

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov
Eurasian National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

3(148)/ 2024

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Астана, 2024

Astana, 2024

Бас редакторы:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Бас редактордың орынбасары: Абуова Ф.У., PhD, доц., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Редакция алқасы:

Ержанов Қ.Қ.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Козловский А.Л.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Усеинов А.Б.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Джансейтов Д.М.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Шункеев К.Ш.	ф.-м.ғ.д., Қ.Жұбанов ат. АӨУ, Ақтөбе, Қазақстан
Исадықов А.Н.	PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей
Шарафуллин И.Ф.	ф.-м.ғ.д., Башқұрт мемлекеттік университеті, Уфа, Ресей
Сакута С.Б.	ф.-м.ғ.д., Ұлттық зерттеу институты Курчатов институты, Мәскеу, Ресей
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., Тарту университеті, Тарту, Эстония
Попов А.И.	ф.-м.ғ.д., Латвия университеті, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Хиросима Университеті, Хиросима, Жапония
Тойода Ш.	PhD, Окаяма Ғылым Университеті, Окаяма, Жапония
Ертурк С.	PhD, Нийде Университеті, Нийде, Түркия
Килин Д.	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ
Юлун Хан	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Сәтбаев к-сі, 2
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 402 б.
Тел.: +7 (7172) 709-500, (ішкі 31-410).
E-mail: vest_phys@enu.kz

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы
Меншіктенуші: КеАҚ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті"
Мерзімділігі: жылына 4 рет
Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен тіркелген
02.02.2021ж. № KZ66VPY00031918 қайта есепке қою туралы куәлігі
Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі 13/1
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

Editor-in-Chief:

K. Zhumadilov,

PhD, Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Deputy Editor-in-Chief: F. Abuova, PhD, Ass. Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Editorial board:

K. Yerzhanov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Qainarbai	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Kozlovskiy	PhD, Institute of Nuclear Physics», Astana, Kazakhstan
A. Morzabaev	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
Zh. Salikhodzha	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Useinov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
D. Dzhanseytov	PhD, Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan
K. Shunkeyev	Doctor of Phys.-Math. Sciences, K. Zhubanov University, Aktobe, Kazakhstan
A. Isadykov	PhD, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
I. Sharafullin	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Bashkir State University, Ufa, Russia
S. Sakuta	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Kurchatov Institute, Moscow, Russia
A. Lushchik	Doctor of Phys.-Math. Sciences, University of Tartu, Tartu, Estonia
A. Popov	Doctor of Phys.-Math. Sciences., University of Latvia, Riga, Latvia
M. Hoshi	PhD, Hiroshima University, Hiroshima, Japan
Sh. Toyoda	PhD, Okayama University of Science, Okayama, Japan
S. Yerturk	PhD, Niğde Ömer Halisdemir University, Niğde, Türkiye
Dmitri Kilin	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA
Yulun Han	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA

Editorial address: **2, Satpayev str., of. 402**

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, 010008

Tel.: +7 (7172) 709-500, (ext. 31-410),

E-mail: vest_phys@enu.kz

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Non-profit joint-stock company «L.N. Gumilyov Eurasian National University»

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan

Rediscount certificate № KZ66VPY00031918 from 02.02.2021

Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., Astana, Kazakhstan 010008

L.N. Gumilyov Eurasian National University

Tel: +7 (7172) 709-500, (ext.31-410). Website: <http://bulphysast.enu.kz>

Главный редактор:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Зам. главного редактора: Абуова Ф.У., PhD, доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Редакционная коллегия:

Ержанов К.К.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Козловский А.Л.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Морзабаев А.К.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Усеинов А.Б.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Джансейтов Д.М.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Шункеев К.Ш.	д.ф.-м.н., Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан
Исадыков А.Н.	PhD, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
Шарафуллин И.Ф.	д.ф.-м.н., Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
Сакута С.Б.	д.ф.-м.н., Национальный исследовательский институт Курчатовский институт, Москва, Россия
Лущик А.Ч.	д.ф.-м.н., Тартуский университет, Тарту, Эстония
Попов А.И.	д.ф.-м.н., Латвийский университет, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Университет Хиросимы, Хиросима, Япония
Тойода Ш.	PhD, Университет Науки Окаямы, Окаяма, Япония
Ертурк С.	PhD, Университет Нийде, Нийде, Турция
Килин Д.	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США
Юлун Хан	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2
Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 402
Тел.: +7(7172) 709-500, (вн. 31-410),
E-mail: vest_phys@enu.kz

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник: НАО «Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева» Периодичность: 4 раза в год
Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан Свидетельство о постановке на переучет № KZ66VPY00031918 от 02.02.2021 г.

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажымукана, 13/1,

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

МАЗМҰНЫ/ CONTENTS/ СОДЕРЖАНИЕ

Р.Асылбаев, Д.Кенбаев, А.Даулетбекова, Б.Садуова, Г.Аралбаева, А.Акилбеков <i>Жылдам ксенон иондарымен сәулеленген BaF_2 және CaF_2 кристалдарының сәулеленуден туындаған оптикалық жұтылуының термиялық күйдіруі.....</i>	
R. Assylbayev, D. Kenbayev, A. Dauletbekova, B. Saduova, G. Aralbayeva, A. Akilbekov <i>Thermal annealing of radiation-induced optical absorption of BaF_2 and CaF_2 crystals irradiated with fast xenon ions.....</i>	
Р.Асылбаев, Д.Кенбаев, А.Даулетбекова, Б.Садуова, Г.Аралбаева, А.Акилбеков <i>Термический отжиг радиационно-индуцированного оптического поглощения кристаллов BaF_2 и CaF_2, облученных быстрыми ионами ксенона.....</i>	7
А.Б. Базарбек, А.Д. Акылбекова, Г.Д. Кабдрахимова, А.Ш. Омархан, А.А. Ногай <i>Темір-фосфор және никель-фосфор жүйелері үшін тұрақты құрылымдарды табудың ab-initio есептеулері.....</i>	
A.B. Bazarbek, A.D. Akylbekova, G.D. Kabdrakhimova, A.Sh. Omarkhan, A.A. Nogai <i>Ab-initio calculations for the search for stable structures for iron-phosphorus and nickel-phosphorus systems.....</i>	
А.Б. Базарбек, А.Д. Акылбекова, Г.Д. Кабдрахимова, А.Ш. Омархан, А.А. Ногай <i>Расчеты ab-initio для поиска стабильных структур для систем железо-фосфор и никель-фосфор.....</i>	23
Д.С. Бижанова, М.М. Бахтин, Е.Т. Кашкинбаев, М.Н. Аумаликова, Е.А. Сайфулина, А.С. Шоқабаева, Э.М. Мусаева <i>Радиоактивті қалдықтар қоймасының маңында орналасқан Ақсуелді мекенінің тұрғындарынан алынған биологиялық сынамалардағы уранның мөлшерін бағалау.....</i>	
D.S. Bizhanova, M.M. Bakhtin, E.T. Kashkinbayev, M.N. Aumalikova, E.A. Saifilina, A.S. Shokabayeva, E.M. Mussayeva <i>Evaluation of uranium content in biological samples taken from residents of the village of Aksu, located near a radioactive waste storage facility.....</i>	
Д.С. Бижанова, М.М. Бахтин, Е.Т. Кашкинбаев, М.Н. Аумаликова, Е.А. Сайфулина, А.С. Шоқабаева, Э.М. Мусаева <i>Оценка содержания урана в биологических пробах, взятых у жителей поселка Аксу, расположенного вблизи хранилища радиоактивных отходов.....</i>	41
К.Ш. Жумадилов, А.М. Андабаева, В.Ф. Степаненко, А.И. Иванников, А.А. Баграмова, С.М. Сарсенова, А.К. Амангельдина, М.Т. Касымжанов <i>Радонның диффузиялық камерасындағы CR-39 детекторындағы альфа бөлшектерінің іздерінің таралуы.....</i>	

K.S. Zhumadilov, A.M. Andabayeva, V.F. Stepanenko, A.I. Ivannikov, A.A. Bagramova, S.M. Sarsenova, A.K. Amangeldina, M.T. Kassymzhanov <i>Distribution of alpha particle tracks on CR-39 detector in radon diffusion chamber.....</i>	
К.Ш. Жумадилов, А.М. Андабаева, В.Ф. Степаненко, А.И. Иванников, А.А. Баграмова, С.М. Сарсенова, А.К. Амангельдина, М.Т. Касымжанов <i>Распределение следов альфа-частиц в детекторе CR-39 в диффузионной камере радона</i>	54
А.Л. Козловский <i>Төмен энергиялы He²⁺ ионды сәулеленуге ұшыраған ZrO₂ керамикасының беткі қабатының құрылымдық деградация кинетикасын зерттеу.....</i>	
A.L. Kozlovskiy <i>Study of the structural degradation kinetics of the near-surface layer of ZrO₂ ceramics exposed to low-energy He²⁺ ion irradiation.....</i>	
А.Л. Козловский <i>Изучение кинетики структурной деградации приповерхностного слоя ZrO₂ керамик, подверженных низкоэнергетическому облучению ионами He²⁺.....</i>	72
Ә. Теміржанов, Б. Садыков, Т. Жолдыбаев, Ж. Керімкулов, Қ. Мендібаев <i>Жеңіл зарядты бөлшектерді анықтауға арналған сәйкестік схемасы бар көп арналы анализатор.....</i>	
A. Temirzhanov, B. Sadykov, T. Zholdybaye, Zh. Kerimkulov, K. Mendibayev <i>Multichannel coincidence analyzer for light charged particle identification.....</i>	
А. Темиржанов, Б. Садыков, Т. Жолдыбаев, Ж. Керимкулов, К. Мендибаев <i>Многоканальный анализатор со схемой совпадения для идентификаций легкозаряженных частиц.....</i>	86
Д.К. Ескермесов, Б.К. Рахадиллов, Ж.Т. Төлеуханова, С. Пазылбек, А.С. Ескермесова <i>Импульсті плазмалық өңдеу (PPT) әдісімен Ni-Cr-Al негізіндегі алынған (DS) жабындардың беттік модификациясы.....</i>	
D.K. Yeskermessov, B.K. Rakhadilov, Zh.T. Toleukhanova, S. Pazyzbek, A.S. Yeskermessova <i>Surface modification of (DS) coatings based on Ni-Cr-Al by pulsed plasma treatment (PPT) method.....</i>	
Д.К. Ескермесов, Б.К. Рахадиллов, Ж.Т. Төлеуханова, С. Пазылбек, А.С. Ескермесова <i>Поверхностная модификация (DS) покрытий на основе Ni-Cr-Al методом импульсной плазменной обработки (PPT).....</i>	98
Ш. Хамада <i>Әртүрлі өзара әрекеттесу потенциалдарында ²⁰Ne + ²⁴Mg серпімді шашыраудың бұрыштық үлестірімдерін қайта талдау.....</i>	
Ш. Хамада <i>Повторный анализ угловых распределений упругого рассеяния ²⁰Ne + ²⁴Mg в различных потенциалах взаимодействия.....</i>	
Sh. Hamada <i>Reanalysis of ²⁰Ne + ²⁴Mg elastic scattering angular distributions within various interaction potentials.....</i>	117



Термический отжиг радиационно-индуцированного оптического поглощения кристаллов BaF_2 и CaF_2 , облученных быстрыми ионами ксенона

Р.Асылбаев¹, Д.Кенбаев², А.Даулетбекова³, Б.Садуова³, Г.Аралбаева^{*3},
А.Акилбеков³

¹Павлодарский педагогический университет имени Алкея Маргулана, Павлодар, Казахстан

²Университет имени Шакарима города Семей, Семей, Казахстан

³Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

(E-mail: ¹ruslanassylbay@yandex.kz, ²edu.kdx@yandex.kz, ³alma_dauletbek@mail.ru,
³samai_b_91@mail.ru, ³agm_555@mail.ru, ³akilbekov_at@enu.kz)

Аннотация. Кристаллы BaF_2 и CaF_2 , обладающие высокой радиационной стойкостью, как сцинтилляторы с высоким временным разрешением используются в физике высоких энергий. В настоящей работе исследуются радиационные дефекты в кристаллах BaF_2 и CaF_2 при облучении ионами ^{132}Xe с энергиями 220 и 230 МэВ, соответственно, до флюенсов 10^{11} - 10^{14} ион/см². Спектры радиационно-наведенного оптического поглощения измерялись в интервале от 1,5 до 10 эВ. Термический отжиг радиационных дефектов, индуцированных в монокристаллах BaF_2 и CaF_2 , изучался путем проведения пошагового отжига. Циклы "нагрев-охлаждение-измерение" выполнялись в идентичных условиях с увеличением температуры отжига ($T_{\text{отж}}$) на 20-30 К. Все спектры измерялись при комнатной температуре. Предполагается, что в радиационно-индуцированную полосу поглощения при 9,7 эВ в CaF_2 имеют суммарный вклад анионные кластеры, созданные в области ионного трека, и сложные комплексные дырочные агрегаты. Центр, отвечающий за полосу с максимумом 8,15 эВ, также имеет дырочную природу и структуру, близкую к центру 6,5 эВ. В УФ области спектра BaF_2 наблюдается небольшое увеличение полосы 9,18 эВ в интервале температур 450-575К, которое сопровождается уменьшением полос с максимумами 6,5 и 8,2 эВ, то есть последняя также имеет дырочную природу. Полосы 7,4 эВ, 2,24 эВ и 3,04 эВ практически не изменяются во всем интервале температур отжига. По аналогии с CaF_2 , в Хе-облученных монокристаллах BaF_2 высокоэнергетические полосы ниже фундаментального поглощения также могут иметь природу анионных кластеров.

Ключевые слова: кристаллы BaF_2 и CaF_2 , быстрые тяжелые ионы, радиационные дефекты, спектры оптического поглощения, термический отжиг.

Поступила 30.08.2024 После доработки 07.09.2024. Принята к печати 07.09.2024. Доступно онлайн 30.09.2024

1* автор для корреспонденции

Введение

Первые сцинтилляционные детекторы, разработанные на основе щелочно-галогидных кристаллов (Na:Tl , CsI:Tl), имеют хорошие спектрометрические характеристики, быстрое действие, являются прозрачными к собственному излучению, что минимизирует внутреннюю реабсорбцию, также на основе этих кристаллов могут быть реализованы детекторы в различных форм-факторах. Однако данные детекторы имеют некоторые недостатки. Например, в физике высоких энергий критически важно применение детекторов с высокой радиационной стойкостью, тогда как для регистрации быстрых процессов основной характеристикой выступает высокое временное разрешение детекторов. В последние годы наблюдается значительный прогресс в изучении и применении сцинтилляционных детекторов на базе фторида бария BaF_2 посредством кросс-люминесценции. Монокристаллы BaF_2 применяются в качестве сцинтилляционных материалов для обнаружения гамма-излучения во многих экспериментах по физике высоких энергий. Быстрая синхронизация возможна благодаря очень короткому времени затухания около 0,8 нс люминесценции при 195 и 220 нм. Кристалл BaF_2 также имеет интенсивный, медленный компонент свечения с максимумом 300 нм с временем затухания около 620 нс при комнатной температуре, что является существенным недостатком сцинтилляторов на основе кристаллов BaF_2 . Допирование кристаллов BaF_2 примесью лантана приводит к тушению экситонного свечения. В то же время с понижением интенсивности медленной компоненты люминесценции имеет место понижение интенсивности и кросс-люминесценции. В последние годы основное внимание уделяется механизму сцинтилляции в этом кристалле. Тем не менее, остается много нерешенных вопросов о процессах радиационного дефектообразования в нелегированных и легированных кристаллах фторида бария. Результаты исследований можно найти в [1]. Эта проблема остается нерешенной.

Кристалл CaF_2 также обладает относительно высокой радиационной стойкостью. Это свойство позволяет использовать кристалл, как и BaF_2 , в сцинтилляционных детекторах. Кристаллы $\text{CaF}_2\text{:Dy}$, $\text{CaF}_2\text{:Tm}$ и $\text{CaF}_2\text{:Mn}$ применяются как радиационные дозиметры [2,3].

Присутствие примесей и создание собственных дефектов при облучении ионизирующей радиацией сильно влияет на свойства BaF_2 и CaF_2 . Модификация структуры и физических свойств BaF_2 и CaF_2 под воздействием радиации позволяет создавать материалы с заданными свойствами. Ионное облучение создает в материалах радиационные дефекты и структурные нарушения. Радиационное воздействие на широкощелевые материалы изменяет их оптические свойства посредством расположения локальных дефектных уровней в запрещенной зоне. В то же время недостаточно изученными остаются процессы дефектообразования в кристаллах BaF_2 и CaF_2 при облучении высокоэнергетическими ионами, моделирующими воздействие осколков деления [4-6].

И фторид бария, и фторид кальция имеют идентичную кубическую структуру решетки флюорита. В этой структуре куб из ионов Ba^{2+} или Ca^{2+} окружен кубом из ионов фтора (F^-) (Рис.1). На этом же рисунке приведены параметры решеток BaF_2 и CaF_2 .

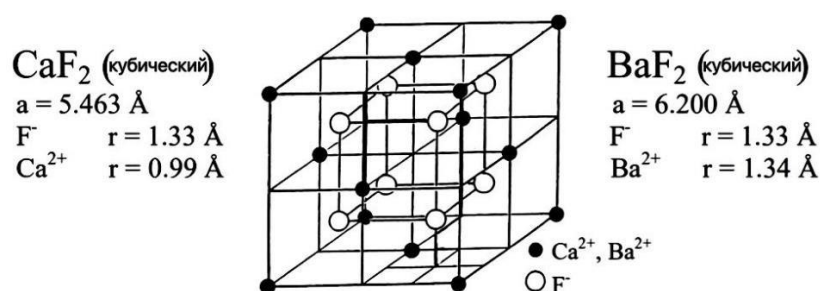


Рисунок 1. Структура кристаллов BaF_2 и CaF_2 . Параметры кристаллической решетки

Из рисунка 1 можно выделить следующее отличие этих кристаллов: в отличие от фторида кальция, для фторида бария характерно очень близкое значение размеров ионов бария и фтора. В целом однотипность решеток обоих изучаемых кристаллов позволяет похожим образом интерпретировать результаты аналогичных экспериментов для каждого образца.

Целью настоящей работы является исследование специфики процессов дефектообразования в кристаллах BaF_2 и CaF_2 при их облучении тяжелыми ионами ^{132}Xe методами оптической абсорбционной спектроскопии в широком спектральном диапазоне от вакуумного ультрафиолета до ближнего ИК и пошагового термического отжига спектров поглощения.

Методология

В данной работе использовались монокристаллы BaF_2 компании EpicCrystal (Китай) и монокристаллы CaF_2 (ГОИ им. С. В. Вавилова, Россия).

Кристаллы BaF_2 и CaF_2 облучались ионами ^{132}Xe на ускорителе ДЦ-60. В Табл. 1 приведены параметры ионов ксенона в кристаллах BaF_2 и CaF_2 , рассчитанные с помощью кода SRIM[7].

Таблица 1. Параметры ионов ^{132}Xe в монокристаллах CaF_2 и BaF_2

Кристалл	Ион	E , МэВ	R , мкм	S_e , кэВ/нм	S_n , кэВ/нм
CaF_2	^{132}Xe	230	18	20	0,06
BaF_2	^{132}Xe	220	17.6	20	0.069

Из таблицы 1 видно, что пробег иона, а также электронные и ядерные потери иона ^{132}Xe имеют практически одинаковые значения для обоих кристаллов. Соотношение $S_e/S_n \approx 300$, то есть электронные потери доминируют.

Спектры поглощения облученных образцов в ультрафиолетовой (УФ), видимой и ближней инфракрасной (ИК) областях измерялись с помощью двухлучевого спектрофотометра Jasco V-660, оснащенного двойным дифракционным монохроматором.

Этот спектрофотометр охватывает диапазон спектра от 190 до 900 нм (1,4-6,5 эВ). Абсолютная погрешность оценивается в интервале 0,001-0,02 эВ.

Спектры оптического поглощения в области поглощения вакуумного ультрафиолета (ВУФ) измерялись при помощи вакуумного монохроматора ВМР-2. Источником света в ВМР-2 служит газоразрядная лампа с H_2 и водяным охлаждением. Вовремя разряда молекулы водорода диссоциируют на атомы. Водород подается в систему из генератора, поддерживая рабочее давление около 10,7 Па. Напряжение на электродах лампы варьируется от 1 до 1,2 кВ при рабочем токе 0,4 А. Тлеющий разряд возникает между электродами через капилляр, что обеспечивает высокую плотность тока. Абсолютная погрешность оценена в интервале от 0,014 и 0,074 эВ.

Таким образом, измерения спектров поглощения проводились в диапазоне спектра от 4,5 до 10,5 эВ[8].

Для изучения термического отжига оптического поглощения центров окраски, созданных в монокристаллах BaF_2 и CaF_2 под воздействием быстрых ионов ^{132}Xe , был выполнен пошаговый отжиг радиационно-индуцированных дефектов. Множественные циклы "нагрев-охлаждение-измерение" выполнялись в идентичных условиях с увеличением температуры отжига ($T_{отж}$) на 20-30 К. Все спектры измерялись при комнатной температуре.

Результаты и обсуждение

На рисунке 2 представлены спектры радиационно-наведенного оптического поглощения монокристаллов BaF_2 , облученных ионами ^{132}Xe энергией 220 МэВ при 295 К, в зависимости от флюенса ($1 \times 10^{11} - 1 \times 10^{14}$) ion/cm^2 и CaF_2 , облученных ионами ^{132}Xe энергией 230 МэВ при комнатной температуре в зависимости от флюенса ($5 \times 10^{12} - 1 \times 10^{14}$) ion/cm^2 .

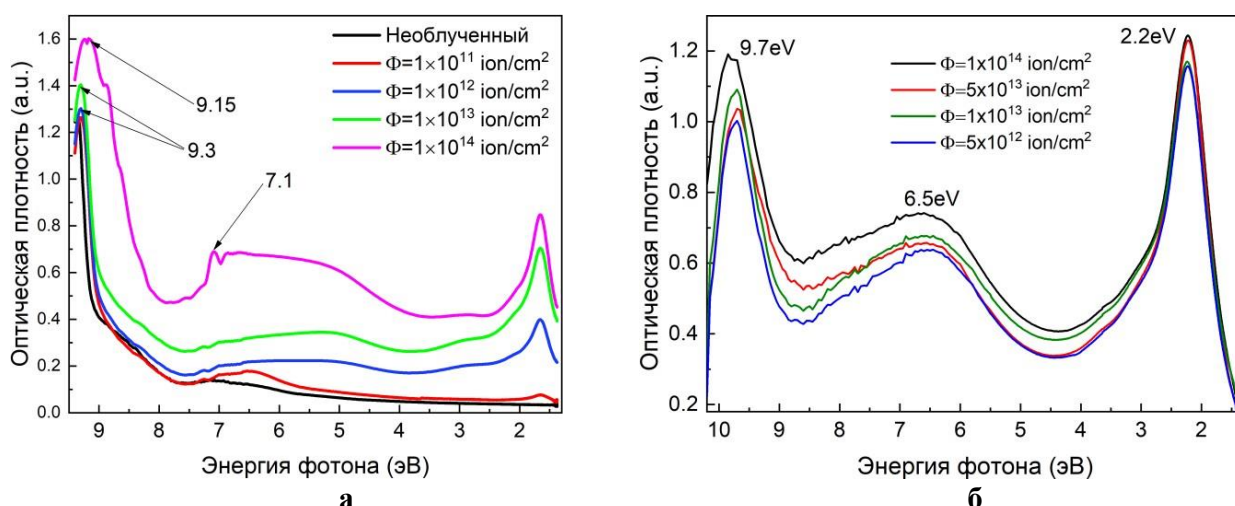


Рисунок 2. Спектры поглощения: а - кристаллов BaF_2 , облученных ионами 220 МэВ ^{132}Xe при RT в зависимости от флюенса ($1 \times 10^{11} - 1 \times 10^{14}$) ion/cm^2 ; б – кристаллов CaF_2 , облученных ионами 230 МэВ ^{132}Xe при RT в зависимости от флюенса ($5 \times 10^{12} - 1 \times 10^{14}$) ion/cm^2

Как можно видеть из рисунка 2, облучение быстрыми тяжелыми ионами ^{132}Xe индуцирует в исследуемых образцах интенсивные полосы оптического поглощения, за которое ответственны радиационные дефекты электронного и дырочного характера. В обоих образцах мы видим три группы структурных сложных полос поглощения. Полосы в видимой области спектра около 2 эВ, очевидно, связаны с электронными центрами окраски F-типа и коллоидами металла. Поглощение в районе 6 эВ приписывается агрегатным дырочным центрам.

На рисунке 3 представлены дозовые зависимости радиационно-индуцированной оптической плотности для отдельных значений энергий фотона для кристалла CaF_2 . Следует отметить, что с ростом флюенса оптическая плотность и, соответственно, концентрация дефектов увеличивается.

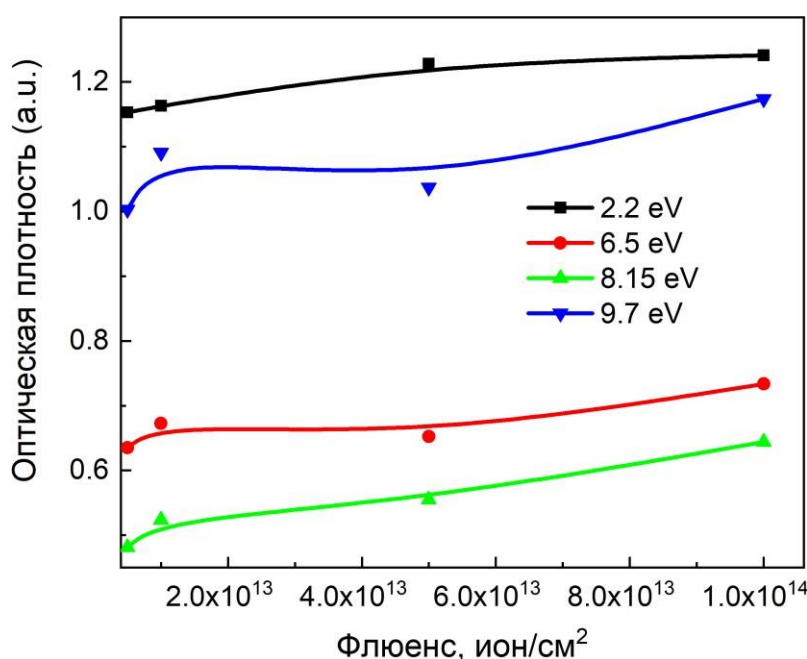


Рисунок 3. Зависимость радиационно-индуцированной оптической плотности для отдельных значений энергий фотона для кристаллов CaF_2 , облученных ионами ^{132}Xe с энергией 230 МэВ при RT, от флюенса ионов ($5 \times 10^{12} - 1 \times 10^{14}$) ион/см²

Основные концепции для центров окраски были разработаны при исследовании щелочно-галогидных кристаллов (ЩГК)[9]. Аналогичные идеи были использованы для радиационных дефектов в галогенидах щелочноземельных металлов, поэтому в дальнейшем все вышеупомянутые кристаллы будут определяться как ионно-галогидные кристаллы. Схематические изображения электронных центров окраски в кристаллах BaF_2 и CaF_2 приведены на рис. 4, но также существуют комплементарные им дырочные центры окраски, которые будут рассмотрены ниже. Оптические характеристики центров окраски в кристаллах фторида бария и фторида кальция даны в таблице 2.

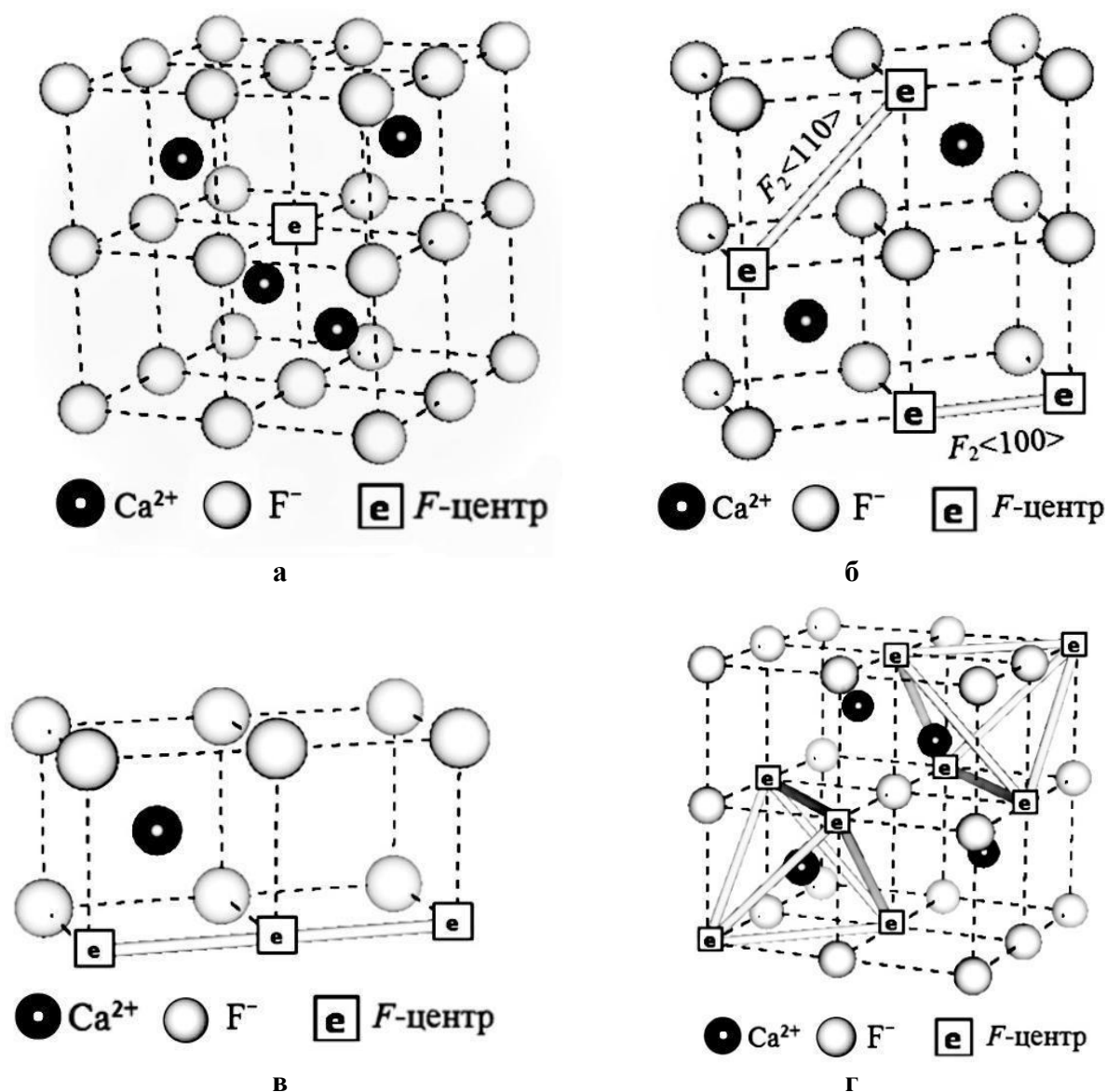


Рисунок 4. Схематическое изображение основных электронных центров окраски в кристаллах BaF_2 и CaF_2 : а) F центр; б) F_2 центр; в) F_3 центр; г) F_4 центр

Таблица 2. Характеристики центров окраски в CaF_2 и BaF_2 [10-15]

Дефект	Модель дефекта	Полоса поглощения (эВ)		Температура разрушения (К)	
		CaF_2	BaF_2	CaF_2	BaF_2
α центр	v_a	–		110	
F центр	$v_a + e^-$	3,3	2,3 2.046	250	
F_2 центр	$2 v_a + e^-$	2,25 3,44 4,13		–	

F_3 центр	3F	1,83 1,86	1,83 3.04	–	
V_2	квазимолекула(фтор) F_3^-	6,5	6,5		
F_4 центр	4F	2,24 3,25		–	
V_k	(фтор) F_2^-	3,38	3,4 (80K)	~430 K	
		9,7			

В[11] показали, что термическое и оптическое разрушение спектра ЭПР коррелирует с термическим и оптическим разрушением центров, ответственных за полосы поглощения при 3,4 и 2,3 эВ для кристаллов BaF_2 . Из данных соображений можно заключить, что Х-облучение недопированного BaF_2 при 77 К приводит к образованию V_k -центров с поглощением при 3,4 эВ и F-центров с поглощением при 2,3 эВ. Полоса поглощения при 2,3 эВ, вероятно, возникает из-за F-центра, который связан с отрицательно заряженными фторными интерстициями, в отличие от полосы поглощения около 2,03 эВ (611 нм).

Для анализа спектров поглощения кристаллов BaF_2 и CaF_2 до и после отжига воспользуемся схемой дефектов в кристалле КВг, который является типичным представителем ЩГК, рисунок 5 и таблицей 2.

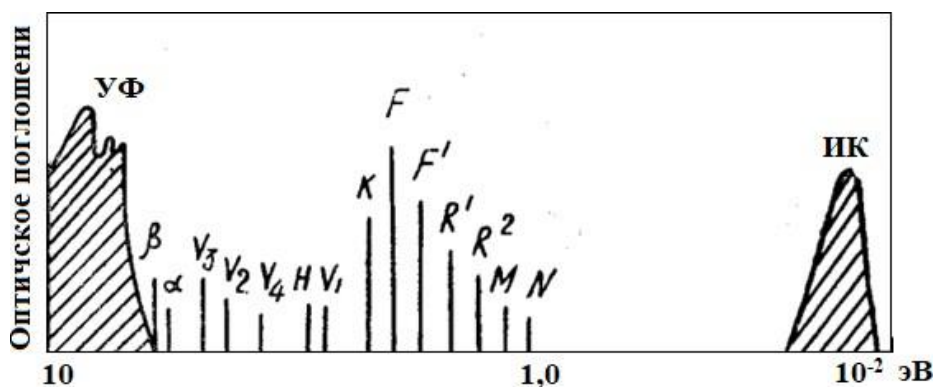


Рисунок 5. Схематический спектр оптического поглощения ЩГК

На рисунке 5 схематически изображено положение полос поглощения в кристалле КВг после облучения при комнатной температуре и при гелиевых температурах. Беспримесный и бездефектный кристалл КВг имеет поглощение в ультрафиолетовой (УФ) и инфракрасной областях спектра (ИК). На краю собственного фундаментального поглощения в УФ при 10 эВ имеются два пика, связанные с экситонными возбуждениями. В ИК при 0,01 эВ, находится полоса поглощения, связанная с оптическими колебаниями ионов решетки. До облучения область между УФ и ИК прозрачна. После облучения ионизирующей радиацией в спектрах поглощения появляются полосы поглощения центров окраски. Наиболее интенсивная полоса поглощения связана с F центрами, в коротковолновой стороне от F центра располагаются полосы K и L1, 2, 3,

представляющие переход на внешние возбуждённые состояния F центра. Далее идут дырочные V, H центры. В длинноволновой области спектра от F центра располагаются сложные электронные центры окраски (M, R, N). На длинноволновом крае экситонного поглощения наблюдаются α - и β -полосы поглощения. α -полоса связана с возбуждением иона галоида, расположенного рядом с анионной вакансией, а β -полоса возникает при возбуждении иона галоида, расположенного рядом с F центром. Подобные спектры оптического поглощения характерны для всех ЦГК и могут найти распространение на другие типы ионных кристаллов.

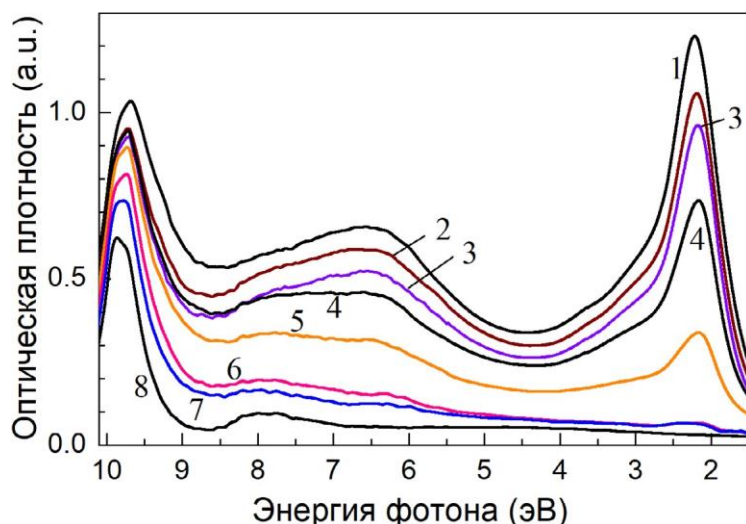


Рисунок 6. Спектры оптического поглощения монокристаллов CaF_2 после облучения ионами 230 МэВ ^{132}Xe до флюенса $\Phi = 5 \times 10^{13}$ ион/см² и пошагового отжига в интервале температур (440-1023K) 1 – после облучения; 2 – 440°K; 3 – 470°K; 4 – 500 K; 5 – 540°K; 6 – 580°K; 7 – 660°K; 8 – 773 K; 9 – 1023 K; кристаллы облучались при 295°K[8]

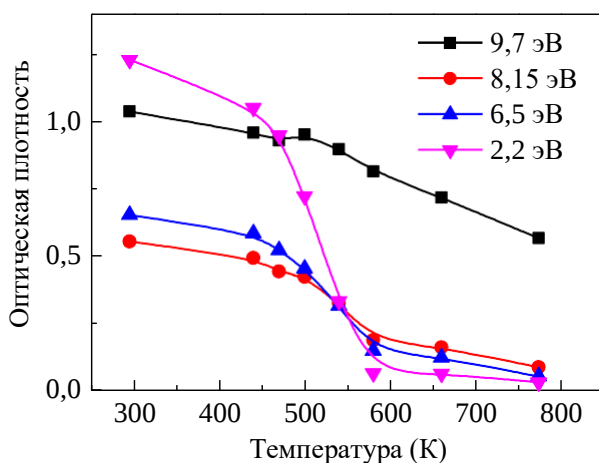


Рисунок 7. Зависимость индуцированного оптического поглощения в разных спектральных областях от температуры промежуточных прогревов для кристалла CaF_2 , облученного при 295°K ионами 230 МэВ Xe^{132} с флюенсом $5 \cdot 10^{13}$ ион/см²[8]

На рисунках 6 и 7 показана зависимость оптической плотности, облученного ионами CaF_2 ($\Phi = 5 \cdot 10^{13} \text{Xe}/\text{см}^2$), от температуры отжига [8]. Для CaF_2 интенсивность полосы при 9,7 эВ остается стабильной до высоких температур. Понижение полосы в большей степени связано с уходом поглощения перекрывающихся полос, полоса также незначительно увеличивается после нагрева от 400 до 500 К. Стабильность полосы при 9,7 эВ указывает на то, что с ней связаны дефекты, стабильные до высоких температур. Основной отжиг других полос поглощения происходит в интервале 460-580 К.

