $WMnB_2$ was determined from the X-ray diffraction pattern. Reflection indexing were performed by several methods: DICVOL, ITO, McMaille, TREOR. The best results were obtained for the rhombic system with lattice parameters: $a(A)=3.13$; $b(A)=8.14$; $c(A)=3.02$.

Появление новых материалов, обладающих необычными свойствами, всегда является серьёзным вызовом для исследователей. Зачастую свойства того или иного материала напрямую определяются его кристаллической структурой. По этой логике возможность идентификации и моделирования кристаллических структур новых материалов является ключевым механизмом получения желаемых свойств. Инструментарий при этом может быть самым разнообразный. Мощным инструментом для определения кристаллической структуры новых соединений является рентгеновская дифракция.

В этой работе представлена попытка определения кристаллической структуры впервые синтезированного соединения $WMnB_2$ на основе анализа рентгеновской дифрактограммы.

Идентификация фазы и индексирование рефлексов выполнялась несколькими методами индексирования, такими как DICVOL [1], где определение гипотетических параметров элементарной ячейки основывается на последовательной процедуре дихотомии при изменении длины осей элементарной ячейки и межосевых углов; ITO [2]; McMaille; TREOR 90 [3] и др.

Наилучшие результаты при идентификации фазы были получены для ромбической сингонии с параметрами решетки: $a(A)=3,13$; $b(A)=8,14$; $c(A)=3,02$ и объемом ячейки $V=77,06$.

После этого было проведено уточнение параметров элементарной ячейки и выполнено тестирование пространственной группы. Оптимальная пространственная группа, соответствующая данной структуре: $63 (Cmcm)$. Для моделирования дифрактограммы был использован структурный файл базы данных ICDD PDF-4, структурного типа CrB с заполнением элементарной ячейки

разведения препаратов демонстрирует, собственно, что главным механизмом конфигурации физических свойств ЭМИ смесей считается перемена диэлектрической проницаемости смесей. Объектом в предоставленной работе считаются [2] образцы кристаллов и порошков (осч. 99.99%) K_2SO_4 с примесью марганца Mn^{2+} . При получении кристаллов способом осаждения применялись нитраты калия, марганца и сульфат аммония. В кристалле $K_2SO_4 - Mn$ в первый раз были выявлены 2 группы рекомбинационных излучений, связанные с примесными ионами Mn^{2+} при 2.75, 2.33, 2.1, 1.96 эВ. На базе измерений спектров возбуждения групп излучений ожидается, собственно что 1-ая группа излучения связана с люминесценцией Mn^{2+} , размещенного в узле решетки возле всевозможных недостатков, 2-ая группа излучений связана с люминесценцией Mn^{2+} в междоузельных положениях кристаллической решетки. На основе измерения спектров флуоресценции ожидается, собственно, что выявленные группы излучений связана с рекомбинацией электронов с дырками на созданных центрах захватов возле примесей Mn^{2+} . Задачами наших исследований считаются, что в кристаллах K_2SO_4 диапазоны возбуждения для собственных излучений при 4,1-4,3 эВ, 4,5-5,0 эВ. Исследование процессов формирования примесных электронно-дырочных центров захвата в кристаллах K_2SO_4-Tl при температурах 15K, 80K и 300 K.

1. Савельев С.В., Морозова Л.А. Физико-химическая биология как основа современной медицины, Минск, 21 мая 2021, 246-247
2. Б.Н. Юсупбекова, К. Жанылысов, Т. Алибай, Д. Толеков, Т. Кабадулла, А.Манат, 14th International Conference “Interaction of Radiation with Solids”, September 21-24, 2021, Minsk, Belarus

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛОВ K_2SO_4 С ПРИМЕСЯМИ ВЫРАЩЕННЫХ ИЗ ВОДНОГО РАСТВОРА

Шамиева Р.К.¹, Нурахметов Т.Н.¹, Толеков Д.А.¹

¹) Евразийский национальный университет им.Л.Н. Гумилева ул.Кажымукан 13,
010000 Нур-Султан, Казахстан,
E-mail: rasha_arman@bk.ru

STUDY OF THE LUMINESCENT CHARACTERISTICS OF K_2SO_4 CRYSTALS WITH IMPURITIES GROWN FROM AN AQUEOUS SOLUTION

Shamiyeva R.K.¹, Nurakhmetov T.N.¹, Tolekov D.A.¹

¹) L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Str., 010000 Nur-Sul-
tan, Kazakhstan,

Paper presents a study of the luminescence characteristics of K_2SO_4 crystals with impurities grown by the slow evaporation method. The nature of the Tl impurity emission and the formation of electron-hole trapping centers in irradiated K_2SO_4 – Tl crystals will be studied by spectroscopic methods.

В разделе физики конденсированного состояния одной из своевременных задач множества десятков лет остается изучение излучательного распада собственных и примесных электронных возбуждений в ионных кристаллах. Техническое использование ЩГК в качестве оптических материалов, в сцинтилляционной технике, термолюминесцентных дозиметрах и др. базировалось на обозначенных базовых свойствах. Образцы были получены способом медленного испарения при 300К водяного раствора солей чистого сульфата калия K_2SO_4 и Mn^{2+} . В работе изучены тепловые, спектральные и барические зависимости двупреломления кристаллов калия с 1.7% примесью меди. Было установлено, что внедрение примеси изменяет безоговорочную значение, не изменяя при этом характера дисперсии, а еще ведет к подъему температурной зависимости. Применяя опытно приобретенные температурные и спектральные зависимости двупреломления кристаллов для различных значений одноосного сжатия, построены обобщенные температурно-спектрально-барические диаграммы изотропного состояния сульфата калия, с которыми возможно квалифицировать изотропное положение кристаллов в конкретных температурных, спектральных и барических промежутках, что собственно имеет возможность практическое владении при применении предоставленного кристалла в качестве кристаллооптического датчика. Приобретенные итоги обосновывают [1] важное различие значений коэффициентов поглощения исследуемых смесей электролитов от воды. Коэффициенты поглощения смесей имеют значение ниже, чем в контрольном опыте с чистой водой. Нарращивание коэффициентов поглощения для обозначенных значений

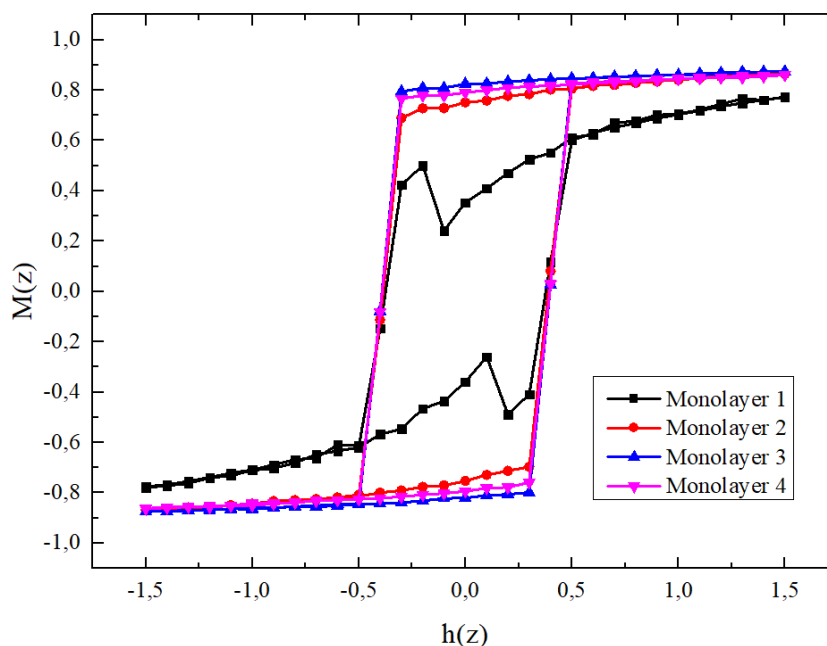


Рис. 1. Петля гистерезиса в системе с точечными дефектами при толщине пленок равным $N = 4$ и при значении обменного интеграла межпленочного взаимодействия равного $J_2/J_1 = -0.3$

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-32-70189, Минобрнауки РФ (соглашение 0741-2020-0002) и гранта МД-2229.2020.2 Президента РФ.

1. Bersweiler M, Lacour D, Dumesnil K, Montaigne F, Hehn M, Phase diagram in exchange-coupled CoTb/[Co/Pt] multilayer-based magnetic tunnel junctions, Physical Review: Condensed matter and materials physics, American Physical Society, V. 92, P. 224431(2015)
2. Vaz C.A.F, Bland J.A.C, Lauhoff G, Magnetism in ultrathin filmstructures, Rep. Prog. Phys, V.71, P.056501,(2008)
3. Прудников В.В, Прудников П.В, Лях А.С, Неравновесное критическое поведение трехмерной анизотропной модели гейзенберга: динамическая восприимчивость и флуктуационно-диссипативное отношение, Вестн.Ом.ун-та,Т.25,С.23-32(2020).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ И ИСКУССТВЕННЫХ СТРУКТУР НА ЭФФЕКТЫ ГИСТЕРЕЗИСА В МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Шакиров Р.С.¹, Прудников П.В.¹

¹) ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
E-mail: roman_shakirovv@mail.ru

INVESTIGATION OF THE EFFECT OF DEFECTS AND ARTIFICIAL STRUCTURES ON HYSTERESIS IN MULTILAYER NANOSTRUCTURES

Shakirov R.S.¹, Prudnikov P.V.¹

¹) Omsk State University named F.M. Dostoevsky

The influence of two different types of structural defects on hysteresis in multilayer structures consisting of two symmetrical ferromagnetic films separated by a non-magnetic metal film has been studied.

Исследование гистерезисных эффектов [1] в мультислойных структурах [2], состоящих из сверхтонких ферромагнитных [3] пленок, которые разделены антиферромагнитным металлом, имеют довольно высокую актуальность. Подобные структуры называются синтетическими антиферромагнетиками и хорошо себя показывают в устройствах хранения информации. Одним из характерных свойств ферромагнитных материалов является магнитный гистерезис который проявляется как при квазистатическом, медленно протекающем во времени перемагничивании, так и при динамическом, «быстром» перемагничивании.

За последние 40 лет индустрия магнитной записи научилась намеренно вводить тщательный беспорядок в структуры. Целью введения контролируемого беспорядка является получить желаемые магнитные свойства и поведение петли гистерезиса. Активные исследования в данном направлении продолжаются с целью увеличения объема памяти устройств хранения информации.

В данной работе было исследовано влияние точечных дефектов на поведение петли гистерезиса в мультислойной магнитной структуре, состоящих из двух симметричных ферромагнитных пленок с толщиной $N = 4$ МС (Монослой) ферромагнитных кубических-пленок. Значения обменных интегралов задавались как $J_1/k_B * T = 1$, а $J_2/J_1 = -0.3$. Температура системы измеряется при этом в единицах обменного интеграла J_1/k_B и принимает значение $T = 0.8$.

Было показано, что при $N = 4$ у нас появляется скачкообразное изменение намагниченности, из-за создания отдельных кластеров, которым требуется куда большие поля для перемагничивания нежели для систем без дефектов.

а конкретный состав был выбран на основе предварительных экспериментов. Аттестация структурного состояния плёнок проведена на рентгеновском дифрактометре Pananalitical. Для измерений магнитных свойств использовались вибромагнитометр LakeShore, измерительный комплекс PPMS DynaCool 9T и Керр-магнитометр EvicoMagnetics.

Характеристика свойств слоя $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}$ проводилась по гистерезисным свойствам индикаторного слоя $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$. На рисунке 1 для плёнок с разными значениями L приведены температурные зависимости поля смещения центра петли гистерезиса (поле обменного смещения) $H_e(T)$ и коэрцитивной силы $H_c(T)$ этого слоя. Их анализ позволяет сделать заключение о наличии антиферромагнитного упорядочения в слое $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}$ при температурах, значительно превышающих комнатную температуру, и зависимости от толщины эффективности его взаимодействия с прилегающим ферромагнитным слоем. Последнее может быть связано с толщинными изменениями в параметрах микроструктуры антиферромагнитного слоя или с его неоднородностью, которая также изменяется с толщиной. С привлечением данных по структуре плёнок проведена оценка вероятности реализации этих механизмов.

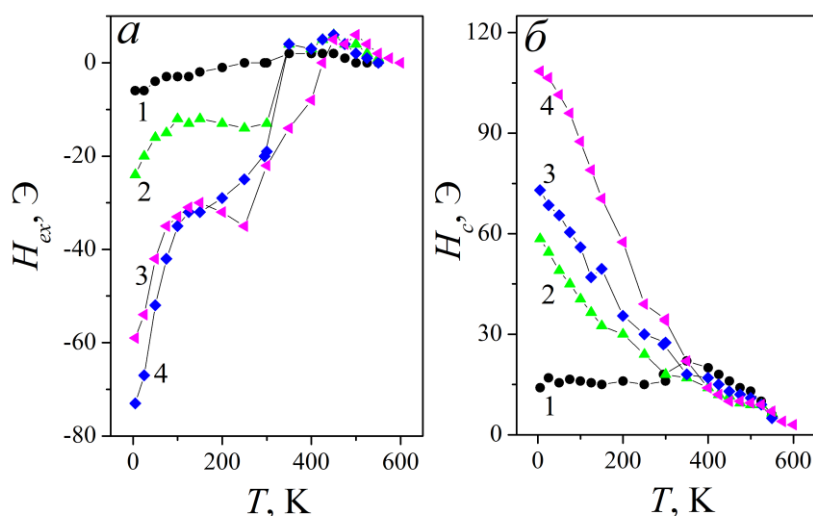


Рис. 1. Температурные зависимости поля обменного смещения (а) и коэрцитивной силы (б) в плёнках $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ с толщиной слоя $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}$ 20 (кривая 1), 40 (кривая 2), 60 (кривая 3) и 100 (кривая 4) нм

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №22-22-00814

1. O'Grady K. et al. Anisotropy in antiferromagnets //Journal of Applied Physics. – 2020. – Т. 128. – №. 4. – С. 040901
2. Feng W. et al. Structural and magnetic phase diagrams of epitaxial Cr–Mn alloy thin films //Journal of Applied Physics. – 2010. – Т. 108. – №. 7. – С. 073915.

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО СЛОЯ $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{80}$ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕЖСЛОЙНОЙ СВЯЗИ В ПЛЁНКАХ $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{80}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$

Северова С.В.¹, Фещенко А.А.¹, Москалев М.Е.¹, Лепаловский В.Н.¹,
Горьковенко А.Н.¹, Васьковский В.О.^{1, 2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н.Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург,
Россия

E-mail: severova.sveta.severova@yandex.ru

EFFECT OF THE THICKNESS OF THE ANTIFERROMAGNETIC $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{80}$ LAYER ON THE PROPERTIES OF $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{80}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ FILMS

Severova S.V.¹, Feshchenko A.A.¹, Moskaev M.E.¹, Lepalovskij V.N.¹,
Gorkovenko A.N.¹, Vas'kovskiy V.O.^{1, 2}

¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterin-
burg, Russia

The paper considers the magnetic properties and structure of Ta / $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}$ / $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ / Ta films. The dependences of the main magnetic characteristics of the films are obtained and interpreted. Their structure has been studied.