На рисунке 6 спектры измерялись после облучения и после промежуточных нагреваний до определенных температур от 440 К до 1023 К для кристалла CaF_2 . Оптическое поглощение при 3 эВ уходит менее интенсивно по сравнению с поглощением при 2,3 эВ и их интенсивности сравниваются примерно при нагреве до 570 К, а также с интенсивностью полосы 8,15 эВ. Согласно литературным данным, поглощение в интервале 1,5-4 эВ связано с электронными центрами окраски [1], т.е. агрегатными центрами F типа [1,16], а также с коллоидами кальция [17]. Спектральная область ~4,5-8,5 эВ содержит ряд широких и перекрывающихся полос радиационно-индуцированного оптического поглощения с основным максимумом около 6,5 эВ. Наряду с электронными центрами окраски при радиационном воздействии в кристалле создаются комплементарные им дырочные центры. Структурная полоса поглощения при 6,5 эВ по всей вероятности связана с наиболее стабильными при комнатной температуре дырочными комплексами – трехгалогидными квазимолекулами фтора F_3^- . Уход полос 3 эВ, 2,2 эВ и 6,5 эВ, можно объяснить разрушением этих центров. При повышении температуры происходит разрушение дырочных комплексных центров и их миграция по кристаллу, в результате при встрече с электронными центрами происходит их рекомбинация. Согласно рисунку 5, если проводить аналогию с KBr, то за оптическое поглощение около 9,7 эВ в CaF_2 частично могут отвечать в том числе и сложные агрегатные дырочные центры. Соответственно полоса 9,7 эВ может быть обусловлена более сложными агрегатами дырочных центров. Центр, отвечающий за полосу с максимумом 8,15 эВ, также имеет, вероятно, дырочную природу и структуру, близкую к центру, связанному с поглощением при 6,5 эВ.

В предыдущих исследованиях [8,18] указано, что полоса при 9,7 эВ в CaF_2 , наводится только при облучении высокоэнергетическими ионами, тогда как облучение протонами и рентгеновскими лучами не приводит к росту оптического поглощения в данной области. Ранее определено [19], что разупорядочение фтористой подрешетки в материалах со структурой флюорита начинается на несколько сотен градусов ниже температуры плавления. Процесс связан с образованием кластеров, состоящих из интерстициалов и вакансий фтора, а также окружающих их релаксированных (слегка смещенных в сторону вакансий) анионов. Эти кластеры нестабильны; они существуют при высоких температурах и исчезают при охлаждении кристалла. Однако в [20] показано, что кластеры могут быть заморожены путем термического тушения (заковки) и именно они ответственны за интенсивное ВУФ-поглощение на несколько эВ ниже края фундаментального поглощения. В статье [18] предположено, что подобная ситуация могла бы реализоваться при облучении монокристалла CaF_2 высокоэнергетическими ионами при комнатной температуре, а стабильная при высоких температурах полоса поглощения при 9,7 эВ связана с первыми стадиями разупорядочения анионной под решетки. При облучении ионами ^{132}Xe в области ионного трека происходит разупорядочение решетки, особенно в

анионной подрешетке. В то же время имеет место быстрое охлаждение данной области до комнатной температуры, в результате чего кристаллическая решетка в области ионного трека может не успеть полностью восстановиться и анионные кластеры могут остаться стабильными.

Таким образом, рост оптического поглощения в области 9,7 эВ в монокристаллах CaF_2 , облученных высокоэнергетическими ионами Xe^{132} , может быть совокупным следствием разупорядочения анионной подрешетки с образованием анионных кластеров в большей мере и образования сложных дырочных центров окраски, также в анионной подрешетке, в меньшей мере.

В спектрах поглощения кристаллов BaF_2 после облучения ионами 220 МэВ ^{132}Xe также присутствует ряд неидентифицированных полос поглощения, рисунки 2а и 8. Кривые температурной зависимости оптической плотности отдельных полос поглощения представлены на рисунке 9. Для удобства анализа кривые были разделены на УФ область и видимую -ИК область спектра. В видимой и ИК области спектра доминирует поглощение F_2 центров с максимумом 1,62 эВ, с температурой отжига, по нашим данным, 475К. Отжиг имеет трехстадийный характер, причем две последние стадии совпадают с отжигом полосы 9,18 эВ. Двухстадийность последнего, скорее всего, связана с тем, что это дырочный сложный агрегат. Отжиг этой полосы сопровождается также отжигом F_3 и F_4 центров (1,83 и 2,24 эВ, соответственно).

В УФ области спектра наблюдается небольшое увеличение полосы 9,18 эВ в интервале температур 450-575К, которое сопровождается уменьшением полос с максимумами при 6,5 и 8,2 эВ, то есть последняя также имеет дырочную природу. Полосы 7,4 эВ, 2,24 эВ и 3,04 эВ практически не изменяются во всем интервале температур отжига.

Так как кристалл BaF_2 также имеет структуру флюорита, справедливо предположить, что высокоэнергетические полосы оптического поглощения также могут быть связаны с разупорядоченностью в анионной подрешетке с образованием фторных кластеров.

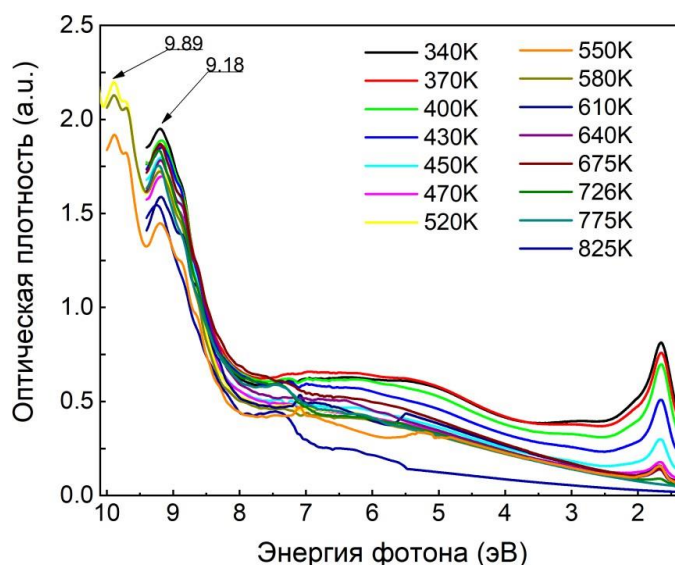


Рисунок 8. Спектры оптического поглощения монокристаллов BaF_2 после облучения ионами 220 МэВ ^{132}Xe до флюенса $\Phi = 1 \times 10^{14} \text{Xe}/\text{см}^2$ и пошагового отжига в интервале температур (340-825 К)

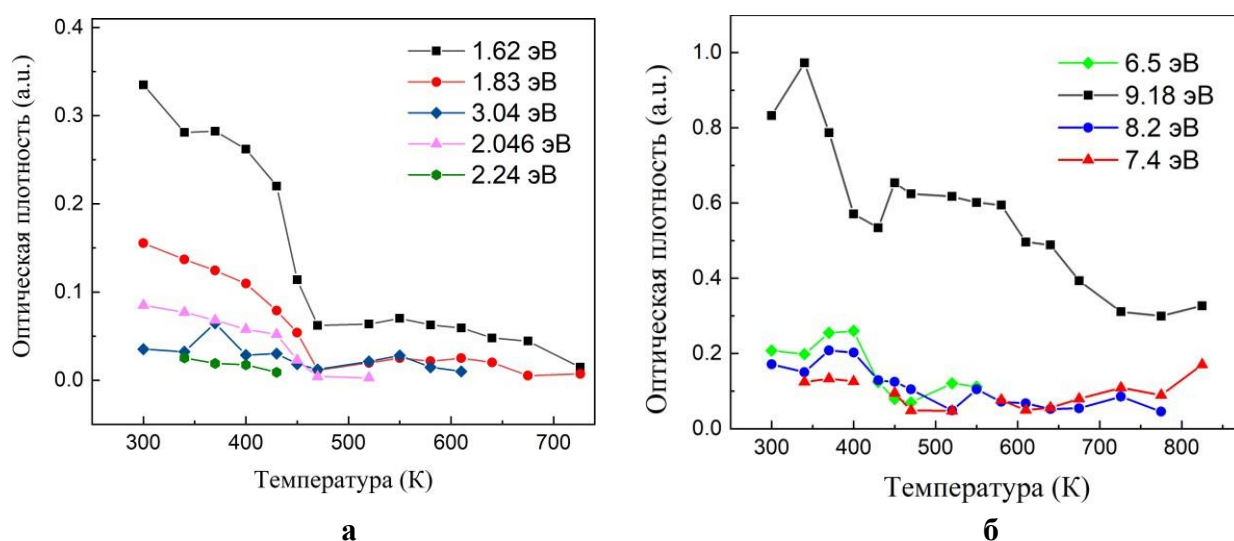


Рисунок 9. Зависимость индуцированного оптического поглощения в разных спектральных областях от температуры промежуточных прогревов для кристалла BaF_2 , облученного при 295°K ионами ^{132}Xe , дофлюенса 1×10^{14} ион/см²: а- видимая и ИК область, б – УФ область

Заключение

Монокристаллы BaF_2 и CaF_2 характеризуются высокой радиационной стойкостью и высоким сцинтилляционным временным разрешением, вследствие чего они широко используются в физике высоких энергий в качестве детекторов. В настоящей работе исследуются радиационные дефекты в кристаллах BaF_2 и CaF_2 при облучении ионами ^{132}Xe с энергией 220 и 230 МэВ, соответственно, до флюенсов 10^{11} - 10^{14} ион/см², моделирующими энергию осколков деления ядерного топлива. Спектры оптического поглощения измерялись в широком спектральном интервале от вакуумного ультрафиолета до ближнего ИК (10-1,5) эВ. Термический отжиг центров окраски, созданных быстрыми тяжелыми ионами в монокристаллах BaF_2 и CaF_2 , был проведен в режиме пошагового отжига с последующим измерением спектра поглощения. Многочисленные циклы "нагрев-охлаждение-измерение" выполнялись в идентичных условиях с увеличением температуры отжига ($T_{отж}$) на 20-30 К. Все спектры измерялись при RT.

Предполагается, что в радиационно-индуцированную полосу поглощения при 9,7 эВ в CaF_2 имеют суммарный вклад анионные кластеры, созданные в области ионного трека, и сложные комплексные дырочные агрегаты. Центр, отвечающий за полосу с максимумом 8,15 эВ предположительно имеет дырочную природу и структуру, близкую к центру 6,5 эВ. В УФ области спектра BaF_2 наблюдается небольшое увеличение полосы 9,18 эВ в интервале температур 450-575 К, которое сопровождается уменьшением полос с максимумами 6,5 и 8,2 эВ, то есть последняя также имеет дырочную природу. Полосы 7,4 эВ, 2,24 эВ и 3,04 эВ практически не изменяются во всем интервале температур отжига. Установлены температуры термического разрушения центров окраски различного типа. По аналогии

с CaF_2 , в Хе-облученных монокристаллах BaF_2 высокоэнергетические полосы ниже фундаментального поглощения также могут иметь природу анионных кластеров.

Благодарность, конфликт интересов

Работа выполнена в рамках грантового проекта АР14870572 Министерства науки и высшего образования РК.

Вклад авторов.

А. Акилбеков – создание концепции. Анализ и обобщение результатов исследования.

А. Даулетбекова – анализ литературных источников. Написание таких разделов, как введение, результаты и обсуждение, заключение.

Р. Асылбаев – проведение пошагового отжига и измерение спектров поглощения кристаллов CaF_2 .

Д. Кенбаев – проведение облучения кристаллов и измерения спектров поглощения в зависимости от флюенса.

Г. Аралбаева – проведение пошагового отжига и измерения спектров поглощения кристаллов BaF_2 . Общее редактирование статьи.

Б. Садуова – сбор литературных источников, построение различных графиков и рисунков.

Список литературы

1. Hayes W. Crystals with the fluorite structure - electronic, vibrational and defect properties. London: Clarendon Press, 1974. 448 p.
2. Bugaenko T.Yu., Radzhabov E.A., Ivashechkin V.F. Thermal decay of photochromic color centers in CaF_2 , SrF_2 , and BaF_2 crystals doped by La and Y impurities // Physics of the Solid State. 2008. Vol. 50, № 9. P. 1671–1673.
3. Itoh N., Stoneham A.M. Materials modification by electronic excitation // Radiation Effects and Defects in Solids. 2001. Vol. 155, № 1–4. P. 277–290.
4. Boccanfuso M. et al. Study of the damage produced in CaF_2 by swift heavy ion irradiation // NuclInstrum Methods Phys Res B. 2002. Vol. 191, № 1–4. P. 301–305.
5. Davidson A.T. et al. The colouration of CaF_2 crystals by keV and GeV ions // Radiation Effects and Defects in Solids. 2002. Vol. 157, № 6–12. P. 637–641.
6. Aumayr F. et al. Single ion induced surface nanostructures: a comparison between slow highly charged and swift heavy ions // Journal of Physics: Condensed Matter. 2011. Vol. 23, № 39. P. 393001.
7. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010) // NuclInstrum Methods Phys Res B. 2010. Vol. 268, № 11–12. P. 1818.
8. Assylbayev R. et al. Radiation damage caused by swift heavy ions in CaF_2 single crystals // Radiat Meas. Pergamon, 2016. Vol. 90. P. 18–22.
9. Catlow C.R.A., Diller K.M., Hobbs L.W. Irradiation-induced defects in alkali halide crystals // Philosophical Magazine A. 1980. Vol. 42, № 2. P. 123–150.
10. El-Said A.S. et al. Study of heavy-ion induced modifications in BaF_2 and LaF_3 single crystals // NuclInstrum Methods Phys Res B. 2004. Vol. 218. P. 492–497.

11. Bochkareva E.S. et al. Formation of metal nanoparticles in MgF_2 , CaF_2 and BaF_2 crystals under the electron beam irradiation // NuclInstrum Methods Phys Res B. 2017. Vol. 403. P. 1–6.
12. Magneto optical properties of F-centres in alkaline earth fluorides // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. 1969. Vol. 309, № 1496. P. 53–68.
13. Kotomin E.A., Popov A.I. The kinetics of radiation-induced point defect aggregation and metallic colloid formation in ionic solids // Radiation Effects in Solids. Dordrecht: Springer Netherlands. P. 153–192.
14. Beaumont J.H., Hayes W. M-centres in alkaline earth fluorides // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. 1969. Vol. 309, № 1496. P. 41–52.
15. Collins W.C. The M^{+} Center in CaF_2 // physica status solidi (b). 1973. Vol. 56, № 1. P. 291–298.
16. Shcheulin A.S. et al. Photothermal transformation of color centers in CaF_2 crystals // OptSpectrosc. MaikNauka-Interperiodica Publishing, 2015. Vol. 118, № 4. P. 542–546.
17. Alcala R., Orera V.M. Cation colloidal particles in alkaline-earth halides // Le Journal de Physique Colloques. 1976. Vol. 37, № C7. P. 520–525.
18. Assylbayev R. et al. Structural defects caused by swift ions in fluorite single crystals // Opt Mater (Amst). North-Holland, 2018. Vol. 75. P. 196–203.
19. Hutchings M.T. et al. Investigation of thermally induced anion disorder in fluorites using neutron scattering techniques // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1984. Vol. 17, № 22. P. 3903–3940.
20. Ryskin A.I. et al. Stabilization of high-temperature disorder of fluorine sublattice by quenching in calcium fluoride crystals // J Fluor Chem. 2017. Vol. 200. P. 109–114.

Р.Асылбаев¹, Д.Кенбаев², А.Даулетбекова³, Б.Садуова³, Г.Аралбаева^{*3}, А.Акилбеков³

¹Маргулан университеті, Павлодар, Қазақстан

²Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан

³Л. Н. Гумилеватындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Жылдам ксенон иондарымен сәулеленген BaF_2 және CaF_2 кристалдарының сәулеленуден туындаған оптикалық жұтылуының термиялық күйдіруі

Аңдатпа. BaF_2 және CaF_2 кристалдары жоғары радиациялық төзімділікке ие және олар уақыттық шешу қабілеті жоғары сцинтилляторлар ретінде физика саласында жоғары энергиялы зерттеулерде қолданылады. Бұл жұмыста BaF_2 және CaF_2 кристалдарын 10^{11} – 10^{14} ион/см² флюенста, 220 және 230 МэВ энергиямен ¹³²Xe иондарымен сәулелендіруден кейінгі түзілген радиациялық ақаулар бойынша зерттеулер жүргізілді. Оптикалық жұтылу спектрлері 10-нан 1,5 эВ аралығында өлшенді. BaF_2 және CaF_2 монокристалдарында түзілген түс орталықтарының термиялық күйдірілуін зерттеу үшін радиациялық ақауларды кезең-кезеңімен күйдірмелеу жүргізілді. Бірдей жағдайларда бірнеше "қыздыру-суыту-өлшеу" циклдары өткізілді, күйдірмелеу температурасы (Ткүйд) 20-30 К-қа дейін көтеріліп отырды. Барлық спектрлер бөлме температурасында өлшенді. CaF_2 -де 9,7 эВ радиацияның жұту жолағына жалпы үлесті иондық трек аймағында түзілген аниондық кластерлер және күрделі кемтіктік агрегаттары

қосады деп болжанады. 8,15 эВ максимуммен белгіленген жолақта кемтіктіксіпатына және 6,5 эВ орталығына ұқсас құрылымға ие. BaF₂ спектрінің УК аймағында 450-575К температура аралығында 9,18 эВ диапазонының шамалы ұлғаюы байқалады, бұл 6,5 және 8,2 эВ максимумдарымен жолақтардың азаюымен қатар жүреді, соңғысының да кемтіктіксіпаты бар. 7,4 эВ, 2,24 эВ және 3,04 эВ жолақтары күйдіру температурасының барлық диапазонында іс жүзінде өзгеріссіз қалады. CaF₂ ұқсастығы бойынша Хе-сәулеленген BaF₂ монокристалдарында іргелі жұтылудан төмен жоғары энергиялық жолақтар да аниондық кластерлер сипатында болуы мүмкін.

Түйін сөздер: BaF₂ және CaF₂ кристалдары, жылдам ауыр иондар, радиациялық ақаулар, оптикалық жұтылу спектрлері, термиялық күйдіру.

R. Assylbayev¹, D. Kenbayev², A. Dauletbekova³, B. Saduova³, G. Aralbayeva³,
A. Akilbekov³

¹Margulan University, Pavlodar, Kazakhstan

²Shakarim University, Semey, Kazakhstan

³L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Thermal annealing of radiation-induced optical absorption of BaF₂ and CaF₂ crystals irradiated with fast xenon ions

Abstract. BaF₂ and CaF₂ crystals possessing high radiation resistance and as high-time resolution scintillators are used in high energy physics. In the present work, radiation defects in BaF₂ and CaF₂ crystals are investigated upon irradiation with 220 and 230 MeV ¹³²Xe ions to fluences of 10¹¹-10¹⁴ ions/cm². Optical absorption spectra were measured in the range from 10 to 1.5 eV. To study thermal annealing of the coloration centers created in BaF₂ and CaF₂ single crystals, step-by-step annealing of radiation defects was carried out. Multiple heating-cooling-measurement cycles were performed under identical conditions with increasing annealing temperature (T_{ann}) by 20-30 K. All spectra were measured at RT. It is assumed that the radiation-induced absorption band at 9.7 eV in CaF₂ is made up of a combined contribution of anion clusters created in the ion track region and complex hole aggregates. The center responsible for the 8.15 eV band also has a hole nature and a structure close to the 6.5 eV center. In the UV region of the BaF₂ spectrum, a slight increase of the 9.18 eV band is observed in the temperature range 450-575K, which is accompanied by a decrease of the bands with maxima of 6.5 and 8.2 eV, i.e., the latter is also of hole nature. The bands 7.4 eV, 2.24 eV and 3.04 eV practically do not change in the whole annealing temperature range. By analogy with CaF₂, in Xe-irradiated BaF₂ single crystals, the high-energy bands below the fundamental absorption can also be of anion cluster nature.

Keywords: BaF₂ and CaF₂ crystals, swift heavy ions, radiation defects, optical absorption spectra, thermal annealing,

References

1. Hayes W. Crystals with the fluorite structure - electronic, vibrational and defect properties. London: Clarendon Press, 1974. 448 p.

2. Bugaenko T.Yu., Radzhabov E.A., Ivashechkin V.F. Thermal decay of photochromic color centers in CaF_2 , SrF_2 , and BaF_2 crystals doped by La and Y impurities // *Physics of the Solid State*. 2008. Vol. 50, № 9. P. 1671–1673.
3. Itoh N., Stoneham A.M. Materials modification by electronic excitation // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2001. Vol. 155, № 1–4. P. 277–290.
4. Boccanfuso M. et al. Study of the damage produced in CaF_2 by swift heavy ion irradiation // *NuclInstrum Methods Phys Res B*. 2002. Vol. 191, № 1–4. P. 301–305.
5. Davidson A.T. et al. The colouration of CaF_2 crystals by keV and GeV ions // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2002. Vol. 157, № 6–12. P. 637–641.
6. Aumayr F. et al. Single ion induced surface nanostructures: a comparison between slow highly charged and swift heavy ions // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2011. Vol. 23, № 39. P. 393001.
7. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010) // *NuclInstrum Methods Phys Res B*. 2010. Vol. 268, № 11–12. P. 1818.
8. Assylbayev R. et al. Radiation damage caused by swift heavy ions in CaF_2 single crystals // *Radiat Meas. Pergamon*, 2016. Vol. 90. P. 18–22.
9. Catlow C.R.A., Diller K.M., Hobbs L.W. Irradiation-induced defects in alkali halide crystals // *Philosophical Magazine A*. 1980. Vol. 42, № 2. P. 123–150.
10. El-Said A.S. et al. Study of heavy-ion induced modifications in BaF_2 and LaF_3 single crystals // *NuclInstrum Methods Phys Res B*. 2004. Vol. 218. P. 492–497.
11. Bochkareva E.S. et al. Formation of metal nanoparticles in MgF_2 , CaF_2 and BaF_2 crystals under the electron beam irradiation // *NuclInstrum Methods Phys Res B*. 2017. Vol. 403. P. 1–6.
12. Magneto optical properties of F centres in alkaline earth fluorides // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. 1969. Vol. 309, № 1496. P. 53–68.
13. Kotomin E.A., Popov A.I. The kinetics of radiation-induced point defect aggregation and metallic colloid formation in ionic solids // *Radiation Effects in Solids*. Dordrecht: Springer Netherlands. P. 153–192.
14. Beaumont J.H., Hayes W. M centres in alkaline earth fluorides // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. 1969. Vol. 309, № 1496. P. 41–52.
15. Collins W.C. The M^+ Center in CaF_2 // *physica status solidi (b)*. 1973. Vol. 56, № 1. P. 291–298.
16. Shcheulin A.S. et al. Photothermal transformation of color centers in CaF_2 crystals // *OptSpectrosc. MaikNauka-Interperiodica Publishing*, 2015. Vol. 118, № 4. P. 542–546.
17. Alcalá R., Orera V.M. Cation colloidal particles in alkaline-earth halides // *Le Journal de Physique Colloques*. 1976. Vol. 37, № C7. P. 520–525.
18. Assylbayev R. et al. Structural defects caused by swift ions in fluorite single crystals // *Opt Mater (Amst)*. North-Holland, 2018. Vol. 75. P. 196–203.
19. Hutchings M.T. et al. Investigation of thermally induced anion disorder in fluorites using neutron scattering techniques // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1984. Vol. 17, № 22. P. 3903–3940.
20. Ryskin A.I. et al. Stabilization of high-temperature disorder of fluorine sublattice by quenching in calcium fluoride crystals // *J Fluor Chem*. 2017. Vol. 200. P. 109–114.

Сведения об авторах:

Асылбаев Р.Н. – PhD, доцент, Павлодарский педагогический университет имени Алкея Маргулана, ул, Мира, 60, 140000, Павлодар, Казахстан.

Кенбаев Д.Х. – преподаватель, Университет имени Шакарима города Семей, ул, Глинки, 20а, 071412, Семей, Казахстан.

Даулетбекова А.К. – к.ф.-м.н., профессор, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, ул, Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан.

Садуова Б. – докторантка 3 курса по специальности 8D05302 «Техническая физика», Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, ул, Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан.

Аралбаева Г.М. – автор для корреспонденции, PhD, и.о.доцента, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, ул, Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан.

Акилбеков А.Т. – доктор ф.-м.н., профессор, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, ул, Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан.

Assylbaev R.N. – PhD, Associate Professor, Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Mira Street, 60, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

Kenbaev D.K. – teacher, Shakarim University of Semey city, Glinka Street, 20a, 071412, Semey, Kazakhstan

Dauletbekova A.K. – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satbayev Street, 2, 010000, Astana, Kazakhstan

Saduova B. – 3rd year PhD student in specialty 8D05302 Technical Physics, Eurasian National University named after L. N. Gumilyov, Satbaev str., 2, 010000, Astana, Kazakhstan

Aralbaeva G.M. – corresponding author, PhD, Acting Associate Professor, L. N. Gumilyov Eurasian National University, Satbaev str., 2, 010000, Astana, Kazakhstan

Akilbekov A.T. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, L. N. Gumilyov Eurasian National University, Satbaev str., 2, 010000, Astana, Kazakhstan

Асылбаев Р.Н. – PhD докторы, Әлкей Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университетінің доценті, Мира көш., 60, 140000, Павлодар, Қазақстан

Кенбаев Д.Х. – оқытушы, Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті, Глинки көш., 20а, 071412, Семей, Қазақстан

Дәулетбекова А.Қ. – ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилева атындағы Еуразия ұлттық университетінің профессоры, Сәтбаев көш., 2, 010000, Астана, Қазақстан

Садуова Б. – Л.Н. Гумилева атындағы Еуразия ұлттық университетінің 8D05302 Техникалық физика мамандығының 3 курс докторанты, Сәтбаев көш., 2, 010000, Астана, Қазақстан

Аралбаева Г.М. – корреспондент автор, PhD докторы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., Сәтбаев көш., 2, 010000, Астана, Қазақстан

Акилбеков А.Т. – ф.-м.ғ.д., Л.Н. Гумилева атындағы Еуразия ұлттық университетінің профессоры, Сәтбаев көш., 2, 010000, Астана, Қазақстан



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



Ab-initio calculations for the search for stable structures for iron-phosphorus and nickel-phosphorus systems

A.B. Bazarbek^{*1}, A.D. Akylbekova¹, G.D. Kabdrakhimova¹, A.Sh. Omarkhan¹,
A.A. Nogai²

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Kazakh Agro-Technical Research University

(E-mail: asyl.bazarbek.92@mail.ru)

Abstract. The study of the internal structure of our planet is one of the most relevant topics in fundamental research. In particular, the analysis of the phase ratios of iron and nickel compounds with light elements at high pressures is an important task for determining the composition and structure of the core of our planet. Due to the complexity of conducting experiments at such high pressures (in the Earth's core ~365 GPa), ab-initio calculations become a useful method for conducting such studies.

With the advent of new algorithms for searching for crystal structures, such as USPEX, AIRSS and CALYPSO, the number of studies and available data on compounds of iron-nickel-containing systems with light elements has increased significantly. These tools have significantly expanded our capabilities in studying the internal processes in planets, creating broader prospects for further research and understanding the evolution of planetary bodies. The integration of these advanced computational methods makes it possible to accurately predict stable and metastable phases of iron compounds under extreme conditions, providing invaluable data on the behavior of materials in the conditions of the Earth's core.

Key words: high pressure physics, ab-initio calculations, quantum chemical modeling, fundamental research, crystal structures.

Introduction

The inner core of the Earth consists of pure iron and its alloy with nickel, as well as impurities of light elements such as hydrogen, carbon, nitrogen, oxygen, silicon, phosphorus and sulfur [1].

Under conditions of high pressure and temperature of the Earth's inner core, iron can undergo phase changes, forming various structures that affect the properties of the core. In addition, the simulation results [2] show that in an iron-phosphorus alloy in the Earth's core, Ni can significantly affect the structure and formation of a solid inner core. The study of the composition and properties of the Earth's core, including the role of an iron-nickel alloy with an admixture of phosphorus, is the key to understanding the dynamics and evolution of our planet [3].

At atmospheric pressure, three intermediate compounds are known in the Fe–P system – FeP, Fe₂P and Fe₃P [4]. At atmospheric pressure, FeP has an MnP-type structure, characterized by a *Pnma* spatial group. Gu et al. [5] used the method of X-ray powder diffraction and Mossbauer spectroscopy to study FeP up to 15.6 GPa. This experiment showed that FeP remains in the MnP type structure throughout the considered range.

It was believed that at atmospheric pressure Fe₂P is represented in the structure of barringerite (P6̄2m) [6]. However, recent results of an experimental study by Litasov et al. [7] have shown that allabogdanite is a thermodynamically stable polymorphic modification of Fe₂P at atmospheric pressure.

At atmospheric pressure, Fe₃P has a schreibersite (*I4̄*) structure. At high pressures, the structure of schreibersite undergoes changes. Thus, Scott et al. [8, 9] conducted experiments in a diamond cell up to 30 GPa. The authors showed that the schreibersite structure undergoes significant compaction above 8 GPa, and peaks of unidentified structure are observed on the X-ray between 17 and 30 GPa. In addition, according to recent data [10], Fe₃P showed thermodynamic stability up to 40 GPa at high pressure and crystallizes into a tetragonal structure.

At atmospheric pressure, the Ni–P system is characterized by the presence of many phases with different crystal structures [11]: Ni₃P, Ni₈P₃, Ni₁₂P₅, Ni₂P, Ni₅P₄, NiP, NiP₂ and NiP₃.

However, at high pressures, the amount of data on compounds in the Ni–P system is limited. Dera et al. [12] investigated the behavior of synthetic Ni₂P in a diamond cell with laser heating at high pressures up to 50 GPa. Under normal conditions, Ni₂P has a hexagonal structure with P6̄2msymmetry (trans jordan mineral). When compressed without heating, Ni₂P remains in the P6̄2mstructure up to at least 50 GPa. Chornkrathok et al. [13] investigated Ni₃P in a diamond cell up to pressures of 50 GPa. During the experiments, it was shown that Ni₃P does not undergo structural phase transitions in the studied pressure range.

The data obtained during such calculations are important for further investigation of the triple Fe–Ni–P system. Therefore, it is important to conduct such studies to establish phase ratios in the Fe–P and Ni–P system at high pressures.

Methods

Quantum chemistry is a powerful tool for studying the properties of molecules, crystals, nanostructures and chemical reactions, which is very useful for many fields of science and

technology. Modern methods of quantum chemistry provide an opportunity to describe various chemical and physical characteristics of molecules, as well as the electronic and spatial structure of molecules in solids in their ground state with an accuracy comparable to the data obtained by experimental methods [14].

Quantum chemistry methods allow us to obtain information about the properties of substances that are sometimes unavailable for experimental analysis, especially when it comes to substances under extreme external conditions, such as high temperatures and/or pressures. In such situations, first principles calculation methods, also called *ab initio*, can be useful. *Ab initio* methods are based solely on the principles of quantum mechanics and seek to solve the electronic Schrodinger equation, taking into account the position of the nuclei and the number of electrons, in order to obtain the necessary data such as electron density, energy and other properties of the system [15].

Due to the difficulty of conducting an experiment at pressures characteristic of the Earth's core – up to ~ 365 GPa, quantum chemical basic calculations are an effective tool for such studies. Examples of the application of basic calculations are a large number of studies, including data on compounds of iron-nickel alloy with light elements has increased significantly. In particular, calculations were performed to search for intermediate compositions and structures in Fe-C and Fe-H [16], Fe-S [17], Fe-N [18], Ni-S [19], Ni-C [20] systems at high pressures.

Studies of the electronic structure were carried out using density functional theory using the VASP software package [21-23]. The exchange-correlation interaction was taken into account using the generalized gradient approximation, presented in the form of the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) functional [24]. All calculations included consideration of spin polarization.

For a more efficient search for crystal structures, the USPEX software package [25] was used, which divides calculations into two stages. At the first stage, the search for stable intermediate stoichiometries was carried out, which led to the construction of thermodynamic convex hulls. At the second stage, a search was performed for each fixed stoichiometry represented on the convex hull.

The search for crystal structures was carried out at 0, 100, 200, 300 and 400 GPa. In all calculations for the search for crystal structures, optimization was carried out within the framework of density functional theory using the conjugate gradient algorithm. The calculated parameters were as follows: the cutting energy of plane waves – 400 eV; the density of the Monkhorst-Pack k-point grid [26] – $0.5 \text{ \AA}^{-1}$; electronic blur – according to the Methfessel – Paxton scheme [27]; smoothing parameter $\sigma = 0.2$ eV. Further, the most energetically advantageous structures were optimized at different pressures with higher accuracy, namely, the cutting energy was increased to 600 eV, the density of k-points was $0.2 \text{ \AA}^{-1}$ and the smoothing parameter $\sigma = 0.1$ eV.

Results

To assess the stability of the phases with respect to decomposition into an isochemical mixture, we used the method of constructing a «convex hull» diagram. To create this diagram, it was necessary to know the stable modifications of pure iron and phosphorus, as well as their enthalpies. Within the pressure range from 0 to 13 GPa, our calculations revealed the well-

known BCC modification of pure iron as the phase with the lowest enthalpy. In the pressure range above 13 GPa and up to 400 GPa, the phase with the lowest enthalpy turned out to be GPU-Fe (see Figure 1). This result corresponds well to the experimental data [28-31].

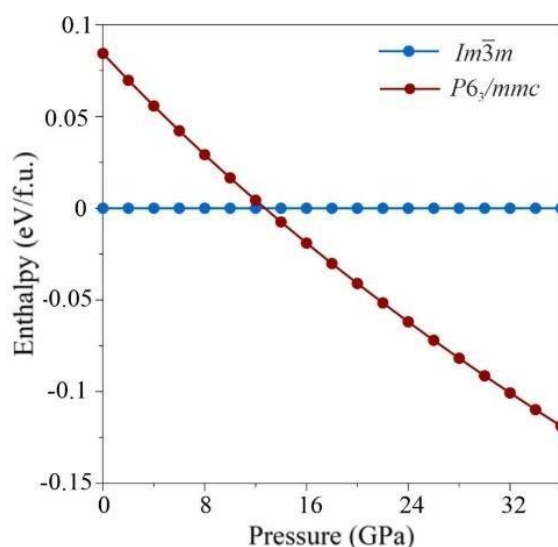


Figure 1 – Dependence of enthalpy on pressure of iron modifications

Note – The results are given with respect to the enthalpy of GPU-Fe

In the case of phosphorus, according to the available experimental data, several structural phase transitions under pressure are observed. The most stable form at atmospheric pressure is the so-called black phosphorus, which is characterized by $Cmca$ symmetry and has the structural designation A17 [32]. According to the calculations, the $Cmca$ structure transitions into a trigonal structure with $R\bar{3}m$ symmetry at 7 GPa (experimental value of 5 GPa [33]) and then into a simple cubic $Pm\bar{3}m$ at 15 GPa (experiment – 11 GPa [34]). In addition, a phase transition from a simple cubic $Pm\bar{3}m$ to a simple hexagonal (P6) structure is observed through the intermediate $Cmcm$ phase in the pressure range 110-127 GPa (experiment – 107-137 GPa [35]). The $Cmcm$ structure is an approximated commensurate model of a disproportionately modulated experimental phase, which is characterized by a four-dimensional supergroup $Cmmm(00\gamma)s00$ [36, 37]. At a pressure of 205 GPa, the P6 structure transforms into a BCC structure ($Im\bar{3}m$). Above 299 GPa, the $Im\bar{3}m$ structure transforms into $I4\bar{3}d$ [38], which is a superstructure of the BCC lattice with small deformations. The $I4\bar{3}d$ structure is stable up to 308 GPa, above which the GPU structure is stabilized, which retains its stability to at least 400 GPa. The result obtained is in good agreement with the available experimental studies (Figure 2).

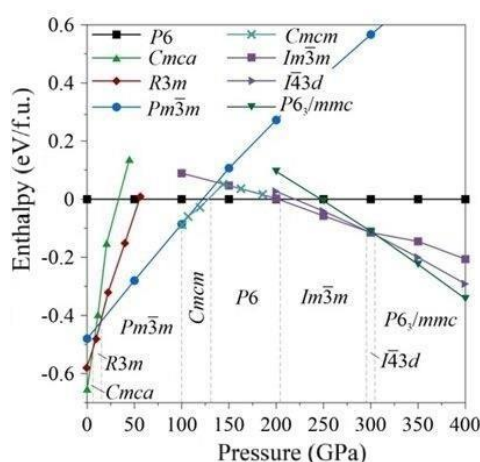
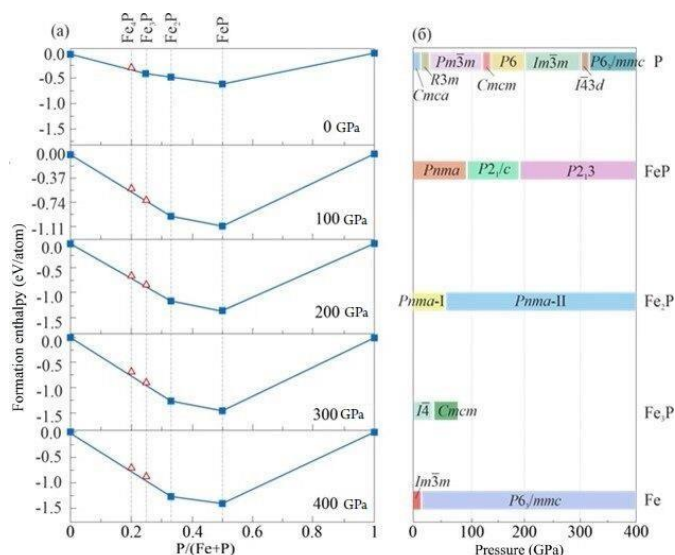


Figure 2 – Enthalpy dependence on pressure of phosphorus modifications

Note – All dependencies are shown relative to the enthalpy of modification P6

At atmospheric pressure, three intermediate compounds are known in the Fe-P system – FeP, Fe₂P and Fe₃P [39, 40]. Similar phases are observed in experiments and at higher pressures of the order of 23 GPa.

The predicted structures of intermediate compounds in the Fe-P system were used to estimate the enthalpy of formation relative to elementary Fe and P. Figure 3 shows convex hulls constructed in accordance with the structures of iron phosphides found. In the pressure range of 0-400 GPa, three intermediate compounds are stable – FeP, Fe₂P and Fe₃P.



a – convex hulls for the Fe-P system at various pressures; b – calculated phase diagram composition-pressure

Figure 3 – Phase stability diagrams in the Fe-P system

Note – Stable structures are indicated by filled blue squares, metastable structures by empty red triangles

FeP undergoes one $Pnma \rightarrow P2_1/c$ phase transition at 75 GPa. Above 200 GPa, the enthalpy of $FeP-P2_1/c$ becomes higher than that of $FeP-P2_13$ (Figure 4). However, up to 400 GPa, the enthalpy difference between these two phases is on average 3-4 meV/f.u. and is within the accuracy of the method (5 meV/f.u.). Thus, it can be said that above 200 GPa $FeP-P2_13$ and $FeP-P2_1/c$ are equally stable, i.e. they can coexist with each other.

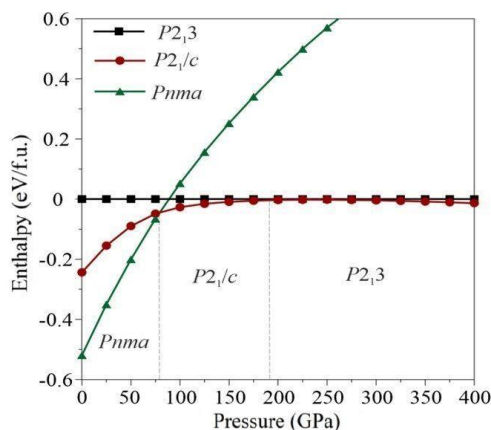


Figure 4 – Enthalpy dependence on pressure of FeP modifications

Note – All dependencies are shown relative to the enthalpy of $FeP-P2_13$

Iron phosphide Fe_2P , according to the calculations carried out, undergoes one phase transition in the studied pressure range. According to our calculations, the structure of barringerite ($P6_2m$) does not have a stability field in the entire studied pressure range, and the stable modification at atmospheric pressure is the structure of allabogdanite, which is characterized by the $Pnma$ spatial group (Figure 5). Above 45 GPa, the structure of allabogdanite transitions into a structure that is also characterized by $Pnma$ symmetry. Further, we will designate the low-bar modification with the structure of allabogdanite as $Fe_2P-Pnma-I$, and the high-bar modification as $Fe_2P-Pnma-II$. $Fe_2P-Pnma-II$ is energetically stable up to 400 GPa. It is worth noting that $Fe_2P-Pnma-I$ spontaneously transforms into $Fe_2P-Pnma-II$ during optimization above 80 GPa. This indicates the structural similarity of these modifications.

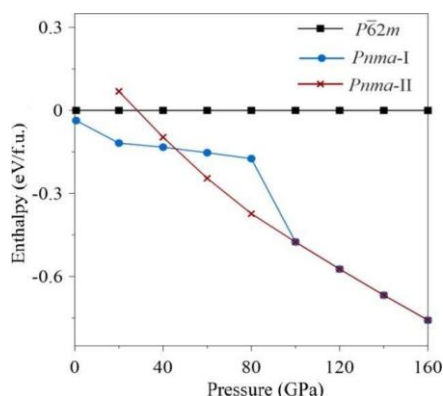


Figure 5 – Enthalpy dependence on pressure of Fe_2P modifications

Note – All dependencies are shown relative to the enthalpy of Fe_2P-P6_2m

In the case of Fe_3P , the stable modification at atmospheric pressure is the structure of schreibersite with $I\bar{4}$ symmetry. Above 30 GPa, Fe_3P - $I\bar{4}$ passes into a structure characterized by rhombic symmetry Cmcm (Figure 6).

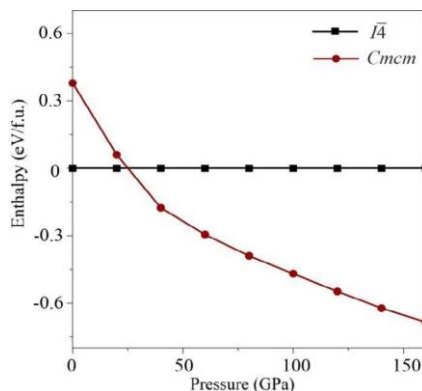


Figure 6 – Enthalpy dependence on pressure of Fe_3P modifications

Note – All dependencies are shown relative to the enthalpy of Fe_3P - $I\bar{4}$

At pressures above 65 GPa, Fe_3P becomes unstable relative to the decomposition reaction $\text{Fe}_3\text{P} = \text{Fe} + \text{Fe}_2\text{P}$ (Figure 7). Iron phosphide Fe_4P is unstable throughout the studied pressure range (Figure 3).

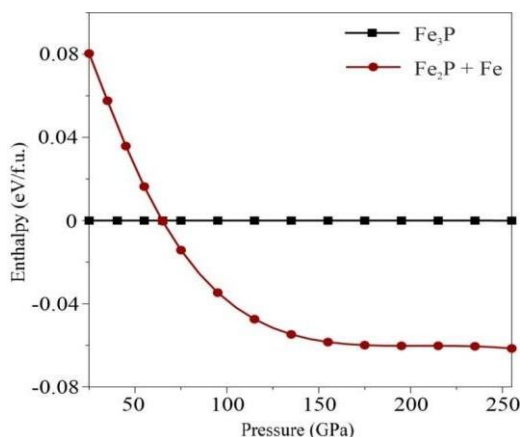


Figure 7 – Dependence of the enthalpy of Fe_3P on the decomposition into Fe_2P and Fe

Nickel does not undergo first-order phase transitions within the pressure range under consideration, and the fcc structure has been identified as a stable modification. This result is consistent with experimental data [41]. In contrast, phosphorus, as demonstrated in Figure 2, goes through a series of phase transitions (see Figure 2).

Both predicted and already known structures were used to estimate the enthalpy of formation relative to elementary Ni and P. To assess the stability of intermediate compounds in the Ni–P

system at various pressures, «convex hull» diagrams were constructed in previous work [42]. A number of stable compounds have been identified in the pressure range under consideration.

Nickel phosphides Ni_{14}P , Ni_{12}P , Ni_{10}P , Ni_8P , Ni_7P and Ni_8P_3 are stable over the entire pressure range of 100-400 GPa and do not undergo phase transitions. Ni_5P , like the aforementioned phosphides, has no phase transitions. At 100 GPa, Ni_5P is a metastable phase ($\Delta H = 35$ meV/atom). The stability field of this phosphide relative to the isochemical mixture $\text{Ni}_7\text{P} + \text{Ni}_3\text{P}$ begins at a pressure of 142 GPa and persists up to 400 GPa (Figure 8).

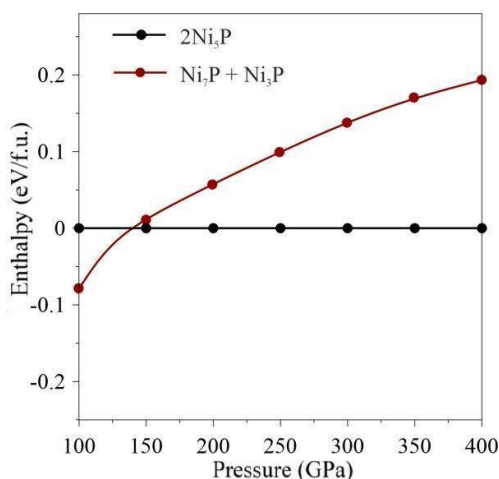


Figure 8 – Dependence of the enthalpy of Ni_5P on the decomposition reaction to Ni_7P and Ni_3P

In the case of Ni_3P , at 100 GPa, the structure of schreibersite ($I\bar{4}$), which is stable at atmospheric pressure, has an enthalpy higher than the newly found structure, which is characterized by Cmca symmetry. The transition from the Ni_3P - $I\bar{4}$ structure to Ni_3P - Cmca occurs at a pressure of 64 GPa (Figure 9).

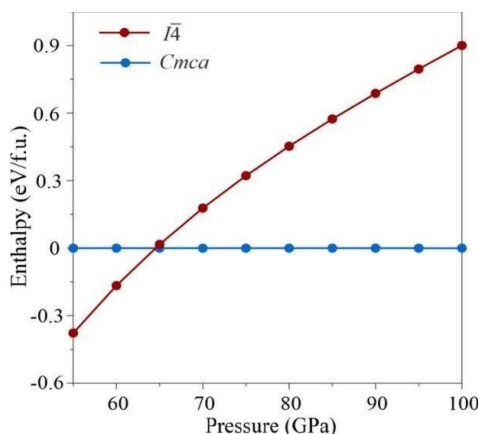


Figure 9 – Enthalpy dependence on pressure of Ni_3P modifications

Note – All dependencies are shown relative to the Ni_3P - Cmca enthalpy

It is worth noting that at a pressure of 100 GPa, Ni_3P - Cmca is a metastable phase. Ni_3P - Cmca stabilizes above 230 GPa relative to the isochemical mixture $\text{Ni}_5\text{P} + \text{Ni}_8\text{P}_3$ (Figure 10).

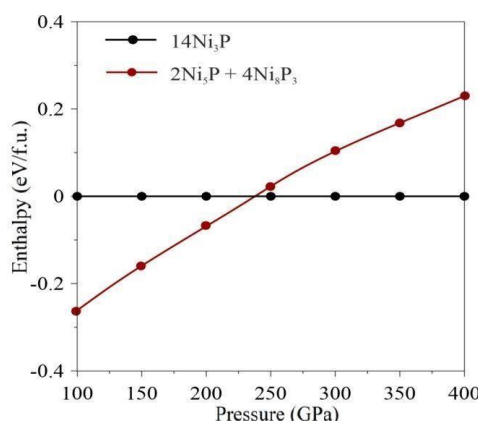


Figure 10 – Dependence of the Ni_3P enthalpy on the decomposition into $\text{Ni}_5\text{P} + \text{Ni}_8\text{P}_3$

In the pressure range of 100-400 GPa, Ni_2P is represented as a structure characterized by Pnma symmetry. It is well known that the structure of transjordanite ($\text{P}\bar{6}2\text{m}$) is more stable at low pressures [43]. Experimental and theoretical studies conducted at pressures up to 50 GPa have not shown the existence of a structural phase transition [12, p. 3205]. According to our calculations, $\text{Ni}_2\text{P-P}\bar{6}2\text{m}$ passes into the found $\text{Ni}_2\text{P-Pnma}$ phase at pressures above 85 GPa (Figure 11), which does not contradict experimental data.

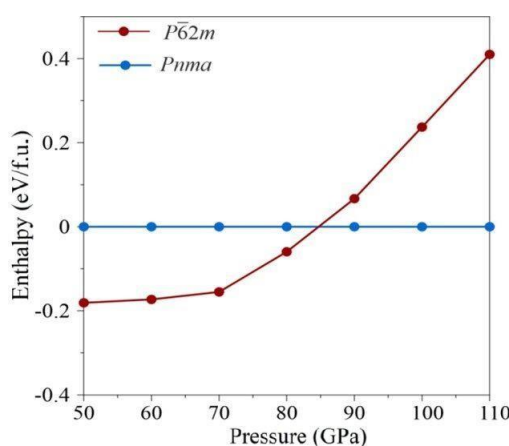


Figure 11 – Enthalpy dependence on pressure of Ni_2P modifications

Note – The dependencies are shown relative to the $\text{Ni}_2\text{P-Pnma}$ enthalpy

At pressures up to 223 GPa, the $\text{Ni}_2\text{P-Pnma}$ phase is metastable with respect to the decomposition reaction $13\text{Ni}_2\text{P} = 3\text{Ni}_8\text{P}_3 + 2\text{NiP}_2$. Above this pressure and up to 400 GPa, this phase is thermodynamically stable (Figure 12).

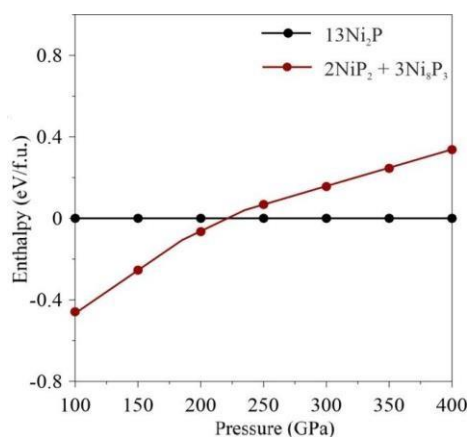


Figure 12 – Dependence of the Ni_2P enthalpy on decomposition into NiP_2 and Ni_8P_3

During the search for stable structures, no new structures were identified for the NiP_2 compound. The experimentally obtained monoclinic structure of $\text{NiP}_2\text{-C2/c}$ remains stable even at high pressures up to 330 GPa. Above this pressure, $\text{NiP}_2\text{-C2/c}$ decays into $\text{Ni}_2\text{P-Pnma}$ and $\text{P-P6}_3/\text{mmc}$ (Figure 13).

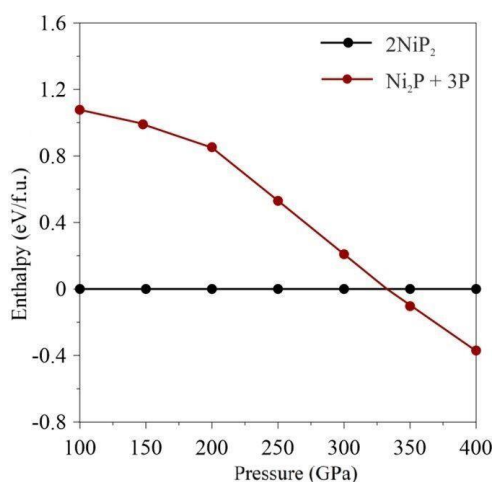


Figure 13 – Dependence of NiP_2 enthalpy on decomposition into Ni_2P and P

All predicted structures are dynamically stable. This is evidenced by the dispersion curves of phonons calculated by us (Figure 14), which have only real frequencies, which indicates the dynamic stability of these structures.

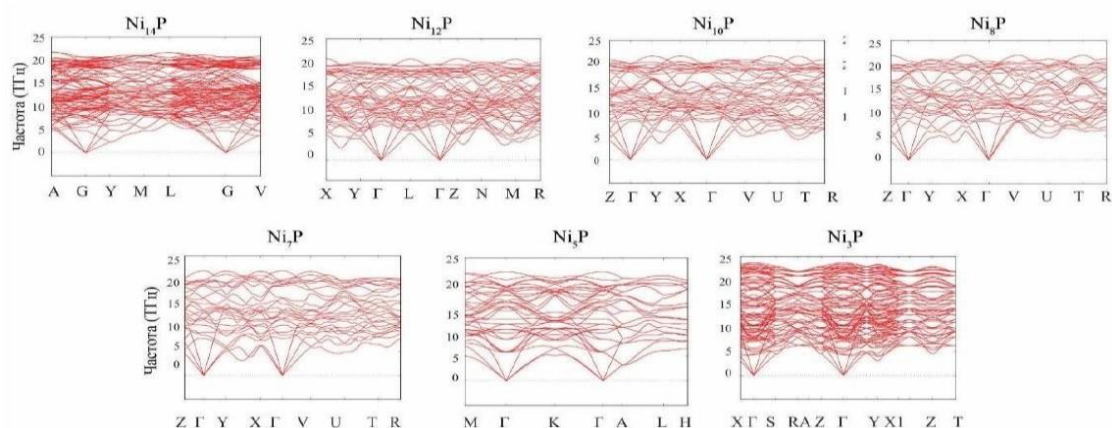


Figure 14 – Dispersion curves of phonons of predicted nickel phosphides

The structures Ni_{14}P , Ni_{12}P , Ni_{10}P , Ni_8P , Ni_7P , Ni_5P and Ni_3P are characterized by fcc packing, with Ni atoms partially replaced by P atoms [44, p. 1980]. The structure of pure Ni is also characterized by fcc packing up to 400 GPa. Thus, the proposed structures can be considered as a series of «ordered» (model) solid solutions (Ni, P). This type of isomorphism between a d-metal and a light element is atypical at atmospheric pressure. At high pressures, where elements that are typical nonmetals, such as sulfur, acquire metallic properties [45], this isomorphism becomes widespread [46,47]. An example is the isomorphic substitution of iron with sulfur, silicon and carbon in GPU and BCC structures [48]. Phosphorus atoms in the structures of model solid solutions tend to be evenly distributed over the structure without clustering or forming groups. It is worth noting that structures with a phosphorus content above ~ 15 wt.% (25 mol.%), i.e. Ni_2P , Ni_8P_3 and NiP_2 cannot be described by fcc packing.

For example, the Ni_2P - $Pnma$ nickel phosphide found is characterized by a Co_2Si type structure. Nickel atoms have two unequal positions in the structure. In both positions, the Ni atoms are surrounded by five P. atoms. Phosphorus has one nonequivalent position. It is surrounded by ten Ni atoms, forming PNi_{10} -two-lobed cubes that are interconnected along the edges and along the edges (Figure 15).

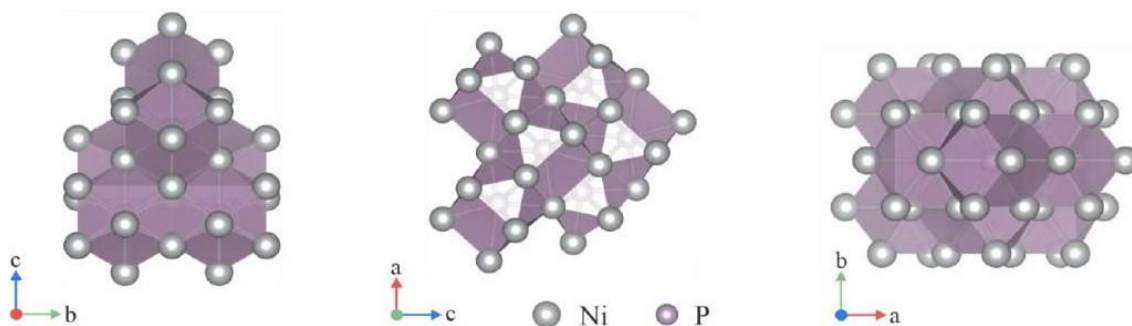


Figure 15 – Ni_2P - $Pnma$ structure

Thus, according to the results obtained, it can be assumed that at pressures of the Earth's core 9.5 wt.% of phosphorus can be dissolved in the nickel structure without lattice deformation, and the limit of phosphorus solubility in solid Ni is ~ 15 wt.%. Despite the fact that Fe and Ni have similar chemical characteristics, structures with isomorphic iron substitution in the Fe-P system have not been found. This phenomenon lies in the fact that the solubility of phosphorus in iron is much lower than in nickel, and is approximately 2.6 wt.% at atmospheric pressure [49] and 4 wt.% at a pressure of 23 GPa [50]. In addition, we believe that the high solubility of phosphorus in nickel compared to the solubility of iron will lead to the fact that the solubility of P in the alloy (Fe, Ni) will be higher than in pure Fe.

Conclusion

As a result, calculations were carried out in this study to search for stable crystal structures in Fe-P and Ni-P systems in the pressure range of 100-400 GPa. Using the VASP software package and the USPEX algorithm, we were able to determine the stability fields for the found Fe₂P and Ni₂P structures.

A recent experimental study has shown that Fe₂P-Pnma-I is a stable phase under normal conditions, and barringerite is a high-temperature modification. Our DFT calculations are in good agreement with this study and confirm that Fe₂P-Pnma-I is a stable modification at 0 GPa.

There are some discrepancies in the experimental studies on the search for the high-pressure phase of Fe₃P. In [9, p. 377], the transition from Fe₃P-I4̄ to a new phase occurs in the pressure range of 17-30 GPa. The existence of a new phase was later confirmed in experiments by Guet al.[51]. In this work, the transition was observed at a higher pressure equal to 64 GPa. However, it should be noted that in a special experiment with a long exposure at 30 GPa, in addition to the peaks of the Fe₃P-I4̄ structure, new peaks were observed on the X-ray. The authors assumed that the new peaks correspond to the Fe₂P + Fe association. However, due to the small number of new peaks, the identification of phases was ambiguous, and it is impossible to exclude the correspondence of these new peaks to the new phase of Fe₃P. This interpretation is consistent with our calculations for Fe₃P. According to our data, the transition from Fe₃P-I4̄ to Fe₃P-Cmcm occurs at 30 GPa. In this case, the new phase observed in the experiments of Gu et al. [51, p. 300] corresponds to Fe₃P-Cmcm.

The Fe-P system is characterized by two intermediate compounds Fe₂P and FeP under the condition of an internal core. A more jelly-like phosphidem content under this condition appears Fe₂P. All these results are very important for the study of the Fe-P system as a whole.

The Ni-P system is typical for individual plants and three intermediate components Ni₈P₃, Ni₂P and NiP₂ at 100-400 GPa. The Ni-P system is characterized by the following interactions Ni₁₄P, Ni₁₂P, Ni₁₀P, Ni₈P, Ni₇P, Ni₅P, Ni₃P, Ni₈P₃ and Ni₂P under the condition of the Earth's inner core. The most nickel-containing phosphide under this condition appears Ni₁₄P.

The trend of phase stability for Ni-P compounds at atmospheric pressure is presented as follows: Ni₅P₄ > Ni₂P > Ni₁₂P₅ > NiP > Ni₈P₃ > Ni₃P > NiP₂ > NiP₃[52]. With increasing pressure, this sequence changes. At the pressures of the inner core, structures with a low phosphorus content

are ordered as follows: $\text{Ni}_8\text{P}_3 < \text{Ni}_3\text{P} < \text{Ni}_2\text{P} < \text{Ni}_5\text{P} < \text{Ni}_7\text{P} < \text{Ni}_8\text{P} < \text{Ni}_{10}\text{P} < \text{Ni}_{12}\text{P} < \text{Ni}_{14}\text{P}$. Among the experimentally known nickel phosphides, Ni_8P_3 , Ni_{12}P_5 , Ni_5P_4 , Ni_2P , NiP_2 and NiP_3 , only Ni_8P_3 and NiP_2 are stable at high pressures.

The results obtained in the course of this study are fundamental and important for further investigation of the structure and composition of the cores of the Earth and planets. The data obtained will also help identify priority areas for future research. Obtaining accurate information about the composition and structure of the Earth's inner core would contribute to a deeper understanding of the internal structure and dynamics of our planet as a whole. In addition, it is of fundamental importance for the development of models describing the processes of formation, differentiation and evolution of the Earth.

The behavior of phosphorus in Fe-Ni alloys has attracted the attention of researchers, since both elements are potentially important components of the Earth's core. In this regard, understanding the characteristics of Fe-P, Ni-P compounds at high pressures is key for subsequent research.

The contribution of the authors:

A.B. Bazarbek – corresponding author and has made a significant contribution to the development of the research concept and to the design of the structure of the article. He supervised the work of all co-authors, coordinated their activities and ensured timely completion of all stages of the work;

A.D. Akylbekova – the author was responsible for setting the main objectives of the study, she also took part in writing the text and agreed on the final version of the article for publication;

G.D. Kabdrakhimova – The author was engaged in collecting experimental and theoretical data and conducting analytical calculations. She was responsible for developing the calculation methodology and interpreting the results;

A.Sh. Omarkhan – She made a key contribution to the calculations on the program, and data collection. She was responsible for formulating conclusions based on the results from theoretical calculations;

A.A. Nogai – the author was engaged in the analysis and processing of numerical data. He completed the tasks of interpreting the results and wrote the section of the article related to the results.

References

1. McDonough W.F. The composition of the Earth. Compositional Model for the Earth's Core // Treatise on Geochemistry. – 2014. – Vol. 2. – P. 559-577.
2. Sun Y. Unveiling the effect of Ni on the formation and structure of Earth's inner core / Y. Sun, M. Mendeleev, F. Zhang // Earth, atmospheric, and planetary scienc. – 2024. – V. 121. – P. 451-462.
3. Ni P. Planet size controls Fe isotope fractionation between mantle and core / P. Ni, A. Shahar, J. Badro, J. Yang // Geophysical research letter. – 2022. – V. 49. – P. 755-762.
4. Stewart A., Schmidt M. Sulfur and phosphorus in the Earth's core: The Fe-P-S system at 23 GPa // Geophysical Research Letters. – 2007. – Vol. 34. – P. 13201-13205.
5. Gu T. et al. In situ high-pressure study of FeP: Implications for planetary cores // Physics of the Earth and Planetary Interiors. – 2011. – Vol. 184. – P. 154-159.

6. Dera P. et al. High-pressure polymorphism of Fe₂P and its implications for meteorites and Earth's core // *Geophysical Research Letters*. – 2008. – Vol. 35. – P. 10301-10306.
7. Litasov K. et al. (Fe,Ni)₂P allabogdanite can be an ambient pressure phase in iron meteorites // *Scientific Reports*. – 2020. – Vol. 10. – P. 8956-8966.
8. Scott H. et al. Equation of state and high-pressure stability of Fe₃P-schreibersite: Implications for phosphorus storage in planetary cores // *Geophysical Research Letters*. – 2007. – Vol. 34. – P. 6302-6306.
9. Scott H. et al. P–V equation of state for Fe₂P and pressure-induced phase transition in Fe₃P // *High Pressure Research*. – 2008. – Vol. 28. – P. 375-384.
10. Li T. New insight into the structural, elastic, dynamics and thermodynamic properties of Fe₃P under high pressures / T. Li, Z. Dan, T. Lu, H. Chang, L. Zhou // *Vacuum*. – 2021. – 221. – P. 112887-112894.
11. Okamoto H. Ni-P (Nickel-Phosphorus) // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. – 2010. – Vol. 31. – P. 200-201.
12. Dera P. et al. Structure and behavior of the barringerite Ni end-member, Ni₂P, at deep Earth conditions and implications for natural Fe-Ni phosphides in planetary cores // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. – 2009. – Vol. 114. – P. 3201-3210.
13. Chornkrathok S., Zhang D., Dera P. Structure and Behavior of the Ni End-Member Schreibersite Ni₃P under Compression to 50 GPa // *Minerals*. – 2020. – Vol. 10. – P. 306-309.
14. Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии. – Казань: КГУ, 2004. – 106 с.
15. Alfe D. The ab initio treatment of high-pressure and high-temperature mineral properties and behavior // *Treatise on Geophysics*. – 2015. – Vol. 2. – P. 369-392.
16. Bazhanova Z., Oganov A., Gianola O. Fe–C and Fe–H systems at pressures of the Earth's inner core // *Physics Uspekhi*. – 2012. – V. 55. – P. 489-497.
17. Bazhanova Z., Roizen V., Oganov A. High-pressure behavior of the Fe–S system and composition of the Earth's inner core // *Physics-Uspekhi*. – 2017. – Vol. 60. – P. 1025-1032.
18. Alkhaldi H., Kroll P. Computing the iron–nitrogen phase diagram at high pressure and high temperature // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – V. 15. – P. 1635.
19. Sagatov E., Bazarbek A., Inerbaev T. et al. Phase Relations in the Ni–S System at High Pressures from ab Initio Computations // *ACS Earth and Space Chemistry*. – 2021. – Vol. 5. – P. 596-603.
20. Abuov A., Inerbaev T., Abuova F., Kaptagay G. Theoretical study of the Ni–C system in the pressure range of 0–100 GPa // *Bulletin of the karaganda university «physics series»*. – 2012. – V. 4. – P. 104.
21. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Physical review B*. – 1996. – Vol. 54. – P. 11169-11186.
22. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // *Computational Materials Science*. – 1996. – Vol. 6. – P. 15-50.
23. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 59. – P. 1758-1775.
24. Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Physical review letters*. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865-3868.
25. Oganov A., Glass C. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications // *Journal of chemical physics*. – 2006. – Vol. 124. – P. 244704-244718.
26. Monkhorst H., Pack J. Special points for Brillouin-zone integrations // *Physical review B*. – 1976. – Vol. 13. – P. 5188-5192.
27. Methfessel M., Paxton A. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 40. – P. 3616-3621.

28. Bancroft D., Peterson E., Minshall S. Polymorphism of iron at high pressure // Journal of Applied Physics. – 1956. – Vol. 27. – P. 291-298.
29. Bassett W., Huang E. Mechanism of the body-centered cubic-hexagonal close-packed phase transition in iron // Science. – 1987. – Vol. 238. – P. 780-783.
30. Rueff J. et al. Magnetic and structural α - ϵ phase transition in Fe monitored by x-ray emission spectroscopy // Physical Review B. – 1999. – Vol. 60. – P. 14510-14512.
31. Barge N., Boehler R. Effect of non-hydrostaticity on the α - ϵ transition of iron // High Pressure Research. – 1990. – Vol. 6. – P. 133-140.
32. Brown A. Rundqvist S. Refinement of the crystal structure of black phosphorus // Acta Crystallographica. – 1965. – Vol. 19. – P. 684-685.
33. Jamieson J. Crystal structures adopted by black phosphorus at high pressures // Science. – 1963. – Vol. 139. – P. 1291-1292.
34. Kikegawa T., Iwasaki H. An X-ray diffraction study of lattice compression and phase transition of crystalline phosphorus // Acta Crystallographica Section B: Structural Science. – 1983. – Vol. 39. – P. 158-164.
35. Akahama Y., Kobayashi M., Kawamura H. Simple-cubic-simple-hexagonal transition in phosphorus under pressure // Physical Review B. – 1999. – Vol. 59. – P. 8520-8525.
36. Fujihisa H. et al. Incommensurate structure of phosphorus phase IV // Physical review letters. – 2007. – Vol. 98. – P. 175501-175504.
37. Marques M. et al. Origin of incommensurate modulations in the high-pressure phosphorus IV phase // Physical Review B. – 2008. – Vol. 78. – P. 54120-54128.
38. Sugimoto T. et al. Identification of superlattice structure cI16 in the P-VI phase of phosphorus at 340 GPa and room temperature via X-ray diffraction // Physical Review B. – 2012. – Vol. 86. – P. 24109-24113.
39. Okamoto H. The Fe-P (iron-phosphorus) system // Bulletin of Alloy Phase Diagrams. – 1990. – Vol. 11. – P. 404-412.
40. Zaitsev A., et al. Thermodynamic properties and phase equilibria in the Fe-P system // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. – 1995. – Vol. 91. – P. 703-712.
41. McMahan A., Albers R. Insulating Nickel at a Pressure of 34 TPa // Physical Review Letters. – 1982. – Vol. 49. – P. 1198-1201.
42. Inerbaev, T. M., Sagatov, N., Sagatova, D., Gavryushkin, P. N., Akilbekov, A. T., Litasov, K. D. Phase Stability in Nickel Phosphides at High Pressures // ACS Earth and Space Chemistry. -2020. – V. 4. – P. 1978–1984.
43. Nisar J., Ahuja R. Structure behavior and equation of state (EOS) of Ni₂P and (Fe_{1-x}Ni_x)₂P (allabogdanite) from first-principles calculations // Earth and Planetary Science Letters. –2010. –Vol. 295. – P. 578-582.
44. Литасов К.Д., Шацкий А.Ф. Состав и строение ядра земли. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2016. – 304 с.
45. Gavryushkin P.N. et al. High-pressure phases of sulfur: Topological analysis and crystal structure prediction // Physica Status Solidi (B). – 2017. – Vol. 254. – P. 1600857-1600860.
46. Li Y., Vocadlo L., Brodholt J. The elastic properties of hcp-Fe alloys under the conditions of the Earth's inner core // Earth and Planetary Science Letters. – 2018. – Vol. 493. – P. 118-127.

47. Gavryushkin P.N. et al. Stability of B2-type FeS at Earth's inner core pressures // Geophysical Research Letters. – 2016. – Vol. 43. – P. 8435-8440.
48. Gavryushkin P. et al. Unbiased crystal structure prediction of NiSi under high pressure // Journal of Applied Crystallography. – 2015. – Vol. 48. – P. 906-908.
49. Zaitsev A., et al. Thermodynamic properties and phase equilibria in the Fe–P system // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. – 1995. – Vol. 91. – P. 703-712.
50. Stewart A., Schmidt M. Sulfur and phosphorus in the Earth's core: The Fe–P–S system at 23 GPa // Geophysical Research Letters. – 2007. – Vol. 34. –P. 13201-13205.
51. Gu T. et al. High-pressure behavior of Fe3P and the role of phosphorus in planetary cores // Earth and Planetary Science Letters. – 2014.–Vol. 390. –P. 296-303.
52. Chen J. et al. Theoretical study on the phase stability, elasticity, hardness and electronic structures of Ni–P compounds // Phase Transitions. – 2016. – Vol. 89. –P. 1078-1089.

А.Б. Базарбек*¹, А.Д. Акылбекова¹, Г.Д. Кабдрахимова¹, А.Ш. Омархан¹, А.А. Ногай²

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті

Темір-фосфор және никель-фосфор жүйелері үшін тұрақты құрылымдарды табудың ab-initio есептеулері

Аңдатпа. Біздің планетамыздың ішкі құрылымын зерттеу іргелі зерттеулердегі ең өзекті тақырыптардың бірі болып табылады. Атап айтқанда, темір мен никель қосылыстарының жоғары қысымдағы жеңіл элементтермен фазалық қатынасын талдау біздің планетамыздың ядросының құрамы мен құрылымын анықтаудың маңызды міндеті болып табылады. Осындай жоғары қысымда эксперименттер жүргізудің қиындығына байланысты (Жер ядросында ~365 ГПа) Ab-initio есептеулері осындай зерттеулерді жүргізудің пайдалы әдісіне айналады.

USPEX, AIRS және CALYPSO сияқты кристалды құрылымдарды іздеудің жаңа алгоритмдерінің пайда болуымен жеңіл элементтері бар темір-никель жүйелерінің қосылыстары туралы зерттеулер мен қол жетімді деректер айтарлықтай өсті. Бұл құралдар планеталардағы ішкі процестерді зерттеудегі мүмкіндіктерімізді едәуір кеңейтіп, планеталық денелердің эволюциясын одан әрі зерттеу мен түсінудің кең перспективаларын жасады. Осы озық есептеу әдістерінің интеграциясы Жер ядросындағы материалдардың сипаттамасы туралы баға жетпес деректерді қамтамасыз ете отырып, экстремалды жағдайларда темір қосылыстарының тұрақты және метастабильді фазаларын дәл болжауға мүмкіндік береді.

Түйінді сөздер: жоғары қысымды физика, Ab-initio есептеулері, кванттық химиялық модельдеу, іргелі зерттеулер, кристалдық құрылымдар

А.Б. Базарбек*¹, А.Д. Акылбекова¹, Г.Д.Кабдрахимова¹, А.Ш. Омархан¹, А.А. Ногай²

¹Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²Казахский агротехнический исследовательский университет им. С. Сейфуллина

Расчеты ab-initio для поиска стабильных структур для систем железо-фосфор и никель-фосфор

Аннотация. Изучение внутреннего строения нашей планеты является одной из наиболее актуальных тем фундаментальных исследований. В частности, анализ фазовых соотношений соединений железа и никеля с легкими элементами при высоких давлениях является важной задачей для определения состава и структуры ядра нашей планеты. Из-за сложности проведения экспериментов при таких высоких давлениях (в ядре Земли ~365 ГПа) расчеты ab-initio становятся полезным методом проведения таких исследований.

С появлением новых алгоритмов поиска кристаллических структур, таких, как USPEX, AIRS и CALYPSO, количество исследований и доступных данных о соединениях железо-никельсодержащих систем с легкими элементами значительно возросло. Эти инструменты значительно расширили наши возможности в изучении внутренних процессов на планетах, создав более широкие перспективы для дальнейших исследований и понимания эволюции планетных тел. Интеграция этих передовых вычислительных методов позволяет точно прогнозировать стабильные и метастабильные фазы соединений железа в экстремальных условиях, предоставляя бесценные данные о поведении материалов в условиях ядра Земли.

Ключевые слова: физика высокого давления, расчеты Ab-initio, квантово-химическое моделирование, фундаментальные исследования, кристаллические структуры.

Сведения об авторах:

Базарбек А.Б. – хат-хабар авторы, PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан.

Акылбекова А.Д. – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан.

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан.

Омархан А.Ш. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің докторанты, Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан.

Ногай А.А. – PhD, С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университетінің аға оқытушысы, Жеңіс көшесі, 62, Астана, Қазақстан.

Базарбек А.Б. – автор для корреспонденции, PhD, и. о. доцента, Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Акылбекова А.Д. – PhD, и.о. доцента, Евразийский национальный университетим. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, и.о. доцента, Евразийский национальный университетим. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Омархан А.Ш. – докторант, Евразийский национальный университетим. Л. Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Ногай А.А. – PhD, старший преподаватель, Казахский агротехнический исследовательский университет им. С. Сейфуллина, ул. Женис, 62, Астана, Казахстан.

Information about authors:

Bazarbek A.B. – corresponding author, PhD, acting associate professor of L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

Akylbekova A.D. – PhD, acting associate professor of L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

Kabdrakhimova G.D. – PhD, acting associate professor of L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

Omarkhan A.Sh. – PhD student of L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

Nogai A.A. – PhD, senior lecturer of Kazakh Agro-Technical Research University, 62 Zhenis str., Astana, Kazakhstan.



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 58.35.03

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-148-3-41-53>

Ғылыми мақала

Радиоактивті қалдықтар қоймасының маңында орналасқан Ақсу елді мекенінің тұрғындарынан алынған биологиялық сынамалардағы уранның мөлшерін бағалау

Д.С. Бижанова*, М.М. Бахтин, Е.Т. Кашкинбаев, М.Н. Аумаликова,
Е.А. Сайфулина, А.С. Шоқабаева, Э.М. Мусаева

Радиобиология және радиациялық қорғау ғылыми зерттеу институты КеАҚ «Астана медицина
университеті», Астана, Қазақстан

(E-mail: bizhanova.d@amu.kz)

Аңдатпа. Радиоактивті қалдық қоймаларынан туындайтын ықтимал қауіптілік деңгейі әртүрлі болуы мүмкін. Қалдықтар қоймасынан шығарылған уранның жергілікті тұрғындар үшін әсері туралы қорытынды жасауға мүмкіндік беретін зерттеулер қажет. Жұмыстың мақсаты радиоактивті қалдықтар қоймасының маңында орналасқан Ақсу елді мекенінің тұрғындарынан алынған биологиялық үлгілердегі (несеп, шаш) уранның мөлшерін зерттеу. Зерттеу барысында радиоактивті қалдықтар қоймасының маңында орналасқан Ақсу елді мекенінде орташа ұзақтығы 30 жыл тұратын жергілікті тұрғындардан алынған биологиялық үлгілерде уранның мөлшері анықталды. Несеп үлгілеріне қарағанда шаш үлгілерінде уранның мөлшері жоғары болатыны айқындалды. Алынған мәліметтерді несептегі уранның нормативті мөлшерін айқындауда пайдалануға болады. Сонымен қатар биологиялық үлгілердегі анықталған уранның мөлшері радиациялық қауіпсіздікті сақтау шараларында биоиндикаторлық көрсеткіш бола алады.