Долгое время антиферромагнитный сплав Ir-Mn являлся основным материалом для устройств спинтроники благодаря хорошей коррозионной стойкости и термической стабильности функциональных свойств, реализующейся вследствие высокой магнитной анизотропии [1]. Однако Ir является редким элементом, что ограничивает экономическую эффективность производства устройств на основе его сплавов. В настоящее время актуальной задачей является поиск антиферромагнитных сплавов, в которых могли бы оптимальным образом сочетаться технические и коммерческие достоинства. Определённые перспективы в решении этой задачи могут быть связаны с материалами на основе антиферромагнитного сплава Cr-Mn [2]. Однако решение этой задачи требует расширения знаний о свойствах сплава в плёночном состоянии. Данная работа посвящена изучению влияния толщины на структуру и магнитные свойства пленок системы $\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{80}/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$.

Образцы для исследования представляли собой многослойные плёнки Ta(5)/ $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}(\text{L})/\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}(10)/\text{Ta}(5)$ и были получены методом магнетронного распыления на покровных стёклах Corning. Слои Ta и $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ фиксированной толщины, значения которой в нанометрах указаны в структурной формуле в скобках, играли вспомогательную роль и выполняли соответственно защитную и индикаторную функции. Толщина основного слоя $\text{Cr}_{80}\text{Mn}_{20}$ варьировалась в пределах 20 - 120 нм,

Показано, что для всех образцов параметры температурного смещения полос ОП с энергиями 2.16–2.70 эВ согласуются с данными для объемного фосфида индия. Это подтверждает связь соответствующих переходов с ядром InP. Полосы с энергиями 3.89–4.70 эВ соответствуют поглощению оболочки ZnS. Смещение указанных полос для серии образцов в виде растворов и пленок КТ свидетельствует о влиянии параметров покрытий. Анализ механизмов тушения экситонной эмиссии в рамках гауссова распределения энергии активации также указывает на связь величины барьера с толщиной полупроводниковой оболочки ZnS.

1. Savchenko S.S., Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., Opt Mater Express, 7, 354 (2017)
2. Savchenko S.S., Weinstein I.A., Nanomaterials, 9, 716 (2019)
3. Savchenko S.S., Vokhmintsev A.S., Weinstein I.A., J Lumin, 242, 118550 (2022)

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ ОБОЛОЧКИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ InP/ZnS

Савченко С.С.¹, Вохминцев А.С.¹, Вайнштейн И.А.¹

¹) НОЦ НАНОТЕХ, УрФУ, Екатеринбург, Россия
E-mail: s.s.savchenko@urfu.ru

EFFECT OF SHELL THICKNESS ON OPTICAL PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR InP/ZnS NANOCRYSTALS

Savchenko S.S.¹, Vokhmintsev A.S.¹, Weinstein I.A.¹

¹) NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Four samples of biocompatible InP quantum dots coated with a ZnS shell and different organic stabilizers were studied. A shift of a ZnS optical absorption band depending on coating parameters is observed. Exciton luminescence quenching appears to be governed by a shell thickness.

Фосфид индия представляет собой один из перспективных материалов для создания экологически безопасных квантовых точек (КТ), которые могут широко применяться для создания дисплеев и систем освещения, а также в биомедицинской отрасли в качестве меток и визуализирующих агентов, где исключено использование излучателей с ионами тяжелых металлов [1,2,3]. Для повышения эффективности люминесценции нанокристаллы покрывают полупроводниковой оболочкой с более широкой запрещенной зоной. Кроме того, наличие оболочки повышает технологичность КТ, делая их более устойчивыми к изменению внешних условий. При этом стабильность раствора и химические свойства определяются внешним органическим покрытием. В настоящей работе представлен анализ оптического поглощения (ОП) и фотолюминесценции (ФЛ) ряда образцов InP/ZnS с различными параметрами оболочек.

Исследовались четыре водных коллоидных раствора КТ, имеющих трехслойную структуру: ядро из InP, оболочка из ZnS и стабилизирующее покрытие. Для образцов КТ-1 и КТ-2 в качестве покрытия использовалась модифицированная полиакриловая кислота, а для КТ-3 и КТ-4 – гетеробифункциональный полимер поливинилпирролидона. Средний размер ядра InP в соответствии с оценкой по положению первой экситонной полосы поглощения составлял 2.1 (КТ-1), 2.3 (КТ-2), 2.0 (КТ-3) и 2.6 (КТ-4) нм. Спектры ОП и ФЛ изучались для растворов и пленок КТ при комнатной температуре, а также в диапазоне 6.5-296 К. Температура образцов регулировалась с помощью гелиевого криостата Janis CCS-100/204N, оснащенного контроллером LakeShore Model 335. Регистрация спектров поглощения выполнялась с помощью спектрофотометра Shimadzu UV-2450. Люминесцентный сигнал записывался посредством спектрографа Shamrock SR-303i-B и ПЗС-матрицы NewtonEM DU970P-BV-602 производства Andor.

[1, 2]. Анализ литературы по оксидным и силикатными соединениями с ионами группы железа показал, что ПП с максимумами при 400-550 нм, связаны с дырочными центрами окрасок (ЦО), которые обусловлены локализацией дырок на ионах кислорода, смежных с катионными вакансиями. Сопоставление спектров γ -облученных и n^0 - γ -облученных образцов показало, что при реакторном облучении создаются дополнительные структурные дефекты типа: вакансии кислорода $\equiv\text{Si}-\square-\text{Si}\equiv$, немостиновый атом кислорода (НАК) $\equiv\text{Si}-\text{O}-$. Анализ разложения спектров ДО на гауссианы в видимой области спектра показал, что в видимой области спектра образуются различные дырочные центры типа: $-\text{O}-\text{Me}$ (Me- металл, катион). Обсуждаются возможные механизмы образование дефектов.

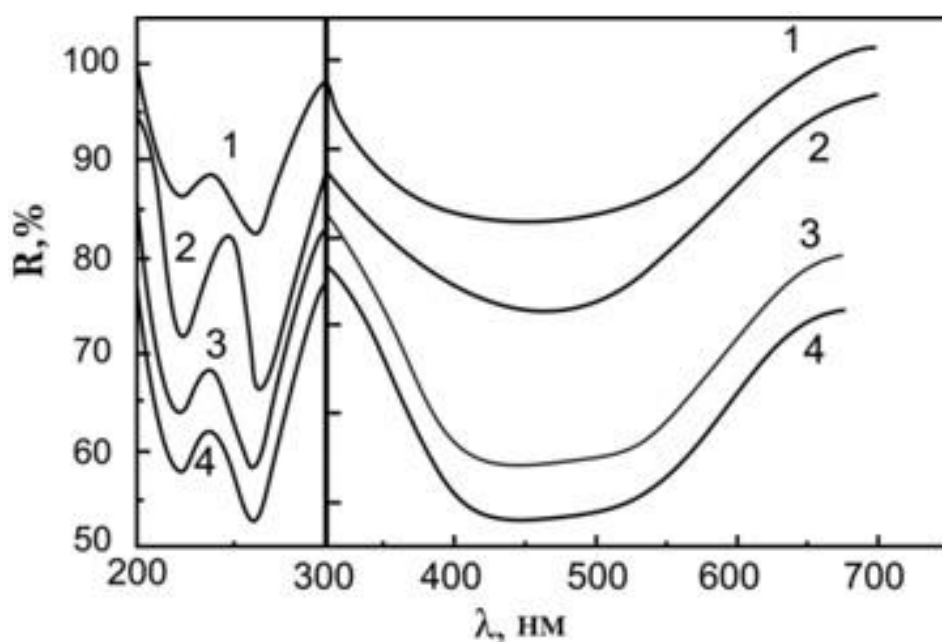


Рис. 1. Спектры ДО облученных образцов керамики СНЦ: 1- $2 \cdot 10^6$ Р ($1,76 \cdot 10^6$ рад); 2- 10^9 Р ($8,8 \cdot 10^8$ рад); 3- $1,5 \cdot 10^{10}$ Р ($1,32 \cdot 10^{10}$ рад); 4- 10^{19} н/см²

1. Бреховских С.М., Тюлькин В.А. Радиационные центры в неорганических стеклах. Москва: Энергоатомиздат. 1988. 200с
2. Силинь А.Р., Трухин А.Н. Точечные дефекты и элементарные возбуждения в кристаллическом и стеклообразном SiO_2 . Рига: Зинатне. 1985. 242 с

ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ОБЛУЧЕННОЙ СТЕАТИТОВОЙ КЕРАМИКИ СНЦ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Нуритдинов И.¹, Саидахмедов К.Х.¹, Эсанов З.У.¹, Мажидов Х.М.¹,
Ирисов Ш.¹

¹) ИЯФ АН РУз

E-mail: skhahramon@yandex.ru

INVESTIGATION OF RADIATION DEFECTS IN IRRADIATED SNC STEATITE CERAMICS BY OPTICAL SPECTROSCOPY

Nuritdinov I.¹, Saidakhmedov Kh.H.¹, Esanov Z.U.¹, Mazhidov Kh.M.¹,
Irisov Sh.¹

¹) INP AS RUz

Radiation defects formed in steatite ceramics of SNC irradiated with high doses of γ - and reactor no- γ -irradiation were studied by the method of diffuse reflection. During no- γ -irradiation of the reactor, in comparison with γ -irradiation, additional structural defects are formed.

В атомной энергетике растёт потребность в материалах, пригодных для использования в полях повышенной радиации. Кроме того, стоит задача более рационального использования уже существующих материалов в экстремальных условиях. В этом аспекте керамические диэлектрики занимают особое место, в том числе магнезиальная керамика на основе MgSiO_3 , т.е. стеатитовая керамика. Однако радиационные процессы в керамических материалах исследованы слабо по сравнению с другими диэлектриками. Поэтому изучение радиационно-стимулированных процессов в керамических материалах является актуальным как с научной, так и с практической точки зрения. Задачей настоящей работы являлось изучение методом диффузного отражения (ДО) природы образующихся дефектов под воздействием высоких доз γ -излучения изотопа Co^{60} , и смешанного реакторного n^0 - γ -облучения. После γ -облучения в спектрах ДО наблюдаются полосы дополнительного поглощения (ПДП) в УФ области с максимумами при $\lambda=220$ и 260 нм и широкая полоса поглощения (ПП), простирающаяся до 700 нм с максимумами при $400\div 500$ нм. Интенсивности, выше указанных ПП увеличивались с ростом дозы γ -облучения (рис.1, кр.1-3). После n^0 - γ -облучения реактора в спектрах ДО появляются аналогичные ПП, которые наблюдались в γ -облученных образцах, но интенсивность полос была выше по сравнению с γ -облученными (см. рис. 1, крив. 4). Литературные данные показали [1, 2], что центры окраски (ЦО), поглощающие свет в области при $\lambda=220$ и 260 нм, наблюдались в кварце, кварцевых и силикатных стеклах при облучении ионизирующим излучением. Полоса поглощения (ПП) при $\lambda=220$ обусловлена трехкоординированным атомом кремния, захватившим электрон ($\equiv\text{Si}^{3+}$). ПП при $\lambda=260$ нм обусловлена ионами железа Fe^{3+} .

$\text{\AA}$, $b = 5.920 \pm 0.004 \text{ \AA}$, $c = 4.700 \pm 0.004 \text{ \AA}$ [4]. Анализ концентрационных зависимостей параметров кристаллической структуры $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ показал, что с увеличением содержания кобальта от $x = 0.8$ до $x = 1$ наблюдается анизотропный рост a , b , c . Наибольшее изменение от концентрации (x) испытывает параметр a , остальные структурные параметры (координаты ионов) $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$ близки к уточненным ранее параметрам $\text{LiNi}_{0.2}\text{Co}_{0.8}\text{PO}_4$ [5] и LiCoPO_4 . Линейный характер концентрационных зависимостей параметров a , b , c соединений $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ подчиняется закону Вегарда.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-60011

1. Semkin M.A., et al. Magnetic phase transitions in the $\text{LiNi}_{0.9}\text{M}_{0.1}\text{PO}_4$ ($M = \text{Co}, \text{Mn}$) single crystals // *Physica Scripta* 2022. V. 97. P. 025707.
2. Kartchickrabhu S., et al. Electrochemical performances of $\text{LiNi}_{1-x}\text{Mn}_x\text{PO}_4$ ($x = 0.05\text{--}0.2$) olivine cathode materials for high voltage rechargeable lithium ion batteries // *Appl. Surf. Sci.* 2018. V. 449. P. 435–444.
3. Urusova N.V., et al. Analysis of migration maps and features of magnetic properties of $\text{LiNi}_{0.9}\text{M}_{0.1}\text{PO}_4$ ($M = \text{Co}, \text{Mn}$) single crystals // *J. All. Comp.* 2019. V. 781. P. 571–581.
4. Rissouli K., et al. Crystallochemical and magnetic studies of $\text{LiM}_{1-x}\text{M}'_x\text{PO}_4$ ($M, M' = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}; 0 \leq x \leq 1$) // *Ann. Chim. Sci. Mat.* 1998. V. 23. P. 85–88
5. Ромашко П.Е., Сёмкин М.А. Особенности кристаллической структуры соединения $\text{LiNi}_{0.2}\text{Co}_{0.8}\text{PO}_4$ // Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021», секция «Физика» (Москва (on-line), 12-23 апреля 2021): тезисы докладов. МГУ. 2021. С. 62.

АТТЕСТАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$

Ромашко П.Е¹, Семкин М.А^{1, 2}

¹) Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия

²) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: polina.romashko.2014@mail.ru

REFINEMENT OF THE CRYSTAL STRUCTURE $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$

Romashko P.E¹, Semkin M.A^{1, 2}

¹) Institute of Natural Sciences and Mathematics UrFU, Yekaterinburg, Russia

²) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

The X-ray diffraction measurement has been carried out to study the $\text{Li}(\text{Ni},\text{Co})\text{PO}_4$ prepared by the glycerol-nitrate synthesis method. An expansion of the cell volume depends on concentration of the Co-ions and is anisotropic: a, b, c parameters are increases and all obey the Vegard's law.

Соединения $\text{Li}(\text{Ni},\text{Co})\text{PO}_4$, с одной стороны, интересны с фундаментальной точки зрения они относятся к классу магнитоэлектрических материалов и обладают антиферромагнитным упорядочением при низких температурах, ниже 20 К [1]. С другой стороны, с прикладной точки зрения литиевые ортофосфаты представляют интерес в качестве перспективных катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов. Чтобы повысить проводимость таких материалов, применяют, например, процедуры легирования и поиска оптимальной структуры, модификацию поверхности электрода, и другие способы физико-химического воздействия [2].

Целью нашей работы является синтез стехиометрического состава $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$ и проведение его структурной аттестации. Уточненные параметры кристаллической структуры $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ играют важную роль при описании остальных физико-химических свойств литиевых ортофосфатов [3].

Поликристаллический образец $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$ был получен глицерин-нитратным методом синтеза. Рентгеноструктурная аттестация была выполнена на дифрактометре высокого разрешения Advance D8 ($\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$). Описание рентгенограммы методом Ритвельда проведено в программе Fullprof Suite, визуализация кристаллической структуры выполнена в программе VESTA.

Кристаллическая структура соединений $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ описывается орторомбической пространственной группой Pnma. Ионы Li занимают позицию 4a с координатами (0; 0; 0), ионы Ni, Co и P занимают позиции 4c (x; 0.25; z), а ионы O расположены в двух узлах 4с и позиции 8d (x; y; z). Результаты рентгеноструктурного анализа $\text{LiNi}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{PO}_4$: уточнены параметры кристаллической структуры, размеры элементарной ячейки $a = 10.190 \pm 0.002 \text{ \AA}$, $b = 5.915 \pm 0.001 \text{ \AA}$, $c = 4.699 \pm 0.001 \text{ \AA}$, близки с известными в литературе для LiCoPO_4 $a = 10.213 \pm 0.005$

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютеров МВС-10П и МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН». Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № ГСГК-0064/21. Проект реализуется победителем Конкурса на предоставление грантов преподавателям магистратуры благотворительной программы «Стипендиальная программа Владимира Потанина» Благотворительного фонда Владимира Потанина.