Түйін сөздер: радионуклид, уран, масс-спектрометрия, биоиндикатор, радиоактивті қалдықтар қоймасы.

Кіріспе

Қазақстан уран өндіру мен өңдеуден әлем бойынша көшбасшы мемлекеттердің бірі болып табылады. Эндогенді уран кен орындарының негізгі қоры еліміздің солтүстік өңірінде шоғырланған. Бұл аймақта уран өндіруші кәсіпорындардың радиоактивті қалдықтары 61 млн тоннаны, ал жалпы радиоактивті белсенділігі 168,4 мың Ки құрайды [1]. Бекітілген санитарлы-гигиеналық талаптарға сай, радиоактивті қалдықтар сақталынған қоймалар үнемі қадағалау мен бақылауды қажет етеді. Бұндай радиоактивті қалдықтар қоймасының бірі Ақмола облысы Ақсу елді мекенінде орналасқан. Астана қаласынан 250 км орналасқан бұл елді мекенде алдыңғы жасалған зерттеулерге сәйкес, Ақсу елді мекенінің орта білім беру мектебінде радонның шамадан тыс артық мөлшері тіркелген [2]. Радон уран және алтын өндірудегі ілеспе газ болып табылады. Қазақстанның солтүстік өңірі уранды аймақтардың бірі болғандықтан, осы аймақ тұрғындарының биологиялық үлгілеріне егжей-тегжейлі және кеңейтілген зерттеу жұмыстарын жүргізу басым бағыт болып табылады.

Қазақстан Республикасының санитарлы-гигиеналық талаптарына сай, радиоактивті қалдықтар сақталынған қоймалар үнемі қадағалау мен бақылауды қажет етеді, тиісті шаралар қолданылмаған жағдайда техногенді радионуклидтер қоршаған орта объектілеріне миграциялануы мүмкін. Атмосфералық ауаға, жер асты және жер үсті суларына тараған уран, адам ағзасына тікелей және ауылшаруашылық өнімдері арқылы тасымалданады [3]. Қалыпты жағдайда тірі ағзада уранның мөлшері төменгі деңгейде болады, бірақ оның көп мөлшерде болуы адам денсаулығы үшін қауіпті болып саналады [4]. Уран адам ағзасында химиялық құрамына, мөлшері мен пішініне байланысты таралатыны белгілі. Әдебиетте ағзаға жинақталған уранның нефроуыттылықтан басқа, репродуктивті және даму бұзылыстары, сүйек өсуінің төмендеуі, ДНҚ зақымдануы, нейроуыттылық және эстрогендік әсерлер сияқты денсаулыққа басқа да әсерлері көрсетілген [5,6].

Денедегі уран деңгейінің жоғарылауы бүйректегі гломерулярлық фильтрацияның төмендеуіне, органикалық аниондардың түтікшелік секрециясына, проксимальды түтікшелердегі глюкоза мен аминқышқылдарының реабсорбциясына әкеледі [7]. Уранның негізгі зақымдайтын органы бүйрек болғандықтан, зерттеулер үшін ең ақпараттық биологиялық сынама несеп болып табылады. Қоршаған ортаның радионуклидтермен ластануын бақылау және олардың адам ағзасында жинақталу дәрежесін бағалау кезінде адам шашының құрамын зерттеу маңызды. АҚШ-тың Ұлттық зертханасында жүргізілген зерттеулершаш құрамында биологиялық үлгі ретінде пайдалану үшін жеткілікті уран жиналатынын көрсетті [8]. Сонымен қатар, шашты Дүниежүзілік денсаулық сақтау ұйымы (ДДҰ) және қоршаған ортаны қорғау агенттігі металдардың адам ағзасына уытты әсерін бағалау үшін таңдады.

Зерттеу материалдары мен әдістері

Зерттеуге биологиялық сынамалар Ақмола облысы Ақсу елді мекенінде 5 жылдан астам өмір сүрген жергілікті тұрғындарынан алынды. Ақсу елді мекені Степногор тау-кен химия комбинатының қалдық қоймасы маңынан 3,5 км жерде орналасқан.

Жұмыс барысында ең алдымен, Ақсу елді мекенінің жергілікті тұрғындарына сауалнама жұмыстары жүргізілді. Сауалнама нұсқасы КеАҚ «АМУ» Локальды Биоэтикалық комитеті отырысының №8 шешімімен бекітілді. Сауалнамаға 40 тұрғын қатысты (27 әйел адам, 13 ер адам). Бақылау тобы ретінде Астана қаласы маңындағы Күйгенжар елді мекені тұрғындары алынды. Зерттеуге бақылау тобынан 32 тұрғын қатысты (25 әйел адам, 7 ер адам).

Биологиялық үлгілер Agilent 7800 (Жапония) индуктивті байланысқан плазмалық масс-спектрометрде ASTM C1379-10 халықаралық әдісіне және АЭХА-ның Element analysis of biological materials Appendix II шаш үлгісін алу әдісіне сәйкес өлшенді [9, 10].

Шаш үлгілерін жинау. Зертханада беткі ластануды және шаштың майлылығын кетіру үшін АЭХА ұсынған шаш үлгілерін дайындау әдісі қолданылды. Ол үшін шашты 10-15 минут ішінде ацетонмен өңдейді, содан кейін бидистилденген сумен үш рет жуады. Үлгілер бөлме температурасында 10-15 минут ішінде кептіріліп, ұзақ мерзімді сақтауға жіберіледі.

Несеп үлгілерін жинау. Зерттеуге қатысқан 37 еріктінің 20-сы (11 әйел адам, 9 ер адам) несеп үлгілерін беруге келісімдерін берді. Тұрғындардан тәуліктік несеп көлемі 2-3 литр болатын құрғақ және таза полиэтилен немесе шыны ыдыстарда (банкаларда) қолды жуғаннан кейін және гигиеналық дәретханасынан кейін жиналды. Жиналған тәуліктік несеп ауылдық емханаға тапсырылды. Кейін, емханада үлгіні 3-5 минут араластылып, сыйымдылығы 30-60 мл стерильді пластикалық контейнерге 20 мл алынды. Несеп үлгісін алғаннан кейін оны HNO_3 концентріленген азот қышқылымен (20 мл үлгіге 0,4 мл азот қышқылы) қышқылдандырып, үлгі шифры контейнерге жазылды. Жиналған үлгілер тасымалдағыш тоңазытқыш арқылы зертханаға жеткізілді. Үлгілер зерттеуге дейін лабораторияда мұздатқышта шамамен -20°C температурада сақталды.

Жұмыс барысында негізгі және бақылау топтарынан жалпы 85 үлгі жиналды. Зерттеуге Ақсу елді мекені тұрғындарынан алынған 5 боялған шаш үлгісі зерттеуге алынбады. Солайша, негізгі топ Ақсу елді мекені тұрғындарынан 40 (20 шаш, 20 несеп), бақылау тобы Күйгенжар ауылы тұрғындарынан 40 (20 шаш, 20 несеп) үлгілері алынды. Сынмаларды зерттеу жұмыстары «Астана медициналық университеті» Коммерциялық емес акционерлік қоғамының Радиобиология және радиациялық қорғау институтының аккредиттелген радиохимия және радиоспектрометрия сынақ зертханасында өтті (аккредиттеу аттестаты № KZ.T.01.1431).

Зерттеу барысынданесеп және шаш сынамалары Multiwave Pro микротолқынды жүйесінде Anton Paar ұсынған әдістеме бойынша ыдыратылды (кесте 1)[11].

Кесте 1 – Шаш, несеп үлгілерін Multiwave Pro микротолқынды жүйесінде ыдырату әдісі

Үлгі	Ротор	Қосылыстар	Параметрлері	Бағдарлама		
Шаш	8NXQ80	0.1-0.5 г. үлгі Реагенттер: • 4-6 мл HNO_3 • 0-2 мл H_2O_2 • 0-1 мл HCL	Қысым жылдам- дығы: 0,3 bar/s	Қуат бағдарламасы		
				қуат	уақыт	желд.
				600 1200 70°C	20:00 15:00	1 1 3

Несеп	8NXQ80	2 мл үлгі Реагенттер: • 4-6 мл HNO ₃ • 0-2 мл H ₂ O ₂ • 0-1 мл HCL	Қысым жылдам- дығы: 0,3 bar/s	Қуат бағдарламасы		
				қуат	уақыт	желд.
				600 1200 70°C	20:00 15:00	1 1 3

Зерттеу нәтижелері

Несеп сынамаларындағы уран мөлшері нәтижелері

Agilent 7800 ICP-MS – индуктивті байланысқан плазмалық масс-спектрометрімен Ақсу елді мекені тұрғындарының несеп, шаш сынамаларындағы уранның мөлшері 2 кестеде көрсетілген. Бұнда үлгі нөмірі, зерттеуге қатысушының жынысы, Ақсу елді мекенінде өмір сүру ұзақтығы, несеп және шаш үлгілеріндегі көрсеткіштері туралы ақпарат берілген.

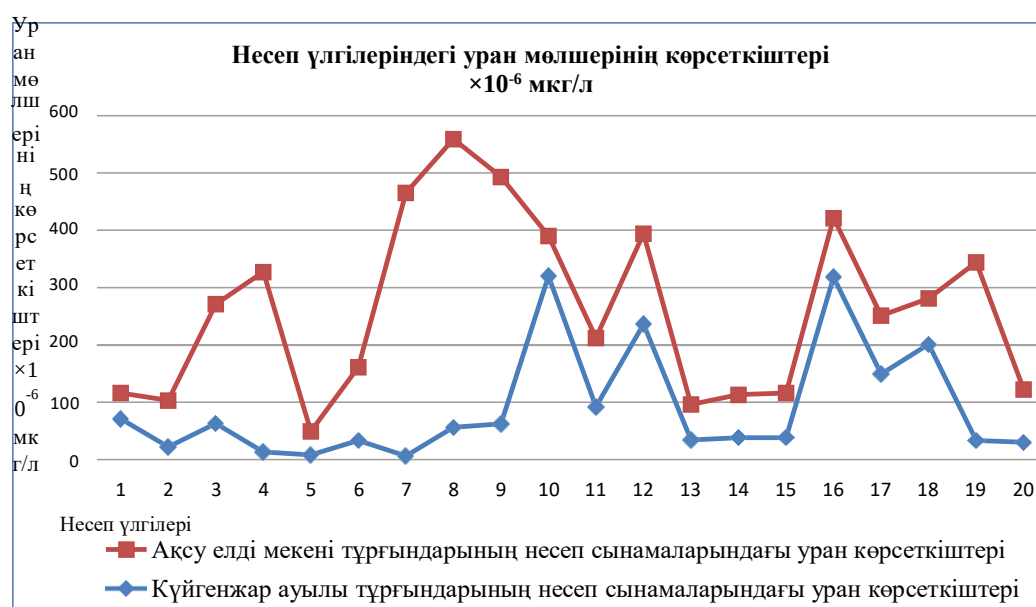
Кесте 2 – Негізгі топ (Ақсу елді мекені) тұрғындары үлгілеріндегі уранның мөлшері, мкг/л

Үлгі №	Жынысы	Елді мекенде тұру ұзақтығы, жыл	Несептегі U X 10 ⁻⁶ мкг/л	Шаштағы U X 10 ⁻⁶ мкг/л
1	ер	65	45	12 223
2	әйел	43	81	-
3	әйел	47	208	10 250
4	ер	73	314	12 580
5	ер	54	41	-
6	әйел	23	128	-
7	ер	11	459	38 570
8	әйел	5	503	-
9	әйел	29	431	-
10	әйел	6	70	-
11	ер	22	120	-
12	әйел	27	158	-
13	әйел	17	62	586
14	әйел	36	75	-
15	ер	48	78	-
16	ер	58	103	31 258
17	әйел	30	102	-
18	әйел	30	80	-
19	ер	30	311	-
20	ер	30	92	-
21	әйел	23	-	463

22	әйел	18	-	1 029
23	әйел	43	-	19 286
24	әйел	40	-	11 293
25	әйел	30	-	2 510
26	әйел	28	-	1 903
27	әйел	25	-	1 903
28	әйел	30	-	9 623
29	әйел	7	-	640
30	әйел	16	-	1 089
31	ер	21	-	623
32	әйел	21	-	986
33	әйел	37	-	8 903
34	ер	26	-	3 851

Ескерту: – тұрғындар биологиялық үлгілерді тапсырмады

Масс-спектрометриялық әдіспен өлшенген несеп үлгілеріндегі уран мөлшері негізгі және бақылау топ тұрғындарында түрлі сандық нәтижелер көрсетті. Несеп үлгілеріндегі уран мөлшерінің көрсеткіштері бақылау тобы (Күйгенжар ауылы) тұрғындарына қарағанда Ақсу елді мекені тұрғындары үлгілерінде жоғары нәтижелер көрсетті (сурет 1).



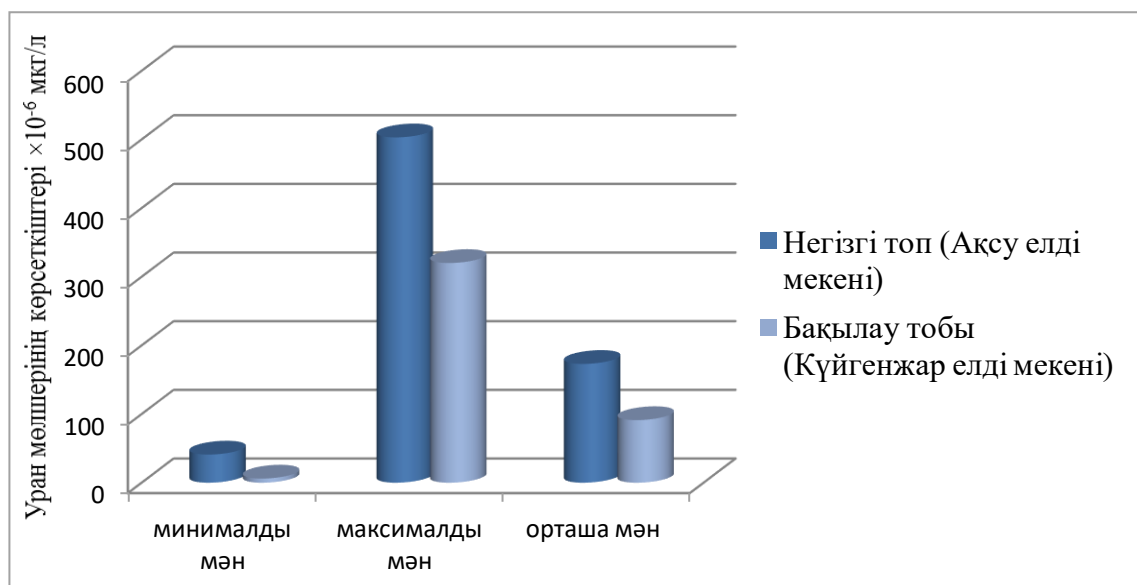
Сурет 1. Негізгі және бақылау топ тұрғындарының несеп үлгілеріндегі уран мөлшерінің көрсеткіштері, мкг/л.

Алынған нәтижелерге IBM SPSS Statistics статистикалық базасында дескриптивті (сипаттамалық) статистикалық талдау жұмыстары жүргізілді [12]. Талдау барысында негізгі (20 үлгі) және бақылау (20 үлгі) тобы тұрғындарының несеп үлгілеріндегі уран мөлшерінің нәтижелерінің негізгі сипаттамалық статистикалық көрсеткіштеріне сипаттама берілді. Есептеулер барысында сипаттамалық статистиканың негізгі талдауын мазмұндайтын негізгі көрсеткіштер алынды. Негізгі топ көрсеткіштеріне жасалған дескриптивті статистикалық талдау жұмыстары бақылау тобы тұрғындарынан алынған несеп үлгілеріндегі уран көрсеткіштеріне де жасалды (кесте 4).

Кесте 4 – Несептегі уран нәтижелеріне негізгі (Ақсу елді мекені) және бақылау тобы (Күйгенжар елді мекені) бойынша дескриптивті статистикалық талдау

Көрсеткіш	Негізгі топ $\times 10^{-6}$ мкг/л	Бақылау тобы $\times 10^{-6}$ мкг/л
Медианасы (<i>median</i>)	102,5	47
Арифметикалық ортасы (<i>X</i>)	173,05	91,15
Геометриялық ортасы	128,20503765230058	52,20739446181568
Стандартты ауытқу (Орташа квадраттық ауытқу)	147,1574434335373	99,46820438818892
Дисперсия s^2	21 655,313157894732	9 893,923684210526
Сумма (<i>Sum</i>)	3 461	1 823
Ең үлкен көрсеткіш (<i>max</i>)	503	320
Ең кіші көрсеткіш (<i>min</i>)	41	6
Диапазон (<i>Range</i>)	462	314
Ең кіші көрсеткіш (<i>min</i>)	41	6
Диапазон (<i>Range</i>)	462	314

Негізгі топ тұрғындарының үлгілеріндегі уранның шектік көрсеткіштерін бақылау тобы тұрғындары үлгілерінің көрсеткіштерімен салыстыратын болсақ, 41×10^{-6} мкг/л (*min*) ең кіші көрсеткіші бақылау тобынан (6×10^{-6} мкг/л (*min*)) 6,8 есе көп, 503×10^{-6} мкг/л (*max*) ең үлкен көрсеткіші 1,6 есе (320×10^{-6} мкг/л (*min*)) көп. Ал $173,5 \times 10^{-6}$ мкг/л орташа көрсеткіші бақылау тобына қарағанда ($91,15 \times 10^{-6}$ мкг/л) 1,9 есе жоғары болды (сурет 2).



Сурет 2. Несеп сынамаларындағы уран мөлшерінің шектік көрсеткіштері ($\times 10^{-6}$ мкг/л)

Сонымен қатар, алынған нәтижелерде Спирменнің дәрежелік корреляция коэффициенті анықталды. Ол үшін алдымен, IBM SPSS Statistics статистикалық базасында дәрежелік матрица құрылды. Солайша, Спирменнің корреляция коэффициенті (ρ) -1.157. Еркіндік дәрежелерінің саны (f) - 18. Еркіндік дәрежелерінің берілген санындағы Спирмен критерийінің критикалық мәні 0.447 құрады.

Ақсу кенті жергілікті тұрғындарынан алынған несеп үлгілеріндегі уран көрсеткіштерін әлем бойынша шет елдерден кәсіби сәулененуге ұшырамаған адамдарда несептегі уран концентрациясымен салыстыру жұмыстары жүргізілді. Тұрғындар үшін әдебиеттер негізінде несептегі уранның рұқсат етілген мөлшерін 0,4 мкг/л-ге тең деп санауға болады [13]. Негізгі және бақылау топ тұрғындарының несеп үлгілеріндегі уран мөлшерінің көрсеткіштері бұл мәннен аспайды.

Шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің нәтижесі.

Шаш үлгілеріндегі уран мөлшері негізгі (Ақсу елді мекені) және бақылау (Күйгенжар ауылы) топ тұрғындарында түрлі сандық нәтижелер көрсетті. Шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің көрсеткіштері бақылау тобы тұрғындарына қарағанда Ақсу елді мекені тұрғындары үлгілерінде жоғары нәтижелер көрсетті (сурет 3).



Сурет 3. Негізгі және бақылау топ тұрғындарының шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің көрсеткіштері (× 10⁻⁶ мкг/л).

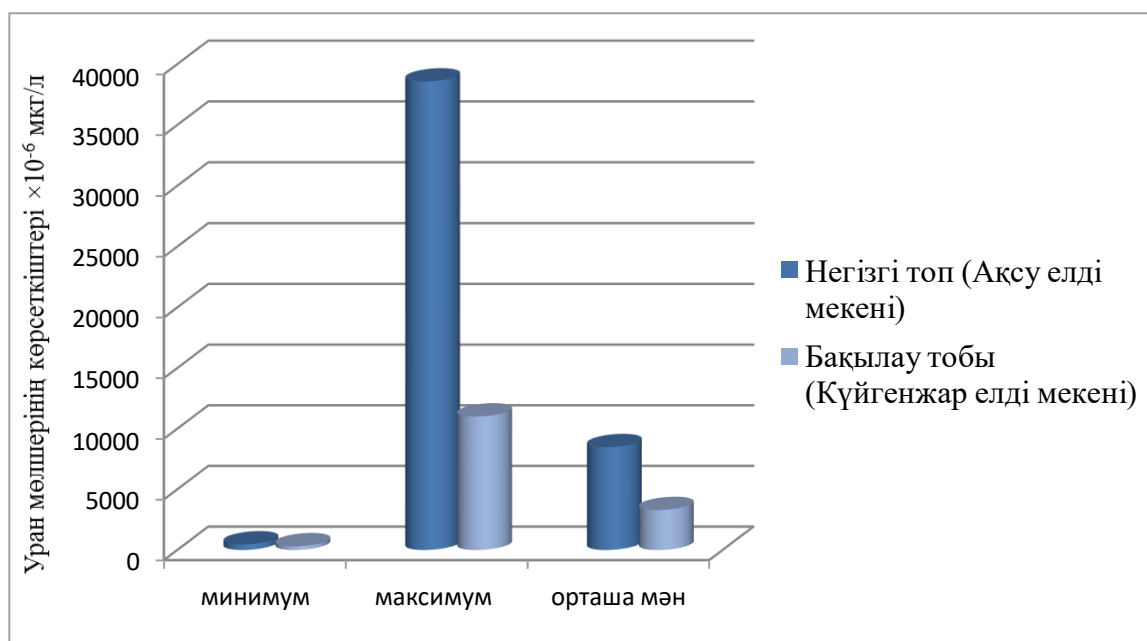
Негізгі (20 сынама) және бақылау (20 сынама) тобы тұрғындарының шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің сандық көрсеткіштеріне IBM SPSS Statistics статикалық база-сында дескриптивті (сипаттамалық) статистикалық талдау жұмыстары жүргізілді. Дескриптивті талдау жұмыстарының нәтижесінде негізгі және бақылау тобы тұрғындарының шаш үлгілері нәтижелеріне жасалған негізгі сипаттамалық көрсеткіштерін ала аламыз (кесте 5).

Кесте 5 – Шаштағы уран нәтижелеріне негізгі (Ақсу елді мекені) және бақылау тобы (Күйгенжар елді мекені) бойынша дескриптивті статистикалық талдау

Көрсеткіш	Негізгі топ ×10 ⁻⁶ мкг/л	Бақылау тобы ×10 ⁻⁶ мкг/л
Медианасы (<i>median</i>)	3 180,5	1588
Арифметикалық ортасы (<i>X</i>)	8 478,45	3 295,05
Геометриялық ортасы	3 618,796448077549	2 069,619884607688
Стандартты ауытқу (Орташа квадраттық ауытқу)	10 622,811995021795	3 521,001942853617
Дисперсия <i>s</i> ²	112844134,68157893	12397454,681578945
Сумма (<i>Sum</i>)	169 569	65 901
Ең үлкен көрсеткіш (<i>max</i>)	38 570	11 008

Ең кіші көрсеткіш (<i>min</i>)	463	307
Диапазон (<i>Range</i>)	38107	10 701

Негізгі топ тұрғындарының шаш үлгілеріндегі уранның шектік көрсеткіштерін бақылау тобы тұрғындары үлгілерінің көрсеткіштерімен салыстыратын болсақ, 463×10^{-6} мкг/л (*min*) ең кіші көрсеткіші бақылау тобынан (307×10^{-6} мкг/л (*min*)) 1,5 есе көп, $38\,570 \times 10^{-6}$ мкг/л (*max*) ең үлкен көрсеткіші 3,5 есе ($11\,008 \times 10^{-6}$ мкг/л (*min*)) көп. Ал $8478,45 \times 10^{-6}$ мкг/л орташа көрсеткіші бақылау тобына қарағанда ($3295,05 \times 10^{-6}$ мкг/л) 2,6 есе жоғары болды (сурет 4).



Сурет 4. Шаштағы уран нәтижелерінің шектік көрсеткіштері ($\times 10^{-6}$ мкг/л)

Кейін, алынған нәтижелерде IBM SPSS Statistics статистикалық базасында Спирменнің дәрежелік корреляция коэффициенті анықталды. Есептеу негізінде Спирменнің корреляция коэффициенті (ρ) -5.37 болды. Еркіндік дәрежелерінің саны (f) - 18. Еркіндік дәрежелерінің берілген санындағы Спирмен критерийінің критикалық мәні 0.447 құрады.

Ақсу елді мекені тұрғындарынан алынған шаш үлгілеріндегі уран көрсеткіштерін әлем бойынша әртүрлі елдерден кәсіби сәулеленуге ұшырамаған адамдардың шаш үлгілеріндегі уран концентрациясымен салыстыру жұмыстары жүргізілді. Ақсу елді мекені тұрғындарының шаш үлгілеріндегі уран мөлшері деректер бойынша, әртүрлі елдерден кәсіби сәулеленуге ұшырамаған адамдардың шаш сынамаүлгілеріндегі уран концентрациясының орташа мәнінен (0,08 мкг/л) төмен деңгейде болды [14].

Қорытынды

Ақсу елді мекені тұрғындарынан жиналған несеп үлгілерде жүргізілген зерттеу нәтижесі бойынша, уранның сандық көрсеткіштері әдеби деректер бойынша кәсіби сәуленуге ұшырамаған тұрғындар үшін несептегі уран мөлшерінен (4 мкг/л) төмен нәтижелер көрсетті [13]. Дегенмен, бақылау тобымен (Күйгенжар ауылы) салыстырғанда, Ақсу елді мекені тұрғындарының несеп үлгілеріндегі уран мөлшерінің орташа мәні (хорт = $173,5 \times 10^{-6}$ мкг/л) 1,9 есе жоғары нәтиже көрсетті.

Шаш үлгілеріндегі уран мөлшері әлем бойынша әдебиеттерде кәсіби сәуленуге ұшырамаған адамдардың шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің орта мәндерінен (0,08 мкг/л) төмен деңгейде болды [14]. Алайда, бақылау тобымен (Күйгенжар ауылы) салыстырғанда, Ақсу елді мекені тұрғындарының шаш үлгілеріндегі уран мөлшерінің орташа мәні (хорт = 8478×10^{-6} мкг/л) 2,6 есе жоғары нәтиже көрсетті. Несеп үлгілерімен салыстырғанда шаш үлгілерінде уран мөлшері жоғары нәтиже көрсетті, бұл шаш үлгілерінің уранның адам ағзасына деген созылмалы әсерінің биоиндикаторы бола алатынын айқындайды.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Жұмыс тапсырыс беруші – Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті «Дозалық жүктемені бағалау және уран кеніштерінің маңында тұратын тұрғындарды эпидемиологиялық зерттеу және теріс техногендік факторларды азайту бойынша іс-шараларды әзірлеу» (тіркеу нөмірі AR14871503, келісім шарт № 248/30-22-24 18.10.2022 ж.) ғылыми гранты шеңберінде, және «ҚР уран кен орындарының жанында тұратын халықтың сыни топтарын анықтау үшін несептегі уранды анықтау бойынша скрининг жүйесін әзірлеу және енгізу» (тіркеу нөмірі 0124RKI0045) ғылыми жобасының шеңберінде жүзеге асырылды.

Авторлардың қосқан үлесі.

Бижанова Д.С. – мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау, зерттеу нәтижелерін жинау, талдау. Зерттеу жұмыстарын жүргізу.

Бахтин М.М. – деректердің дұрыстығына немесе мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді дұрыс зерттеу және шешу, жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту.

Кашкинбаев Е.Т. – идея қалыптастыру, негізгі мақсаттар мен міндеттерді тұжырымдау немесе дамыту, мақаланың рәсімделуіне үлес.

Аумаликова М.Н. – зерттеулер жүргізу, деректерді және дәлелдемелерді жинау, талдау және алынған деректерді түсіндіру.

Сайфулина Е.А. – зерттеу нәтижелеріне статистикалық талдау жұмыстарын жүргізу.

Шоқабаева А.С. – сауалнама жүргізу, сынамаларды жинау және талдау.

Мусаева Э.М. – сынамаларға зертханалық талдау жұмыстарын жүргізу.

**Д.С. Бижанова*, М.М. Бахтин, Е.Т. Кашкинбаев, М.Н. Аумаликова, Е.А. Сайфулина,
А.С. Шокабаева, Э.М. Мусаева**

*Научно-исследовательский институт радиобиологии и радиационной защиты НАО
«Медицинский университет Астана», Астана, Казахстан
(E-mail: bizhanova.d@amu.kz)*

**Оценка содержания урана в биологических пробах, взятых у жителей поселка Ақсу,
расположенного вблизи хранилища радиоактивных отходов**

Аннотация. Уровень потенциальной опасности, возникающей из радиоактивных отходов, может варьироваться. Необходимы исследования, которые позволят сделать выводы о влиянии урана, извлеченного из хранилища отходов, на местное население. Целью работы является изучение содержания урана в биологических образцах (моча, волосы), полученных от жителей населенного пункта Ақсу, расположенного вблизи законсервированных радиоактивных отходов. В ходе исследования было выявлено содержание урана в биологических образцах, собранных у местных жителей, проживающих в населенном пункте Ақсу средней продолжительностью 30 лет. Было обнаружено, что образцы волос содержат более высокое содержание урана, чем образцы мочи. Полученные данные могут быть использованы при определении нормативного количества урана в моче. Кроме того, количество обнаруженного урана в биологических образцах может быть биоиндикаторным показателем в мерах по поддержанию радиационной безопасности.

Ключевые слова: радионуклид, уран, масс-спектрометрия, биоиндикатор, хранилище радиоактивных отходов.

**D.S. Bizhanova*, M.M. Bakhtin, E.T. Kashkinbayev, M.N. Aumalikova, E.A. Saifilina,
A.S. Shokabayeva, E.M. Mussayeva**

*Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection of the Astana Medical University,
Astana, Kazakhstan
(E-mail: bizhanova.d@amu.kz)*

**Evaluation of uranium content in biological samples taken from residents of the village of Aksu,
located near a radioactive waste storage facility**

Abstract. The level of potential danger arising from radioactive waste storage facilities can be different. It is imperative that further studies be conducted in order to ascertain the impact of uranium extracted from waste storage facilities for local residents. The purpose of the work is to study the content of uranium in biological samples (urine, hair) taken from residents of the settlement of Aksu, located near the radioactive waste reservoir. During the study, the content of uranium was determined in biological samples taken from local residents living in the settlement of Aksu, located near the radioactive waste storage facility, with an average duration of 30 years. It was found that hair samples had a higher uranium content than urine samples. The data obtained can be used to determine the standard amount

of uranium in the urine. At the same time, the detected uranium content in biological samples can be a bioindicator indicator in radiation safety measures.

Keywords: radionuclide, uranium, mass spectrometry, bioindicator, radioactive waste storage facility.

Авторлар туралы мәлімет:

Бижанова Д.С. – корреспондент автор, жаратылыстану ғылымдары магистрі, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ аға ғылыми қызметкері, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Бахтин М.М. – б.ғ.д., профессор, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ директоры, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Кашкинбаев Е.Т. – PhD докторы, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ директорының орынбасары, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Аумаликова М.Н. – хат-хабар авторы, PhD докторы, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ радиохимия және радиоспектрометрия сынақ зертханасының меңгерушісі, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Сайфулина Е.А. – медицина ғылымдарының магистрі, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ радиациялық эпидемиология және медико-дозиметрлік регистрі зертханасы меңгерушісі, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Шоқабаева А.С. – жаратылыстану ғылымдары магистрі, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ радиациялық қауіпсіздік және гигиена зертханасы меңгерушісі, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Мусаева Э.М. – жаратылыстану ғылымдары магистрі, Радиобиология және радиациялық қорғау ҒЗИ аға ғылыми қызметкері, КеАҚ «Астана медицина университеті», Бейбітшілік 49/А, Астана, Қазақстан.

Бижанова Д.С. – автор для корреспонденции, магистр естественных наук, старший научный сотрудник НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Бахтин М.М. – д.б.н., профессор, директор НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Кашкинбаев Е.Т. – доктор PhD, заместитель директора НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Аумаликова М.Н. – автор для корреспонденции, доктор PhD, заведующий ИЛ радиохимии и радиоспектрометрии НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Сайфулина Е.А. – магистр медицинских наук, заведующий лабораторией эпидемиологии и медико-дозиметрического регистра НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Шоқабаева А.С. – магистр естественных наук, заведующий лабораторией радиационной безопасности и гигиены НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Мусаева Э.М. – магистр естественных наук, старший научный сотрудник НИИ радиобиологии и радиационной защиты НАО «Медицинский университет Астана». Бейбитшилик 49/А, Астана, Казахстан.

Bizhanova D.S. – corresponding author, Master of Science (Natural Sciences), Senior Researcher, Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection, Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Bakhtin M.M. – Doctor of Biological Sciences, Professor, Director of the Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection of the Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Kashkinbaev E.T. – PhD doctor, deputy director of the Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection of the Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Aumalikova M.N. – corresponding author, PhD doctor, head of the IL of radiochemistry and radiospectrometry of the Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection of the NAO "Astana Medical University". Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Saifulina E.A. – Master of Medical Sciences, Head of the Laboratory of Epidemiology and Medical-Dosimetric Register of the Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection of the Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Shokabaeva A.S. – Master of Natural Sciences, Head of the Laboratory of Radiation Safety and Hygiene, Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection, Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.

Musayeva E.M. – Master of Natural Sciences, Senior Researcher, Research Institute of Radiobiology and Radiation Protection, Astana Medical University. Beibitshilik 49/A, Astana, Kazakhstan.



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ӘӨЖ 29.15.01

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-148-3-54-71>

Ғылыми мақала

Радонның диффузиялық камерасындағы CR-39 детекторындағы альфа бөлшектерінің іздерінің таралуы

К.Ш.Жумадилов^{*1}, А.М.Андабаева¹, В.Ф.Степаненко², А.И.Иванников²,
А.А.Баграмова¹, С.М.Сарсенова¹, Ф.У. Абуова³, А.К.Амангельдина¹,
М.Т.Касымжанов^{1,3}

¹Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы,

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Астана қаласы

²Ресей Федерациясының Денсаулық сақтау Министрлігінің «ФМЗО» Федералдық Мемлекеттік бюджеттік мекемесінің филиалы А.Ф. Цыб атындағы МРФО, Обнинск қаласы

³АҚ "Ядролық технологиялар паркі" Қазақстан, Курчатов қаласы

(E-mail: zhumadilovk@gmail.com)

Аңдатпа. Бұл зерттеудің мақсаты радонның диффузиялық камераларында радон және оның ұрпақтары түзетін альфа бөлшектерінің іздерінің кеңістікте таралуын зерттеу болды. CR-39 (CR-39 қатты күйдегі ядролық трек детекторы.) детекторларымен жабдықталған үш цилиндрлік камера пайдаланылды, радон концентрациясы RAD7 (RAD7 – бүкіл әлем бойынша зерттеуші ғалымдар мен кәсіпқойлар пайдаланатын жан-жақты радон және торон детекторы) құрылғысы арқылы бағаланды. Тіркеу детектордың бетінде альфа бөлшектерінің іздерінің біркелкі емес таралуын анықтады, камера қабырғаларының жанындағы іздердің тығыздығы орталықпен салыстырғанда 30%-ға төмен болды. Бұл нәтижелер камераның бірдей өлшемдеріне негізделген аналитикалық болжамдарға қарама-қайшы болды. Бөлшектердің түсу энергиясына қатысты анықтаудың критикалық бұрышы Track_vision бағдарламалық жасақтамасының көмегімен анықталды, бұл камера өлшемі мен критикалық бұрыштың трек тығыздығының таралуына айтарлықтай әсерін көрсетті. Сонымен қатар, зерттеу радон мен оның ұрпақтарының көлемдік және шөгінді фракцияларының ішінара үлестерін талдау арқылы трек тығыздығының өзгеру көздерін зерттеді. Бүйірлік қабырға үлесінің артқаны байқалды, ал детектор орталығынан радиалды қашықтықтың ұлғаюымен көлемдік және платформалық үлестер азайды. Камераның өлшемдерін өзгерту осы ішінара үлестердің салыстырмалы әсер етті, нәтижесінде детектордың бетінде көрінетін іздердің әр түрлі таралуы пайда болды. Эксперименттік нәтижелер Монте-Карло әдісіне негізделген бұрын әзірленген бағдарламалық жасақтаманы қолдану арқылы алынған мәндермен салыстырылды. Детектордың жауап беру функциясының бес түрлі өрнегі қолданылды, олардың екеуі эксперимент нәтижелерін айтарлықтай бағаламады. Бұл жан-жақты зерттеу радон диффузиялық камераларындағы альфа бөлшектерінің таралу жолдарының күрделі динамикасына жарық түсіреді және радон концентрациясын сенімді бағалау үшін дәл модельдеудің маңыздылығын көрсетеді.

Түйінсөздер: CR-39, Радон, калибрлеу коэффициенті, трек тығыздығы, критикалық бұрыш.

Кіріспе

Пассивті радонды өлшеу әдетте сүзгі қағазымен немесе радонды өткізетін, бірақ оның ұрпақтары үшін емес басқа мембраналармен жабылған цилиндрлік немесе конус пішінді диффузиялық камералармен қоршалған қатты күйдегі ядролық трек детекторларымен орындалады. Радон газы камераға таралады, онда ол ыдырайды және альфа бөлшектерін шығарады, детектор материалында жасырын іздер жасайды. Дәстүрлі түрде радон ұрпақтары камера көлемінде және оның ішкі беттерінде біркелкі таралады деп болжанғанымен, кейбір зерттеулер біркелкі емес таралуды болжайды [1-3]. Ұрпақтардың қысқа жартылай шығарылу кезеңі детектор бетіндегі альфа-тректердің жалпы тығыздығына ықпал етеді, кейбір ұрпақтардың едәуір бөлігі ыдырауға дейін шөгеді.

Сәулеленуден кейін детекторлар бөлшектердің іздерін көрінетін ету үшін химиялық немесе электрохимиялық өңдеуден өтеді. Содан кейін калибрлеу коэффициенттері тректің тығыздығын радон концентрациясына түрлендіру үшін қолданылады [4-6]. Калибрлеуге эксперименттік немесе теориялық әдістер арқылы қол жеткізуге болады, бұл радонның диффузиялық камералары ішіндегі детекторларда тректің біркелкі таралуын болжайды. Дегенмен, теориялық ойлар камера мен детектордың өлшеміне, пішініне және улау жағдайларына байланысты ықтимал біркелкі емес таралуды көрсетеді [7, 8].

Бұл зерттеу радон диффузиялық камераларындағы дөңгелек CR-39 детекторлары үшін альфа-трек тығыздығы мен калибрлеу коэффициенттерінің таралуын зерттеуге бағытталған. Эксперименттік нәтижелер камераның үш түрлі өлшемі бойынша аналитикалық және Монте-Карло есептеулерімен салыстырылды [9, 10].

Материалдар мен әдістер

Эксперимент

Бұл зерттеуде радон диффузиялық камералары ретінде сүзгі қағазымен қапталған үш цилиндрлік шыныаяқ пайдаланылды. Бұл камералардың өлшемдері келесідей болды:

Камера 1: Радиусы $R=2$ см, биіктігі $H=3.5$ см

Камера 2: Радиусы $R=3$ см, биіктігі $H=9$ см

Камера 3: Радиусы $R=3.5$ см, биіктігі $H=6$ см

Әрбір камера дөңгелек CR-39 детекторымен жабдықталған (TASTRACK® , қалыңдығы 1 мм), бүкіл астыңғы бетін жабады. Детекторлар концентрлі шеңберлермен лазермен ойылған, іргелес шеңберлер бір-бірінен 5 мм қашықтықта орналасқан.

Бұл камералар радон көзі ретінде қызмет ететін уран кенінің үлгісімен бірге көлемі 30 Л герметикалық жабылған плексиглас қорабына тығыздалған. Плексиглас қорабының ішіндегі радон концентрациясы RAD7 радон монитормен көмегімен өлшенді.

Детекторлар шамамен 3 ай (93 күн) әсер етті. Экспозиция кезеңінен кейін камералар ашылып, CR-39 детекторлары 6,25 NaOH ерітіндісінде 5 сағат бойы химиялық өңдеуден

өтті. Улау процедурасы су моншасында $70 \pm 1^\circ$ С бақыланатын температурада жүргізілді. Кейіннен детекторлар одан әрі улауды тоқтату үшін тазартылған сумен жуылды.

Тректерді санау оптикалық микроскоптың көмегімен жүргізілді. Детектордың әр дөңгелек жолағында кездейсоқ түрде 50-ге жуық визуалды өрістер таңдалды және әр жолақ үшін алынған тректің орташа тығыздығы детектордың ортасынан тиісті радиалды қашықтыққа жатқызылды.

Бұл әдістеме радонның диффузиялық камераларында альфа бөлшектерінің іздерінің таралуын зерттеуге мүмкіндік берді, бұл іздердің кеңістіктікте таралуы және олардың камера өлшемдерімен және экспозиция жағдайларымен байланысы туралы түсінік берді.

Аналитикалық тәсіл

Маркович және басқа ғалымдар радондарды өлшеуде қолданылатын диффузиялық камералардың егжей-тегжейлі теориялық моделін ұсынды, осы камералардың ішінде орналасқан детекторлардағы іздердің пайда болуының негізінде жатқан іргелі физикалық процестерге назар аударды [11].



Сурет 1. Концентрлік шеңберлері мен радиустары (солдан оңға қарай) ойылған CR-39 детекторлары $R_1 = 2$ см, $R_2 = 3$ см және $R_3 = 3,5$ см сәйкесінше 1, 2 және 3 диффузиялық камераларға орналастырылған

Модель, ең алдымен, диффузиялық камера үшін цилиндрлік пішінді қабылдайды, ол радон өткізгіш сүзгі қағазымен қоршалған. Теориялық құрылымның негізгі аспектілеріне мыналар жатады:

Диффузия процесі: сүзгі қағазы арқылы камераға радонның диффузиясы модельде орталық болып табылады. Бұл диффузия процесі сүзгі қағазына D_1 диффузия коэффициентін тағайындаумен сипатталады.

Ауа құрамы: модель камерада аэрозольдерсіз таза ауа бар деп болжайды.

Радонның таралуы: өткізгіш сүзгі қағазы арқылы камераға түсетін Радон камераның қабырғаларына бекітілмей немесе жиналмай-ақ өзінің газ тәрізді түрін сақтайды деп болжанады. Нәтижесінде радонның барлық белсенділігі камераның ауа көлеміне таралады.

Математикалық өңдеу: радонның және оның ұрпақтарының көлемдік белсенділік концентрациясының таралуы диффузия теңдеуін шешу арқылы анықталады (1), радонның сүзгі арқылы да, камераның ауа көлемінде де диффузиясын ескереді [3, 7, 11].

Бұл теориялық модель диффузиялық камералардағы радондарды өлшеуге қатысатын диффузиялық процестер туралы жан-жақты түсінік береді, мұндай жүйелердегі радондар мен ұрпақтардың концентрациясын дәл болжауға мүмкіндік береді [11].

$$\frac{\partial^2 C_n(r,z,t)}{\partial t^2} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 C_n(r,z,t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_n(r,z,t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_n(r,z,t)}{\partial z^2} \right) - \lambda_n \cdot C_n(r,z,t) + \lambda_{n-1} \cdot C_{n-1}(r,z,t) \quad (1)$$

мұндағы $n = 0, 1, 2, 3$ сәйкесінше ^{222}Rn , ^{218}Po , ^{214}Po және ^{214}Bi мәндерін білдіреді, λ_n – n -ші ұрпақтың ыдырау константасы ($\lambda_{n-1} = 0$ ^{222}Rn үшін).

Камера ішіндегі радон ұрпақтарының мінез-құлқына ыдырау, диффузия және тұндыру процестері әсер етеді. Радон ұрпақтарының диффузиялық теңдеуі олардың прекурсорлардың ыдырауынан, бүкіл камераның диффузиясынан және камера қабырғаларына түсуінен пайда болуын қарастырады. Камера қабырғаларына тұндыру тиісті шекаралық шарттарды белгілеу арқылы шешіледі, әдетте шекарада нөлдік концентрацияны қабылдайды. Диффузия теңдеулерін шешу арқылы радон ұрпақтарының көлемдік белсенділік концентрациясы анықталады. Камера қабырғаларына қарай ағынды есептеу депозитке салынған белсенділік жылдамдығын (S_i) анықтауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, дифференциалдық теңдеулердің тағы бір жиынтығы қазірдің өзінде бар ыдырап бара жатқан прекурсорлардың ұрпақтарының депозиттік қызметіне қосқан үлесін бағалау үшін шешілуі керек. Бұл тәсіл ұрпақтардың камера ішіндегі мінез-құлқын жан-жақты түсінуге мүмкіндік береді, олардың концентрациясы мен тұндыру жылдамдығын дәл бағалауды жеңілдетеді.

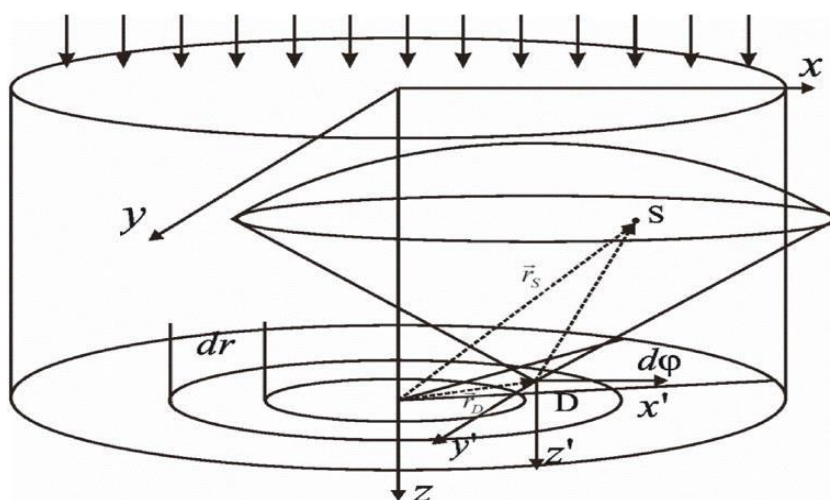
$$\frac{dN_{ii}}{dt} = S_{ii} - \lambda_{ii} N_{ii} + \lambda_{ii-1} N_{ii-1}, \quad (2)$$

мұндағы $i = 1, 2, 3$ ^{218}Po , ^{214}Po және ^{214}Bi және $\lambda_0 = 0$ -ге қатысты, өйткені қабырғаларда тұндырылған Rn атомдары жоқ.

Сипатталған әдістемеге сәйкес диффузиялық камерадағы көлемдік және депозиттік әрекеттерді есептеуге болады. Диффузия коэффициенттері ретінде көрсетілген $D_1 = 1.25 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ сүзгі қағазына арналған және $D_2 = 0.054 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ камералар ішіндегі ауаға арналған. Маңыздысы, бірдей диффузия коэффициенті радонның да, оның ұрпақтарының атомдарының да камералар ішінде диффузиясы үшін қолданылғанын атап өткен жөн. Қоршаған ауадағы диффузия коэффициенттері аэрозольдерге жабысу үрдісіне байланысты әр түрлі ұрпақ атомдары үшін әр түрлі болуы мүмкін болса да, сүзгі қағазымен жабылған диффузиялық камераларда аэрозольдер жоқ деп болжанған. Осылайша, ұрпақтың диффузиялық коэффициенттері байланыспаған атомдардың коэффициенттері ретінде қарастырылды [12-14]. Әдебиеттерде диапазоны $0.01-0.1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ радонның диффузиялық коэффициенттері мен оның байланыспаған ұрпақ атомдары үшін сілтеме жасалған [15-21]. Орташа мәні $0,054 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ [14].

Келесі қадам камера түбінің бүкіл ауданын қамтитын детектордағы альфа бөлшектерінің трек тығыздығының таралуын анықтауды қамтыды. Бұл детектордағы көрінетін іздерді қалдыруға қабілетті альфа бөлшектерін шығаратын барлық ұрпақ үшін көлемдік және шөгінді фракциялардың ыдырауынан түскен үлестерді қорытындылау

арқылы жүзеге асты. Детекторда көрінетін іздерді алу критерийлері альфа бөлшектерінің диапазоны мен критикалық бұрыш арқылы белгіленді [11]. Бұл кешенді тәсіл радонды өлшеуді талдау үшін қажет детектор бетіндегі альфа бөлшектерінің трек тығыздығының таралуын бағалауға мүмкіндік береді.



Сурет 2. Диффузиялық камераның схемалық көрінісі. Жоғарғы көрсеткілер радон диффузиясының бағытын көрсетеді, O_{xyz} координаталар жүйесі камералық цилиндр үшін бекітілген, ал $O_{x'y'z'}$ – анықтау нүктесімен байланысқан координаталар жүйесі

$$[rS \cos\varphi_S - rD \cos\varphi_D]^2 + [rS \sin\varphi_S - rD \sin\varphi_D]^2 + [H - zS]^2 \leq \text{Range}^2$$

$$[rS \cos\varphi_S - rD \cos\varphi_D]^2 + [rS \sin\varphi_S - rD \sin\varphi_D]^2 \leq \tan^2\theta [H - zS]^2 \quad (3)$$

Сурет 2 көрсетілгені бойынша O_{xyz} шығу тегі сүзгінің ортасында, z осі камераның түбіне бағытталған. Эквалайзерде берілген шарттар. (3) конустың көлденең қимасы (саңылауы критикалық бұрыш арқылы анықталған) және сфера (радиусы альфа бөлшектерінің диапазонымен анықталған) түрінде түзілетін балмұздақ тәрізді көлемді анықтаңыз. Осы тиімді көлемде шығарылатын альфа бөлшектері детектордағы іздердің пайда болуына ықпал етуі мүмкін. Детектор бетіне түсу ықтималдығына сәйкес өлшенген тиімді көлемде шығарылатын альфа бөлшектерін қорытындылау детектордың элементар бетінде көрінетін тректердің жалпы санын береді. Бұл процедураны әрбір элементар бет үшін қайталау детектордағы тректердің таралуын береді [11].

Критикалық анықтау бұрышы

Сипатталған аналитикалық әдіс анықтаудың критикалық бұрышын бөлшектердің түсу энергиясымен байланыстыратын функцияны қолданады. Бұл функцияны алу үшін TRACK_VISION компьютерлік бағдарламасының көмегімен бес түрлі өрнек алынды [22]. Бұл бағдарлама ядролық трек материалдарындағы альфа бөлшектерінің іздерін түсу энергиясы, түсу бұрышы және улау кезінде жойылған қабат сияқты факторларға

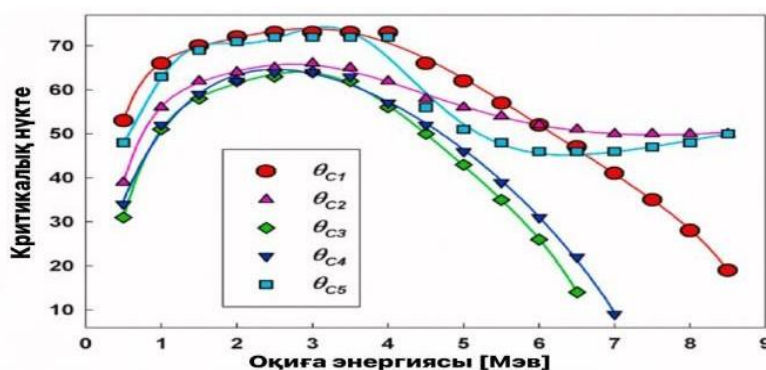
негізделген визуалды түрде көрсетуге қабілетті. Сонымен қатар, ол тректердің параметрлерін, соның ішінде негізгі және кіші осьтерді және трек тереңдігін қамтамасыз етеді. Анықтаудың критикалық бұрышын анықтау үшін бағдарлама альфа бөлшектерінің энергиясының диапазоны бойынша 0,01 Мэв-тан 8,5 Мэв-қа дейін орындалды. Түсу бұрыштары 1° қадаммен 1°-тан 90°-қа дейін өзгерді. Нақты эксперименттік жағдайлар қолданылды, оның ішінде 5 сағаттық улау уақыты және 1,06 мкм/сағ көлемді жылдамдығы. Бағдарламада детектордың жауап беру функциясының бес түрлі өрнегі жүзеге асырылды, олар әртүрлі зерттеулерден алынған: [23-27]. Бұл өрнектер детектордың әр түрлі энергиядағы альфа бөлшектеріне және түсу бұрыштарына реакциясын есептеуге мүмкіндік береді, бұл детектор бетіндегі трек тығыздығының таралуын дәл талдауды жеңілдетеді.

$$V_1 = 1 + (11.45e^{-0.339R'} + 4e^{-0.044R'})(1 - e^{-0.58R'}) \quad (4)$$

$$V_2 = 1 + e^{-0.1R'+1} - e^{R'+1.27} + e^{1.27} - e^1 \quad (5)$$

$$V_3 = 1 + e^{-0.068R'+1.1784} - e^{-0.6513R'+1.1784} \quad (6)$$

$$V_4 = 1 + e^{-0.06082R'+1.119} - e^{-0.8055R'+1.119} \quad (7)$$



3-сурет. Бөлшектердің түсу энергиясының функциясы ретінде критикалық анықтау бұрышы (TRACK_VISION software арқылы алынған)

$$V_5 = 1 + \frac{390}{(R'+2)^{2.35}} \cdot \ln(R' + 1) \cdot (1 - e^{-R'^{\frac{1}{5}}}) + \frac{R'}{80} \quad (8)$$

мұндағы R' детектор материалындағы альфа бөлшектерінің қалдық диапазонын білдіреді.

Көріну критерийлері ретінде тректің диаметрі мен тереңдігінің 1 μ м екенін ескере отырып, бөлшектердің түсу энергиясына (E) қатысты критикалық анықтау бұрыштары

алынды. Қалыпты детектор бетіне қатысты критикалық бұрыштар θ_{c1} , θ_{c2} ,..., және θ_{c5} (3-суретте көрсетілгендей функцияларға V_1 , V_2 ,..., және V_5 , сәйкес келеді). Берілген улау шарттары үшін альфа бөлшектерінің энергиясы 0,1 МэВ-тан төмен тректер жасалмаған. Сонымен қатар, V_3 , және V_4 , жауап беру функцияларын қолдану кезінде энергиясы 7 МэВ-тан жоғары бөлшектер шығаратын тректер қалыпты жағдайда да көріну критерийлеріне сәйкес келмеді.

Сурет 3 келтірілген мәліметтер келесі функциямен сәйкес келеді:

$$\theta_c(E) = \sum_{i=1}^5 a_{ii} \cdot E^{b_{ii}} \cdot e^{-c_{ii}E} \quad (9)$$

a_i , b_i , c_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5$) сәйкес параметрлері 1-кестеде келтірілген. Калибрлеу коэффициенттерін теориялық есептеу осы функциялардың әрқайсысын ескерді және олардың болжамын әр жағдай бойынша эксперимент нәтижелерімен салыстырды.

Кесте 1. Критикалық анықтау бұрышының бес функциясының сәйкес параметрлері θ_{c1} - θ_{c5} V_1 - V_5 жауап функцияларына сәйкес келеді (әрбір сәйкестік үшін R^2 анықтау коэффициенті соңғы қатарда берілген)

	θ_{c1}	θ_{c2}	θ_{c3}	θ_{c4}	θ_{c5}
a_1	33.3630	9.4907e-3	30.9627	15.6977	10.5530
b_1	2.0951	-5.8437	1.5331	0.7533	0.6160
c_1	0.6444	3.4369	1.2099	0.2733	-4.0778e-3
a_2	37.0527	19.6300	3.5150	15.1462	0.62998
b_2	1.1380	0.3669	7.4133	0.7559	13.8183
c_2	1.5517	-0.0131	2.1386	0.2690	3.8767
a_3	158.2901	4.9021	18.5699	17.9516	17.7317
b_3	0.9874	1.3500	1.1808	0.7444	-0.5616
c_3	1.4660	1.0812	0.2808	0.2864	-0.0624
a_4	6.6378	342.9751	102.6803	18.2165	116.2258
b_4	2.1214	1.9326	1.5515	0.7281	2.1152
c_4	0.4321	2.2704	1.3261	0.2982	1.7099
a_5	-6.1985e-4	27.1464	-2.594e-3	-0.0592	79.4112
b_5	-3.9621	3.0547	0.2571	1.9356	3.4437
c_5	-2.1277	1.0639	-1.2805	1-0.3529	1.8776
R^2	0.9982	0.9969	0.9996	0.9974	0.9798

Монте-Карлода есептеу

Fortran 90 бағдарламасы Cr-39_Sensitivity калибрлеу коэффициенттерін бағалау үшін пайдаланылды [10]. Бұл бағдарлама радон және оның ұрпақтары шығаратын альфа бөлшектерінің CR-39 детекторының ішінара сезімталдығын есептейді. Бағдарлама камера көлеміндегі ыдыраған бөлшектерді, камера қабырғалары мен сүзгіге түскен бөлшектерді, сондай-ақ детектордың өзінде қапталған бөлшектерді ескереді.

Жалпы калибрлеу коэффициенті, k_{MC} , осы жарналардың барлығын қосу арқылы анықталады:

$$k_{MC} = k_0 + f_1 k_{1a} + (1 - f_1) k_{1ww} + k_{4ww} + (1 - f_1) k_{1p} + k_{4p} \quad (10)$$

Мұнда, f_1 ^{218}Po -ның көлемдің үлесін білдіреді, бұл ^{218}Po -ның тұндыру алдындағы ауада ыдырайтын бөлігін, ал, k_0 , k_{1a} тиісінше ^{222}Rn және ^{218}Po ішінара сезімталдықты сипаттайды. k_{1w} және k_{4w} камера қабырғаларына түскен ^{218}Po және ^{214}Po -ға сезімталдықты көрсетеді, ал k_{1p} және k_{4p} детектордағы ^{218}Po және ^{214}Po -ға сезімталдықты білдіреді. Бағдарлама радон ұрпақтарының камераның ішкі беттеріне, соның ішінде бүйір қабырғаларына, сүзгіге және детекторға біркелкі түсуін болжайды [10]. Экспериментте қолданылған улау шарттары мен камераның өлшемдері бағдарлама үшін кіріс деректер ретінде пайдаланылды.

Улаудың негізгі мөлшерлемесі $1.06 \mu\text{mh}^{-1}$. (4)–(8) теңдеулерімен өрнектелген бес V функция бойынша нәтижелер алынды. Бұл тәсіл радонды өлшеуді дәл талдау үшін қажетті калибрлеу коэффициенттерін анықтауға мүмкіндік береді [28].

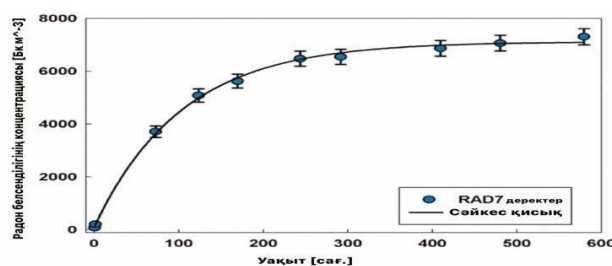
Нәтижелер және талқылау

Калибрлеу қорабындағы радонның орташа концентрациясы

4-суретте Plexiglas қорабындағы радон концентрациясының жоғарылауы RAD7 құрылғысының көмегімен бақыланды, экспозицияның бірінші айында әр 2-3 күн сайын бір сағаттық өлшеулер жүргізілді. Эксперименттік мәліметтер келесі теңдеуге сәйкес келтірілді [29]:

$$C(t) = \alpha + \beta e^{-\gamma t} \quad (11)$$

Мұндағы, α , β және γ қораптағы радон белсенділігінің концентрациясының уақыт эволюциясына әсер ететін үш негізгі процесті білдіреді: кен үлгісінен радонның дем шығаруы, радонның ыдырауы және қораптан радонның ағуы. Параметр α тепе-теңдік радон концентрациясын білдіреді t шексіздікке ұмтылады, $\alpha + \beta$ қораптағы радонның бастапқы концентрациясына тең $t=0$ және γ радонның ыдырау константасы мен радонның ағып кету константасының қосындысы. Бұл функцияны 93 күндік экспозиция уақытына экстраполяциялау қораптағы радон белсенділігінің орташа концентрациясын келесідей береді: $C_{Rn} = (6.8 \pm 0.4) \text{ кБк/м}^3$.

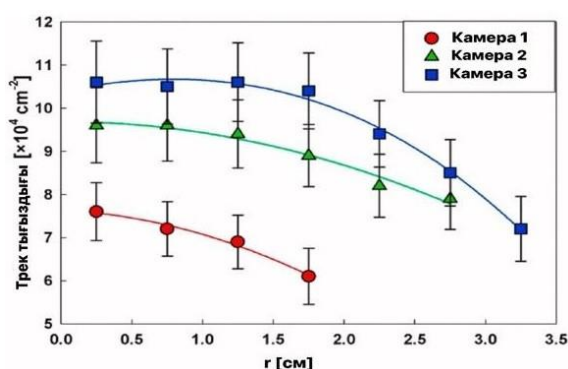


Сурет 4. Радон белсенділігі концентрациясының жинақталуы

Алдыңғы зерттеулер диффузиялық камералардағы радон концентрациясы сыртқы мәннен сәл төмен болуы мүмкін екенін көрсетті [12]. Алайда, қазіргі жағдайларды түзету коэффициентін есептегеннен кейін радон концентрациясының төмендеуі барлық үш камера үшін шамалы екендігі анықталды. Сондықтан әрбір камераның ішіндегі концентрация Plexiglas қорабында өлшенген мәнге тең деп есептелді.

Калибрлеу коэффициенті

Детектор бетіндегі альфа бөлшектерінің іздерінің таралуы біркелкі емес екені анықталды, орталықтан қашықтық ұлғайған сайын трек тығыздығы төмендеп, әр камераның бүйір қабырғаларына жақындады (Сурет 5). Эксперименттік деректер нүктелері көпмүшелік функциялармен тиімді жабдықталған.



Сурет 5. Орталықтан радиалды қашықтыққа қатысты альфа-трек тығыздығы (эксперимент арқылы алынған)

Камералардағы радон белсенділігінің орташа концентрациясы сыртқы концентрацияға (C_{Rn}) тең деп есептелетінін ескере отырып, детектор бетіндегі (i) дөңгелек жолақта табылған орташа альфа-трек тығыздығы (ρ_i) калибрлеу коэффициентіне ($k_{EXP,i}$) түрлендірілді:

$$k_{EEP,ii} = \frac{\rho_i}{C_{Rn} \cdot \Delta t} \quad (12)$$

Мұнда Δt экспозиция уақытын білдіреді. Калибрлеу коэффициенті $k_{(EXP,i)}$ камераның түбінің центрмен сәйкес келетін детектордың центріден радиалды қашықтықтың функциясы ретінде, 6-суретте көрсетілген экспериментте қолданылатын үш камера үшін, камераның өлшемдеріне байланысты камераның қабырғаларына жақын орналасқан калибрлеу коэффициенті орталықтағыдан 30%-ға төмен болды.

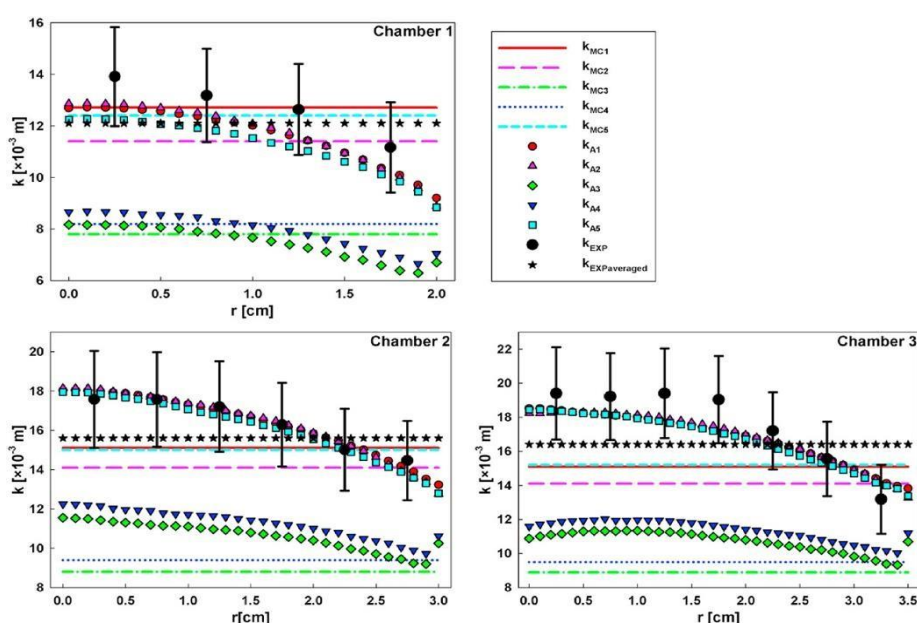
Сурет 6 сонымен қатар теориялық бағалау нәтижелерін көрсетеді. Аналитикалық есептеулер калибрлеу коэффициенттерінің әр түрлі мәндерін берді (k_{A1} , k_{A2} , ..., k_{A5}) критикалық анықтау бұрышы үшін бес түрлі функцияны қолдану арқылы (θ_{C1} , θ_{C2} , ..., θ_{C5} , сәйкесінше). Аналитикалық тәсіл θ_{C1} , θ_{C2} , ..., θ_{C5} , функцияларын қолдану кезінде эксперимент нәтижелерімен жақсы келісетіндігін көрсетті. Ең жақсы сәйкестік 2-ші

камерада байқалды, ал 1-ші және 3-ші камераларға арналған аналитикалық болжамдар да эксперименттік белгісіздік диапазонына түсті. θ_{C1} , θ_{C2} , ..., θ_{C5} функциялары ұқсас нәтижелер берді, ал θ_{C3} және θ_{C4} функциялары эксперименттік мәндерді жете бағаламады.

Жүргізілген зерттеуде CR 39_sensitivity компьютерлік бағдарламасы 6-суретте көрсетілген бес жауап функциясына (V_1 - V_5) негізделген калибрлеу коэффициенттерін (k_{MC1} , k_{MC2} , ..., және k_{MC5}) алу үшін пайдаланылды [10]. ^{218}Po -ның көлемдік үлесі шамамен 0,4 деп есептелді, алайда диффузиялық камерадағы ұрпақтар үшін Джейкоби үлгісіне сүйеніп, төмен мән ($f1 \rightarrow 0$) ұсынылды [30, 31]. Бұл зерттеуде аналитикалық модель қолданылып, сәйкесінше 1, 2 және 3 камералар үшін 0,02, 0,06 және 0,06 ^{218}Po көлемдік

фракциялары алынған. Осы фракциялар CR39_Sensitivity бағдарламасының кіріс параметрлері ретінде қолданылды. Қызықтысы, V_1 және V_5 функциялары эксперимент нәтижелерімен ең жақын сәйкестікті көрсетті [22]. Дегенмен, V_3 және V_4 функциялары барлық жағдайларда эксперименттік мәндерді үнемі төмендетіп отырды.

Қорытындылай келе, зерттеу CR39_Sensitivity бағдарламасы мен аналитикалық модельді калибрлеу коэффициенттерін анықтау үшін тиімді қолданды. Көңілге аударарлығы, V_1 және V_5 функциялары алдыңғы зерттеулермен сәйкес келіп, эксперименттік нәтижелерде жоғары дәлдікпен жұмыс істеді, ал V_3 және V_4 функциялары эксперименттік мәндерді тұрақты түрде төмен бағалады. Бұл жан-жақты талдау ^{218}Po көлемді бөлшектерді анықтаудың күрделі динамикасын түсіндіреді және дәл модельдеудің мұндай зерттеулердегі маңыздылығын көрсетеді.



Сурет 6. Эксперимент нәтижесінде алынған калибрлеу коэффициенттері (k_{EXP} және $k_{\text{EXP,орташа}}$), аналитикалық әдіс (k_{A1} – k_{A5}) және Монте – Карло тәсілі (k_{MC1} – k_{MC5})

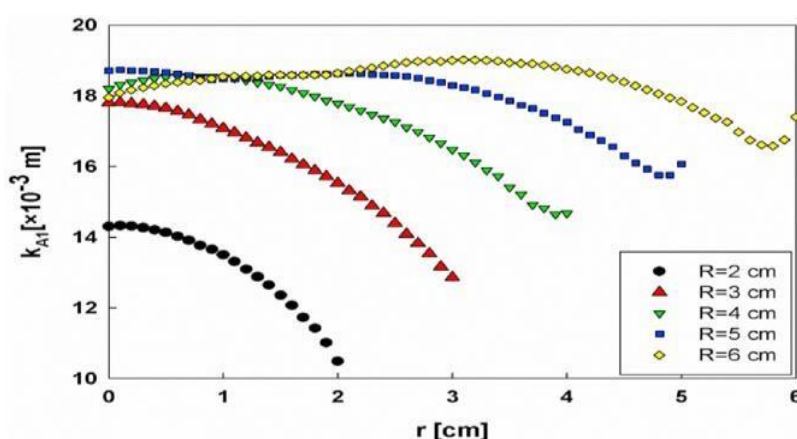
Эксперименттік нәтижелер детектор бетіндегі тректің біркелкі емес таралуына қатысты аналитикалық модельдің болжамдарын растады. Осы біркелкілікке қарамастан,

тректің тығыздығын ($r = 0$ -ден $r = R$) арақашықтықта орташалаңдыру $6,62 \times 10^4$ трек/см⁻², $8,55 \times 10^4$ трек/см⁻² және $8,94 \times 10^4$ трек / см⁻² мәндерін берді. сәйкесінше 1, 2 және 3 камералар үшін. Бұл мәндер 6-суретте жұлдызша таңбалары ретінде бейнеленген калибрлеу коэффициенттерін алу үшін пайдаланылды.

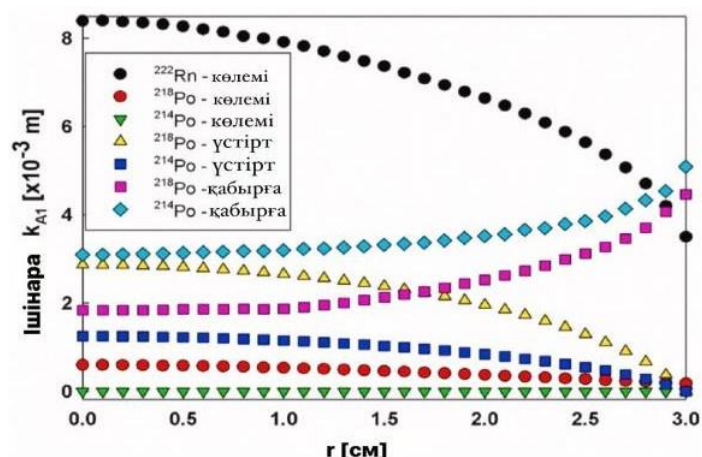
Көңілге аударарлығы, біркелкі бөлінбегеніне қарамастан, орташа мәндер Монте-Карло есептеулерімен, әсіресе радиусы кішірек 1 және 2 камералар үшін, әлі де жақсы жақындатуға болады. Бұл бақылау Монте-Карло моделінің тиімділігін көрсетеді, әсіресе V_1 немесе V_5 жауап беру функцияларын қолданған кезде, тректердің таралуының жалпы тенденциялары мен шамаларын анықтауда. Бұл детектор реакцияларын дәл сипаттау және калибрлеу коэффициенттерін алу үшін эксперименттік деректерді есептеу моделдерімен біріктірудің маңыздылығын айқындайды.

Камера өлшемдерінің өзгеруінің калибрлеу коэффициенттеріне әсерін зерттеу үшін теориялық модель қолданылды. Камераның бекітілген биіктігімен ($H = 6$ см) радиусы (R) жүйелі түрде 2 см-ден 6 см-ге дейін өзгерді. θ_{c1} функциясы эксперименттік бақылауларға оңтайлы сәйкестігі үшін таңдалды. Алынған калибрлеу коэффициентінің үлестірімдері 7-суретте көрсетілген.

Калибрлеу коэффициенттерінің таралуы камера радиусына күрделі түрде тәуелді, радиус бойындағы әртүрлі позициялар арасында 30%-ға дейін айырмашылықтар байқалады. Камераның радиусы ауадағы альфа бөлшектерінің диапазонынан асып кеткенде, камераның цилиндр қабырғасындағы шөгінді фракциялар детектордың ортасындағы тректерге әсер етпейді, бұл орталықтан қашықтық ұлғайған сайын трек тығыздығының артуына әкелуі мүмкін. Бұл күрделілік ^{222}Rn , ^{218}Po және ^{214}Po альфа бөлшектерінің көлемдік белсенділіктеріндегі әртүрлі үлестерден, сондай-ақ камераның түбіндегі, цилиндрлік қабырғадағы және сүзгідегі шөгінді әсерлерден туындайды. Осы жарналардың әрқайсысының өзіндік үлестірімі бар, оған камераның өлшемдері әсер етеді. 8-суретте θ_{c1} критикалық бұрышына назар аудара отырып, 2-камераның барлық ішінара үлестірімдері көрсетілген.



Сурет 7. Биіктігі $H=6$ см және радиусы Әр түрлі цилиндрлік диффузиялық камералар үшін калибрлеу коэффициентінің үлестірімдері $R=2$ см-ден $R=6$ см-ге дейін



Сурет 8. Радоннан және ұрпақтан алынған көлемді және тұндырылған фракциялардан ішінара калибрлеу коэффициенттері. Сүзгі қабырғасынан фракция кірмейді, өйткені камераның биіктігі альфа бөлшектерінің диапазонынан асады және бұл фракциялардан ешқандай үлес жоқ

Сурет 8 трек тығыздығының үлестірімдері мен калибрлеу коэффициенттері туралы мәліметтер келтірілген. Камераның үлкен биіктігінде сүзгінің ешқандай үлесі жоқ. Детектор орталығындағы негізгі үлес ^{222}Rn көлемдік үлесінен келеді, бұл шамамен 50% құрайды. ^{214}Po көлемдік фракциясының әсері шамалы, ал ^{218}Po үлесі шамамен 5% құрайды. ^{218}Po және ^{214}Po үшін төменгі және цилиндр қабырғасындағы фракциялар 50% -ға дейін үлес қосуы мүмкін. Бұл фракциялардың үлестері радиус бойынша әртүрлі болады, себебі тұндырылған фракциялар бүйір қабырғаларының жанында айтарлықтай үлес қосады. Экспозиция геометриясына байланысты детектор орталығынан радиалды қашықтық ұлғайған сайын плато және көлемдік үлестер азаяды; детектордың ортасындағы нүктелер барлық жағынан (2π sr сәулелену) әсер алады, ал камера қабырғаларына жақын нүктелер тек бір жағынан ғана әсер етеді.

Қорытынды

Эксперименттік әдістер детектор бетіндегі альфа бөлшектерінің іздерінің біркелкі емес таралуын растады, орталықтан қашықтық ұлғайған сайын трек тығыздығы төмендейді. Бұл эксперименттік нәтижелер аналитикалық болжамдарға жақсы сәйкес келеді. Трек тығыздығының таралу формасына камераның радиусы, биіктігі және көрінетін тректерді құрайтын альфа бөлшектерінің критикалық бұрышы әсер етеді.

"Жергілікті" калибрлеу коэффициенттері детектор бетінің әртүрлі аймақтарында айтарлықтай өзгеруі мүмкін, бұл калибрлеу коэффициентінің таралуының камера өлшемдеріне және альфа бөлшектерін шығаратын радионуклидтердің көлемдік және шөгінді фракцияларының үлесіне күрделі тәуелділігін көрсетеді. Камераның пішіні мен өлшемдері тұндырылған радон ұрпақтарының беттерге таралуын және олардың

көрінетін іздер қалдыру қабілетін анықтайды. Радонның көлемдік үлесі мен оның ұрпақтарының тығыздыққа қосқан үлесі де біркелкі емес. Шағын детекторлар үшін калибрлеу коэффициентін тұрақты деп қарастыру жиі негізделген болса да, теориялық зерттеулер камераның радиусы мен биіктігіне байланысты трек тығыздығының өзгеруін болжауға мүмкіндік береді.