1. K. A. Romanova, A. V. Kremleva and Yu. G. Galyametdinov, Int. J. Quantum Chem., V. 121, e26569 (2021).

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III) В КАЧЕСТВЕ КОМПОНЕНТОВ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Романова К.А.¹, Галяметдинов Ю.Г.¹

¹) Казанский национальный исследовательский технологический университет
E-mail: ksenuya@mail.ru

THEORETICAL SIMULATION OF THE EMISSION EFFICIENCY OF MESOGENIC EUROPIUM(III) COMPLEXES IN OPTOELECTRONIC MATERIALS

Romanova K.A.¹, Galyametdinov Yu.G.¹

¹) Kazan National Research Technological University

Relationships between liquid-crystalline properties, energies of the excited states, intra-molecular energy transfer rates, and quantum yields of some mesogenic europium(III) complexes were studied. Their application with conductive conjugated polymers in optoelectronic materials was evaluated.

Мезогенные комплексы европия(III) (Eu(III)) с уникальным строением, отличительными жидкокристаллическими (ЖК), оптическими и магнитными свойствами выступают в роли компонентов перспективных функциональных материалов для оптоэлектроники и биомедицины [1]. Наличие неоднозначной взаимосвязи между их строением, структурой и свойствами, зависящими от различных факторов, осложняет практическое применение данных соединений. Вероятность заранее предугадать их оптические и ЖК свойства на стадии синтеза крайне невелика. В данной работе были выявлены теоретические подходы к созданию функциональных материалов на основе ряда мезогенных комплексов Eu(III) с β -дикетонами и основаниями Льюиса, а также некоторых проводящих полимеров. Изучены взаимосвязи между молекулярным строением, природой координационных полиэдров, параметрами полиэдров Вороного-Дирихле, эффективностью люминесценции и ЖК свойствами комплексов Eu(III). На основании рассчитанных энергий возбужденных состояний были определены основные каналы внутримолекулярного переноса энергии в комплексах Eu(III), рассчитаны скорости переноса энергии и значения квантового выхода люминесценции. Произведена оценка эффективности межмолекулярного переноса энергии в оптоэлектронных материалах на их основе и совместного применения с некоторыми проводящими полимерами. В ходе работы было установлено, что ЖК свойства мезогенных комплексов Eu(III) в основном определяются их лигандным окружением, магнитные свойства зависят от природы координационного полиэдра, на оптические свойства оказывают влияние оба этих фактора.

100 (НИИ СТТ, г. Смоленск) были измерены следующие магнитные свойства: квазистатические кривые намагничивания, петли магнитного гистерезиса в магнитных полях от 100 А/м до 2000 А/м. Погрешность определения физических величин не превышала 3 %.

ТО исследуемых образцов проводились в печи СУОЛ в вакууме при температуре 900 °С и 1000 °С с длительностью изотермической выдержки 1 час.

На рисунке представлены кривые намагничивания (рис.1 а) и петли гистерезиса при $H=2$ кА/м (рис.1б) образцов в исходном состоянии и после ТО. Как видно из рисунка 1а, B_{2000} после отжига при 900 °С возросла до 0,82 Тл, после ТО 1000 °С до 0,9 Тл. Соответственно увеличилась остаточная индукция (рис. 1б).

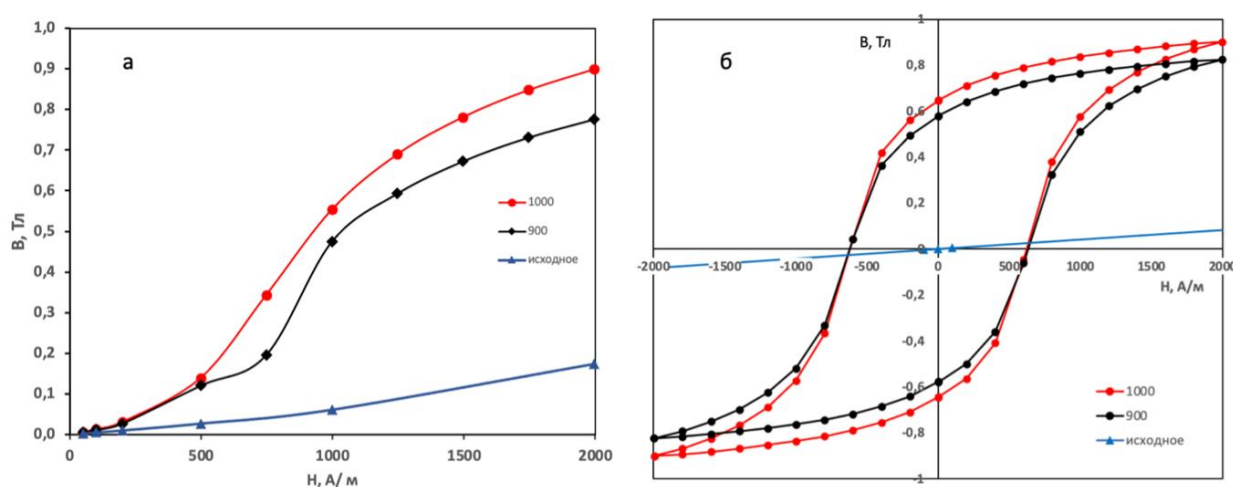


Рис. 1. а) Зависимость индукции магнитного поля от внешнего магнитного поля; б) Петли гистерезиса для $H=2$ кА/м для кольцевых образцов в исходном состоянии и после ТО при 900 °С и 1000 °С.

В результате проделанной работы можно сделать вывод о том, что для улучшения магнитных свойств образцов, полученных методом 3Д-печати, необходимо применять термические обработки. Повышение температуры изотермической выдержки приводит к более существенному улучшению свойств, вероятно, из-за укрупнения кристаллических зерен.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 21-72-10104.

1. А.Р. Сафин, Ranjan Kumar Behera, Аддитивное производство и оптимизация топологии магнитных материалов для электрических машин // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. V. 23. 2021. P. 14-33
2. Zhukov A.S., Barakhtin B.K., Bobyr V.V., Kuznetsov P.A. and Shakirov I.V., The experience of magnets manufacturing from metal powder using a laser // Journal Of Physics: Conference Series. V. 14. 2021 P. 012122

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЬЦЕВЫХ ОБРАЗЦОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ 3D-ПЕЧАТИ ИЗ ПОРОШКА ЖЕЛЕЗА, ПОСЛЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК

Разуева Д.А.¹, Мальцева В.И.¹, Андреев С.В.¹, Волегов А.С.¹, Степанова Е.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: d_razueva@mail.ru

MAGNETIC CHARACTERISTICS OF TOROIDAL SAMPLES PRODUCED BY 3D-PRINTING TECHNOLOGY FROM IRON POWDERS AFTER ANNEALING

Razueva D.A.¹, Maltseva V.I.¹, Andreev S.V.¹, Volegov A.S.¹, Stepanova E.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Influence of the heat treatment on the magnetic characteristics of toroidal samples produced by direct metal laser sintering were investigated. Additional high-temperature heating allows to achieve acceptable magnetic parameters, magnetization increases with the raising of the annealing temperature.

Аддитивные технологии, используемые при производстве магнитов, приобрели широкое распространение благодаря возможности получать магниты более сложной геометрической формы. Гибкость технологий аддитивного производства для изготовления изделий сложной геометрии из порошков магнитных металлов открывает уникальные возможности для новых концепций дизайна и повышения удельной мощности машин без значительного увеличения стоимости производства [1].

Так, например, в работе [2] исследовались образцы, изготовленные в форме кубов из пермаллоя-80 методом селективного лазерного спекания. В ходе исследования было установлено, что благодаря термическим обработкам удалось достичь существенного улучшения магнитных характеристик образцов за счет уменьшения пустот и межзеренных границ. Также было установлено, что магнитные свойства полученных образцов близки по величине к магнитным свойствам образцов, полученных традиционным способом.

В настоящей работе было проведено исследование влияния термических обработок (ТО) на магнитные свойства образцов в форме торов высотой 1 см и различными внешними и внутренними диаметрами (от 1 до 3 см), полученные из порошка карбонильного железа посредством аддитивной системы селективного лазерного плавления Orlas Creator RA с мощностью лазерного луча 158 Ватт и скоростью прохождения лазерного луча по поверхности порошка 1000 мм/с. На полученных торах в исходном состоянии и после ТО на комплексе ММКС-0.5-

с $E \approx 300$ кэВ и $\tau = 80$ нс. Измерения термолюминесценции (ТЛ) осуществлялись в режиме линейного нагрева со скоростью 2 °С/с в спектральном диапазоне $200 - 365$ нм. Для возбуждения ТЛ нами был использован тестовый пучок электронов (с $E = 130$ кэВ и дозой 15 кГр), генерируемый на ускорителе электронов РАДАН-ЭКСПЕРТ.

Кривые ТЛ образцов керамик, предварительно не облученных ИИП, состояли из двух пиков А ($160 - 173$ °С) и Б ($315 - 333$ °С). По мере роста температуры отжига интенсивность пика А возрастала, а пика Б – уменьшалась. Наиболее выраженное изменение интенсивностей пиков А и Б наблюдалось при $T_{\text{отж}} > 1300$ °С, когда резко увеличивался средний размер зерна исследуемых образцов.

Было обнаружено, что предварительное облучение ИИП приводило к изменению структуры кривой ТЛ, как показано на рисунке. Доминирующим пиком становился пик А, причем наблюдалось значительное увеличение интенсивности ТЛ. В работе также обсуждается связь изменений ТЛ свойств керамик $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, характеризующихся разным размером зерна, с генерацией в них радиационных дефектов под действием ИИП.

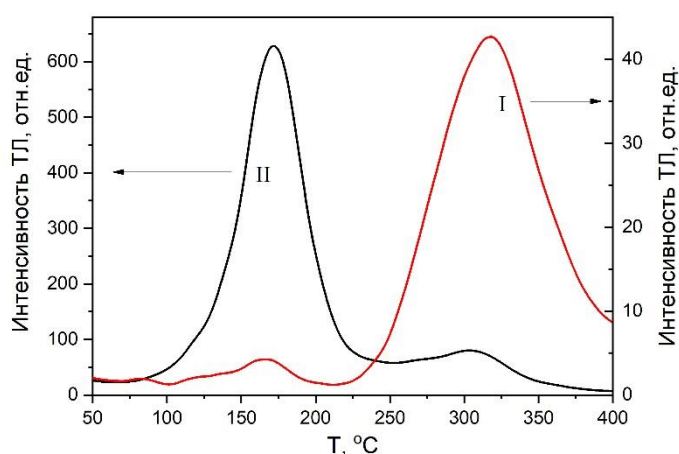


Рис. 1. Кривые ТЛ отожжённой при 1200 °С исходной наноструктурной керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (I) и предварительно облученной С+/Н+ ИИП с $W = 2$ Дж/см² (II)

1. Ibarra A., Hodgson E. R., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 218, 29–35, (2004).
2. Yukihiro E. G., McKeever S. W. S., Optically stimulated luminescence: fundamentals and applications, John Wiley & Sons, (2011).
3. Andrievskii R. A., Nanotechnologies in Russia, 6, 357–369, (2011).
4. Ghyngazov S., Pavlov S., Kostenko V., Surzhikov A., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 434, 120–123, (2018).

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРНЫХ КЕРАМИК Al_2O_3 , ОБЛУЧЕННЫХ ИМПУЛЬСНЫМИ ИОННЫМИ ПУЧКАМИ C^+/H^+

Рамазанова Г.Р.¹, Ананченко Д.В.¹, Никифоров С.В.¹, Баталов Р.И.²,
Баязитов Р.М.², Новиков Г.А.²

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Федеральный ис-
следовательский центр "Казанский научный центр РАН", Казань, Россия
E-mail: Ramazanova_Guzallia@mail.ru

LUMINESCENT PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED Al_2O_3 CERAMICS IRRADIATED WITH C^+/H^+ PULSED ION BEAMS

Ramazanova G.R.¹, Ananchenko D.V.¹, Nikiforov S.V.¹, Batalov R.I.², Bayazitov
R.M.², Novikov H.A.²

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan,
Russia

The luminescent properties of nanostructured $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ceramics irradiated with C^+/H^+ pulsed ion beams have been studied. The relationship between changes in the TL properties of ceramics and the formation of radiation defects under irradiation is discussed.

Материалы на основе широкозонных оксидов (Al_2O_3 , BeO , MgO , ZrO_2 и др.), обладающих высокой $T_{\text{пл}}$, механической, химической и радиационной стойкостью, являются перспективными для применения в области термоядерной энергетики [1]. Кроме того, указанные материалы используются в условиях сильных радиационных полей в качестве сцинтилляторов и люминесцентных дозиметров [2], что накладывает особые требования к радиационной стойкости. Особый интерес привлекает класс наноструктурных модификаций широкозонных оксидов, так как они обладают повышенной радиационной стойкостью по сравнению с их объемными аналогами за счет эффективной аннигиляции радиационных дефектов на границах наночастиц [3]. Создание радиационно-индуцированных дефектов в таких материалах возможно за счет облучения мощным импульсным ионным пучком (ИИП), которое приводит к плавлению и рекристаллизации приповерхностных слоев материала [4].

Целью данной работы является исследование люминесцентных свойств наноструктурного $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, облученного импульсными ионными пучками C^+/H^+ .

В ходе работы исследовались образцы керамики $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с разным размером зерна, который изменялся за счет варьирования температуры отжига на воздухе. Радиационно-индуцированные дефекты в керамике создавались на установке ТЕМП-1 путем облучения мощными ИИП C^+/H^+ (~ 80% из C^+ , на ~ 20% из H^+)

3. М.С. Аникин, Е.Н. Тарасов, М.А. Сёмкин, А.С. Волегов, Е.В. Потапов, Н.В. Селезнева, А.В. Зинин. Магнитные и магнитотепловые свойства соединений $\text{Nd}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$, $x \leq 0.16$ // Челябинский физико-математический журнал, 2021г., том 6, вып. 2, с. 217-225. DOI: 10.47475/2500-0101-2021-16207
4. M.S. Anikin, E.N. Tarasov, N.V. Kudrevatykh, D.S. Neznakhin, M.A. Semkin, N.V. Selezneva, S.V. Andreev, A.V. Zinin. Magnetic and magneto-thermal properties of ferrimagnetic alloys $(\text{Er}_{1-x}\text{Y}_x)(\text{Co}_{0.84}\text{Fe}_{0.16})_2$ and their dependence on the orientations of resultant and sublattice magnetizations // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2021. – V. 33. – P. 275801. DOI: 10.1088/1361-648X/abfc17
5. S.H. Kilcoyne The evolution of magnetic correlations and onset of magnetic order in $\text{Y}(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ Physica B 276-278 (2000) 660-661

Однофазность синтезированных образцов $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$, где $x = 0.14, 0.16, 0.20$, подтверждена методами рентгеноструктурного и термоманитного анализа. Значения T_C составили 135, 200 и 285 К, соответственно.