Детектордың бетіндегі тректердің таралуы әр жағдайда әр түрлі болуы мүмкін және оларды оңай болжау мүмкін емес. Бұл өзгергіштік радонды өлшеу кезінде радон диффузиялық камераларын практикалық қолдануға әсер етуі мүмкін. Камера радиусының 30% - дан аз радиусы бар детекторларды пайдалану және қателерді азайту үшін калибрлеу және өлшеу кезінде тректерді санаудың біркелкілігін қамтамасыз ету ұсынылады.

Есептеулерде бес Түрлі V функциялары қолданылды, олардың үшеуі бір-бірімен және эксперименттік мәліметтермен жақсы келісімді көрсетті. Дегенмен, әртүрлі әдістермен анықталған V_3 және V_4 функциялары келіспеушіліктерді көрсетеді. Бұл сәйкессіздіктің себебін одан әрі зерттеу орынды.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Жұмыс 2023 жылғы 3 тамыздағы № 269/23-25 келісім-шарт бойынша Ғылым және жоғары білім министрлігінің AR19678341 ғылыми зерттеулерді гранттық қаржыландыру жобасының қаржылық қолдауымен жүзеге асырылды.

Авторлардың қосқан үлесі.

К.Ш. Жумадилов: мәтін жазу және жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту; **А.М. Андабаева:** мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау; **В.Ф. Степаненко:** жазу – шолу және өңдеу; **А.И. Иванников:** мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау; **А.А. Баграмова:** мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау; **С.М. Сарсенова және Ф.У.Абуова:** жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, деректердің дұрыстығына немесе мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді дұрыс зерттеу және шешу; **А.К. Амангельдина:** жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, деректердің дұрыстығына немесе мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді дұрыс зерттеу және шешу; **М.Т. Касымжанов:** жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, деректердің дұрыстығына немесе мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді дұрыс зерттеу және шешу.

Қолданылған әдебиеттер

Nikezic, D., Stevanovic, N., Radon progeny behavior in diffusion chamber//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 239, 399–406(2005).

Palacios, D., Sajo-Bohus, L., Greaves, E.D., Radon progeny distributions inside a diffusion chamber and their contributions to track density in SSNT detectors//Radiat. Meas. 40, 657–661(2005).

- Stevanovic, N., Markovic, V.M., Nikezic, D., Time dependence of ^{222}Rn , ^{220}Rn and their progeny distributions in a diffusion chamber//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 872, 93–99(2017).
- Abdalla, A.M., Hajry, A.A., Radon irradiation chamber and its applications//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 786, 78–82(2015).
- Antovic, N., Vukotic, P., Zekic, R., Svrkota, R., Ilic, R., Indoor radon concentrations in urban settlements on the Montenegrin Coas// Radiat. Meas. 42, 1573–1579(2007).
- Ismail, A.H., Jaafar, M.S., Design and construct optimum dosimeter to detect airborne radon and thoron gas: experimental study//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 269, 437–439(2011).
- Pressyanov, D., Radon progeny distribution in cylindrical diffusion chambers//Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 596, 446–450(2008).
- Sasaki, T., Gunji, Y., Okuda, T., Transient-diffusion measurement of Radon in Japanese soils from a mathematical viewpoint//J. Nucl. Sci. Technol. 43, 806–810(2006).
- Markovic, V.M., Markovic, A.G., Stevanovic, N., Nikezic, D., Rn progeny diffusion, deposition and track distribution in diffusion chamber with permeable membrane//Radiat. Meas. 124, 146–157(2019).
- Nikezic, D., Yu, K.N., Stajic, J.M., Computer program for the sensitivity calculation of a CR-39 detector in a diffusion chamber for radon measurements//Rev. Sci. Instrum. 85, 022102(2014).
- Markovic, V.M., Markovic, A.G., Stevanovic, N., Nikezic, D., Rn progeny diffusion, deposition and track distribution in diffusion chamber with permeable membrane//Radiat. Meas. 124, 146–157(2019).
- Amgarou, K., 2002. Long-Term Measurements of Indoor Radon and its Progeny in the Presence of Thoron Using Nuclear Track Detectors: A Novel Approach. PhD Thesis, available at: <https://ddd.uab.cat/record/37276?ln=en>.
- Durcik, M., Havlik, F., Experimental study of radon and thoron diffusion through barriers//J. Radiat. Nuc. Chem. 209, 307–313(1996).
- Nazaroff, W.W., Nero, A.V., 1988. Radon and its Decay Products in Indoor Air. John Wiley & Sons.
- George, A.C., Knutson, E.O., Particle size of unattached radon progeny in filtered room air//Radiat. Protect. Dosim. 56, 119–121(1994).
- Knutson, E.O., George, A.C., Tu, K.W., The graded screen technique for measuring the diffusion coefficient of radon decay products//Aerosol Sci. Technol. 27, 604–624(1997).
- Leonard, B.E., High ^{222}Rn levels, enhanced surface deposition, increased diffusion coefficient, humidity, and air exchange effects//Health Phys. 70, 372–387(1996).
- Malet, J., Michielsen, N., Boulaud, D., Renoux, A., Mass transfer of diffusive species with non constant in-flight formation and removal in laminar tube flow: application to unattached short-lived radon daughters//Aerosol Sci. Technol. 32, 168–183(2000).
- Phillips, C.R., Khan, A., Leung, H.M.Y., 1988. The nature and determination of the unattached fraction of radon and thoron progeny. In: Nazaroff, W.W., Nero, A.V. (Eds.), Radon and its Decay Products in Indoor Air. John Wiley & Sons, pp. 203–256.
- Tokonami, S., Determination of the diffusion coefficient of unattached radon progeny with a graded screen array at the EML environmental chamber//Radiat. Protect. Dosim. 81, 285–290(1999).
- Tymen, G., Kerouanton, D., Huet, C., Boulaud, D., An annular diffusion channel equipped with a track detector film for long-term measurements of activity concentration and size distribution of nanometer ^{218}Po particles//J. Aerosol Sci. 30, 205–216(1999).
- Nikezic, D., Yu, K.N., Computer program TRACK_VISION for simulating optical appearance of etched tracks in CR-39 nuclear track detectors//Comput. Phys. Commun. 178, 591–595(2008).

Brun, C., Fromm, M., Jouffroy, M., Meyer, P., Groetz, J.E., Abel, F., Chambaudet, A., Dorschel, B., Hermsdorf, D., Bretschneider, R., Kadner, K., Kuhne, H., Intercomparative study of the detection characteristics of the CR-39 SSNTD for light ions: present status of the Besancon-Dresden approaches//Radiat. Meas. 31, 89–98(1999).

Durrani, S.A., Bull, R.K., 1987. Solid State Nuclear Track Detection. Principles Methods and Applications. Pergamon Press.

Hermsdorf, D., Evaluation of the sensitivity function V for registration of α -particles in PADC CR-39 solid state nuclear track detector material//Radiat. Meas. 44, 283–288(2009).

Yu, K.N., Ho, J.P.Y., Nikezic, D., Yip, C.W.Y., 2005a. Determination of the V function for CR-39 by atomic force microscope. In: Recent Advances in Multidisciplinary Applied Physics. Elsevier, Amsterdam, pp. 29–34.

Yu, K.N., Ng, F.M.F., Nikezic, D., Measuring depths of sub-micron tracks in a CR- 39 detector from replicas using atomic force microscopy//Radiat. Meas. 40, 380–383(2005).

Stajic, J.M., Milenkovic, B., Nikezic, D., Study of CR-39 and Makrofol efficiency for radon measurement//Radiat. Meas. 117, 19–23(2018).

Stajic, J.M., Milenkovic, B., Nikezic, D., Radon concentrations in schools and kindergartens in Kragujevac city, Central Serbia//Clean 43, 1361–1365(2015).

Koo, V.S.Y., Yip, C.W.Y., Ho, J.P.Y., Nikezic, D., Yu, K.N.,. Deposition fractions of ^{218}Po in diffusion chambers//Appl. Radiat. Isot. 59, 49–52(2003).

McLaughlin, J.P., Fitzgerald, B., Models for determining the response of passive alpha particle detectors to radon and its progeny in cylindrical detecting volumes//Radiat. Protect. Dosim. 56, 241–246(1994).

**К.Ш.Жумадилов^{1*}, А.М.Андабаева¹, В.Ф.Степаненко², А.И.Иванников², А.А.Баграмова¹,
С.М.Сарсенова¹, Ф.У.Абуова¹, А.К.Амангельдина¹, М.Т.Касымжанов^{1,3}**

¹Международная кафедра ядерной физики, новых материалов и технологий,
Евразийский Национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, Астана

²МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии», Обнинск, Россия

³АО «Парк ядерных технологий», Курчатов, Казахстан

(*e-mail: zhumadilovk@gmail.com)

Распределение следов альфа-частиц в детекторе CR-39 в диффузионной камере радона

Абстракт. Целью этого исследования было изучение пространственного распределения следов альфа-частиц, образующихся радоном и его потомками в диффузионных камерах радона. Использовались три цилиндрические камеры, оснащенные детекторами CR-39, концентрация радона оценивалась с помощью устройства RAD7. Регистрация выявила неравномерное распределение следов альфа-частиц на поверхности детектора, плотность следов возле стенок камеры была на 30% ниже, чем в центре. Эти результаты контрастировали с аналитическими прогнозами, основанными на одних и тех же размерах камер. Критический угол обнаружения относительно энергии падения частиц был определен с помощью программного обеспечения Track_vision, которое продемонстрировало значительное влияние размера камеры и

критического угла на распределение плотности пути. Кроме того, в исследовании изучались источники изменения плотности следов путем анализа частичных долей объемных и осадочных фракций радона и его потомков. Наблюдалось увеличение доли боковой стенки, а объемный и платформенный вклад уменьшался с увеличением радиального расстояния от центра детектора. Изменение размеров камеры повлияло на относительный эффект этих частичных вкладов, что привело к различному распределению видимых следов на поверхности детектора. Экспериментальные результаты сравнивались со значениями, полученными с помощью ранее разработанного программного обеспечения, основанного на методе Монте-Карло. Было использовано пять различных выражений функции отклика детектора, два из которых существенно недооценили результаты эксперимента. Это всестороннее исследование проливает свет на сложную динамику путей распространения альфа-частиц в радоновых диффузионных камерах и подчеркивает важность точного моделирования для надежной оценки концентрации радона.

Ключевые слова: CR-39, радон, калибровочный коэффициент, плотность трека, критический угол

**K.S.Zhumadilov¹, A.M. Andabayeva¹, V.F.Stepanenko², A.I. Ivannikov², A.A.Bagramova¹,
S.M.Sarsenova¹, F.U.Abuova¹, A.K.Amangeldina¹, M.T.Kassymzhanov^{1,3}**

¹*International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technology,*

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana

²*A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center, Obninsk, Russia*

³*JST «Park of Nuclear Technology», Kurchatov, Kazakhstan*

(*E-mail: zhumadilovk@gmail.com)

Distribution of alpha particle tracks on CR-39 detector in radon diffusion chamber

Abstract. The purpose of this study was to study the spatial distribution of traces of alpha particles formed by radon and its descendants in the diffusion chambers of radon. Three cylindrical chambers equipped with CR-39 detectors were used, the radon concentration was estimated using the RAD7 device. Registration revealed an uneven distribution of traces of alpha particles on the surface of the detector, the density of traces near the camera walls was 30% lower than in the center. These results were the opposite of analytical predictions based on the same camera dimensions. The critical angle of detection relative to the particle incidence energy was determined using the Track_vision software, which showed a significant effect of camera size and critical angle on the distribution of track density. In addition, the study examined the sources of changes in track density by analyzing partial contributions of volumetric and sedimentary fractions of radon and its descendants. There was an increase in the sidewall share, and with an increase in the radial distance from the detector Center, the volume and platform share decreased. Changing the dimensions of the camera affected the relative effects of these partial contributions, resulting in different distributions of visible traces on the detector's surface. The experimental results were compared with the values obtained using previously developed software based on the Monte Carlo method. Five different expressions of the detector response function were

used, two of which greatly underestimated the results of the experiment. This comprehensive study sheds light on the complex dynamics of alpha particle propagation paths in radon diffusion chambers and highlights the importance of accurate modeling for reliable estimation of radon concentrations.

Keywords: CR-39, Radon, Calibration coefficient, Track density, Critical angle

Автор туралы мәліметтер:

Жумадилов К.Ш. – корреспондент автор, PhD докторы, профессор, Еуразия ұлттық университеті «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының меңгерушісі, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан

Андабаева А.М. – 2 курс магистранті, Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан.

Степаненко В.Ф. – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Денсаулық сақтау министрлігінің "нмиц радиология" ФМБУ филиалы А. Ф. Цыба атындағы мрнц медициналық-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының меңгерушісі

Иванников А.И. – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Денсаулық сақтау министрлігінің "нмиц радиология" ФМБУ филиалы А. Ф. Цыба атындағы мрнц медициналық-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының жетекші зерттеушісі

Баграмова А.А. – PhD докторанты, Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан

Сарсенова С.М. – PhD докторанты, Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – PhD докторы, профессор, Еуразия ұлттық университеті «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының доценті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан

Амангельдина А.К. – 2 курс магистранті, Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан.

Касымжанов М.Т. – PhD докторанты, Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан 13, Астана, Қазақстан

Сведения об авторах:

Жумадилов К.Ш. – автор для корреспонденции, PhD, профессор, заведующий "Международной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий", Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Андабаева А.М. – магистрант 2 курса, Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Степаненко В.Ф. – доктор биологических наук, профессор, заведующий лаборатории медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России.

Иванников А.И. – доктор биологических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России.

Баграмова А.А. – PhD докторант, Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Сарсенова С.М. – PhD докторант, Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Абуова Ф.У. – PhD, ассоциированный профессор, доцент "Международной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий", Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Амангельдина А.К. – магистрант 2 курса, Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Касымжанов М.Т. – PhD докторант, Евразийский национальный университет, Кажымукан 13, г. Астана, Казахстан

Information about authors:

Zhumadilov K.Sh. – corresponding author, PhD, Professor, Head of the "International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies", Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Andabayeva A.M. – master course student, Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Stepanenko V.F. – Doctor of Biological Sciences, Professor, Head of the Laboratory of Medical-Ecological Dosimetry and Radiation Safety of the MRRC named after A.F. Tsyba - a branch of the Federal State Budgetary Institution "National Medical Research Center of Radiology" of the Russian Ministry of Health.

Ivannikov A.I. – Doctor of Biological Sciences, Professor, Leading researcher of the Laboratory of Medical-Ecological Dosimetry and Radiation Safety of the MRRC named after A.F. Tsyba - a branch of the Federal State Budgetary Institution "National Medical Research Center of Radiology" of the Russian Ministry of Health.

Bagramova A.A. – PhD student, Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Sarsenova S.M. – PhD student, Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Abuova F.U. – PhD, Associate professor, docent "International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies", Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Amangeldina A.K. – master course student, Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan

Kassymzhanov M.T. – PhD student, Eurasian National University, Kazhymukan 13, Astana, Kazakhstan



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ӘӨЖ 29.01.29.
Ғылыми мақала

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-148-3-72-85>

Изучение кинетики структурной деградации приповерхностного слоя ZrO_2 керамик, подверженных низкоэнергетическому облучению ионами He^{2+}

Козловский А.Л. 

Институт ядерной физики МЭ РК, Алматы, Казахстан

(E-mail: kozlovskiy.a@inp.kz)

Аннотация. В работе рассмотрены эффекты накопления радиационных повреждений в приповерхностном слое ZrO_2 керамик, возникающих при высокодозном облучении низкоэнергетическими ионами He_{2+} , а также определение влияния температуры облучения на толщину поврежденного слоя в керамиках, изменение которой обусловлено эффектами диффузии ионов вглубь материала. Для определения эффектов радиационных повреждений, а также определения кинетики изменений в зависимости от вариации внешних факторов был использован метод рамановской пьезоспектроскопии боковых сколов керамик, что позволило получить данные изменений величин остаточных напряжений и FWHM вдоль траектории движения ионов в материале, а также на глубине, превышающей глубину проникновения ионов в материал. Согласно проведенным исследованиям, было установлено, что основной тип деформационных искажений, возникающих в результате облучения и, как следствие, накопления структурных изменений, вызванных облучением, связан с формированием в структуре остаточных механических напряжений растягивающего типа. При этом изменение условий облучения, в частности, увеличения температуры облучения приводит к возрастанию величин остаточных механических напряжений в структуре поврежденного слоя, а также наблюдается увеличение толщины поврежденного слоя, изменение которой обусловлено эффектами диффузии ионов вглубь материала мишени. Анализ изменений величины FWHM свидетельствует о том, что при малых флюенсах облучения (ниже 10^{17} ион/см²), основные изменения структурных особенностей поврежденного слоя обусловлены эффектами накопления структурных искажений в результате деформационных напряжений, в то время как при высокодозном облучении вклад в деструктивное разупорядочение поврежденного слоя оказывает формирование аморфноподобных включений, наличие которых связано с агломерацией гелия, а также формирования газонаполненных включений в поврежденном слое.

Ключевые слова: радиационно-стойкие керамики, структурные искажения, остаточные напряжения, деформация, разупорядочение, газонаполненные пузырьки, свеллинг.

Введение

Проблема свеллинга или образования газонаполненных включений в поврежденном слое при высокодозном облучении или в течение длительного времени эксплуатации керамик или конструкционных материалов в условиях повышенного радиационного фона или при их постоянном контактировании с теплоносителем является одной из наиболее важных проблем в определении потенциала и сроков эксплуатации материалов [1-3]. При этом в случае газового распухания, в особенности, связанного с накоплением гелия или водорода в структуре поврежденного слоя, следует учитывать природу данных газов, в частности, их высокую подвижность и возможность к образованию комплексных дефектов, представляющих собой $He+VO$, наличие которых может привести к их агломерации в пустотах, а в случае большой концентрации и увеличению объема данных заполненных пустот, что приводит к возникновению дополнительных структурных напряжений за счет изменений объемов газонаполненных полостей ввиду увеличения внутреннего давления в них [4, 5]. Также при высоких концентрациях гелия или водорода в приповерхностных слоях может произойти эффект детонационного вскрытия данных газонаполненных полостей, что, в свою очередь, приведет к частичному охрупчиванию и деструкции приповерхностного слоя, что весьма нежелательно и недопустимо при эксплуатации данных материалов в качестве конструкционных материалов в ядерной энергетике [6, 7]. В металлах данные эффекты достаточно хорошо изучены, а также определены основные факторы, оказывающие влияние на деградацию поврежденного слоя за счет агломерации и детонационного вскрытия данных полостей, приводящих к частичному отслаиванию поврежденного слоя и снижению прочностных параметров. В керамиках в силу определенных характеристик, отличающихся от металлов и сплавов, процессы газового распухания представляют достаточно большой интерес к изучению ввиду возможностей получения не только новых фундаментальных знаний о процессах накопления радиационных повреждений в высокопрочных материалах, но и определению потенциала использования данных материалов в качестве конструкционных материалов, способных эксплуатироваться в условиях повышенных радиационных фонов, а также высоких температур, без использования которых невозможно увеличение КПД выгорания ядерного топлива в реакторах нового поколения. Также следует отметить, что для керамических материалов, в особенности, диэлектрических керамик, возникающие эффекты ионизации при взаимодействии налетающих заряженных частиц с кристаллической структурой поврежденного слоя и приводящие в результате данных взаимодействий к изменению в распределении электронной плотности, в силу диэлектрической природы, имеют необратимый характер, что приводит к возникновению областей с измененной электронной плотностью [8-10]. Наличие подобных областей в структуре керамик может привести к инициализации процессов полиморфных трансформаций, которые достаточно хорошо изучены для ZrO_2 керамик при облучении их тяжелыми ионами, а также известны случаи взаимосвязи между изменением фазового состава керамик и процессами трекобразования в диэлектрических керамиках [11-15]. При этом для низкоэнергетического облучения

процессы ионизации равновероятны по вкладу с процессами атомных смещений, возникающих в результате соударений налетающих частиц с ядрами, что при больших дозах облучения может привести к формированию как структурных искажений, так и областей разупорядочения (аморфных включений), наличие которых в структуре приводит к ускоренной деградации приповерхностного слоя.

На основании вышесказанного, ключевой целью данной работы является изучение эффектов радиационно-индуцированного охрупчивания приповерхностного слоя ZrO_2 керамик, обусловленного совокупностью эффектов, связанных с диффузией имплантированных ионов, а также температурным расширением, обусловленным влиянием температуры нагрева образцов при облучении. В качестве основного метода оценки использовался метод измерения величины остаточных механических напряжений в приповерхностном слое керамик с применением рамановской пьезоспектроскопии, выполненной путем съемки спектров с бокового скола образцов вдоль траектории движения ионов в материале. Актуальность данного исследования заключается в расширении общих представлений механизмов накопления радиационных повреждений в тугоплавких керамиках, а также диффузионного расширения поврежденного слоя, изменение которого необходимо учитывать при определении потенциала использования данного типа керамик в качестве конструкционных материалов для ядерной энергетики.

Материалы и методы

В качестве объектов для проведения исследований были выбраны поликристаллические керамики на основе ZrO_2 с моноклинным типом кристаллической структуры, обладающие высокой степенью структурного упорядочения (более 95 %), а также хорошими показателями прочностных и теплофизических параметров. Выбор данного типа керамик в качестве объекта для исследований обусловлен совокупностью их физико-химических, прочностных и теплофизических параметров, а также хорошей совместимостью с другими типами материалов и химической инертностью, что делает возможным использование данного типа керамик в качестве основы для создания конструкционных материалов, использующихся в экстремальных условиях, в том числе при повышенном радиационном фоне и высоких температурах. При этом следует отметить, что ZrO_2 керамики, в отличие от других типов керамик, обладают низким показателем коэффициента объемного термического расширения, что делает их кандидатными материалами при использовании в режимах постоянного воздействия высоких температур.

В качестве ионов для облучения были выбраны ионы He^{2+} с энергией 40 кэВ, выбор которых основан на возможности моделирования процессов деградации приповерхностного слоя, связанных с эффектом газового распухания, а также накопления продуктов ядерных реакций, характерных для режимов эксплуатации высокотемпературных реакторов. При этом в силу слабой растворимости и достаточно хорошей подвижности ионы гелия могут имплантироваться в структуру приповерхностного слоя, приводя к их агломерации в пустотах и полостях, а также

создавая дополнительные деформационные искажения кристаллической структуры за счет накопительного эффекта и объемного распухания поврежденного слоя. В свою очередь, облучение при высоких температурах, как правило, сопровождается объемным термическим расширением кристаллической структуры, способной также оказать негативное влияние на изменение свойств поврежденного слоя. При этом высокая подвижность ионов при высоких температурах может способствовать их диффузии вглубь образца, что приводит к увеличению толщины поврежденного слоя. Облучение образцов проводилось на ускорителе тяжелых ионов ДЦ-60, расположенного на базе Института ядерной физики МЭ РК (Астанинский филиал, Астана, Казахстан). Образцы были облучены флюенсами в диапазоне от 10^{15} до 5×10^{17} ион/см² при различных температурах, диапазон которых варьировался от 300 К до 1000 К. Температура облучения контролировалась путем размещения образцов на специальном керамическом нагревателе, использование которого позволяет достигнуть заданной температуры и поддерживать ее в течение всего облучения. Контроль за температурой облучения проводился с использованием термопар, размещенных на нагревателе и образце. Выбор флюенсов облучения обусловлен возможностями моделирования процессов глубокого перекрытия структурах дефектов в поврежденном слое, а также возникновению эффекта агломерации, что позволяет оценить кинетику деградации приповерхностного слоя [16, 17]. Выбор режимов температур облучения был основан на возможностях моделирования процессов деструкции приповерхностного слоя в условиях, максимально приближенных к реальным.

Определение остаточных механических напряжений в структуре поврежденного слоя проводилось путем съемки рамановских спектров вдоль траектории движения ионов керамики на глубине порядка 1 мкм, что позволило оценить структурные изменения как в поврежденном слое, так и на глубине, превышающей глубину пробега ионов He^{2+} в керамиках, величина которой составляет порядка 400-450 нм. Измерения проводились с шагом 100 нм от начала поверхности, что позволило установить толщину поврежденного слоя, а также определить ее увеличение в зависимости от совокупности различных факторов, в том числе изменений флюенса облучения и температуры облучения. Для вычисления величины остаточных механических напряжений использовалась формула (1) [14]:

$$\Delta\omega = P_u \times \sigma \quad (1)$$

где $\Delta\omega = \omega_{irr} - \omega_0$ – смещение моды рамановского спектра облученных образцов относительно исходного (необлученного); P_u – пьезоспектроскопический коэффициент, значение которого было рассчитано на основе зависимостей $\Delta\omega/d\mu$, σ_u – величина остаточных напряжений. Определение величины остаточных механических напряжений проводилось для моды при 259 см^{-1} , характеризующей изменение химических связей Zr – OII в структуре керамик и имеющей наибольшую интенсивность линии (см. данные, представленные на рисунке 1).

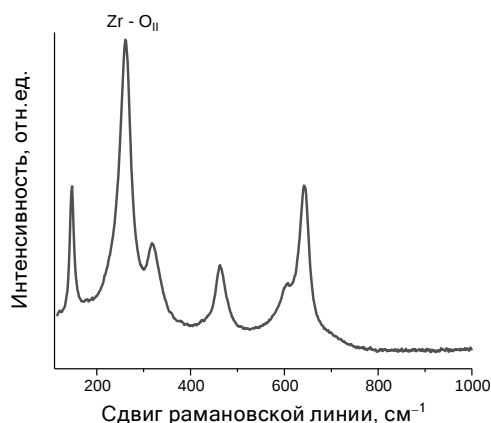


Рисунок 1. Рамановский спектр ZrO₂ керамики с моноклинным типом кристаллической решетки в исходном (необлученном) состоянии

Оценка наличия аморфных включений в поврежденном слое, а также изменений глубины аморфизации, обусловленной структурным разупорядочением, была проведена путем сравнительного анализа изменений величины FWHM спектральной линии при 259 см⁻¹. Гипотеза, лежащая в основе определения аморфных включений в поврежденном слое, заключается в том, что изменение величины FWHM, свидетельствующая об изменении формы спектральной линии, в случае ее увеличения характеризует потерю структурного порядка, связанного как с разупорядочением, так и разрывом химических и кристаллических связей. Следует также отметить, в случае изменений формы спектральных линий без изменений величины FWHM обусловлены накоплением структурных деформаций без инициализации формирования аморфных включений в поврежденном слое. В данном случае сравнительный анализ изменения формы, интенсивности, а также смещения спектральных линий рамановских спектров позволяет с высокой точностью определить вклад различных типов структурных изменений в деградацию поврежденного слоя керамики.

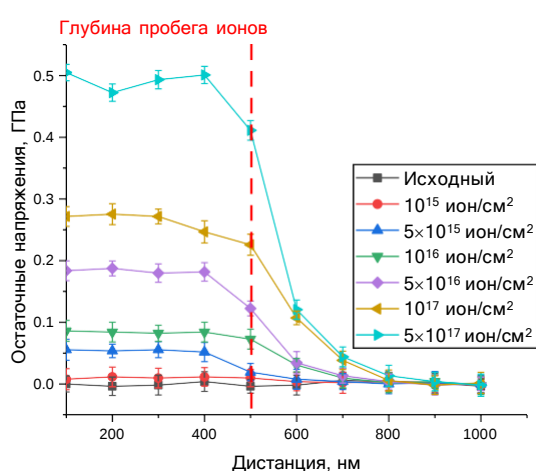
Результаты и обсуждение

Изучение кинетики радиационных повреждений, в особенности, в малых приповерхностных слоях является одной из ключевых проблем в современном материаловедении, связанном с оценкой перспектив использования новых типов керамики в качестве материалов, подвергающихся воздействию высокодозного облучения. При этом в отличие от тяжелых высокоэнергетических ионов, а также нейтронов, обладающих достаточно большой глубиной пробега, воздействие низкоэнергетических ионов происходит на глубинах приповерхностного слоя порядка 300-500 нм, что не всегда поддается оценке традиционными методами исследования, включая рентгеновскую дифракцию или визуальные методы оценки. В данном случае основные структурные изменения, происходящие с материалами, достаточно плохо регистрируются стандартными методами, что приводит к необходимости поиска новых способов их регистрации и идентификации. Также следует отметить, что эффектов

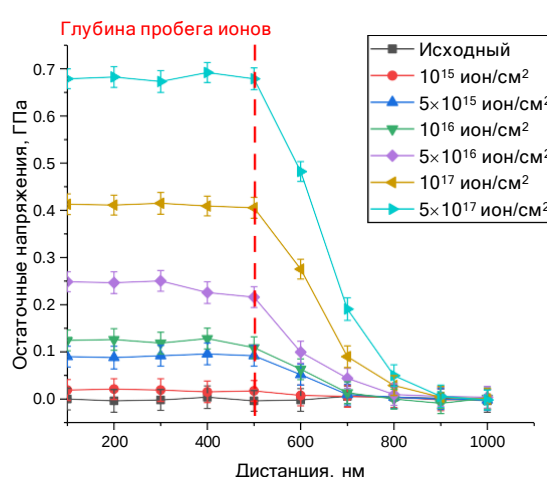
полиморфных трансформаций при низкоэнергетическом облучении ионами He^{2+} в структуре поврежденного слоя не наблюдалось, что может быть объяснено тем, что для инициализации данных процессов, величины ионизационных потерь налетающих ионов должны быть более 20 кэВ/нм [11-13], что значительно выше величин ионизационных потерь низкоэнергетических ионов He^{2+} .

В свою очередь, изучение деградации приповерхностного слоя керамик может помочь в прогнозировании потенциальных условий использования данных материалов в ядерно-энергетических установках, а также определить кинетику изменений приповерхностного слоя, который наиболее часто контактирует с другими поверхностями, а также теплоносителем, что позволит установить критические режимы эксплуатации, исключаящие эффекты деструкции приповерхностного слоя за счет процессов распухания и охрупчивания. Наиболее перспективным методом для оценки кинетики структурных изменений на малых слоях является метод рамановской пьезоспектроскопии, использование которого позволяет определить тип структурных изменений, которые могут быть обусловлены накоплением структурных искажений в результате накопления деформационных напряжений или частичной аморфизацией, связанной с сильным разупорядочением кристаллической структуры, обусловленной различными факторами, в том числе и образованием газонаполненных включений.

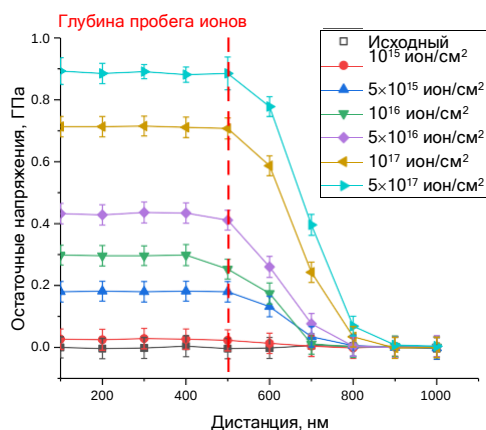
На рисунке 2 приведены результаты оценки величины остаточных механических напряжений, полученные с применением метода рамановской пьезоспектроскопии, отражающие деформационное искажение структуры, а также его кинетику изменений в случае увеличения флюенса облучения и температуры. Данные представлены в виде зависимостей величины σ_r , рассчитанной с использованием формулы (1) на различной глубине образца (измерения проводились вдоль бокового скола с поверхности), отражающие накопление структурных искажений растягивающего типа.



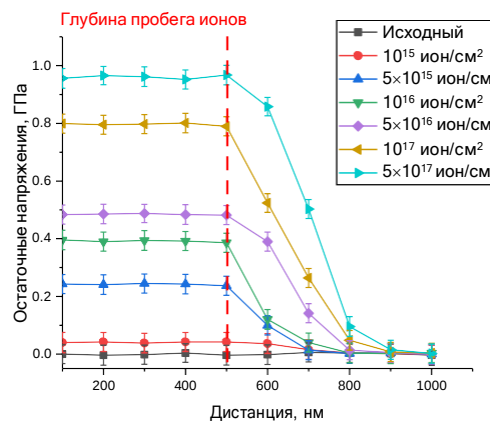
а)



б)



в)



г)

Рисунок 2. Динамика изменений величин остаточных механических напряжений вдоль траектории движения ионов He^{2+} в поврежденном слое на различной глубине, отражающей диффузионные процессы, связанные с проникновением ионов He^{2+} вглубь материала за счет совокупности различных факторов: а) данные при температуре 300 К; б) данные при температуре 500 К; в) данные при температуре 700 К; г) данные при температуре 1000 К (пунктирной красной линией на графиках отражена граница максимальной глубины пробега ионов He^{2+} в керамиках).

Анализ наблюдаемых изменений величины остаточных механических напряжений в зависимости от вариации условий облучения (в случае увеличения флюенса облучения и температуры) показал тренды на увеличение остаточных механических напряжений в структуре поврежденного слоя, а сам характер изменений данной величины свидетельствует о растягивающем характере данных напряжений, формирование которых обусловлено структурными искажениями, вызванными облучением. Наблюдаемые структурные изменения в данном случае обусловлены совокупностью ионизационных и атермических процессов, возникающих в результате взаимодействия налетающих ионов с кристаллической структурой керамик, а также трансформацией переданной кинетической энергии ионов в тепловую, что приводит к образованию структурно-деформированных включений, искажение которых приводит к деструкции поврежденного слоя. При рассмотрении представленных зависимостей изменения величины σ_u в случае увеличения флюенса облучения можно сделать вывод о том, что при малых флюенсах облучения (10^{15} - 10^{16} ион/см²) изменения величины σ_u минимальны, что свидетельствует о том, что при данных флюенсах облучения происходит накопление структурных повреждений, а сами керамики проявляют достаточно высокую сопротивляемость к деструкции, вызванной взаимодействием налетающих ионов с поврежденным слоем. При флюенсах облучения выше 5×10^{16} ион/см² наблюдается увеличение изменений величины σ_u , свидетельствующее о более выраженных структурных деформациях в поврежденном слое, связанных с эффектами

формирования кластерных дефектов типа He-VO, наличие которых фиксируется изменениями спектральных линий (искажением их формы, а также увеличением фонового излучения, свидетельствующего о формировании кластерных дефектов и областей разупорядочения). Согласно полученным данным, формирование кластерных дефектов наблюдается при больших флюенсах облучения, при которых концентрация имплантированных ионов достаточно высока, а также накопленные структурные искажения приводят к формированию достаточного количества кислородных вакансий в структуре поврежденного слоя, что создает все условия для образования кластеров. В данном случае формирование кластерных дефектов приводит к росту механических напряжений в структуре, что приводит к более выраженной деформации кристаллической решетки, а также возможному разрыву кристаллических и химических связей.

Изменение температуры облучения, как видно из представленных данных, приводит к увеличению величины остаточных напряжений не только в сравнении значений при одном и том же флюенсе облучения (см. данные на рисунке 3а), но и увеличению толщины поврежденного слоя, в котором величина значений остаточных механических напряжений выше исходных значений (см. данные на рисунке 3б). Общий вид полученных зависимостей изменения величины σ_u от флюенса облучения при вариации температуры облучения свидетельствует о негативном воздействии температурного нагрева образцов в процессе облучения на разупорядочение приповерхностного слоя, а также его увеличения, обусловленного термическими эффектами, связанными со структурным разупорядочением, за счет термического расширения и увеличения скорости подвижности точечных и вакансионных дефектов в структуре поврежденного слоя за счет тепловых воздействий. Согласно представленным данным, было установлено, что увеличение температуры облучения приводит к явно выраженному проявлению увеличения толщины поврежденного слоя, которое проявляется при флюенсах облучения 10^{16} - 10^{17} ион/см² и имеет несколько сдерживающий тренд при высокодозном облучении 5×10^{17} ион/см², изменение которого может быть объяснено факторами частичной аморфизации за счет образования кластерных дефектов типа He – VO в структуре поврежденного слоя при формировании большого количества кислородных вакансий, обусловленного термическим воздействием, а также накоплением деформационных искажений кристаллической структуры, приводящих к образованию свободных VO. В данном случае увеличение температуры облучения приводит к увеличению амплитуды колебаний кристаллической решетки, что увеличивает подвижность структурных дефектов, а также их диффузии вглубь образца и на поверхность, что приводит к увеличению толщины поврежденного слоя, изменение которого наглядно продемонстрированы на рисунке 3б. Следует отметить, что в случае облучения флюенсом 5×10^{17} ион/см² рост величины остаточных механических напряжений в структурах поврежденного слоя составляет более чем 1.5-2 кратное изменение в сравнении со значениями, полученными для температуры облучения 300 К. При этом толщина поврежденного слоя, на которой фиксируются значимые изменения величины σ_u при данном флюенсе, увеличивается с 680-700 нм до 800-850 нм с увеличением температуры, из чего можно сделать вывод о влиянии температурного воздействия на скорость диффузии дефектов вглубь образцов. Также следует отметить, что изменение величины толщины поврежденного слоя при

изменении флюенса облучения свидетельствует о накопительном эффекте структурных искажений, которые проявляются не только в разупорядочении поврежденного слоя, но и увеличении его толщины за счет диффузионных процессов.

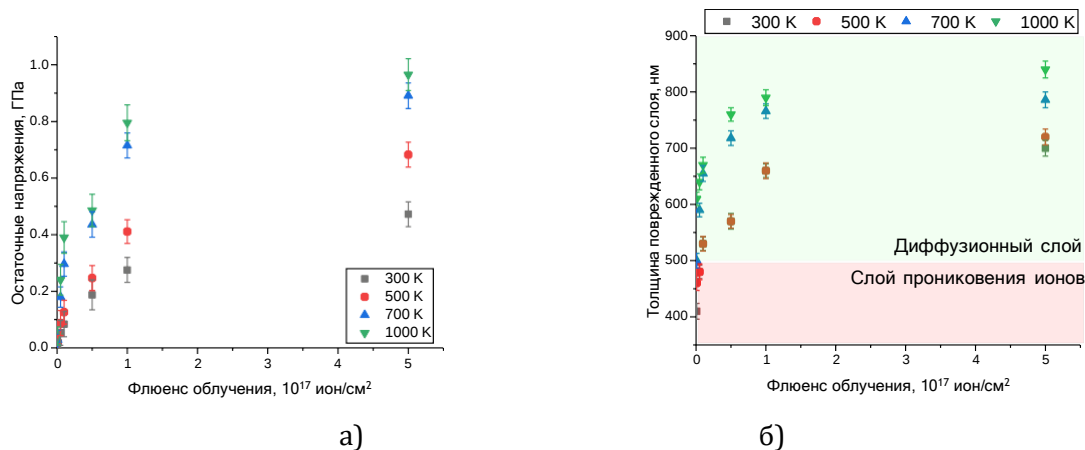
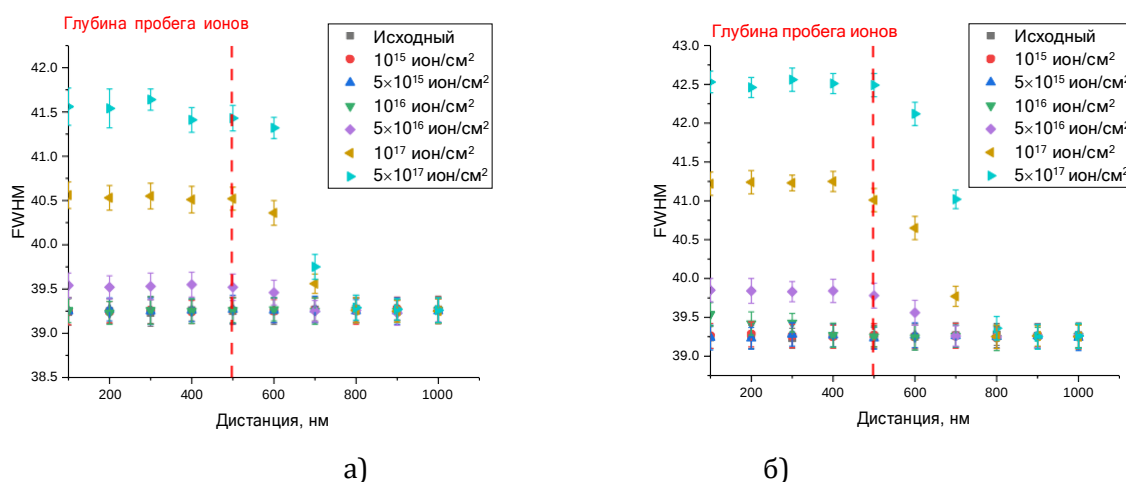


Рисунок 3. а) Результаты сравнительного анализа изменения величины остаточных механических напряжений в поврежденном слое в зависимости от флюенса и температуры облучения; б) Результаты оценки толщины поврежденного слоя в керамиках в зависимости от условий облучения (красной областью выделена область, характерная для максимальной глубины пробега ионов в керамиках, зеленая область отражает диффузионный слой в керамиках с зарегистрированными изменениями структурных повреждений)

На рисунке 4а-г приведены результаты изменения величины FWHM в зависимости от глубины образца при вариации флюенса облучения, а также температуры, при которой происходит облучение. Общий тренд изменений данной величины свидетельствует о формировании структурно-разупорядоченных областей, не имеющих ближнего порядка кристаллической решетки, наличие которых свидетельствует об инициализации процессов частичной аморфизации поврежденного слоя.



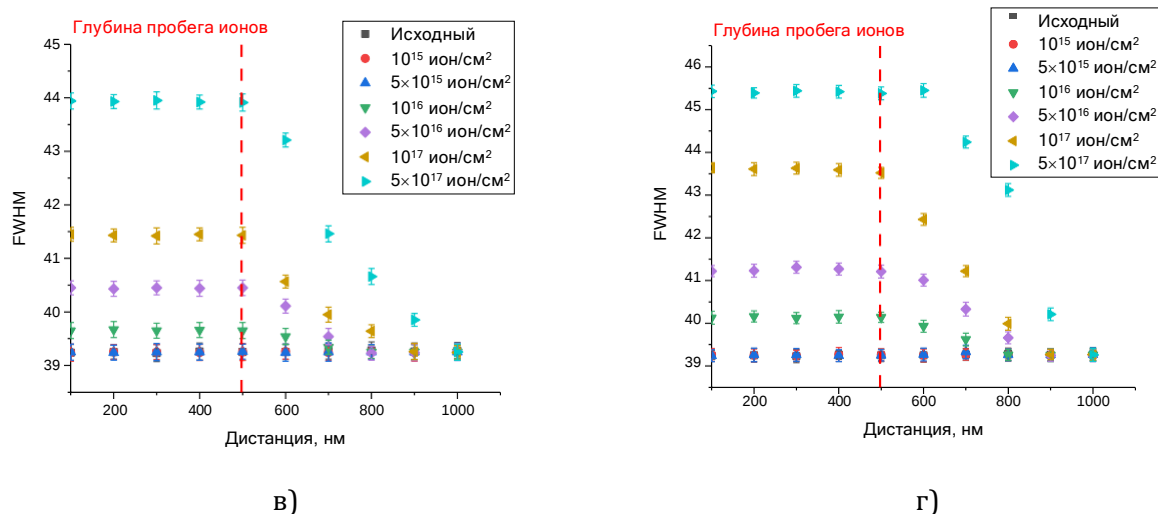


Рисунок 4. Результаты оценки изменения величины FWHM, отражающие эффект аморфизации приповерхностного слоя керамик при накоплении структурных искажений и деформаций: а) данные при температуре 300 К; б) данные при температуре 500 К; в) данные при температуре 700 К; г) данные при температуре 1000 К (пунктирной красной линией на графиках отражена граница максимальной глубины пробега ионов He^{2+} в керамиках)

Согласно представленным данным, наиболее значимые изменения величины FWHM происходят при флюенсах выше 5×10^{16} ион/см², при которых наблюдается увеличение FWHM, свидетельствующее о формировании областей разупорядочения, накопление которых приводит к частичной аморфизации поврежденного слоя [14]. При этом следует отметить, что увеличение температуры облучения приводит к росту величины FWHM, а также увеличению толщины поврежденного слоя, что свидетельствует о том, что процессы аморфизации имеют явно выраженную зависимость от температурных факторов, изменение которых приводит к более интенсивным процессам агломерации образования кластерных дефектов, оказывающих негативное воздействие на степень структурного упорядочения.

Таким образом, анализируя наблюдаемые изменения величины FWHM, можно сделать вывод о том, что процессы структурного разупорядочения имеют явно выраженную зависимость как от флюенса облучения, так и от температуры облучения. В случае малых флюенсов облучения основные изменения кристаллической структуры поврежденного слоя обусловлены эффектами накопления деформационных искажений за счет возникновения остаточных механических напряжений в результате взаимодействия налетающих ионов с кристаллической решеткой. При этом в случае высокодозного облучения происходит процесс формирования кластерных дефектов типа $He - VO$, увеличение концентрации которых приводит к частичной аморфизации кристаллической структуры. При этом увеличение температуры облучения в данном случае приводит к ускорению процессов аморфизации, а также увеличению толщины поврежденного слоя.

Заключение

Анализируя полученные зависимости изменений величин остаточных механических напряжений и FWHM, полученных на основе измеренных рамановских спектров, можно сделать вывод о достаточно хорошей перспективности использования данного метода для определения повреждений в малых приповерхностных слоях, вызванных ионным облучением. При этом характер наблюдаемых изменений позволил установить не только тип структурных искажений, но и кинетику изменений, связанных с накоплением структурных повреждений, их агломерацией и образованием кластерных дефектов в структуре, накопление которых приводит к частичной аморфизации поврежденного слоя.

В ходе проведенных измерений величин остаточных напряжений в поврежденном слое в зависимости от вариации условий облучения было установлено, что увеличение температуры облучения при одних и тех же значениях флюенса приводит к росту величины остаточных механических напряжений, изменение которых в данном случае обусловлено термическими эффектами, связанными с термическим расширением кристаллической структуры керамик. Оценивая наблюдаемые изменения толщины поврежденного слоя керамик при изменении условий облучения, можно сделать вывод о том, что в случае высокотемпературного облучения необходимо учитывать диффузионные эффекты, связанные с миграцией имплантированных ионов и связанных с ними кластеров на глубину гораздо большую, чем глубина пробега ионов в керамиках. Данные эффекты, имеющие явно выраженную зависимость от температуры, обусловлены эффектами термического расширения кристаллической структуры, которые возникают при высоких температурах облучения, а в случае высокодозного облучения приводят к ускорению процессов диффузии дефектов вглубь образца, тем самым увеличивая толщину деформированного приповерхностного слоя.

Полученные зависимости изменения структурных особенностей поврежденного слоя при вариации условий облучения (температуры облучения) и флюенса облучения в дальнейшем могут быть использованы при определении потенциала условий эксплуатации данных керамик в условиях повышенного радиационного фона. Основываясь на полученных результатах, можно сделать вывод о том, что данный тип керамик может рассматриваться в качестве материалов инертных матриц дисперсного ядерного топлива, ввиду высокой радиационной стойкости и низкого теплового расширения, что позволяет использовать их в экстремальных условиях.

Работа выполнена в рамках программно-целевого финансирования BR20280986 «Комплексные фундаментальные исследования по ядерной и радиационной физике, физике высоких энергий и космических лучей для атомной энергии» при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан.

Список литературы

1. Ye, F. J., Zhu, T., Song, Y. M., Wang, Q. Q., Zhang, P., Kuang, P., Cao, X. Z. Helium irradiation-induced swelling resistance of heterogeneous nanoparticles in an iron-based multi-principal element alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, (2023). 939, 168643.
2. Li, C., Lei, G., Zhu, Z., & Huang, H. Effects of Y_2O_3 nanoparticles/Ni matrix interface on the mechanical properties and helium swelling resistance in NiMoCr- Y_2O_3 alloys. *Journal of Nuclear Materials*, (2024). 589, 154854.
3. Sugimoto, Y., Miyamoto, M., Kim, J. H., Hwang, T., & Nakamichi, M. Helium swelling behavior for neutron multipliers after irradiation with He ions at high temperatures. *Nuclear Materials and Energy*, (2024). 38, 101584.
4. Jin, H., Zhang, S., Zheng, J., Zhang, J., Miao, H., & Cao, L. Machine Learning-Based Prediction of Irradiation-Induced Swelling from Synergistic Effects of Helium and Hydrogen. *Fusion Science and Technology*, (2024). 80(5), 682-694.
5. Cao, Z., Ding, Y., Li, Y., Wu, L., Wu, X., & Ran, G. Helium bubble evolution in Zr alloys: Effects of sinks and temperature. *Journal of Nuclear Materials*, (2024). 600, 155270.
6. Sugimoto, Y., Hara, K., Haruta, M., Kurata, H., Kim, J. H., Hwang, T., Miyamoto, M. Effect of the internal pressure of helium bubbles on the morphology and mobility of beryllium. *Fusion Engineering and Design*, (2023). 191, 113720.
7. Ping-Ping, L., Qi-Cong, W., Yu-Mei, J., Han, W. T., Xiao-Ou, Y., Zhan, Q., & Wan, F. R. Blistering Behavior of Beryllium and Beryllium Alloy under High-Dose Helium Ion Irradiation. *Materials*, (2024). 17(16), 3997.
8. Su, R., Shi, L., Perepezko, J. H., & Zhang, H. Helium-driven element depletion and phase transformation in irradiated Ti_3SiC_2 at high temperature. *Journal of the European Ceramic Society*, (2023). 43(8), 3104-3111.
9. Liu, M., Yan, Y., Zhu, Z., Liu, R., Ye, L., Zhou, H., & Huang, H. Microstructural evolution, swelling and hardening of CVD-SiC induced by He ions irradiation at 650° C. *Ceramics International*, (2023). 49(2), 1880-1887.
10. Zhu, Y., Chai, J., Shen, T., Niu, L., Liu, Y., Jin, P., Wang, Z. Helium irradiation induced microstructural damages and mechanical response of Al_2O_3 - ZrO_2 -SiC composites. *Journal of the European Ceramic Society*, (2023). 43(8), 3475-3485.
11. Kozlovskiy, A. L., Konuhova, M., Borgekov, D. B., & Popov, A. I. Study of irradiation temperature effect on radiation-induced polymorphic transformation mechanisms in ZrO_2 ceramics. *Optical Materials*, (2024). 115994.
12. Ghyngazov, S. A., Boltueva, V. A., O'Connell, J. H., Vershinina, T. N., Kirilkin, N. S., Rymzhanov, R. A., Surzhikov, A. P. Swift heavy ion induced phase transformations in partially stabilized ZrO_2 . *Radiation Physics and Chemistry*, (2022). 192, 109917.
13. Balogh, A. G. Irradiation induced defect formation and phase transition in nanostructured ZrO_2 . *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, (2012). 282, 48-58.
14. Zhumazhanova, A., Mutali, A., Ibrayeva, A., Skuratov, V., Dauletbekova, A., Korneeva, E., Zdorovets, M. Raman study of polycrystalline Si_3N_4 irradiated with swift heavy ions. *Crystals*, (2021). 11(11), 1313.
15. van Vuuren, A. J., Ibrayeva, A. D., Skuratov, V. A., Zdorovets, M. V. Analysis of the microstructural evolution of silicon nitride irradiated with swift Xe ions. *Ceramics International*, (2020). 46(6), 7155-7160.
16. Uglov, V. V., Ivanov, I. A., Zlotski, S. V., Stepanjuk, N. A., Ryskulov, A. E., Jin, K. Composition and Structure of fcc-Structured High-Entropy Alloys Irradiated with Helium Ions. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, (2023). 17(2), 494-499.

17. Uglov, V. V., Abadias, G., Zlotski, S. V., Saladukhin, I. A., & Cherenda, N. N. Surface blistering in ZrSiN nanocomposite films irradiated with He ions. Surface and coatings technology, (2020). 394, 125654.

Kozlovskiy A.L.

Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

Study of the structural degradation kinetics of the near-surface layer of ZrO₂ ceramics exposed to low-energy He²⁺ ion irradiation

Abstract. This work considers the effects of radiation damage accumulation in the near-surface layer of ZrO₂ ceramics arising under high-dose irradiation with low-energy He²⁺ ions. Additionally, it determines the influence of irradiation temperature on the thickness of the damaged layer in ceramics, the change of which is caused by the effects of ion diffusion into the depth of the material. To determine the effects of radiation damage, and to determine the kinetics of changes depending on the variation of external factors, the method of Raman piezospectroscopy of lateral chips of ceramics was used. This enabled the acquisition of data pertaining to changes in the values of residual stresses and FWHM along the trajectory of ion movement in the material, as well as at a depth exceeding the depth of ion penetration into the material. According to the conducted studies, it was established that the main type of deformation distortions arising as a result of irradiation and, as a consequence, the accumulation of structural changes caused by irradiation, is associated with the formation of residual mechanical tensile stresses in the structure. Moreover, a change in the irradiation conditions, in particular, an increase in the irradiation temperature, leads to an increase in the values of residual mechanical stresses in the structure of the damaged layer, and an increase in the thickness of the damaged layer is also observed, the change of which is due to the effects of ion diffusion deep into the target material. Analysis of alterations in the FWHM value indicates that at low irradiation fluences (below 10¹⁷ ion/cm²), the main changes in the structural features of the damaged layer are due to the effects of accumulation of structural distortions as a result of deformation stresses, while at high-dose irradiation, the formation of amorphous-like inclusions, the presence of which is associated with helium agglomeration, as well as the formation of gas-filled inclusions in the damaged layer, contribute to the destructive disordering of the damaged layer.

Key words: radiation-resistant ceramics, structural distortions, residual stresses, deformation, disordering, gas-filled bubbles, swelling

Козловский А.Л.

ҚР ЭМ Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

Төмен энергиялы He²⁺ ионды сәулелену геушыраған ZrO₂ керамикасының беткі қабатының құрылымдық деградация кинетикасын зерттеу

Аңдатпа. Жұмыста төмен энергиялы He²⁺ иондарымен жоғары дозалы сәулелену кезінде пайда болатын ZrO₂ керамикаларының беткі қабатында радиациялық зақымданулардың жинақталуының әсері, сондай-ақ сәулелену температурасының керамикадағы зақымдалған қабаттың қалыңдығына әсерін анықтау қарастырылады, оның өзгеруі материалға иондардың

диффузиялық әсеріне байланысты. Радиациялық зақымданудың әсерін және сыртқы факторлардың өзгеруіне байланысты өзгеру кинетикасын анықтау үшін керамиканың бүйірлік жарықшақтарын Раман пьезоспектроскопиясы әдісі қолданылды, бұл қалдық кернеулер мен FWHM шамаларының өзгеру деректерін материалдағы иондардың қозғалыс траекториясы бойымен, сондай-ақ материалға иондардың ену тереңдігінен асатын тереңдікте алуға мүмкіндік берді. Жүргізілген зерттеулерге сәйкес, сәулелену нәтижесінде пайда болатын деформациялық бұрмаланулардың негізгі түрі және нәтижесінде сәулеленуден туындаған құрылымдық өзгерістердің жинақталуы құрылымдағы созылу түріндегі қалдық механикалық кернеулердің пайда болуымен байланысты екендігі анықталды. Сонымен қатар, сәулелену жағдайларының өзгеруі, атап айтқанда, сәулелену температурасының жоғарылауы зақымдалған қабаттың құрылымындағы қалдық механикалық кернеулердің жоғарылауына әкеледі, сонымен қатар зақымдалған қабаттың қалыңдығының жоғарылауы байқалады, оның өзгеруі иондардың мақсатты материалға терең диффузиясының әсерінен болады. FWHM шамасының өзгеруін талдау көрсеткендей, төмен сәулелену флюенстерінде (10^{17} ион/см²-ден төмен) зақымдалған қабаттың құрылымдық ерекшеліктерінің негізгі өзгерістері деформациялық кернеулер нәтижесінде құрылымдық бұрмаланулардың жинақталуының әсерінен болады, ал жоғары дозалы сәулелену кезінде зақымдалған қабаттың деструктивті бұзылуына ықпал ететін аморфты қосындылардың пайда болуы, олардың болуы гелий агломерациясымен, сондай-ақ зақымдалған қабатта газ толтырылған қосындылардың пайда болуымен байланысты.

Түйін сөздер: радиацияға төзімді керамика, құрылымдық бұрмаланулар, қалдық кернеулер, деформация, тәртіпсіздік, газ толтырылған көпіршіктер, ісіну

Сведения об авторах:

Козловский Артем – автор для корреспонденции, доктор PhD, заведующий лабораторией физики твердого тела Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК (Алматы, Казахстан). E-mail: kozlovskiy.a@inp.kz

Information about authors:

Kozlovskiy Artem – corresponding author, PhD, Head of the Laboratory of Solid State Physics, Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan). E-mail: kozlovskiy.a@inp.kz

Авторлар туралы мәліметтер:

Козловский Артем – корреспондент-автор, PhD докторы, Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі Ядролық физика институтының Астана қаласындағы филиалық атты дене физикасы зертханасының меңгерушісі (Алматы, Қазақстан). E-mail: kozlovskiy.a@inp.kz



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



Многоканальный анализатор со схемой совпадения для идентификаций легкозаряженных частиц

А. Темиржанов^{1,2*}, Б. Садыков², Т. Жолдыбаев², Ж. Керимкулов²,
К. Мендибаев^{2,3}

¹Satbayev University, Алматы, Казахстан

²Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

³Объединенный Институт ядерных исследований, Дубна, Россия

(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Аннотация. В экспериментах по ядерной физике применяются специально созданные модульные блоки, обрабатывающие сигналы с детекторов излучения и позволяющие получить информацию о природе этих процессов. Эти блоки, называемые ядерной электроникой, легли в основу систем ядерной спектрометрии в медицине, дозиметрии, в исследованиях космические лучей и в других источниках ионизирующего излучения.

В статье описано создание электрической схемы измерения для ДЕ-Е метода регистрации и идентификации легкозаряженных частиц использованием программы MultiSim. С помощью данной программы были смоделированы спектрометрический усилитель, одноканальный анализатор и схема совпадений с применением современных микроэлектронных компонентов. На основе смоделированной схемы был создан прототип спектрометрического усилителя. Сигнал, полученный с созданного прототипа, совпадает с смоделированным. Полученные данные свидетельствуют о том, что смоделированную схему можно использовать для экспериментов в ядерной физике для идентификаций легкозаряженных частиц, а также в других областях, где есть нужда в ядерной спектроскопии.

Ключевые слова: ядерная электроника, многоканальный анализатор, альфа спектроскопия, гамма спектроскопия, микроэлектроника.

Введение

Во всех областях науки, где приходится иметь дело с ионизирующими излучениями, используются специальные электронные приборы или так называемая ядерная электроника для получения, преобразования и обработки информации, поступающей от детекторов. Такие приборы применяются в таких разных областях исследования, как в экспериментах по ядерной физике, дозиметрии, ядерной медицины и т.д. [1, 2, 3]. В число этих устройств входят зарядочувствительные предусилители, спектрометрический усилитель, дискриминатор или одноканальный анализатор, схема совпадения, контроллер, блоки аналогового цифрового преобразователя и многие другие. Для унификации данных устройств были разработаны и приняты международные стандарты NIM и SAMAC. До настоящего времени в основном применяются модульные системы, разработанные в данных стандартах и которые находят широкое применение и удовлетворяют требованиям большинства задач [4, 5].

В то же время необходимо отметить, что достижения последних десятилетий в области микроэлектроники оказывают существенное влияние на развитие ядерной электроники. Большие усилия были направлены на разработку приборов и систем для нужд ядерной спектроскопии путем использования оцифровки аналоговых сигналов с использованием современной микропроцессорной схемотехники [6-9].

Вместо большого количества модулей разного назначения разрабатываются многоканальные анализаторы (МКА), собранные в одно компактное устройство, внутри которого программируемая логическая интегральная схема с быстрой оперативной памятью и быстрыми АЦП со скоростью до 250 миллионов выборок в секунду, осуществляет набор данных с детектора ионизирующего излучения. Электронные модули обработки и преобразования сигнала реализованы в виде программы внутри контроллера, которая называется цифровым алгоритмом обработки сигнала [10, 11, 12].

Другой способ реализаций многоканального анализатора основан на применении микроконтроллеров со специальными электронными схемами обработки сигнала и пикового детектора. В современных микроконтроллерах внутри имеется АЦП и встроенная оперативная память с прямым доступом от периферийных устройств, что позволяет записывать сигналы с АЦП на память напрямую без участия процессора [13-19].

Целью статьи является моделирование специальной двухдетекторной схемы для набора данных в экспериментах по ядерной физике на Циклотроне У-150М Института ядерной физики (г. Алматы). Использование такой схемы позволит реализовать двухдетекторную методику идентификации и регистрации частиц из ядерных реакций, так называемый ΔE - E -метод. Суть данного метода заключается в одновременном использовании тонкого проточного детектора ΔE и детектора полного поглощения энергии E , которые находятся один за другим. Такой подход позволяет идентифицировать легкозаряженные частицы, появившиеся после взаимодействия бомбардирующей частицы с ядром мишенью в камере рассеивания на основе измерений удельных потерь энергии и полной энергии. Распределение энергий между двумя детекторами различно для разных типов частиц из-за их разных тормозных способностей, что позволяет проводить их

идентификация на двумерной матрице ΔE - E , на которой каждая типчастица находится на своем локусе [20-23].

Данная схема была смоделирована в программе MultiSim [21, 22], которая позволяет симулировать реальную электрическую схему. В схеме реализованы блоки спектрометрического усилителя –SA, дискриминатора –Discr, схемы совпадения –CS на основе коммерчески доступных и малобюджетных операционных усилителей, компараторов и других интегральных микросхем. Был собран прототип спектрометрического усилителя на основе моделированного SA.

Методология

Принцип работы системы регистрации легкозаряженных частиц показан на рисунке 1, где легкие заряженные частицы (${}^{1,2,3}\text{H}$, ${}^{3,4,6}\text{He}$), образовавшиеся после взаимодействия ускоренной частицы с мишенью, регистрируются полупроводниковыми детекторами с толщиной 10-100 микрон для пролетного ΔE и 2-10 миллиметров для детектора полного поглощения E . Сигнал с детекторов усиливается до нужного уровня зарядочувствительными предусилителями, обозначенными на схеме как ЗЧПУ. Далее выходные сигналы с предусилителей преобразуются спектрометрическими усилителями СУ. Одноканальный анализатор ОА работает как компаратор и вырабатывает логический сигнал, если уровень входного сигнала выше установленного уровня. Схема совпадения СС вырабатывает логический сигнал 1, если на его вход одновременно попадают прямоугольные сигналы с ОА, то есть СС представляет собой логическую схему “И”. Сигнал со СС выступает триггером, запускающим АЦП микроконтроллера. Далее данные отправляются на компьютер, где можно увидеть собранный спектр в специально созданных программах, например, в пакете объектно-ориентированных программ и библиотек ROOT, разработанном в CERN.

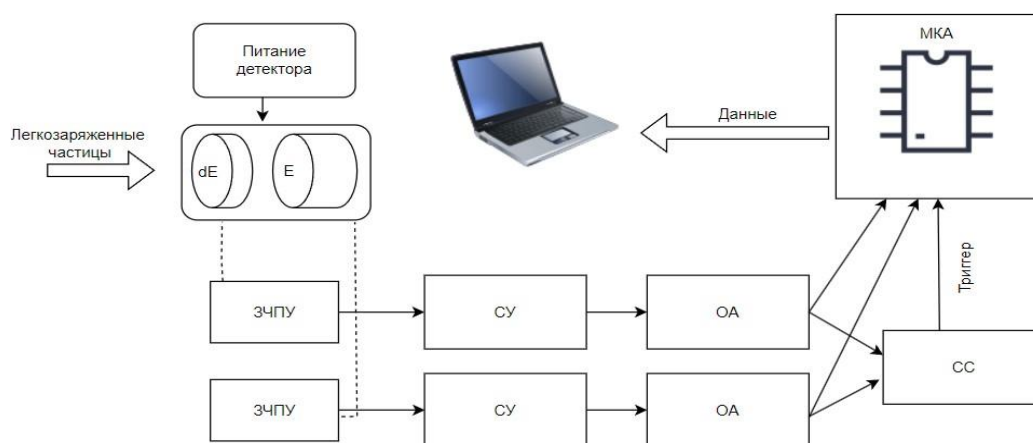


Рисунок 1. Блок-схема метода регистрации и идентификации легкозаряженных частиц

Чтобы обеспечить полный сбор заряда с детектора, схема предусилителя настроена на создание длительного времени затухания импульса (типичное время затухания составляет около 500-1000 микросекунд). Поскольку импульсы возникают в случайные моменты времени (радиоактивный распад является случайным процессом), то при высокой частоте счета они могут накладываться друг на друга. Амплитуды этих импульсов несут важную информацию, поскольку они соответствуют заряду, накопленному в детекторе, который пропорционален энергии регистрируемых частиц. Поэтому наложение импульсов, их насыщение и последующий нелинейный отклик являются крайне нежелательными процессами. Применение спектрометрического усилителя решает эту проблему и позволяет добиться лучшего отношения сигнала к шуму.

Комбинация из конденсатор-резистор CR-дифференциатора и резистор-конденсатор RC-интегратора, приведенная на рисунке 2а), используется в качестве формирователя гауссовского импульса в спектрометрических усилителях. Добавление операционного усилителя позволяет добиться импедансной изоляции двух цепей друг от друга. Операционные усилители работают в режиме повторителя напряжения и на втором операционном усилителе происходит усиление сигнала. Спектрометрический усилитель смоделирован на основе операционных усилителей OPA354. Емкость конденсатора составляет 50 пФ, а сопротивление резистора 10 кОм, что позволяет добиться временной константы преобразования сигнала в гауссовскую форму в 0,5 микросекунд. Как результат, на выходе получаем сигнал с шириной в 2 микросекунды, представленный на рисунке 2б).

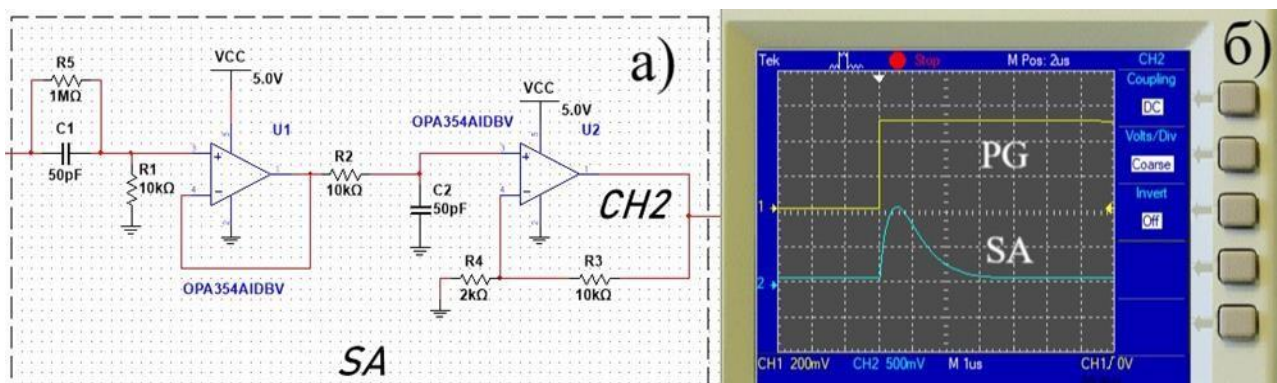


Рисунок 2. а) Принципиальная схема SA, б) сигнал с выхода SA и PG

На рисунке 3 представлена смоделированная с использованием программы MultiSim полная электрическая схема преобразования сигнала, состоящая из спектрометрического усилителя -SA, одноканального анализатора или компаратора – Discr на основе компаратора LM339N и схемы совпадения -CS на основе логического элемента И 74HC08N.

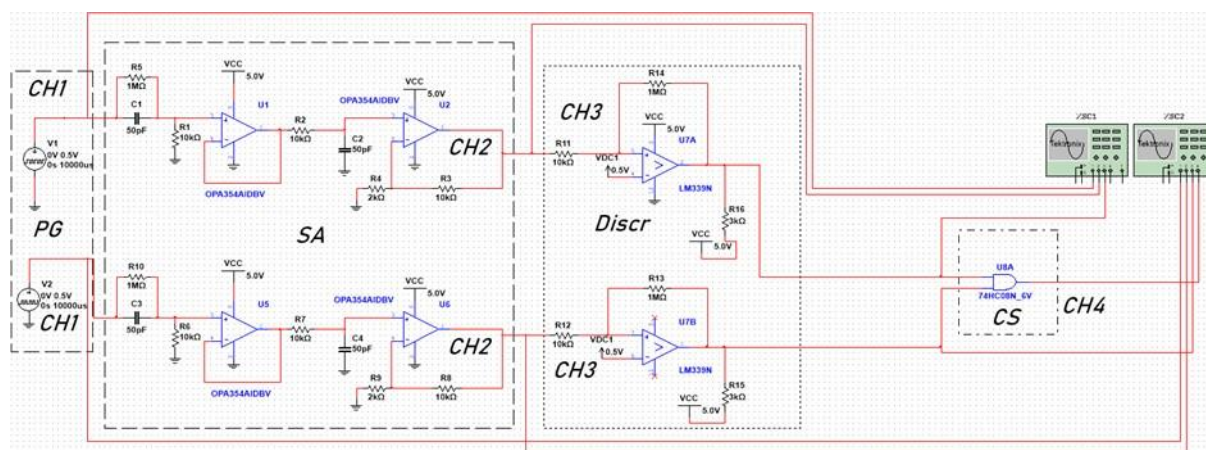


Рисунок 3. Предложенная электрическая схема МКА со схемой совпадения

На рисунке 3 генератор сигнала обведен в рамку и обозначен как PG, а его выходы подключены ко входам CH1 виртуальных осциллографов. Соответственно в рамки обведены SA и Discr, CS и к какому каналу осциллографа подключены их выходы.

Для моделирования на вход SA был подан сигнал с генератора сигналов, похожий на реальный сигнал с предусилителя [24]. Высота сигнала 500 mV, нарастание 10 ns и длинный спад сигнала в 1000 us повторяет форму сигнала с выхода предусилителя ORTEC 142B, который создан для работы с кремниевыми детекторами. На рисунке 3 генератор сигнала обведен в рамку и обозначен как PG, а их выходы подключены ко входам CH1 виртуальных осциллографов. Соответственно в рамки обведены SA и Discr, CS и к какому каналу осциллографа подключены их выходы.

Результаты и Обсуждение

Для симуляции работы предложенной схемы на вход SA был подан сигнал с виртуального генератора сигналов, встроенного в программу MultiSim. Высота сигнала 500 mV, нарастание 10 ns и длинный спад сигнала в 1000 us повторяет форму сигнала с выхода предусилителя ORTEC 142B, который специально создан для работы с кремниевыми детекторами [26]. В результате были получены последующие сигналы с каждого из элементов электрической схемы, которые представлены на рисунке 4. Прохождение регистрируемой частицы через два последовательных детектора приводит к образованию двух одновременных сигналов, в то время как шум и фоновые частицы в основном взаимодействуют только с одним детектором. В результате все эти паразитные процессы, которые могут привести к росту мертвого времени АЦП, отсекаются работой схемой совпадений.

Для проверки работоспособности предложенной схемы, собранной в MultiSim, начато создание прототипа в виде отдельной печатной платы. На первом этапе был реализован прототип спектрометрического усилителя SA, представленный на рисунке 5. Для проверки его работоспособности был создан измерительный стенд, состоящий из альфа источника Ra226 и кремниевого детектора фирмы ORTEC, толщиной 300 микрон и зарядово-чувствительного предусилителя 142B фирмы ORTEC.

На рисунке 6а показаны полученные на стенде сигналы с предусилителя 142В и с выхода прототипа SA. На рисунке 6б показаны те же сигналы, но в другом масштабе времени, чтобы видеть структуры единичного импульса. Как видно из рисунка 6б, выходной сигнал с выхода прототипа спектрометрического усилителя SA идентичен смоделированному (рисунок 4а, сигнал SA), что говорит о возможности его дальнейшего использования при реализации полной схемы. Прототип отличается компактными размерами и малым энергопотреблением по сравнению с модулями NIM. Созданная плата может найти свое применение как при проведении ядерно-физических экспериментов, так и в других смежных областях науки.

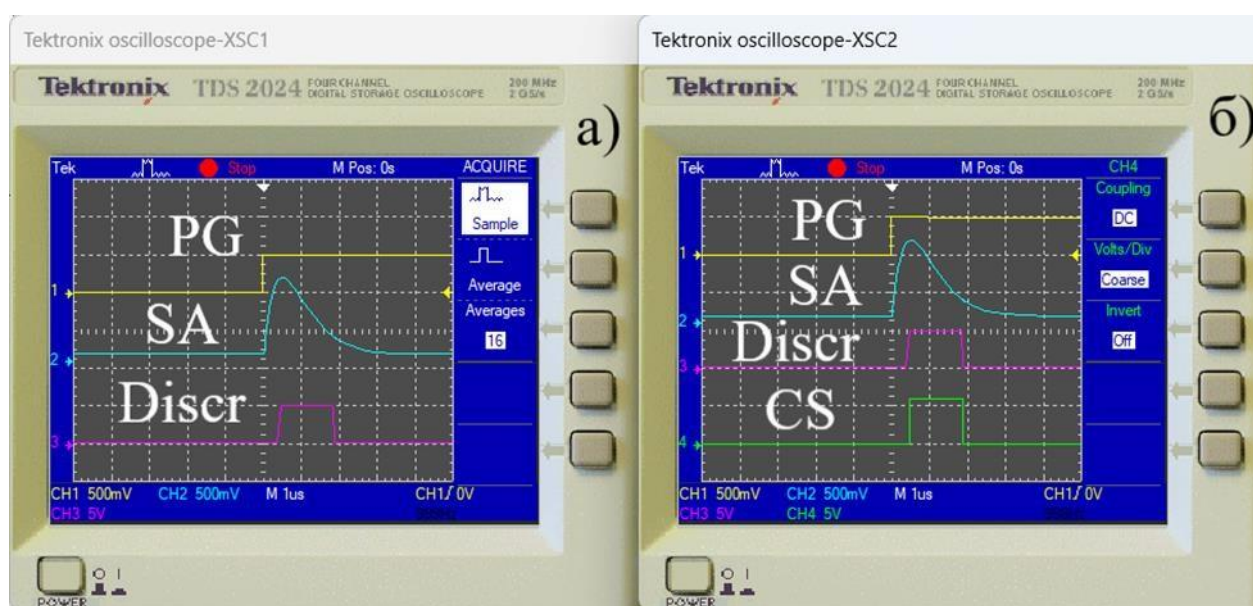


Рисунок 4. Сигналы, полученные в процессе симуляций электрической схемы МКА со схемой совпадения: а) первый канал схемы б) второй канал и схема совпадения



Рисунок 5. Созданный прототип SA



Рисунок 6. Сигналы, полученные на измерительном стенде: а) сигналы с предусилителя 142В и с выхода прототипа SA, б) те же сигналы, но в другом масштабе времени

Заключение

Была предложена и смоделирована система из современных операционных усилителей, компараторов и логической схемы, которая выполняет аналоговую электрическую схему обработки сигнала для МКА. Схема должна работать в связке с микроконтроллерной системой с встроенным АЦП и пиковым детектором.

На основе смоделированной схемы в MultiSim для проверки ее работоспособности была реализована плата спектрометрического усилителя на основе операционного усилителя. Полученные сигналы с предусилителя совпадают с сигналом смоделированной схемы. Достигнутые результаты свидетельствуют о том, что современными микросхемами и программным обеспечением можно создавать сложные устройства как для ядерно-физических экспериментов, так и для смежных областей науки, где приходится иметь дело с ионизирующими излучениями. Предложенная схема будет реализована для набора данных в экспериментах по ядерной физике на Циклотроне У-150М Института ядерной физики (г. Алматы).

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, Грант №. AP14870958.

Вклад авторов

Темиржанов Әлішер Әлібекұлы – Проведение исследований, сбор данных и доказательств, анализ и интерпретация полученных данных. Составление черновика рукописи. Программирование, разработка программного обеспечения, проектирование компьютерных программ.

Садыков Бахтияр Маденұлы – Предоставление измерительных приборов, вычислительных ресурсов и иных инструментов для проведения эксперимента. Утверждение окончательного варианта рукописи.

Жолдыбаев Тимур Кадыржанұлы – Составление черновика рукописи и его критический пересмотр с внесением ценного замечания. Утверждение окончательного варианта рукописи.

Керімкулов Жамбыл Куанышбекұлы – Формирование идеи; формулировка или развитие ключевых целей и задач.

Мендибаев Кайрат Оразбаевич – Предоставление измерительных приборов, вычислительных ресурсов и иных инструментов для проведения эксперимента. Составление черновика рукописи. Утверждение окончательного варианта. Разработка методологии исследования.