На рисунке 1 представлены определенные температурные зависимости изменения магнитной части энтропии приведенная к значению ΔS_m в T_C ($\Delta S_m/\Delta S_{T_C}(T)$). Из рисунка 1 следует, что с ростом содержания железа максимальные значения ΔS_m (ΔS_{max}) увеличиваются, а величина ΔT_{FWHM} , характеризующая разность между максимальной и минимальной температурами на половине максимальной высоты пика $\Delta S_m(T)$, уменьшается. При этом значения ΔS_m в окрестности низкотемпературного максимума так же уменьшается с увеличением содержания железа.

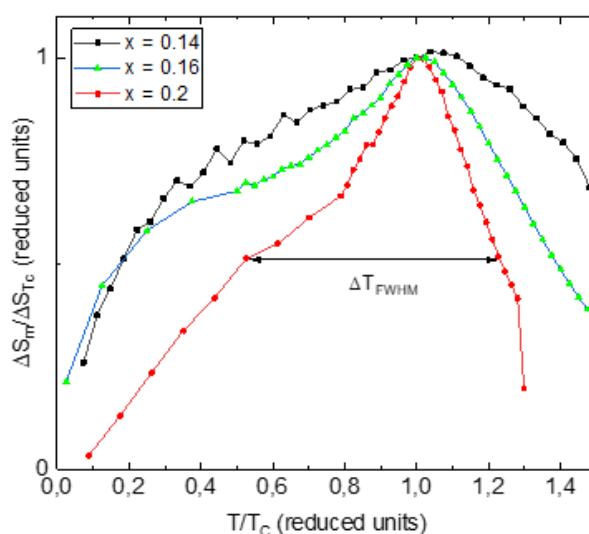


Рис. 1. Зависимости $\Delta S_m/\Delta S_{T_C}(T)$ для соединения $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$ в магнитном поле 70 кЭ

Из полученных результатов следует, что пик МКЭ сужается при увеличении концентрации железа на образцах с иттрием, что связано с усилением d-d обменного взаимодействия, что приводит к исчезновению низкотемпературной аномалии вызванной парамагнетизмом части атомов кобальта.

Работа выполнена при поддержке Государственного контракта FEUZ-2020-0051 между УрФУ и Министерством высшего образования РФ

1. Anikin M.S., Tarasov E.N., Kudrevatykh N.V., Inishev A.A., Semkin M.A., Volegov A.S., Zinin A.V. Features of magnetic and thermal properties of $R(Co_{1-x}Fe_x)_2$ ($x \leq 0.16$) quasibinary compounds with $R = Dy, Ho, Er$ // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2016. – V. 418. – PP. 181–187
2. E. Belorizky, M.A. Fremy, J.P. Gavigan, D. Givord, H.S. Li Evidence in rare-earth (R)-transition metal (M) intermetallics for a systematic dependence of R-M exchange interactions on the nature of the R atom // J. Appl. Phys. 1987. V. 61. P. 3971.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЙ $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$

Аникин М.С.¹, Тарасов Е.Н.¹, Рагозина М.В.¹, Потапов Е. В.¹,
Незнахин Д.С.¹, Зинин А.В.¹

¹) Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: maskim.anikin@urfu.ru

MAGNETIC PROPERTIES AND MAGNETOCALORIC EFFECT OF $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$ COMPOUNDS

Anikin M.S.¹, Tarasov E.N.¹, Ragozina M.V.¹, Potapov E.V.¹, Neznakhin D.S.¹,
Zinin A.V.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. In this paper, presents the results of a study of the temperature and field dependences (H) of magnetization (M) and magnetocaloric effect (ΔS_m) of $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$ compounds at 2 – 380 K and in magnetic fields up to 90 kOe.

Ранее при исследовании соединений $R(Co_{1-x}Fe_x)_2$ ($x = 0 - 0.16$) с тяжелыми редкоземельными элементами (R), такими как Dy, Ho, Er, было установлено, что частичное замещение Co на Fe приводит к уширению пика изотермического изменения магнитной части энтропии (ΔS_m) в область температур ниже температур Кюри (T_C) [1], т.е. образуется так называемая плато-подобная зависимость $\Delta S_m(T)$. Что авторы связали с возникновением «низкотемпературного» максимума ΔS_m образующегося при упорядочении внешним магнитным полем редкоземельной подрешетки, частично разупорядоченной из-за слабого междоузельного обменного взаимодействия R-3d. В свою очередь, при исследовании аналогичных соединений $R(Co_{1-x}Fe_x)_2$ с легким редкоземельным элементов Nd, где энергия междоузельного R-3d обменного взаимодействия намного больше [2], добавка Fe не приводила к образованию плато-подобной зависимости $\Delta S_m(T)$ [3]. Позже на соединении с «не магнитным» иттрием – $Y(Co_{0.84}Fe_{0.16})_2$ было обнаружено уширение пика изотермического изменения энтропии (ΔS_m) в области температур ниже температур Кюри [4], что авторы связали с парамагнетизмом части атомов кобальта.

В связи с чем, была поставлена задача исследования структуры, магнитных и магнитотепловых свойства соединений $Y(Co_{1-x}Fe_x)_2$, с «не магнитным» металлом $R = Y$, при концентрациях Fe (x) выше критического значения 0.1375 [5]. С целью выяснения роли кобальтовой подрешетки в образовании плато-подобной зависимости $\Delta S_m(T)$.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ МЕТОДОМ МОНТЕ- КАРЛО

Пятков А.Ю.¹, Панов Ю.Д.¹, Улитко В.А.¹

¹⁾ Уральский Федеральный Университет
E-mail: AlekseyPyatkov@yandex.ru

SIMULATION OF SPIN SYSTEMS WITH COMPETING INTERACTIONS BY THE CLASSICAL MONTE CARLO

Pyatkov A.Yu.¹, Panov Yu.D.¹, Ulitko V.A.¹

¹⁾ Ural Federal University

We performed multicanonical replica-exchange Monte-Carlo simulations for frustrated 2D Ising model with competing interactions.

Изучение свойств неупорядоченных и фрустрированных спиновых систем представляет большой интерес с фундаментальной и практической точки зрения [1]. Такие системы крайне чувствительны к различным типам взаимодействий и демонстрируют различные типы фазовых переходов при конечных температурах. При моделировании классический метод Монте-Карло (МК) сталкивается с известной проблемой “критического замедления” вблизи точки фазового перехода. Популярным решением здесь является использование репличного обменного алгоритма МК [2] при моделировании “проблемного” региона.

Мы рассматриваем модель Блюма-Капеля на квадратной решетке. Модель Блюма-Капеля позволяет смоделировать свойства некоторых купратов. При помощи репличного обменного алгоритма МК мы исследуем термодинамические характеристики данной модели вблизи трикритической точки. Исследование проводилось на больших решетках. Для ускорения расчетов алгоритм был реализован средствами языка CUDA. Для области трикритической точки [3] были получены гистограммы энергий.

Работа была выполнена при поддержке программы повышения конкурентоспособности Уральского Федерального университета (Акт 211 Правительства РФ, соглашение № 02.A03.21.0006) и Министерства образования и науки РФ, проект FEUZ-2020-0054.

1. H. T. Diep, Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
2. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, E-print archives, cond-mat/0012021.
3. M.J. Jozef Strečka, Ising model, Blume-Capel model, Mean-field theory, Effective-field, Acta Physica Slovaca. 65 (2015) 235–367

To prove this hypothesis we made calculations with rotation of magnetic moment of iron atoms position Fe_1 in two cases: rotation of one atom magnetic moment with constraining the others (one atom rotation scheme) and rotation of two iron atoms magnetic moments in position Fe_1 simultaneously as cluster with constraining the others (dimer rotation scheme). In our calculation we use Vienna Ab initio Simulation Package [5] that uses density functional theory. In our calculation we use 2x2 supercell with experimental crystal structure of bulk Fe_3GeTe_2 [4] with 16 angstrom additional space between layers to simulate monolayer structure. We calculate ground state energy for every 2.5 degree for small angles of rotation (less than 10 degree) and for every 15 degree for other angles. Our results demonstrate that rotation scheme with dimer cluster were more energy favorable. And both rotation cannot be fitted by simple $(1-\cos(\alpha))$ function. Moreover, the obtained Curie temperature is in a good agreement with the one for the full model as well as with the results of other studies.

This work was supported by the Russian Science Foundation, Grant No. 21-72-10136

1. J. L. Lado and J. Fernández-Rossier, 2D Materials 4,035002 (2017).
2. B. Huang et al, Nature 546, 270 (2017).
3. Y. Deng et al, Nature 563, 94 (2018).
4. H.-J. Deiseroth, K. Aleksandrov, C. Reiner, L. Kienle, and R. K. Kremer, European Journal of Inorganic Chemistry 2006, 1561 (2006)
5. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B54, 11169(1996).

DEVELOPING A NEW EFFECTIVE MAGNETIC MODEL OF Fe_3GeTe_2 BASED ON AB-INITIO CALCULATIONS

Pushkarev G.V.¹, Badrtdinov D. I.¹, Yakovlev, I. A.¹, Mazurenko V. G.¹,
Rudenko A. N.¹, Mazurenko V. V.¹

¹) Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, Ural Federal University,
620002 Ekaterinburg, Russia
E-mail: pushkarev.g.v@gmail.com

In our work we propose a new effective magnetic model for two-dimensional van der Waals ferromagnet Fe_3GeTe_2 . To prove its correctness we conducted ab-initio calculations as well as compared Curie temperatures using Monte Carlo simulations with the obtained parameters.

Mermin-Wagner theorem prohibit intrinsic ferromagnetism in 2D materials. Recent papers reported that magnetocrystalline anisotropy is the key that opens up the possibility of intrinsic ferromagnetism in 2D [1-3]. To study magnetic properties of 2D Fe_3GeTe_2 we construct the spin model with isotropic exchange interactions between iron ions and single-ion anisotropy. In this material two types of iron atomic positions can be distinguished: Fe_1 and Fe_2 . Two atoms of iron allocate position Fe_1 and another one allocate position Fe_2 . Due to strong nearest neighbour ferromagnetic exchange between iron atoms in position $\text{Fe}_1 \sim 114$ meV we propose that we can consider two iron atoms in position Fe_1 as effective cluster.

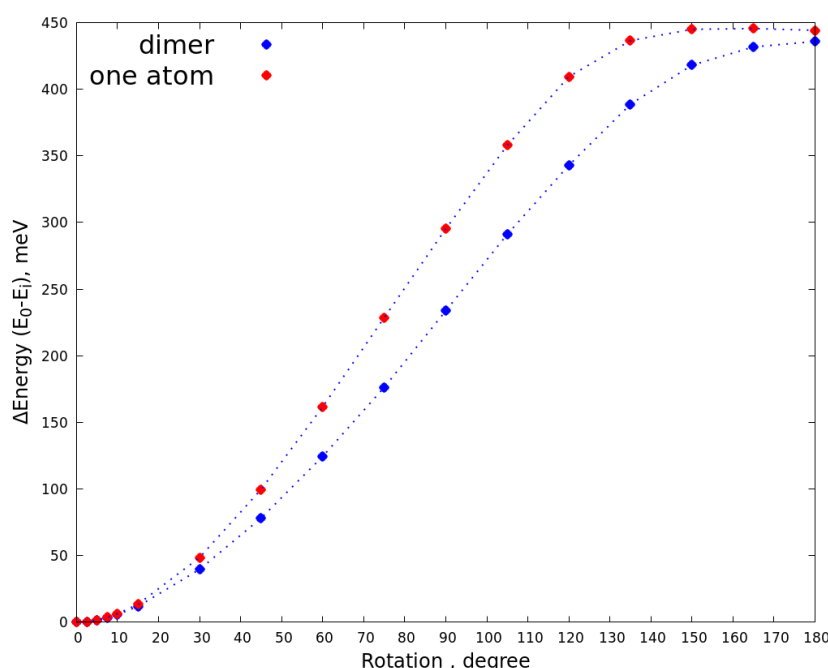


Рис. 1. Calculated energy difference between ferromagnetic ground state and energy with rotation of magnetic moments in one atom rotation scheme (red) and dimer rotation scheme (blue).

4. Яцышен В.В., Потапова И.И. Частотные спектры отражения и прохождения света для тонкой пластинки из нанокompозита / Сборник трудов XIX Международной научно-технической конференции "Физика и технические приложения волновых процессов-2021". Самара. 23-26 ноября 2021 г. / Самара: ПГУТИ, 2021. – 297 с.: с ил. ISBN 978-5-907336-25-4

Формула Максвелла-Гарнетта для диэлектрической проницаемости нанокомпозита:

$$\epsilon M(\omega) = (\epsilon_d(1+2x))/(1-x) \quad (2)$$

$$\text{где } x = (f(\epsilon_m - \epsilon_d))/(\epsilon_m + 2\epsilon_d)$$

Вычислим диэлектрическую проницаемость по формуле Бруггемана:

$$\epsilon M(\omega) = (H_B + \sqrt{(H_B)^2 + 8\epsilon_m\epsilon_d})/4 \quad (3)$$

$$H_B = (2-3f)\epsilon_d - (1-3f)\epsilon_m \quad (4)$$

Формула (3) Максвелла-Гарнетта, не описывает влияния размера наночастиц на частотную дисперсию вблизи частоты плазмонного резонанса [3].

Найдем также показатель преломления нанокомпозита в случае s-поляризации по формуле:

$$N_s = \sqrt{(\epsilon M(\omega) \epsilon_0) / (\epsilon M(\omega) + \epsilon_0)} \quad (6)$$

Выразим амплитуды прошедшей и отраженной волн через амплитуду падающей волны:

$$A_t = (2k_{zi}A_0)/(k_{z2}(g_1 - g_2) + k_{zi}(g_1 + g_2)) = T \cdot A_0 \quad (7)$$

$$A_r = ((g_1 + g_2) \cdot T - 1) \cdot A_0 = R \cdot A_0 \quad (8)$$

Для энергетических коэффициентов отражения и прохождения соответственно получим:

$$RR = |R|^2 \quad (9)$$

$$TT = S_z3/S_{zi} \quad (10)$$

Вектор Пойтинга:

$$S_{zi} = (k_{zi} \cdot c \cdot |A_0|^2) / (k_0 \cdot 8 \cdot \pi) \quad (11)$$

$$S_z3 = (k_{z3} \cdot c \cdot |A_t|^2) / (k_0 \cdot 8 \cdot \pi) \quad (12)$$

И получим окончательное выражение для энергетического коэффициента прохождения:

$$TT = S_z3/S_{zi} = (k_{z3} \cdot c \cdot |A_t|^2) / (k_{zi} \cdot c \cdot |A_0|^2) \quad (13)$$

Таким образом, при расчете комплексной диэлектрической проницаемости рассматриваемого нанокомпозитов можно сделать вывод, что подход Бруггемана является более строгим. Как видно на рисунке 1, значения ϵM , рассчитанные по формуле Максвелла-Гарнетта и по формуле Бруггемана, совпадают только при больших частотах $\omega/(\omega_p) > 1,7$, однако уже $\omega/(\omega_p) < 1,6$ эти значения начинают различаться.

Полученные выражения говорят о том, что энергетические коэффициенты для поверхностных плазмонов имеют резонансный характер.

1. Yatsyshen, V.V., Potapova, I.I., Verevkin, K.Y. Ellipsometry of Nanocomposite Layered Materials Lecture Notes in Networks and Systems, 155, pp. 258-268, (2021)
2. Johnson P.B., Christy R.W. Optical constant of the noble metals // Phys. Rev. B, V. 6. P. 4370-4379, (1972).
3. Potapova, I.I., Yatsishen, V.V. Dependence of complex dielectric permeability and complex refraction index from frequency for composite with gold nanoparticles, AIP Conference Proceedings, 2313, статья № 030026, (2020)

РАСЧЕТ ЧАСТОТНЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ НАНОКОМПОЗИТОВ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛЕЙ МАКСВЕЛЛА-ГАРНЕТТА И БРУГГЕМАНА

Потапова И.И.¹, Яцышен В.В.¹

¹) Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Волгоградский государственный университет"

E-mail: potapova.irina@volsu.ru

CALCULATION OF FREQUENCY AND ENERGY DEPENDENCIES IN RADIATION TRANSMISSION FOR NANOCOMPOSITES USING THE MAXWELL-HARNETT AND BRUEGGEMANN MODELS

Potapova I.I.¹, Yatsishen V.V.¹

¹) Federal State Autonomous Education Institution of Higher Education "Volgograd State University"

In this work, we calculated the complex permittivity for a nanocomposite with silver particles using the Maxwell-Garnett and Brueggemann models. The refractive index of the nanocomposite in the case of s-polarization and the energy reflection and transmission coefficients were calculated.

Изучение композитных материалов с наночастицами важно, так как на их поверхности возможно распространение поверхностных плазмонов [1].

В нашем докладе, опубликованном ранее, уже было доказано существование диапазона относительных частот, в котором наблюдается полное отражение света от тонкой пластины из нанокompозитного материала. В этой области нанокompозит ведет себя как резонансный диэлектрик, в котором могут возбуждаться объемные плазмон-поляритоны, характеризующиеся появлением запрещенной зоны с полным отражением [4].

В данной работе мы рассмотрим нанокompозит в виде матрицы диэлектрика с равномерно распределенными в нем наночастицами металла в форме шара диаметром много меньше длины волны и глубины проникновения поверхностных поляритонных волн в материал.

В дальнейших вычислениях мы опирались на численные данные статьи Джонсона и Кристи об оптических постоянных благородных металлов [2]. Диэлектрическая проницаемость матрицы диэлектрика принята $\epsilon_d=2,56$, плазменная частота $\omega_p=9$ эВ, релаксационная постоянная $\gamma=0,02$ эВ, ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость воздуха ($\epsilon_0=1$)

Расчет диэлектрической проницаемости металла наночастиц будем проводить исходя из приближения Друде [1]:

$$\epsilon_m(\omega)=\epsilon_0-(1/(y*(y+i*G))) \quad (1)$$

$y=\omega/\omega_p$ -нормированная частота,

$G=\gamma/\omega_p$ - нормированное затухание.

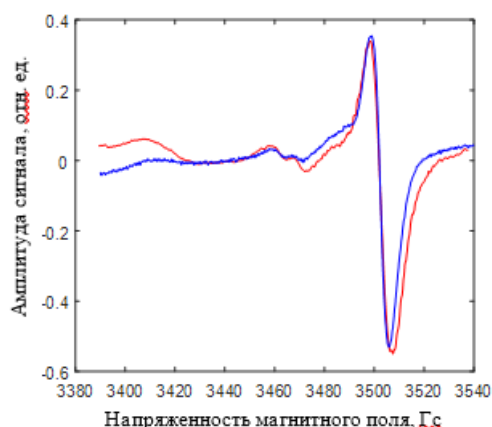


Рис. 1. Спектры ЭПР человеческого волоса (красная линия – спектр образца при $T=77\text{K}$, синяя линия – спектр образца, подвергнутого воздействию ИИ)

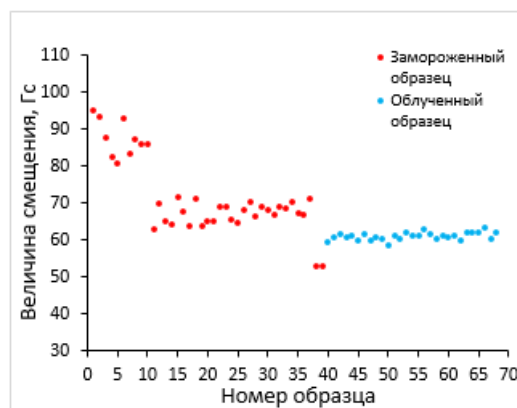


Рис. 2. График величины смещения между максимумом сигнала **а** и минимумом дублета **б**

На рис. 2 показаны результаты сравнительного анализа смещения сигнала **б** относительно **а** (фиксировалось расстояние от максимального значения сигнала **а** до минимума дублета **б**). Как видно из рисунка, величина смещения для группы образцов, подвергшихся воздействию ИИ дозой равной 40 кГр, практически не меняется и характеризуется величиной $\Delta H_{\text{max/min}} \approx 61$ Гс. Для группы образцов охлажденных до $T = 77$ К характерна величина смещения $\Delta H_{\text{max/min}} \approx 67$ Гс, однако для некоторых образцов величина смещения либо меняется в диапазоне от 80 Гс до 95 Гс, либо равна 53 Гс, что может быть связано с индивидуальными особенностями данных образцов.

Таким образом, разница между $\Delta H_{\text{max/min}}$ обеих групп составляет порядка 6 Гс, что, вероятно, может быть связано с изменением формы α -кератина под действием низких температур.

В результате проведенного исследования показано, что в меланопротеиновом волокне волоса в норме присутствуют парамагнитные центры, характеризующиеся сигналами **а** и **б**, связанными со структурой α -кератина, чувствительные к воздействию ионизирующего излучения – при облучении их интенсивность увеличивается.

Таким образом, следующим шагом в исследовании парамагнитных свойств меланопротеинового волокна человеческого волоса станет изучение природы, свойств и характеристик рассматриваемых сигналов ЭПР.

1. Мишинкина Е.А., Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф., Тезисы докладов XVII Всероссийская школа-семинар по пробелам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-2017), с. 260, (2016).
2. Минихаметова Е.А., Байтимиров Д.Р., Конев С.Ф., Иванов Д.В., Правишкина Т.А., Тезисы докладов V Международной молодежной научной конференции: Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2018, с. 179, (2018)

СИГНАЛЫ ЭПР НАБЛЮДАЕМЫЕ В МЕЛАНОПРОТЕИНОВОМ ВОЛОКНЕ ПРИ НИЗКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ И ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Подшивалов А.П.¹, Байтимиров Д.Р.¹, Конев С.Ф.¹, Иванов Д.В.²

¹) Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия

²) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН
E-mail: alexey.podshivalov@urfu.me

EPR SIGNALS IN MELANOPROTEIN FIBER AT LOW TEMPERATURE AND UNDER THE INFLUENCE OF IONIZING RADIATION

Podshivalov A.P.¹, Bajtimirov D.R.¹, Konev S.F.¹, Ivanov D.V.²

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) M.N. Miheev Institute of Metal Physics Ural Branch of Russian Academy of Sciences

In this paper we studied the EPR signals in the melanoprotein fiber at a temperature of $T = 77\text{K}$ and as a result of the exposure to ionizing radiation. These EPR signals are associated with paramagnetic centers localized in the structure of α -keratin, and their intensity increases upon irradiation.

В данной работе исследуются сигналы Электронного Парамагнитного Резонанса (ЭПР), наблюдаемые в меланопротеиновом волокне человеческого волоса при температуре $T=77\text{ K}$ и в результате воздействия ионизирующего излучения, создаваемого линейным ускорителем электронов модели УЭЛР-10-10С2.

Человеческий волос представляет собой высокоупорядоченное биоволокно, состоящее из белка кератина и биополимера меланина. В силу своих свойств – рост с одинаковой скоростью на протяжении всей жизни человека – он является ретроспективным датчиком биохимических процессов в организме. Кроме того, α -кератин волоса представляет собой природный материал, содержащий протеиновые нанотрубки внешним диаметром 10 нм, внутренним диаметром 7 нм [1], схожим по пространственной архитектуре со многими упорядоченными углеродными волокнами.

Ранее нами было показано [2], что спектр ЭПР волоса при температуре 77 К содержит сигналы в районе $g = 2.08$ (одиночный пик – а) и $g = 2.03$ (дублет с расщеплением $\Delta H = 8\text{ Гс}$ – б), как показано на рис. 1. Форма сигналов не меняется от образца к образцу. При комнатной температуре данные сигналы не наблюдаются.

При изучении радиационно-индуцированных парамагнитных центров, возникающих под воздействием ИИ, в спектре ЭПР облучённого волоса нами при комнатной температуре были обнаружены сигналы характерной формы, содержащие линии а при $g = 2.06$ и б в районе $g = 2.03$ с расщеплением $\Delta H = 8\text{ Гс}$.

Переключение мемристоров осуществлялось в биполярном режиме. Импульсы записи информации имели амплитуду 4 В, а импульсы чтения – амплитуду 0.1. Характеристика удержания того или иного состояния измерялась с интервалом 24 ч.

В импульсном режиме было достигнуто количество циклов работы более 113 тысяч. При этом отношение сопротивлений R_{HRS} / R_{LRS} на всём протяжении работы мемристоров было равно не менее $3 \cdot 10^3$. Значение R_{HRS} варьировалось от 900 кОм до 50 ГОм, а R_{LRS} – от 25 до 315 Ом. Также было показано, что мемристоры способны удерживать оба состояния сопротивления более 9 суток для значений $R_{LRS} < 40$ Ом и $R_{HRS} > 600$ кОм. Сравнение полученных данных о надёжности структуры Zr/ZrO_2 -nt/Au с литературными [5] свидетельствует о стабильности работы исследуемых мемристорных структур и возможности их использования в качестве элементов резистивной памяти.

Исследование выполнено в рамках инициативного научного проекта FEUZ-2020-0059 Минобрнауки РФ

1. I.A. Petrenyov, A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, AIP Conf. Proc. 2174, 020242 (2019).
2. A.S. Vokhmintsev, I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, I.A. Weinstein, Nanotechol. 33, 075208 (2022).
3. A.S. Vokhmintsev, R.V. Kamalov, A.V. Kozhevina, I.A. Petrenyov, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, Proc. 2018 USBEREIT, pp. 348-351 (2018).
4. I.A. Petrenyov, R.V. Kamalov, A.S. Vokhmintsev, N.A. Martemyanov, I.A. Weinstein, J. Phys. Conf. Ser. 1124, 022004 (2018).
5. K.-H. Choi, N. Duraisamy, M.N. Awais, N.M. Muhammad, H.-C. Kim, J. Jo, Mater. Sci. Semicond. Process. 16, pp. 1285-1291 (2013).

ОЦЕНКА НАДЁЖНОСТИ МЕМРИСТОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ НАНОТУБУЛЯРНОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Петренёв И.А.¹, Вохминцев А.С.¹, Камалов Р.В.¹, Вайнштейн И.А.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: i.a.petrenev@urfu.ru

THE RELIABILITY ESTIMATION FOR MEMRISTOR STRUCTURES BASED ON NANOTUBULAR ZIRCONIA

Petrenyov I.A.¹, Vokhmintsev A.S.¹, Kamalov R.V.¹, Weinstein I.A.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

Reliability of memristors based on nanotubular zirconia was studied. The endurance is estimated to be > 113 thousand cycles as well as the resistance ratio is > 3000. The devices are able to remain stable for > 9 days in high and low resistance states at room temperature.

К мемристорам предъявляется множество требований, касающихся их эффективности (напряжения переключения, сопротивления в различных резистивных состояниях), возможности использования для различных применений (время переключения между состояниями, количество резистивных состояний, линейность) и надёжности (количество циклов работы, время удержания одного состояния). Ранее для структур на основе нанотубулярного диоксида циркония ($\text{ZrO}_2\text{-nt}$) нами были исследованы параметры эффективности [1, 2] и применимость в областях резистивной памяти [2] и нейроморфных систем [3]. Однако именно характеристики надёжности мемристорных структур имеют решающее значение для оценки их потенциала по интеграции в коммерческие разработки. В связи с чем цель данной работы заключалась в исследовании и количественной оценке максимального количества циклов работы и времён удержания состояний с высоким и низким сопротивлением для устройств со структурой $\text{Zr}/\text{ZrO}_2\text{-nt}/\text{Au}$.

Слой $\text{ZrO}_2\text{-nt}$ был получен методом анодирования металлического циркония в двухэлектродной ячейке при постоянном напряжении 20 В в течение 5 мин [4]. Синтезированный слой оксида толщиной 1.7 мкм состоял из самоупорядоченных нанотрубок с внутренним диаметром 30 нм и толщиной стенок 10 нм. Золотые контакты толщиной 50 нм и диаметром 140 мкм на слое $\text{ZrO}_2\text{-nt}$ наносились методом магнетронного напыления.

Вольт-амперные характеристики полученных мемристоров $\text{Zr}/\text{ZrO}_2\text{-nt}/\text{Au}$ изучались с помощью микрозондовой станции Cascade Microtech MPS 150 [2]. Zr -подложка заземлялась, а управляющий сигнал подавался на Au-контакты.

Для более качественного понимания физических процессов, протекающих при работе MCL, а также в целях проектирования новых каскадов MCL-систем, в данной работе была разработана численная модель MCL. Электродинамическая часть модели описывается уравнениями Максвелла в записи через магнитный векторный потенциал (полноволновая постановка). Прецессия вектора намагниченности описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта. Система из указанных уравнений решается численно в двумерной осесимметричной геометрической постановке с помощью среды для численного моделирования COMSOL Multiphysics [5].

Результаты расчёта выходного импульса по составленной модели в сопоставлении с экспериментальными данными по упоминавшейся 77-гигаваттной системе приведены на рисунке 1. Наблюдается хорошее согласие модели и экспериментальных данных по амплитуде и форме основного пика выходного импульса. Модель также позволяет анализировать распределение электромагнитного поля и других физических величин в сечении линии.

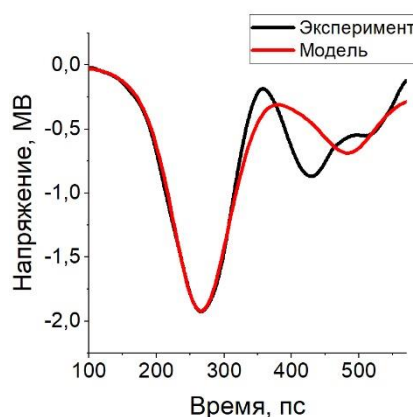


Рис. 1. Форма выходного импульса четвертой ступени MCL согласно экспериментальным данным [4] и расчёту по составленной модели

1. Romanchenko I. V. et al. Four channel high power RF source with beam steering based on gyromagnetic nonlinear transmission lines // Review of Scientific Instruments. – T. 88. – С. 054703. (2017)
2. Ulmaskulov M. R., Shunailov S. A. Microwave generation modes of ferrite nonlinear transmission lines up to 20 GHz // Journal of Applied Physics. – T. 130. – С. 234905. (2021)
3. Alichkin E. A. et al. Picosecond solid-state generator with a peak power of 50 GW // Review of Scientific Instruments. – T. 91. – С. 104705. (2020)
4. Rukin S. et al. Generation of multi-gigawatt picosecond pulses by magnetic compression lines // 2020 7th Int. Congr. on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE). – IEEE. – С. 92-97. (2020)
5. COMSOL Multiphysics Reference Manual 5.4, COMSOL AB, Stockholm, Sweden. (2018)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИКОСЕКУНДНЫХ ЛИНИЙ МАГНИТНОЙ КОМПРЕССИИ ЭНЕРГИИ

Патраков В.Е.^{1, 2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт Электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: vitpatrakov@gmail.com

NUMERICAL SIMULATION OF PICOSECOND MAGNETIC COMPRESSION LINES

Patrakov V.E.^{1, 2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Electrophysics, Yekaterinburg, Russia

Magnetic compression lines (MCL) are a recent extension of all solid-state pulsed power approach, that has allowed increasing peak power of picosecond pulses far into multi-gigawatt range. In this study a numerical model of MCL has been developed using COMSOL Multiphysics simulation software.

Нелинейные линии передачи (NLTL – non-linear transmission line), заполненные ферритом в состоянии насыщения, имеют большие перспективы в качестве мощных импульсных источников микроволнового излучения. Такие линии, называемые гиромангнитными, на сегодняшний день могут обеспечивать генерацию микроволнового излучения с импульсной мощностью порядка 100 МВт [1]. Частота генерации может достигать 20 ГГц [2]. Генерация микроволновых колебаний в NLTL происходит из-за прецессии вектора намагниченности насыщенного феррита вокруг линий эффективного магнитного поля, складывающегося из поля питающего импульса и поля внешнего подмагничивающего соленоида. Прецессия намагниченности вызывает изменение магнитного потока в сечении линии и, соответственно, возникновение ЭДС индукции в проводниках линии, что и приводит к преобразованию импульса и генерации колебаний.

В последние годы также исследуется иной подход, состоящий в использовании NLTL для увеличения мощности монополярных электрических импульсов мультигигаваттного диапазона мощностей [3, 4]. Для реализации такого подхода длительность питающего высоковольтного импульса должна быть примерно равна периоду генерируемых линией колебаний. Это позволяет эффективно использовать первый полупериод генерируемых колебаний как более мощный выходной импульс. Такие линии носят название MCL (Magnetic Compression Line – линия магнитной компрессии энергии). На сегодняшний день самая мощная установка, использующая MCL-подход, содержит в себе четыре каскада MCL и может обеспечивать на 48-омной нагрузке мощность до 77 ГВт при длительности импульса 105 пс [4].

ribbons, peak of $\Delta Z/Z$ ratio after annealing slightly displaces toward the higher frequencies.

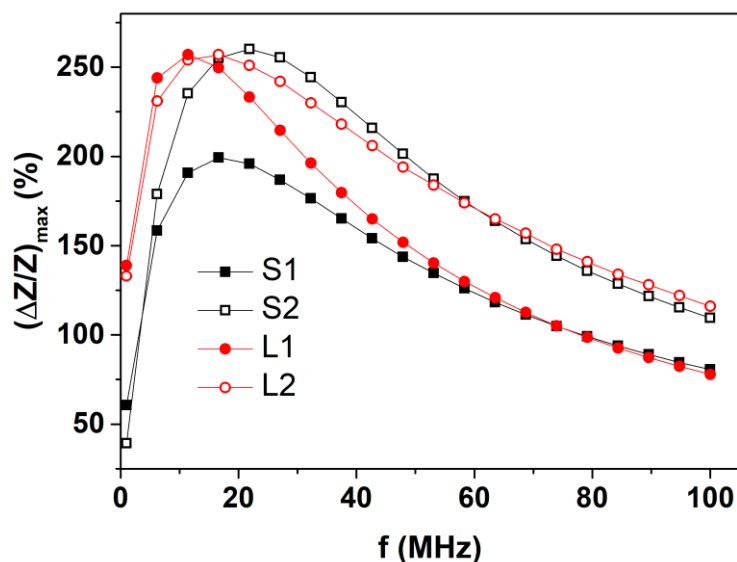


Fig. 1. Frequency dependence of the maximum of the GMI ratio for ribbons with different cross sections (S1, S2 - 0.8 mm, L1, L2 - 2 mm) and type of treatment (S1, L1 – as-quenched state, S2, L2 - after relaxation annealing).

This work was financially supported by the grant of President of Russian Federation MK-2080.2022.1.2.

1. R. S. Beach, A. E. Berkowitz, Appl. Phys. Lett. 64, 3652 (1994)
2. S. O. Volchkov, A. A. Pasyukova, M. S. Derevyanko, D. A. Bukreev, N. V. Kozlov, Andrey V. Svalov, A. V. Semirov, Sensors 21(20), 67283 (2021)
3. G.V. Kurlyandskaya, J.M. Barandiaran, M. Vazquez, D. Garcia, N.V. Dmitrieva J. Magn. Magn. Mater. 215-216, 740 (2000)

MAGNETIC AND MAGNETOIMPEDANCE IMPEDANCE PROPERTIES OF COBALT-BASED AMORPHOUS RIBBONS WITH DIFFERENT GEOMETRIES

Pasynkova A.A.^{1,2}, Timofeeva A.V.^{1,2}, Lukshina V.A.¹, Kurlyandskaya G.V.²

¹⁾ M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia

²⁾ Institute of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University,
620002 Ekaterinburg, Russia
E-mail: pasynkova_a@imp.uran.ru

A comparative analysis of the influence of geometric parameters on the features of the effective magnetic anisotropy and magnetoimpedance effect was carried out for Co-based amorphous ribbons in the as-quenched state and after relaxation annealing.

The giant magnetic impedance (GMI) effect consists in a significant change in the impedance of a ferromagnet when an external magnetic field is applied and a high-frequency current passes through it [1]. It is useful technique for the analysis of the effective magnetic anisotropy and dynamic magnetic permeability in the MHz frequency range [2]. Rapidly quenched Co-based amorphous ribbons with small negative magnetostriction constant is a good model material for studies of the effective magnetic anisotropy [3]. The length, width and ratio of width/length are very essential contributing to the shape anisotropy peculiarities. As-quenched and ribbons after a relaxation annealing usually had longitudinal effective magnetic anisotropy and one-peak type response for the field dependence of GMI [3]. In this work, the structure, magnetic, and GMI properties of Co-based ribbons with different parameters of the effective magnetic anisotropy were comparatively studied.

Fe₃Co₆₇Cr₃Si₁₅B₁₂ amorphous ribbons were obtained by rapid quenching. Ribbons with 0.8 mm (S1) and 2 mm (L1) width were prepared. Annealing at 350°C for 1 hour without load (S2 and L2, respectively) was done for frozen stresses relaxation. The thickness of the ribbons was about 32 μm for the 2 mm wide ribbons and 24 μm for the 0.8 mm wide ribbons, the length was 4.5 cm in both cases. An X-ray diffraction analysis (Bruker D8 Advance) and a study of magnetic hysteresis loops (MMKS-05) were carried out showing amorphous structure and longitudinal effective anisotropy in all cases. The GMI was studied using Agilent HP e4991A impedance analyzer. The GMI ratio of the total impedance Z was calculated as follows: $\Delta Z/Z = 100\% \cdot (Z(H) - Z(H_{\max}))/Z(H_{\max})$, $H_{\max} = 110$ Oe. Figure 1 shows the frequency dependence of the maximum of the GMI ratio of the total impedance $(\Delta Z/Z)_{\max}$. In as-quenched state, GMI responses of L1 wide ribbons are very similar to the L2 in the frequency range up to 20 MHz. For higher frequencies, higher value of $\Delta Z/Z$ was observed for annealed ribbon confirming the lower level of the internal stresses. However, the relaxation annealing of narrow ribbons results in the remarkable increase of the maximum of $\Delta Z/Z$ ratio from about 200% for S1 to about 260% for S2. As in the case of L1 and L2

что может быть интерпретировано как проявление механизма термоактивированного туннелирования в рамках модели Шенга и Абелеса.

В отличие от композита, для многослойных структур данная пропорциональность не выполняется, а наиболее удовлетворительная линеаризация сопротивления происходит в координатах $\ln R \sim f(1/T)$, при этом в области температур порядка 167 К наблюдается излом и разделение на два участка. Оценки энергии активации электрической проводимости на этих участках и сравнение с литературными источниками [1] позволяют предположить, что в диапазоне от 77 до 160 К многослойных структурах $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]_{112}$ реализуется прыжковая проводимость с прыжками по ближайшим соседям, а в диапазоне от 160 до 300 К — примесная проводимость по прослойкам ZnO.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук МК-4296.2022.1.2

1. L. Schmidt-Mende, J.L., MacManus-Driscoll ZnO – nanostructures, defects, and devices, Materials Today, 10, 40, (2007)

МЕХАНИЗМЫ ПРОВОДИМОСТИ В ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ СТРУКТУРЕ $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]_{112}$

Панков С.Ю.¹, Жилова О.В.¹, Макагонов В.А.¹, Фошин В.А.¹, Бабкина И.В.¹

¹ Воронежский государственный технический университет
E-mail: srgpank@mail.ru

CONDUCTION MECHANISMS IN THE THIN FILM STRUCTURE $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]_{112}$

Pankov S.Yu.¹, Zhilova O.V.¹, Makagonov V.A.¹, Foshin V.A.¹, Babkina I.V.¹

¹ Voronezh state technical university

The paper presents the results of analysis of the mechanisms of electrotransport in thin-film multilayer structures $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]_{112}$ in the temperature range 77-300 K.

Многослойные структуры ферромагнитный металл – полупроводник (ди-электрик) с толщинами слоев нанометрового диапазона вызывают большой интерес как с практической, так и фундаментальной точек зрения. Практический интерес вызван обнаруженным в них достаточно сильным магнитным взаимодействием между металлическими слоями, что возможно использовать при применении таких систем в ВЧ- и СВЧ-диапазонах. Фундаментальный аспект изучения свойств таких материалов заключается в том, что при уменьшении характеристических размеров до единиц-десятков нанометров в таких объектах проявляются новые физические явления, объясняемыми исключительно в рамках законов квантовой механики.

В данной работе были изучены механизмы проводимости в многослойной системе $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]_{112}$, полученной методом ионно-лучевого напыления. Толщина пленок варьировалась в диапазоне от 60 до 150 нм, а толщина бислоя $[(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}/\text{ZnO}]$ от 0,6 до 1,6 нм.

Для установления физической природы электропереноса в многослойных структурах были измерены и проанализированы температурные зависимости электросопротивления образцов в диапазоне температур 77-300 К. Для сравнения был проведен анализ зависимости электросопротивления композита $(\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20})_{34}(\text{SiO}_2)_{66}$, полученного аналогичным способом толщиной 120 нм.

Было установлено, что электросопротивление многослойных структур и композита характеризуется отрицательным температурным коэффициентом, а значения уменьшаются на один-два порядка величины при увеличении температуры от 77 до 300 К. Анализ температурных зависимостей композита показал, что во всем температурном диапазоне соблюдается пропорциональность $\ln R \sim f(1/T^{1/2})$,

дифрактометрии на дифрактометре Bruker D8 Advance. Зависимости электрического сопротивления от температуры были получены при помощи 4-х контактного метода на постоянном токе. Измерения магнитной восприимчивости и намагниченности производились на СКВИД-магнитометре MPMS-XL-5 (Quantum Design, США) в температурном интервале 2 - 350 К и вибромагнитометре Lake Shore VSM 7407 в интервале от 300 К до 1000 К.

Рентгенофазовый анализ показал, что образцы $\text{Fe}_{5-x}\text{Mn}_x\text{GeTe}_2$ ($x = 0, 0.25$) с замещением по катионной подрешетке однофазны и кристаллизуются в орторомбической сингонии (пространственная группа $R3m$). При замещении атомы марганца статистически замещают позиции железа, тип структуры не изменяется, однако наблюдается уменьшение среднего межслоевого расстояния. Образцы обладают металлическим типом проводимости. Обнаружено, что замещение атомов железа атомами марганца до $x = 0.25$ не оказывает заметного влияния на температуру магнитного превращения и величину намагниченности.

Установлено, что замещение по анионной подрешетке теллура селеном в различных концентрациях ($y = 0, 0.2, 0.5$) приводит к фазовому расслоению. В замещенных образцах образуется тетрагональная фаза типа FeSe , обладающая переходом в сверхпроводящее состояние, что отражается на проводимости полученных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FEUZ-2020-0054).

1. A.F. May et al., Ferromagnetism Near Room Temperature in the Cleavable van der Waals Crystal Fe_5GeTe_2 // ACS Nano, V. 13. P. 4436 (2019).
2. A.F. May, Magnetic structure and phase stability of the van der Waals bonded ferromagnet $\text{Fe}_{3-x}\text{GeTe}_2$ // PHYSICAL REVIEW, V. 93, P. 11 (2016).
3. J.-G. Park, Opportunities and challenges of 2D magnetic van der Waals materials: magnetic graphene? // J. Phys.: Condens. Matter, V. 28. P. 301001 (2016).

ПОИСК И СИНТЕЗ НОВЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАГНЕТИКОВ НА ОСНОВЕ Fe_5GeTe_2

Пальцева А.И.¹, Селезнева Н.В.¹, Баранов Н.В.^{1, 2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, ИЕНиМ, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: paltseva.ai@yandex.ru

SYNTHESIS AND STUDY OF 2D MAGNETS BASED ON COMPOUND Fe_5GeTe_2

Paltseva A.I.¹, Selezneva N.V.¹, Baranov N.V.^{1, 2}

¹⁾ Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics,
Ekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Ekaterinburg, Russia

The $\text{Fe}_{5-x}\text{Mn}_x\text{GeTe}_2$ and $\text{Fe}_5\text{GeTe}_{2-y}\text{Se}_y$ compounds have been synthesized and studied by using X-ray diffraction, magnetization and electrical resistivity measurements. It has been shown that the partial substitution of Mn for Fe does not lead to a significant change in the p.

Двумерные магнитные соединения представляют собой идеальные объекты для фундаментального экспериментального исследования магнетизма низкоразмерных систем. Актуальность синтеза и исследования такого рода соединений подтверждается непрерывно растущим числом посвященных им публикаций, в том числе, касающихся их возможного применения [1].

Наибольшее внимание в последние годы уделяется железосодержащим слоистым теллуридам типа Fe_nGeTe_2 ($n = 2, 3, 5$), в которых в зависимости от состава и способа приготовления наблюдается магнитное упорядочение до температур, превышающих комнатную. Показано, что кристаллы этих соединений могут расслаиваться вплоть до монослоев. Установлено, что массивные кристаллы $\text{Fe}_{n-x}\text{GeTe}_2$ обладают ферромагнитным или более сложным гелимагнитным упорядочением с температурами Кюри $T_C \sim 280 - 310$ К [2, 3].

Слоистый теллурид $\text{Fe}_{5-x}\text{GeTe}_2$ – магнетик Ван-дер-Ваальса с одной из максимальной (среди подобных изученных соединений) температур Кюри, порядка 310 К. Структура такого кристалла состоит из слоев Fe и Ge, расположенных между слоями Te. Известно, что свойствами данного типа соединений, в том числе и магнитными, можно управлять замещениями как по катионной, так и по анионной подрешеткам. Целью данной работы являлись синтез, аттестация и изучение физических свойств новых соединений $\text{Fe}_{5-x}\text{Mn}_x\text{GeTe}_2$ и $\text{Fe}_5\text{GeTe}_{2-y}\text{Se}_y$.

Соединения получены методом ампульного твердофазного синтеза при $T = 800$ С. Аттестация образцов выполнялась методом рентгеновской

This work was supported by the Science Committee of Ministry of Education and Science Republic of Kazakhstan, IRN AP08856436

1. Kainarbay A.Z., Nurakhmetov T.N., Daurenbekov D.K., Eliseev A.A., etc. Luminescent Down Shifting CdTe Colloidal Quantum Dots for Enhancing Polycrystalline Silicon Solar Cells//Optik - International Journal for Light and Electron. Optics. – 2018. -Vol. 169. - P. 41-47.
2. Kainarbay A.Z., Abdraman B., Bazarbayeva G., Daurenbekov D.K., Nurakhmetov T.N., Salikhodja Z.M., Zhunusbekov A.M., Yussupbekova B.N. Semiconductor quantum dots down converters for silicon solar cells// 6 th International Congress Energy Fluxes and Radiation Effects: Book of Abstracts. – Tomsk, 2018. - P.659.

LUMINESCENT DOWNSHIFTING COLLOIDAL QUANTUM DOTS FOR LARGE-AREA SOLAR CELLS

Ospanova A.K.¹, Eralieva A.A.¹, Auelkan T.¹, Kabdrashov Z.¹, Kizatov M.¹,
Kuralbay A.¹, Ryskeldy S.¹, Kainarbay A.Z.¹

¹L.N. Gumilyov Eurassian national university
E-mail: aygerim-ospanova-00@mail.ru

We show a practical application of colloidal quantum dots as a luminescent converters for operating large-area solar modules. For these purposes, we used quantum dots of the core/shell type with a high quantum luminescence yield (50%) embedded in polymer matrix.

The combination of solar cells (SC) with luminescent “down converters” based on colloidal quantum dots semiconductors (CQD) have been suggested as a very promising method to high power conversion efficiencies. Previously, our laboratory demonstrated this possibility using quantum dots of many semiconductors, such as cadmium telluride or plumbum chalcogenides (relative increase in efficiency and other electrical parameters of solar cells by 10-15% of the initial values).

For “down-conversion”, the luminescent converter (LC) as like thin film contains CQD is located on the front surface of the SC. High-energy photons with energy more than E_g of semiconductor material are absorbed by the converter and down-converted into lower energy photons which, in turn, can be absorbed by the solar cell. In this work, we show the use of CQD (CdSe/3ZnS) into photovoltaic technology to increase the efficiency of silicon SC.

As we know from the semiconductor physics course, Conventional silicon SC only effectively converts photons of energy close to the Si band gap as a result of the discrepancy between the incident solar spectrum and the spectral absorption properties of the material. These losses can be reduced by using photoluminescence, in which photons are shifted to an energy range in which the cell has a higher spectral response. By many authors, CQDs have been proposed for use as downshifters, since the wavelength of the radiation can be controlled by their size as a result of quantum limitation. To analyze the effect of LC, we carried out a series of optical and photoelectric measurements. A high PL emission is observed with a peak at 600 nm (CdSe/3ZnS). On fig. Figure 1 shows the Luminescence and absorption spectra of CdSe/3ZnS(2).

PV measurements were performed outdoors on large area PV modules on the market. These measurements showed an increase in the voltage of coated SC with LC (CdSe/3ZnS).

Conclusions: We have found that CQD are efficient luminescent material for photovoltaic applications. Under sunlight, the modified solar panels showed outstanding photovoltaic values. Further work is required to improve the temperature stability of the QCD. Using QCD with high temperature and radiation resistance can potentially increase the efficiency of SC.

трактами ($\rho = 50 \text{ Ом}$). При помощи датчика были измерены форма и амплитуда тока электронного пучка. Также в данной работе при использовании различных коллиматоров была выявлена зависимость распределения плотности тока по радиусу.

1. А.И. Климов. Экспериментальные методы в сильноточной электронике: учебное пособие / А.И. Климов. – Томск: Из-во Томского политехнического университета, 2009. – 229 с.
2. С.А. Шунайлов, К.А. Шарыпов, В.Г. Шпак, М.Р. Ульмаскулов, М.И. Яландин, В.В. Ростов, М.Д. Коломиец, “Рефлектометрия электронного диода с взрывоэмиссионным катодом”, Изв. ВУЗов. Физика, 2014, Т.57 Вып.1 1/3, pp.307-311.

ДИАГНОСТИКА ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ ПИКОСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

Осипенко Е.А.¹, Шарыпов К.А.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина

²⁾ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электро-
физики Уральского отделения Российской академии наук
E-mail: ea.iep@yandex.ru

DIAGNOSTICS OF PICOSECOND ELECTRON BEAMS PARAMETERS

Osipenko E.A.¹, Sharypov K.A.²

¹⁾ Ural Federal University

²⁾ Institute of Electrophysics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

The pulse shape and current amplitude of picosecond electron beams have been performed. Also the dependence of the current distribution of electron beam along radius was revealed.

Диагностика параметров электронных пучков включает в себя измерение временных (времена нарастания и спада, а также длительность) и энергетических (ток, энергия частиц) параметров. Для измерения указанных выше параметров зачастую используют традиционные методы, включающие в себя использование пояса Роговского и различных шунтов [1]. Однако в пикосекундном временном диапазоне такие методы неприменимы. В данном случае используются либо косвенные методы измерений, например, метод рефлектометрии, основанный на анализе отражений высокочастотных сигналов от несогласованной нагрузки линии [2], либо использование датчиков с пикосекундным разрешением.

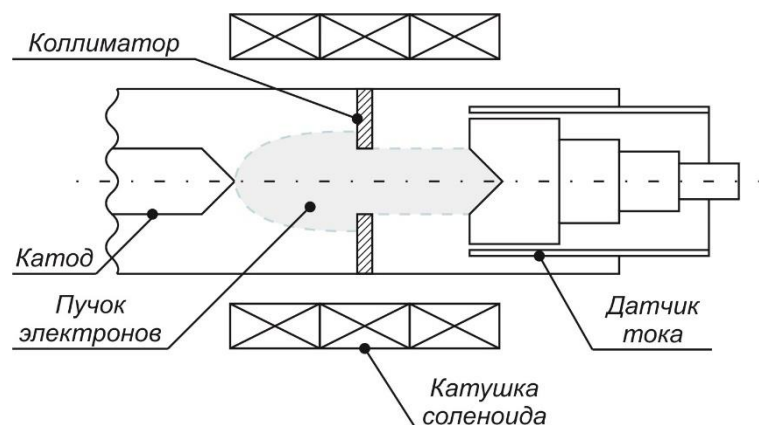


Рис. 1. Схема проведения измерений

Был сконструирован датчик на основе цилиндра Фарадея и ступенчатой линии, согласующей волновое сопротивление цилиндра Фарадея с передающими

from 1.9 to 2.3 mm³/(N·m). The further increasing of the energy density shows not monotonous changes in the wear rates. The highest wear rate is observed at 25 J/cm² and the least at 20 J/cm². The friction coefficient of the HEA after HCPEB treatment was not changed much. It ranged from 0.63 to 0.67 which differs by approximately 3 %. The changes in tribological behavior of the HEA modified by HCPEB might be explained by the increasing of the homogenization of the chemical elements distribution which was demonstrated in our previous study [2].

This research was funded by Russian Science Foundation (project 20-19-00452).

1. Wei X, Zhang P, Yu Z, Yan H, Wu D, Shi H, Chen J., Lu Q., Tian Y., Ma S., Lei W. Journal of Alloys and Compounds, 862,158563, (2021).
2. Osintsev K, Gromov V, Ivanov Y, Konovalov S, Panchenko I, Vorobyev S. Metals, V. 11, P.1228, (2021).

INFLUENCE OF HIGH-CURRENT PULSED ELECTRON BEAM SURFACE TREATMENT ON TRIBOLOGICAL CHARACTERISTICS OF NON-EQUIMOLAR Al-Co-Cr-Fe-Ni HIGH-ENTROPY ALLOY

Osintsev K.A.^{1,2}, Konovalov S.V.¹, Ivanov Yu.F.^{2,3}, Gromov V.E.², Panchenko I.A.²

¹⁾ Samara National Research University

²⁾ Siberian State Industrial University

³⁾ Institute of High Current Electronics of the Siberian Branch of the RAS

E-mail: osincev.ka@ssau.ru

In this study wire-arc additively manufactured high-entropy alloy Al-Co-Cr-Fe-Ni system was subjected to high-current electron beam surface treatment at different energy density of an electron beam. The tribological characteristics such as wear rate and coefficient of friction were studied.

High-entropy alloys (HEAs) is relatively new concept of materials consisted of at least five elements with approximately 5 to 35 at. % ratio. Surface modification of high-entropy alloys might be implemented to eliminate defects lasted after fabrication and consequently further improve hardness and tribological properties. This study aims to investigate influence of HCPEBs on tribological characteristics of Al-Co-Cr-Fe-Ni HEA system.

Wire-arc additive manufacturing (WAAM) was used as a method of fabrication of the material. As a feeding wire there was used the combined cable with the diameter of 1 mm and composed of aluminum wire (Al $\approx$ 99.95 wt. %), Cr-Ni wire (Cr $\approx$ 20 wt. %, Si $\approx$ 1 wt. %, Ti $\approx$ 0.2 wt. %, Ni – balanced), and Fe-Ni-Co wire (Co $\approx$ 17 wt. %, Ni $\approx$ 29 wt. %, Si $\approx$ 0.2 wt. %, Fe – balanced). Samples of a high-entropy alloy were fabricated via layer-by-layer deposition on an AISI 1020 steel substrate in an inert gas atmosphere (Ar $\approx$ 99.99%). The operation parameters were held constant: a wire feed speed – 8 m/min, voltage – 17 V, a travel speed – 0.3 m/min, a gas supply speed (Ar) – 14 L/min, work angle – 80 degrees. HCPEB treatment was performed with the following parameters: energy of accelerated electrons $U = 18$ keV, energy density of electron beam $E_s = (10, 15, 20, 25, 30)$ J/cm², pulse duration $f = 200$ μ s, number of pulses $N = 3$. As the tribological characteristics wear rate and friction coefficient were obtained on planar samples using tribometer Pin on Disc and Oscillating TRIBOtester.

The assessed wear behavior of the Al_{15.64}Co_{7.78}Cr_{8.87}Fe_{22.31}Ni_{44.57} HEA fabricated by WAAM without HCPEB treatment showed wear rate of $1.4 \cdot 10^{-4}$ mm³/(N·m) and the friction coefficient of 0.65. The values of the wear rate and the friction coefficient are similar to the values obtained in [1], where Al-Co-Cr-Fe-Ni high entropy alloy coatings were processed by laser cladding. HCPEB surface modification of the alloy showed formation of a submicro-nanocrystalline structure and crystallites ranging from 100 to 200 nm due to high-speed crystallization with the rate of 10^9 K/s [2]. With the increasing of the energy density of electron beams from 10 to 15 J/cm² wear rate increases

зависимость удовлетворяет уравнению, рассчитанному за счет добавочных «тепловых» усилий, совершавших работу.

$$U(f) = \int_r 1^2 [F(r) - f] dr = D \left[\sqrt{1 - f/F_m} - (f/2F_m) \ln(1 + \sqrt{1 - f/F_m}) / (1 - \sqrt{1 - f/F_m}) \right] \quad (1)$$

График зависимости $U(f)$ от f/F_m оказался нелинейным, но при больших цепочках он является, близок к прямой и удовлетворяет уравнению (1).

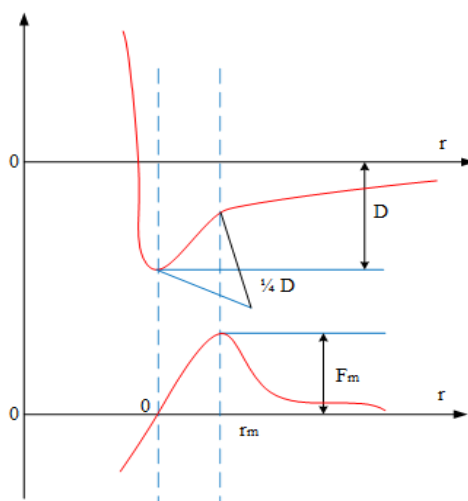


Рис. 1. Потенциальная энергия и сила взаимодействия для атомов в двухатомной молекуле

Из приведенного видно, что разрушение происходит при меньшей энергии диссоциации и эта энергия зависит от n числа звеньев в цепочке, из чего следует, что расхождение между энергетическими и силовыми критериями разрушения связей возможны. Для достаточно длинных цепочек разрушение энергетически возможно, когда растягивающая сила еще не в состоянии разорвать связи. При выполнении условия $W_{\pi} = D$ силу безопасности можно определить по формуле

$$f_{\text{безоп}} = F_m \left[1 - \left[(1 - 2/\sqrt{n}) \right]^2 \right] \quad (2)$$

и при $n=10$ $f_{\text{безоп}} = 0,87F_m$, а при $n=100$ $f_{\text{безоп}} = 0,36F_m$. Совершенно очевидно, что несмотря на выполнение энергетического критерия разрушения, при $f < F$, разрыва связи не происходит, а энергия в звеньях цепочки, не будучи транспортированной к подлежащей разрыву связи, останется неиспользованной.

1. А.Н. Орлов, Ю.М. Пилишкин, М.М.Шепелева, ФММ, 4, 540, 1957.
2. Френкель Я.И., Введение в теории металлов, Физматгиз, 1958, 227 с.
3. Э.Е. Томашевский, ФТТ, 12, 3202 (1970)

ИЗМЕНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ И СИЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДВУХАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЕ

Окилов Б.Р.¹, Джалилов Ф.¹, Мирзоев Д.Н.¹, Шодиев Ш.Ш.¹

¹) Политехнический Институт Таджикского Технического Университета им. академика М. Осими в г. Худжанде
E-mail: bunyod_01_01@inbox.ru

CHANGING THE POTENTIAL ENERGY AND THE INTERACTION FORCE OF A DIATOMIC MOLECULE

Oqilov B.R.¹, Jalilov F.¹, Mirzoev D.N.¹, Shodiev Sh.Sh.¹

¹) Polytechnic Institute of Tajik Technical University named after academician M. S. Osimi to the city of Khujand

In order to break the interatomic bonds, a transition needs to occur from a state of stable equilibrium into a state of unstable equilibrium. The fracture occurs for lower dissociation levels of energy, which depends on the number of elements in the chain, which shows that the discrepancy bet.

Для разрыва связи вдоль линии действия силы необходим переход из положения устойчивого равновесия в положение неустойчивого равновесия, оба из которых определяются величиной заданной силы. Для совершения такого перехода необходимо выполнение добавочной работы за счет тепловых усилий над уровнем $F=f$. Эта работа и есть величина энергетического барьера разрушения связи.

В случае распада напряженных связей работа, затрачиваемая на ее разрыв, распределяется следующим образом: доля механической силы $D-U$, которая в своем очередь является механической работой, состоит из трех частей:

1. Начальной, относительно малой части энергии затраченной в результате нагрузки.

2. Работы, равной произведению силы на изменение расстояние между атомами $f(r_2-r_1)$, совершаемой одновременно с действиями тепловой флуктуации (подъем на вершину барьера U), и

3. Работы по «дорыванию» связи (перевод с вершины барьера в разорванное состояние), которая равна $\int_r 2^\circ F(r) dr$.

В схеме распада нет фиксированного состояния разорванной связи, поскольку принимается, что внешняя сила постоянна, а ее потенциал линейен и неограничен. Как уже отмечали, внешняя сила по отношению к разорванным связям, создают взаимодействия с соседними атомами. Поэтому более корректно будет рассматривать распад линейной цепочки атомов, обладающей ограниченным запасом механической энергии [1,2,3].

Силовая зависимость энергии активации разрыва межатомной связи оказалась нелинейной, причем для больших цепочек (n велико), полученная

1. D.A. Pshenay-Severin, Yu.V. Ivanov, A.A. Burkov, A.T. Burkov. J. Phys.: Condens. Matter., 30, 135501 (2018).
2. A.A. Povzner, A.G. Volkov, T.A. Nogovitsyna, S.A. Bessonov. Phys. Sol. State 63 (3), 377 (2021).

ПАРАМАГНИТНЫЕ СПИНОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И ТЕРМОЭДС ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

Повзнер А.А.¹, Волков А.Г.¹, Бессонов С.А.¹, Ноговицына Т.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина

E-mail: t.a.nogovitsyna@urfu.ru

PARAMAGNETIC SPIN FLUCTUATIONS AND THERMOELECTRIC POWER OF $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ SOLID SOLUTIONS

Povzner A.A.¹, Volkov A.G.¹, Bessonov S.A.¹, Nogovitsyna T.A.¹

¹⁾ Ural Federal University

In this paper, we study the features of the electronic structure, paramagnon excitations, and thermoelectric power of $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ under conditions of a concentration transition from exchange-enhanced spin paramagnetism to diamagnetism of the Weyl semimetal CoSi. It is shown that the paramagnetic spin.

Твердые растворы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ богатые моносилицидом кобальта, благодаря своим физико-механическим и физико-химическим свойствам являются перспективными материалами для создания термогенераторов с высокими КПД. Однако механизмы формирования термоэлектрических свойств этих материалов, которые в значительной степени определяются особенностями электронной структуры, остаются окончательно не выясненными. Трудности, возникающие при изучении электронной зонной структуры $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, с нарушенной вследствие отсутствия центра инверсии кристаллической структурой B20, связаны с необходимостью учета топологических особенностей их электронного спектра [1] и кулоновских корреляций, приводящих к флуктуациям спиновой плотности [2].

В настоящей работе исследуются особенности электронной структуры, парамагнетонные возбуждения и термоэдс $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ в условиях концентрационного перехода от обменно-усиленного спинового парамагнетизма к диамагнетизму вейлевского полуметалла CoSi. Показано, что возникающие при замещении атомов железа атомами кобальта парамагнитные спиновые флуктуации существенно усиливаются, когда химический потенциал оказывается в области отрицательной кривизны плотности состояний (DOS) d-электронов. При этом вследствие зависящего от температуры флуктуационного сдвига химического потенциала, наряду с перенормировкой диффузной составляющей термоэдс, возникает эффект парамагнетонного увлечения d-электронов. Полученные результаты описывают усиление термоэлектрических характеристик твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ в области концентрационного перехода к вейлевскому топологическому полуметаллическому соединению CoSi.

Скорость роста кристаллитов в свою очередь зависит от их формы. Сейчас используется только сферическая модель приближения формы частиц несмотря на то, что по многим данным реальная форма кристаллов может быть далека от сферической и зачастую более удлиненная [2]. Именно поэтому важным является развитие теории с другим более точным приближением: эллипсоидальным. В данной работе была исследована промежуточная стадия процесса фазового превращения и найдена функция роста эллипсоидальных кристаллов в случае однокомпонентных и бинарных расплавов. При этом был учтен предельный переход к сферическому случаю.

1. WC Winegard. An Introduction to the Solidification of Metals. London: Institute of Metals; 1964.
2. Ocaña M, Morales MP, Serna CJ. The growth mechanism of α – Fe₂O₃ ellipsoidal particles in solution. J. Colloid Int. Sci.. 1995;171:85–91

СКОРОСТЬ РОСТА ОБЪЕМА ЧАСТИЦЫ В ОДНОКОМПОНЕНТНОМ И БИНАРНОМ РАСПЛАВАХ

Никишина М. А.¹, Александров Д. В.¹

¹) Кафедра теоретической и математической физики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: margaritanikishina98@gmail.com

PARTICLE VOLUME GROWTH RATE IN ONE-COMPONENT AND BINARY MELTS

Nikishina M. A.¹, Alexandrov D. V.¹

¹) Department of Theoretical and Mathematical Physics, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In this paper, we will consider obtaining the growth rate of the volume of an individual particle in the case of single-component and binary melts. The formula is determined for ellipsoidal and spherical particles.

Для моделирования процессов нуклеации полидисперсного ансамбля частиц, важной характеристикой является скорость роста кристаллов. При правильном выборе скорости роста мы сможем получить как можно больше очагов кристаллизации, при этом минимизировать время зарождения между самыми первыми ядрами и последующими, что в свою очередь приведет к более однородной и мелкозернистой структуре производимого материала, а следовательно, к его улучшенным качественным характеристикам [1].

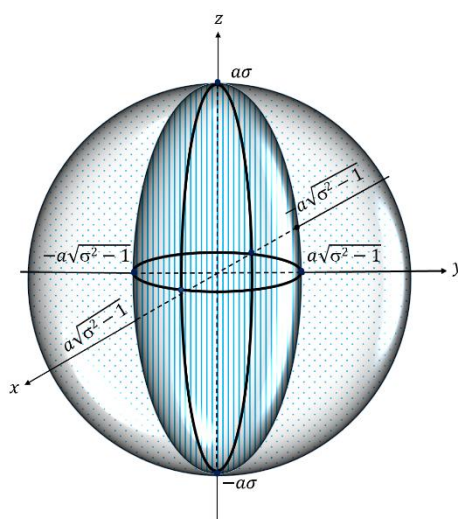


Рис. 1. Модель эллипсоидального кристалла в координатах вытянутого эллипсоида вращения

В качестве основного подхода было использовано измерение спектров КРС отдельных частиц, осажденных на КРС-нейтральную подложку (медная пластина). Нанесенные на пластину метки позволили проводить изучение одних и тех же частиц разными методами (спектроскопия КРС и сканирующая электронная микроскопия), а также измерение спектров КРС через значительные интервалы времени. Сравнение спектров, измеренных при разных значениях мощности возбуждающего лазерного излучения, для разных частиц позволило предложить физико-химическую модель деградации допированного LTO с фазовым переходом типа «порядок-беспорядок». При протекании быстрых процессов, индуцированный фазовый переход сопровождался лазерной абляцией образца с переосаждением наночастиц, но с сохранением формы частицы, испытывавшей фазовый переход. Помимо деградационных процессов, был продемонстрирован эффект переосаждения углерода даже для образцов, не содержащих проводящего углеродного покрытия.

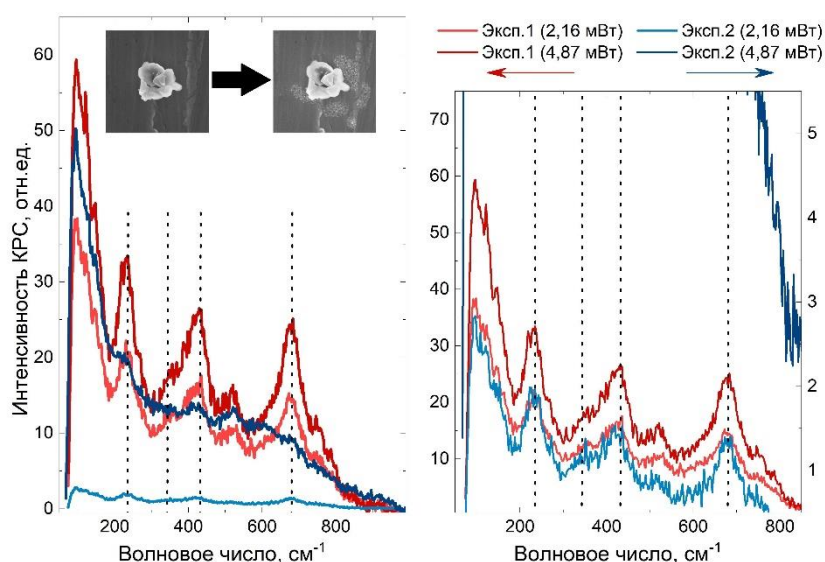


Рис. 1. Изменение спектров КРС и морфологии частицы $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ под действием лазерного излучения. Пунктирными линиями обозначены положения характеристических пиков LTO.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания FEUZ-2020-0054.

1. D.V. Pelegov, B.N. Slautin, P.S. Zelenovskiy, D.K. Kuznetsov, E.A. Kiselev, D.O. Al-ikin, A.L. Kholkin, V.Y. Shur, Single particle structure characterization of solid-state synthesized $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, J. Raman Spectrosc. 48 (2017) 278–283. doi:10.1002/jrs.4999
2. Dmitry V. Pelegov, Ralph Nicolai Nasara, Chia-hao Tu, and Shih-kang Lin, Defects in $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ induced by carbon deposition: analysis of unidentified bands in Raman spectra, Physical Chemistry Chemical Physics, 2019, 31, 20757-20763. doi: 10.1039/C9CP04629A

ИНДУЦИРОВАННАЯ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ ДЕГРАДАЦИЯ $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$

Никифоров А.А.¹, Пелегов Д. В.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: aleks-nik99@mail.ru

INDUCED BY LASER RADIATION DEGRADATION OF $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$

Nikiforov A.A.¹, Pelegov D. V.¹

¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation

Raman spectroscopy is often considered as a non-destructive method of studying the structure. But, specifically, the interaction of laser radiation with the object of study is given very little attention. The object of this study is LTO doped Mn, resulting in increased electronic conductivity.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света зачастую рассматривается как неразрушающий метод исследования структуры. Но, конкретно, взаимодействию лазерного излучения с объектом исследования уделяется очень мало внимания. Особенно хорошо это заметно для тех публикаций, где этот метод является вспомогательным и используется для подтверждения целевой фазы. Объектом данного исследования является титанат лития легированный марганцем ($\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$), в результате легирования повышается электронная проводимость.

Можно найти большое число публикаций со спектрами ЛТО, но в большинстве своём такие исследования проводятся специалистами в области химии твердого тела и электрохимии, и поэтому вопрос влияния лазерного излучения на исследуемый материал в этих работах, как правило, не рассматривается[1]. Дополнительную сложность представляет тот факт, что исследуемый объект представляет собой порошки с частицами субмикронного размера и поэтому геометрия взаимодействия лазерного излучения с веществом довольно сложна.

Отсутствие публикаций по теме деградации ЛТО под действием лазерного излучения отчасти вызвано тем, что этот материал имеет структуру шпинели $\text{Li}[\text{Li}_{1/6}\text{Ti}_{5/6}]_2\text{O}_4$, устойчивую к разного вида воздействиям[2]. Однако чистый ЛТО имеет крайне низкую электронную проводимость ($10^{-8} - 10^{-13}$ См/см) и в качестве решения, альтернативного синтезу наноразмерных порошков, предлагается его допирование для создания дополнительных центров проводимости в объеме материала. В данной работе представлены результаты исследования эффектов воздействия лазерного излучения с длиной волны 633 нм различной мощности на частицы $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$.

методом Вильямсона–Холла. Полученные результаты свидетельствуют о применимости сверхрешеток на основе сплава $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{10}$ совместно с концентраторами магнитного потока в качестве сенсоров малых магнитных полей.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России по темам «Спин» АААА-А18-118020290104-2 и «Магнит» 122021000034-9 при частичной поддержке РФФИ (грант № 20-42-660018).

1. M.A. Milyaev, N.S. Bannikova, L.I. Naumova et. al., Journal of Alloys and Compounds, 854, 157171, (2021)

ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВЕРХРЕШЕТКИ CoFeNi/Cu С КОНЦЕНТРАТОРАМИ МАГНИТНОГО ПОТОКА

Найданов И. А.^{1, 2}, Миляев М. А.¹

¹) Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²) Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ivannayd_1997@bk.ru

HIGHLY SENSITIVE CoFeNi/Cu SUPERLATTICES WITH MAGNETIC FLUX CONCENTRATORS

Naydanov I. A.^{1, 2}, Milyaev M. A.¹

¹) M.N. Miheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia

²) Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

In the course of the work, it was possible to reduce the saturation fields of CoFeNi/Cu superlattices with the effect of giant magnetoresistance by a factor of 11 to 15–20 Oe using magnetic flux concentrators made of NiFeCuMo and NiFe materials.

Сверхрешеточные наноструктуры с эффектом гигантского магнитосопротивления находят свое применение в качестве сенсорных элементов, чувствительных к магнитным полям. Сверхрешетки состоят из обменно связанных ферромагнитных слоев, разделенных немагнитными прослойками. В присутствии магнитного поля вследствие спин зависимого рассеяния магнитные сверхрешетки могут изменять свое сопротивление на десятки процентов.

Характерная чувствительность к магнитным полям сверхрешеток с толщиной немагнитных прослоек, соответствующих второму максимуму РККИ взаимодействия, составляет 0.1–0.5 %/Э в диапазоне несколько сотен эрстед [1]. Цель работы заключается в увеличении чувствительности сверхрешеток к слабым магнитным полям при помощи концентраторов магнитного потока.

Проведены исследования магниторезистивных свойств сверхрешеток композиции: стекло/Ta/NiFeCr/[FM/Cu]₈/Ta, где FM-ферромагнитный сплав. В качестве ферромагнитных слоев использовались тройные сплавы CoFeNi. Для повышения чувствительности к магнитным полям применялись концентраторы магнитного потока в форме трапеций, изготовленные из материалов NiFeCuMo и NiFe. Наибольшая чувствительность 3,6 %/Э достигнута в сверхрешетках на основе сплава Co₇₀Fe₂₀Ni₁₀ с магнитосопротивлением порядка 30 %. Показано, что наибольшее усиление магнитного поля концентраторами достигается за счет увеличения соотношения между продольным и поперечным размерами концентраторов. Дополнительно проведен отжиг концентраторов с целью уменьшения вклада в гистерезис на кривых зависимости сопротивления сверхрешеток от магнитного поля. Отжиг до температуры T=730 °C привел к уменьшению гистерезиса за счет уменьшения микронапряжений. Микронапряжения рассчитывались

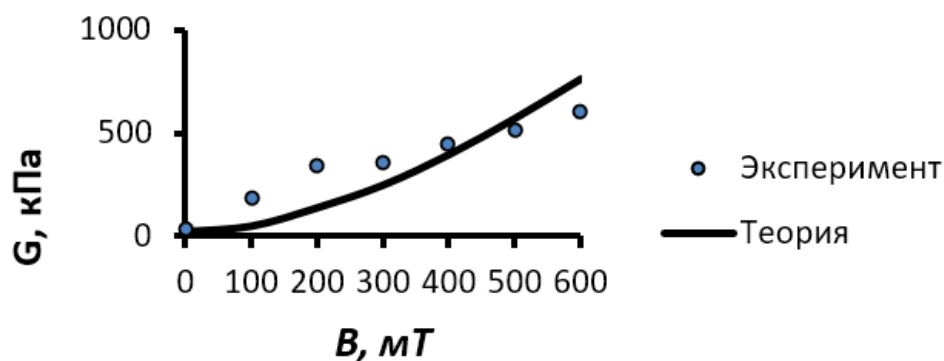


Рис. 1. Модуль сдвига в зависимости от приложенного магнитного поля. Объемная концентрация внедренных частиц составляет 30%. Модуль упругости образца без поля 10 кПа.

Результаты теоретического исследования показывают, что предложенная модель достаточно хорошо количественно объясняет сильные магнитореологические эффекты в исследованных плотных магнитных полимерах. Модель также описывает убывающую зависимость модуля от величины сдвиговой деформации.

Работа выполнена при поддержке гос. задания FEUZ-2020-0051.

1. Borin D., Stepanov G., Musikhin, A. Zubarev, A. Bakhtiarov A. & Storozhenko P. Magnetorheological effect of magnetoactive elastomer with a permalloy filler. // *Polymers*. —2020. — V. 12. — P. 2371.