Список литературы

1. Marques L., Vale A., Vaz P. State-of-the-art mobile radiation detection systems for different scenarios //Sensors, 21(4), 1051(2021).
2. Tsoulfanidis N., Landsberger S. Measurement and detection of radiation. – CRC press, 2021.
3. Pausch G. et al. Detection systems for range monitoring in proton therapy: Needs and challenges // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 954, 161227(2020).
4. Clark A. M. et al. Improvements for heavy-ion accelerator mass spectrometry at the university of Notre Dame's nuclear science laboratory //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 541, 342-349(2023).
5. Kim Y. et al. Position-sensitive NaI (TL) detector module for large-area Compton camera //Journal of the Korean Physical Society, 72, 26-32(2018).
6. Vaz S. C. et al. Nuclear medicine and molecular imaging advances in the 21st century //The British journal of radiology, 93(1110), 20200095(2020).
7. Quaglia L. et al. Eco-friendly Resistive Plate Chambers for detectors in future HEP applications // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1058, 168757(2024).
8. Pausch G. et al. Detection systems for range monitoring in proton therapy: Needs and challenges // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 954, 161227(2020).
9. Holík M. et al. A synchronization and data acquisition system for silicon detectors //Journal of Instrumentation, 13(11), 11019(2018).
10. Villamarín D. et al. Design of a high performance Digital data Acquisition SYstem (DAISY) for innovative nuclear experiments //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1055, 168526(2023).
11. Mostafanezhad I. et al. Measurements on All-In-One Digitizer System-an-chip (AODS): a High Dynamic Range Front-End Digitizer for Particle Physics Experiments //2020 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC). – IEEE, 1-2(2020).

12. Recker M. C., Cazalas E. J., McClory J. W. Pulse shape discrimination with a low-cost digitizer using commercial off-the-shelf components //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 954, 161479(2020).
13. Jithin B. P., Sastri O. Novel coincidence setup using indigenously developed portable USB gamma spectrometer and associated analysis software //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 964, 163793(2020).
14. Cardoso J. M. et al. A very low-cost portable multichannel analyzer //2000 IEEE Nuclear Science Symposium. Conference Record (Cat. No. 00CH37149). – IEEE, 2(2), 12/164-12/167 (2000).
15. Voss H. D., Bakke J. C., Roselle S. N. A spacecraft multichannel analyzer for a multidetector solid state detector array //IEEE Transactions on Nuclear Science, 29(1), 173-177(1982).
16. Bombelli L. et al. A multichannel integrated readout circuit for high throughput X-ray spectroscopy with Silicon Drift Detectors //IEEE Transactions on Nuclear Science, 60(1), 430-436(2013).
17. Carminati M. et al. Handheld magnetic-compliant gamma-ray spectrometer for environmental monitoring and scrap metal screening //Sensors, 22(4), 1412(2022).
18. Zhang J., Yang Z., Li Y. Research on gamma spectroscopy system while drilling based on DSP and FPGA //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2418(1), 012024(2023).
19. Chierici A. et al. Resource Constrained Electronics and Signal Processing for UAV Radiation Sensors //EPJ Web of Conferences. – EDP Sciences, 288, 10019(2023).
20. Sweany S. et al. Reaction losses of charged particles in CsI (Tl) crystals //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1018, 165798(2021).
21. Dubey R. et al. High-energy electron measurements with thin Si detectors //Measurement, 228, 114392(2024).
22. Ahmadov G. S. et al. Detection of ternary and quaternary fission fragments from ^{252}Cf with a position-sensitive ΔE -E telescope based on silicon detectors //Physics of Particles and Nuclei Letters, 12, 542-549(2015).
23. Aidos A. et al. Study of one-step and two-step neutron transfer in the reaction $^6\text{Li} + ^9\text{Be}$ //arXiv preprint arXiv:2407.19846. – 2024
24. Atiea H. M., Rashid J. M. Simulation of Charge Sensitive Preamplifier to improve Nuclear Pulse detecting using Multisim Software //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 1999(1), 012125(2021).
25. Li Y. et al. Energy spectrum response of a CsI (Tl) detector read out by an APD //Journal of Instrumentation, 15(5), T05005(2020).
26. Bertoni R. et al. Innovative amplifiers for muon spectroscopy experiments at RAL //Journal of Instrumentation, 15(3), C03020(2020).

Ә. Теміржанов^{1,2*}, Б. Садықов², Т. Жолдыбаев², Ж. Керімкулов², Қ. Мендібаев^{2,3}

¹Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

²Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан,

³Біріккен Ядролық Зерттеулер Институты, Дубна, Ресей

*(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Жеңіл зарядты бөлшектерді анықтауға арналған сәйкестік схемасы бар көп арналы анализатор

Аңдатпа. Ядролық физика эксперименттерінде радиациялық детекторлардың сигналдарын өңдейтін және осы процестердің табиғаты туралы ақпарат беретін арнайы құрылған модульдік қондырғылар қолданылады. Ядролық электроника деп аталатын бұл блоктар медицинада, дозиметрияда, ғарыштық сәулелерді зерттеуде және иондаушы сәулеленудің басқа көздерінде ядролық спектрометрия жүйелерінің негізін құрайды.

Мақалада MultiSim бағдарламасында жеңіл зарядталған бөлшектерді тіркеудің ΔE -E әдісі үшін электрлік өлшеу тізбегін құру сипатталған. Бағдарлама заманауи микроэлектрондық компоненттерді пайдалана отырып, спектрометриялық күшейткішті, бір арналы анализаторды және сәйкестік тізбегін модельдеді. Модельдеу схемасын қолдана отырып, спектрометриялық күшейткіштің прототипі жасалды. Құрылған прототиптен алынған сигнал имитацияланғанымен сәйкес келеді. Алынған деректер симуляцияланған схеманы жеңіл зарядталған бөлшектерді анықтау үшін ядролық физикадағы тәжірибелер үшін, сондай-ақ ядролық спектроскопия қажеттілігі бар басқа салаларда қолдануға болатындығын көрсетеді.

Түйін сөздер: ядролық электроника, көп арналы анализатор, альфа-спектроскопия, гамма-спектроскопия, микроэлектроника

A. Temirzhanov^{2*}, B. Sadykov², T. Zholdybayev², Zh. Kerimkulov², K. Mendibayev^{2,3}

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

² Institute of nuclear physics, Almaty, Kazakhstan,

³Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

*(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Multichannel coincidence analyzer for light charged particle identification

Abstract. Nuclear physics experiments use specially designed modular units that process signals from radiation detectors and provide information on the nature of these processes. These units, called nuclear electronics, form the basis of nuclear spectrometry systems in medicine, dosimetry, cosmic ray research, and other sources of ionizing radiation.

The article describes the creation of an electrical measurement circuit for the ΔE -E method of recording and identifying lightly charged particles using the MultiSim program. By using this program, a spectrometric amplifier, a single-channel analyzer, and a coincidence circuit were simulated using modern microelectronic components. Based on the simulated circuit, a prototype of a spectrometric

amplifier was created. The signal obtained from the created prototype coincides with the simulated one. The obtained data indicate that the simulated scheme can be used for experiments in nuclear physics for the identification of lightly charged particles, as well as in other areas where there is a need for nuclear spectroscopy.

Keywords: Nuclear electronics, multichannel analyzer, alpha spectroscopy, gamma spectroscopy, microelectronics

Информация об авторах:

Темиржанов Алишер Алибекулы – автор для корреспонденции, младший научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Садыков Бахтияр Маденович – кандидат физ-мат. наук, ведущий научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Жолдыбаев Тимур Кадыржанович – кандидат физ-мат. наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Керимкулов Жамбул Куанышбекович – кандидат физ-мат. наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник, РГПРГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Мендибаев Кайрат Оразбаевич – PhD по специальности «Ядерная физика», старший научный сотрудник, Лаборатория ядерных процессов, Объединенный Институт ядерных исследований (Российская Федерация) и РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Авторлар туралы ақпарат:

Темиржанов Әлішер Әлібекұлы – корреспондент автор, РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Қ.И. Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ-да, «Робототехника» мамандығы бойынша докторантураны аяқтады.

Садыков Бахтияр Маденұлы – РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты.

Жолдыбаев Тимур Кадыржанұлы – РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор.

Керімкулов Жамбыл Куанышбекұлы – РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор.

Мендибаев Кайрат Оразбаевич – Біріккен ядролық зерттеулер институты (Ресей Федерациясы) және РМК Ядролық физика институты ядролық процестер зертханасының аға ғылыми қызметкері, «Ядролық физика» мамандығы бойынша PhD докторы.

About the authors:

Temirzhanov Alisher Alibekuly – corresponding author, Junior Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, completed his doctorate at KazNITU named after K. Satpayev in Robotics.

Sadykov Bakhtiyar Madenovich – Leading Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Physics and Mathematics.

Zholdybaev Timur Kadyrzhanovich – Leading Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor

Kerimkulov Zhambul Kuanyshbekovich – Leading Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor

Mendibaev Kairat Orazbaevich – Senior Researcher at Joint Institute for Nuclear Research (Russian Federation) and Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Nuclear Physics.



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ӘӨЖ 29.19.13

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-148-3-98-116>

Ғылыми мақала

Поверхностная модификация (DS) покрытий на основе Ni-Cr-Al методом импульсной плазменной обработки (PPT)

Д.К. Ескермесов¹, Б.К. Рахадиллов^{2,3}, Ж.Т. Толеуханова*¹, С. Пазылбек⁴,
А.С. Ескермесова³

¹НАО «Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева», Усть-Каменогорск, Казахстан

²НАО «Восточно-Казахстанский университет имени Сарсена Аманжолова», Усть-Каменогорск, Казахстан

³ТОО «PlasmaScience», Усть-Каменогорск, Казахстан

⁴Университет имени Жумабека Ахметулы Ташенева, Шымкент, Казахстан

(E-mail: *ztoleukhanova@ektu.kz)

Аннотация. Для защиты материалов от абразивной коррозии можно использовать различные методы термического напыления для нанесения покрытий, такие, как порошковое напыление газовым пламенем, плазменное напыление, напыление и плавление, высокоскоростное кислородно-газовое напыление и детонационное напыление. Термическое напыление является одним из наиболее эффективных методов защиты материала от износа и коррозии, тем самым увеличивая срок службы материала. В данной статье представлено изменение поверхности покрытий на основе Ni-Cr-Al методом импульсной плазменной обработки с использованием плазменного генератора. Покрытия были получены методом детонационного напыления (DS), после чего прошли импульсную плазменную обработку (PPT). Изучены изменения структурно-фазового состояния покрытий под воздействием плазменного потока. В работе использовались сканирующая электронная микроскопия (SEM), рентгеновская энергодисперсионная спектроскопия (EDX), рентгеноструктурный анализ (XRD), характеристика шероховатости поверхности, испытания на твердость и трибологические испытания для комплексного анализа изменений характеристик детонационных Ni-Cr-Al покрытий. Показано, что модификация поверхности покрытий импульсной плазменной обработкой приводит к увеличению износостойкости их поверхностного слоя за счет уменьшения коэффициента трения и увеличения микротвердости. Согласно результатам рентгеновского фазового анализа, улучшение трибомеханических свойств полученных поверхностей связано с увеличением содержания фаз CrNi₃, NiAl и NiCr в обработанных покрытиях.

Ключевые слова: покрытие, термическое напыление, детонационное напыление, импульсная плазменная обработка, коэффициент трения, шероховатость, микротвердость.

Введение

Защитные и функциональные покрытия используются в различных приложениях, включая автомобильные системы, компоненты котельного оборудования и силовое оборудование, химическое оборудование для процессов, авиационные двигатели, ортопедию и стоматологию, сухопутные и морские турбины, а также суда [1]. Среди коммерчески доступных методов термического напыления наиболее подходящими для получения желаемых твердых, плотных и износостойких покрытий являются детонационное напыление (DS) и напыление высокоскоростным кислородно-газовым пламенем (HVOF) [2].

Требуемые свойства покрытия могут быть достигнуты с помощью различных методов, одним из которых является термическое напыление. Термическое напыление - это нанесение материала на подложку в виде размягченных или расплавленных капель с образованием сплошного покрытия. Это эффективный и недорогой метод нанесения покрытий для изменения свойств поверхности материала, который стал важным инструментом в технологии обработки поверхностей [3]. Для нанесения покрытий используется множество методов термического напыления, таких, как газопламенное порошковое напыление [4], дуговое напыление проволокой [5], плазменное напыление [6, 7], высокоскоростное кислородно-топливное напыление (HVOF) [8] и напыление из детонационного пистолета [9]. Выбор способа зависит от функциональных требований, приспособляемости материала покрытия к предполагаемому способу, требуемого уровня адгезии, доступности метода и стоимости оборудования [10].

Покрытия, наносимые методом детонационного напыления, играют важную роль в защите материалов и сплавов от износа и коррозии [11]. Различные исследователи проводили работы по изучению характеристик покрытий, формируемых методом детонационного напыления [12-13]. Однако работ в области использования наноструктурированных порошков с детонационным напылением пока немного. Необходимы также дополнительные исследования для оптимизации технологических параметров процесса детонационного напыления, совершенствования конструкции устройства для распыления с помощью детонационного пистолета [14] и понимания того, как технологические параметры детонационного напыления влияют на микроструктуру, механические и другие свойства покрытий [15].

Разработанное исследователями устройство разделения с помощью детонационного пистолета позволило добиться хороших результатов распыления с помощью детонационного пистолета при высоких требованиях к производительности [16]. Процесс распыления с помощью детонационного пистолета, используемый в данной работе, аналогичен описанному авторами [17]. Материал для покрытия подается через дозатор в виде порошка одновременно со смесью горючих газов (например, кислорода и ацетилена). Затем свеча зажигания поджигает газ внутри камеры,

создавая детонационную волну, которая продвигает материал покрытия через металлический барабан к подложке с очень высокими скоростями. Как результат, при ударе частиц горячего порошка о подложку их высокая кинетическая энергия способствует формированию покрытия, отличающегося высокой твердостью, плотностью и долговечностью. Толщина покрытия зависит от различных технологических параметров, включая, но не ограничиваясь ими, размер частиц материала покрытия, соотношение используемых газообразных продуктов сгорания, расход газа и расстояние между выпускным отверстием цилиндра и подложкой. Цикл детонационного напыления можно повторять со скоростью от 1 до 10 циклов в секунду, пока не будет достигнута желаемая толщина покрытия [18].

Качество покрытий, получаемых методом детонационного напыления, определяется двумя ключевыми параметрами: скоростью u и температурой t_c частиц в момент их столкновения с поверхностью. Для оптимального формирования покрытия важно, чтобы распыляемые частицы (температура распыления, t_p) находились в полурасплавленном состоянии (при температуре, равной температуре расплавления ($t_c = t_p$)) перед столкновением с подложкой. Частицы, не достигшие полурасплавленного состояния, обычно отскакивают от поверхности, что приводит к снижению скорости осаждения. В случае, если такие частицы всё же проникают в слой, они ухудшают качество покрытия, вызывая появление дефектов и неровностей. Перегрев частиц также нежелателен, так как это вызывает разбрызгивание капель и, соответственно, ухудшение качества поверхности покрытия [19].

Предварительные исследования показали, что фазовый состав детонационных покрытий значительно зависит от температуры термического отжига. Однако такая термообработка имеет недостаток, связанный с размягчением материалов подложки. Эти недостатки традиционных методов термообработки можно устранить с помощью термической активации поверхности импульсными потоками плазмы [20]. Импульсная плазменная обработка (РРТ) обладает рядом преимуществ, включая высокие скорости нагрева и охлаждения поверхности материала (10^4 - 10^8 К/с) и возможность формирования слоистых структур с различным фазовым составом, что позволяет изменять их физико-химические свойства. Кроме того, данная методика позволяет осуществлять локальное воздействие на изделие. Таким образом, технология импульсной плазмы предоставляет возможность управления изменениями поверхностного слоя. В литературе до сих пор отсутствует единое мнение о том, как РРТ влияет на структурно-фазовые преобразования в покрытиях на основе Ni-Cr-Al, а также о том, каким образом расстояние от плазменной горелки до поверхности образца сказывается на механических и трибологических свойствах покрытий. В этой статье мы исследуем влияние продолжительности обработки при РРТ-модификации покрытий Ni-Cr-Al, полученных методом детонационного напыления, под воздействием потока плазмы, на механические и трибологические свойства получаемых поверхностей.

Методология

DS покрытия на основе Ni-Cr-Al были распылены с использованием детонационной установки «Детонационное распыление с компьютерным управлением (CCDS2000)» (Исследовательская лаборатория «Поверхностная инженерия и трибология», Усть-Каменогорск, Казахстан). В этой установке детонация происходит внутри ствола в результате взрывоопасной смеси, которая формируется благодаря постоянной подаче газовых компонентов через специальное смесительное устройство (смотреть рисунок 1а) [21].

Поверхностная модификация покрытий PPT осуществлялась с помощью метода импульсной плазменной обработки, используя генератор плазмы, разработанный Институтом электросварки им. Е.О. Патона (Национальная Академия наук, Украина). Особенностью данного плазмотрона является возможность переключения электрического тока через область ионизированного газа за фронтом детонационной волны, что позволяет генерировать импульсную плазму с частотой от 1 до 4 Гц и энергией до 7 кДж (смотреть рисунок 1б).

Для повышения шероховатости поверхности и, следовательно, улучшения адгезии перед напылением подложки проходили пескоструйную обработку (Подложка: сталь DIN 14MoV63, среднее арифметическое отклонение профиля $R_a = 1,25$ мкм). В качестве напыляемого материала был использован композитный порошок 584.054 производства H.C. Starck. В качестве исходного материала использовалась смесь, состоящая из 80 мас.% никелевого порошка (Ni20Cr80) и 20 мас.% алюминия (чистотой 99,99%). Размер частиц порошка составлял от 30 до 45 мкм. В качестве горючего газа использовалась смесь ацетилена с кислородом, которая является наиболее распространённым топливом для детонации распыляемых порошков. Распыление происходило при соотношении ацетилена и кислорода O_2/C_2H_2 , равном 1,856. Объем взрывчатой смеси в стволе детонационного пистолета составлял 60%, а в качестве газа-носителя использовался азот. Расстояние между обработанной поверхностью образца и детонационным стволом было 250 мм. Детонационные покрытия обрабатывались импульсной плазменной дугой прямого действия при следующих параметрах: емкость конденсатора 960 мкФ, напряжение 3,2 кВ, индуктивность 30 мкГн, частота 1,2 Гц, скорость прохождения 3,4 мм/с, выемка электрода $h = 10$ мм, количество проходов – 1. Режимы обработки выбирались путём изменения расстояния H между плазменной горелкой и закалённой поверхностью (смотреть таблицу 1).

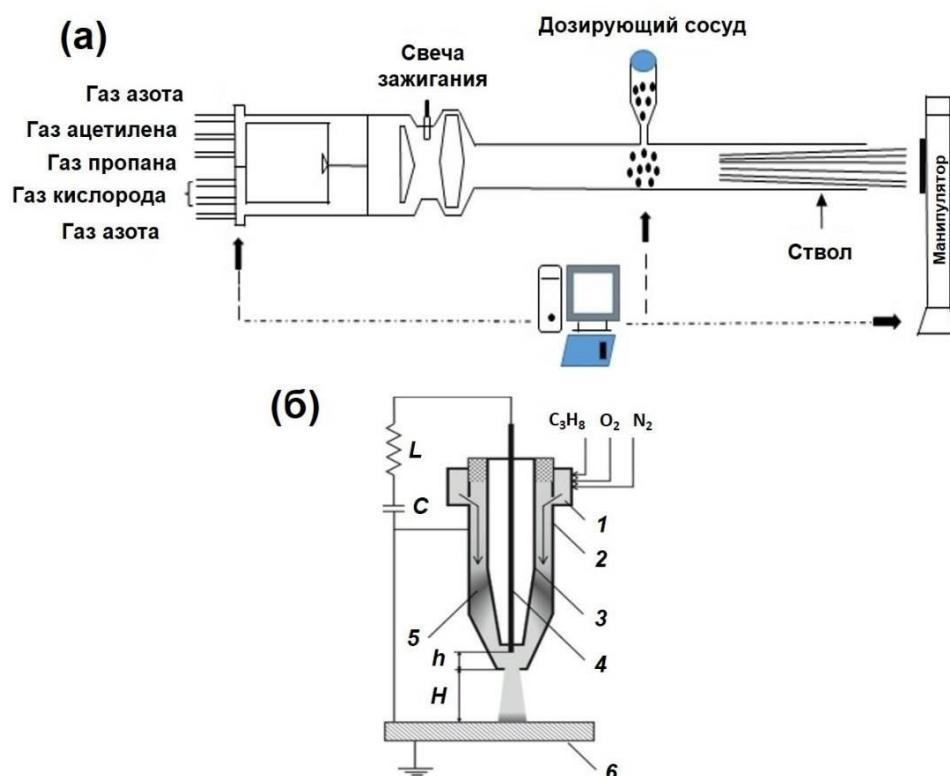


Рисунок 1. Принципиальная схема детонационного комплекса «CCDS2000» (а) и РРТ (б): 1 – камера детонаций; 2, 3 – электроды с общим осевым направлением; 4 – изнашиваемый электрод; 5 – волна детонации; 6 – зона контакта плазмы [21]

Таблица 1. Технологические параметры обработки методом РРТ для покрытий на основе Ni-Cr-Al

Номер образца	Покрытие	Расстояние от плазменной горелки до поверхности образца, Н (мм)	Средняя шероховатость (Ra) (мкм)	Микротвердость (ГПа)
1 (Исходное)	Ni-Cr-Al	–	9,83	4,1
2		40	4,47	7,4
3		50	6,12	6,2
4		60	3,82	7,6

Химический анализ состава и морфологию поверхности покрытия изучали с использованием рентгеновской энергодисперсионной спектрометрической системы «OXFORD INSTRUMENTS», растровой электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (SEM/EDX) с аппаратами «VEGA³» (TESCAN), «SEM Solutions» (TESCAN) и «NeoScope JSM-5000» (JEOL) при напряжении 10-20 кВ.

Для изучения кристаллической структуры нанесенных покрытий была проведена рентгеновская дифракция (XRD) с помощью рентгеновского дифрактометра «D8 DISCOVER» (Bruker) при напряжении 40 кВ и токе 40 мА с медной мишенью ($\lambda = 154$ нм). Шаг сканирования составлял 0.02° в диапазоне углов от 10° до 90° . Для дифракции с изменяющимся углом падения был установлен многофункциональный адаптер.

Для анализа шероховатости поверхности R_a и объема удаленного материала покрытия мы измеряли сечение следа износа на поверхности образца с использованием профилометров модели «Model 130» (JSC Plant Proton) – контактный метод и «Alicon InfiniteFocus Model G5» (Bruker) – бесконтактный метод по стандарту ASTM D7127-05.

Определение микротвердости поверхности полученных DS покрытий выполнялись с использованием автоматизированного микротвердомера модели «METOLAB» по методике Виккерса с нагрузкой на индентор 0,2 Н (стандарт ASTM E384 11 охватывает измерение твердости по Виккерсу с использованием усилий в диапазоне от $9,807 \times 10^{-3}$ до 9,807 Н). Отпечатки индентором выполнялись на расстоянии 1 мм друг от друга по стандарту ASTM E384-11.

Трибологические исследования для определения коэффициента трения поверхности DS покрытий проводились при комнатной температуре 28°C в атмосфере воздуха по схеме «шарик-диск» на установке «Tribometer TRB3» (Anton Paar). В качестве контртела использовался шарик диаметром 3 мм, изготовленный из прессованного сертифицированного материала – SHKh15. Нагрузка на шарик составляла 6Н, скорость скольжения – 2 см/с, радиус трека – 2,5 мм, общий пройденный путь встречного тела составлял 50 м. Условия анализа соответствовали международным стандартам ASTM G 133-95 и ASTM G99.

Результаты и Обсуждение

По полученным данным от растровой электронной микроскопии, процесс детонационного напыления и последующая обработка импульсной плазмой обладают определенными особенностями в формировании морфологии поверхности. На рисунке 2а показано РЭМ-изображение поверхности Ni-Cr-Al перед PPT. Покрытие имеет типичную структуру, характерную для методов термического напыления: высокую плотность, однородный состав и толщину слоя, а также наличие отдельных пор. На рисунке 2б-г показаны РЭМ-изображения поверхности Ni-Cr-Al после PPT. Видно, что поверхностный слой содержит сложный градиентный состав, модифицированный расплавленной плазмой. Перед нанесением PPT поверхностное покрытие демонстрирует значительные пространственные различия в элементном составе. На четырех участках, где проводился EDX для образца 1, атомный процент Ni колеблется от 15,49% до 64,82%, атомный процент Cr колеблется от 8,79% до 19,17%, а атомный процент Al колеблется от 8,74% до 70,10%. В результате импульсной плазменной обработки химический состав поверхности покрытий Ni-Cr-Al изменяется в зависимости от расстояния до плазмотрона с изменением интенсивности отдельных элементов, таких, как Al, Ni, Cr и Fe (см. таблицу 2 и рисунок 3).

Это хорошо согласуется со средним отношением Ni к Cr, измеренным при помощи EDX (с усреднением по 4 точкам), составляющим приблизительно 2.9 к 1. Появление пика Fe при 6.4 кэВ в спектрах EDX (Рисунок 4) показывает, что на поверхности покрытия содержится все больше Fe по мере уменьшения расстояния H между плазменной горелкой и поверхностью образца во время PPT. При расстоянии H 40 мм атомный процент Fe, измеренный EDX, составляет до 69.97%, по сравнению с 2.48% до PPT. Атомный процент Fe, измеренный EDX, остается присутствующим, но менее значимым для образцов 3 и 4, когда H равно 50 мм и 60 мм соответственно. Вполне вероятно, что в зоне реакции, где температура может достигать 3500 °C, происходит полное плавление нанесенного покрытия и частичное плавление содержащего Fe материала подложки. Фаза Al_2O_3 значительно более распространена после обработки PPT, которая проводится в атмосферных условиях, то есть в присутствии кислорода.

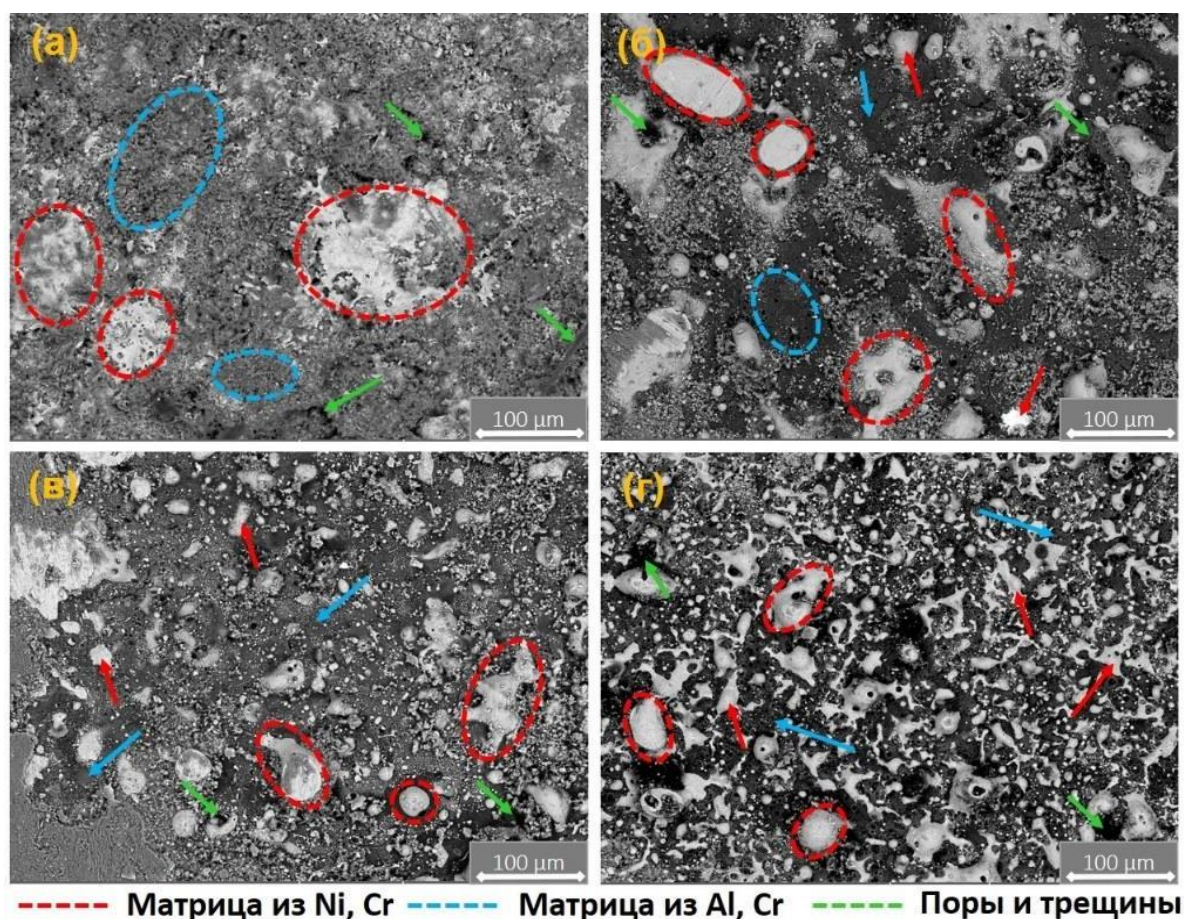


Рисунок 2. SEM-изображение поверхности Ni-Cr-Al покрытий (DS) до (а) и после (б), (в) и (г) PPT

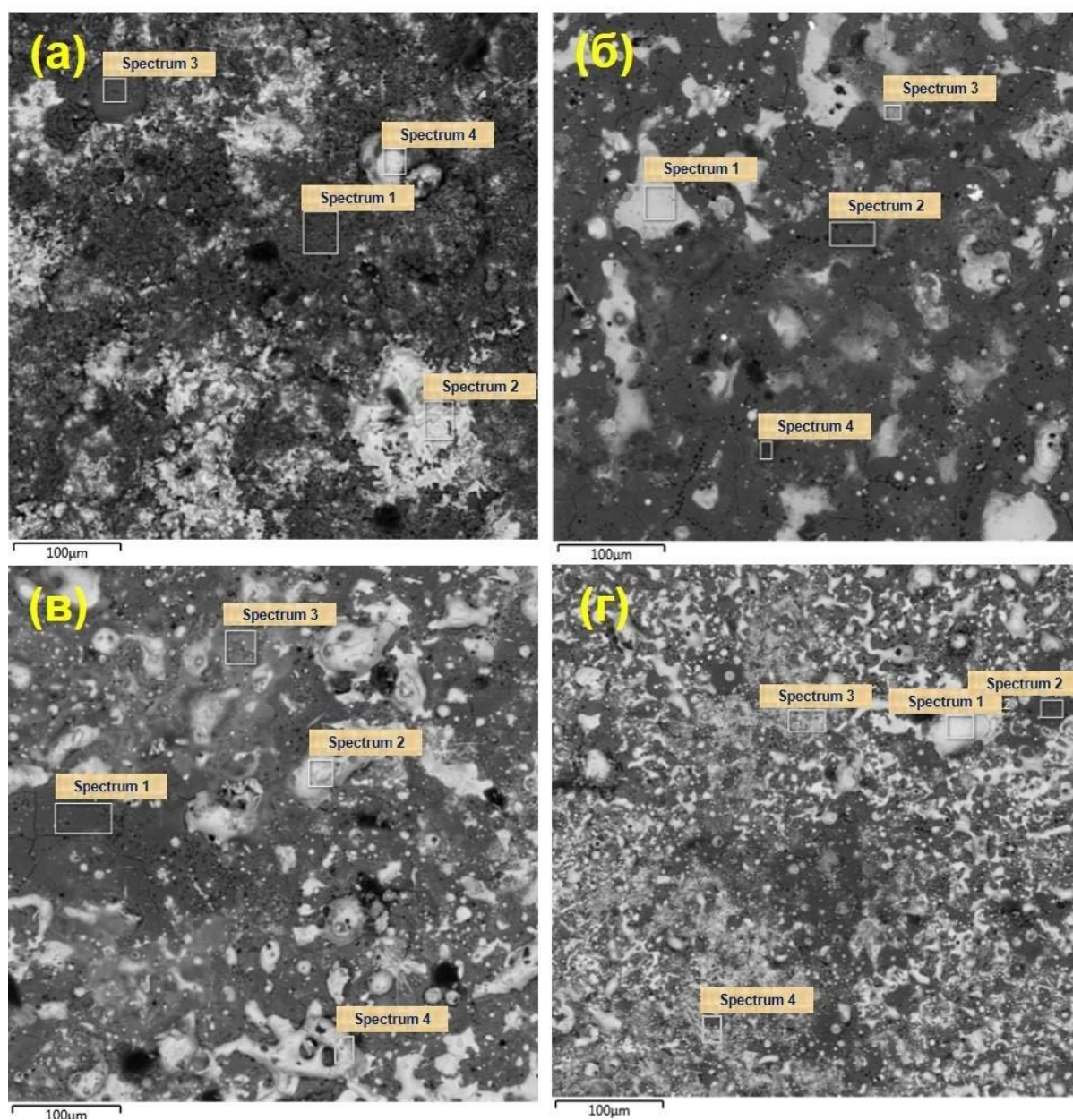


Рисунок 3. SEM-изображение областей спектра поверхности Ni-Cr-Al покрытий до (а) и после (б), (в) и (г) PPT (контраст фаз)

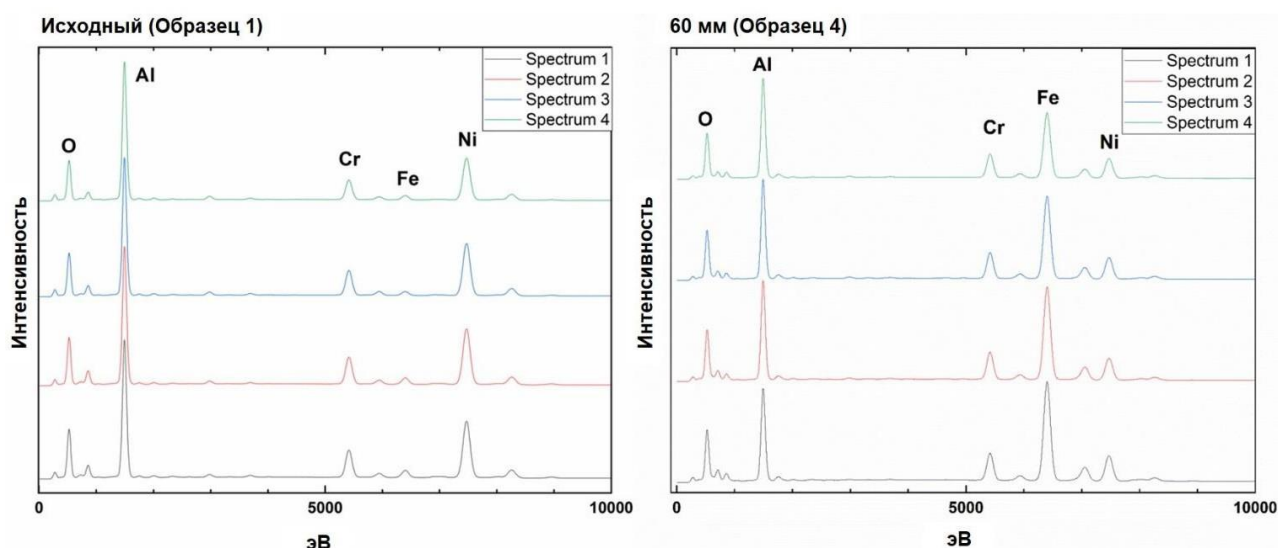


Рисунок 4. EDX-анализ поверхности покрытий на основе элементов Ni-Cr-Al

Таблица 2. Химический состав элементов в покрытиях Ni-Cr-Al по данным SEM/EDX

№	Область спектра	Химический состав, %						
		Ni (Никель)	Cr (Хром)	Al (Алюминий)	Fe (Железо)	O (Кислород)	C (Углерод)	Примеси
Образец 1	Спектр 1	34,46	10,91	50,70	0,52	2,46	0,72	0,23
	Спектр 2	64,82	19,17	8,74	2,48	3,17	1,38	0,24
	Спектр 3	15,49	8,79	70,10	0,48	8,79	1,02	0,29
	Спектр 4	52,90	16,01	13,37	0,90	6,25	10,07	0,28
Образец 2	Спектр 1	9,81	4,23	1,05	69,97	8,64	5,46	0,83
	Спектр 2	17,74	3,23	32,14	7,18	38,76	0,61	0,35
	Спектр 3	7,58	3,65	1,35	49,29	18,20	19,32	0,61
	Спектр 4	39,13	0,50	2,30	32,60	24,52	0,45	0,29
Образец 3	Спектр 1	42,72	10,59	38,24	2,86	3,83	1,39	0,37
	Спектр 2	44,64	15,13	7,02	18,01	10,31	1,95	0,38
	Спектр 3	6,61	14,76	35,29	20,80	14,92	6,85	0,42
	Спектр 4	26,54	2,93	47,66	8,05	11,95	2,43	0,10
Образец 4	Спектр 1	62,15	17,42	1,67	7,03	5,21	4,69	1,84
	Спектр 2	16,05	37,94	39,60	2,25	2,40	1,11	0,64
	Спектр 3	31,47	8,35	10,19	25,96	15,15	7,39	1,49
	Спектр 4	43,59	13,80	16,06	5,18	13,41	2,55	1,84

На поверхности полученных покрытий был проведен рентгеновский анализ (XRD). Глубина зондирования или проникновения рентгеновского луча составляет

приблизительно 0,3 мкм, в зависимости от угла падения луча. Наличие пика Al_2O_3 обнаруживаемого только в обработанных покрытиях, можно однозначно отнести на счет импульсной плазменной обработки в кислородсодержащей атмосфере. Фазовый анализ этих покрытий методом XRD показывает наличие фаз CrNi_3 , NiCr , Al и Al_2O_3 (смотреть рисунок 5). Скорее всего, во время распыления методом детонации и последующего PPT поверхность подложки нагревается до расплавления и из осажденных элементов Ni , Cr и Al образуются фазы CrNi_3 , NiAl и NiCr . До PPT нанесенные покрытия Ni-Cr-Al, по-видимому, состояли в основном из CrNi_3 с добавлением некоторых алюминийсодержащих фаз.

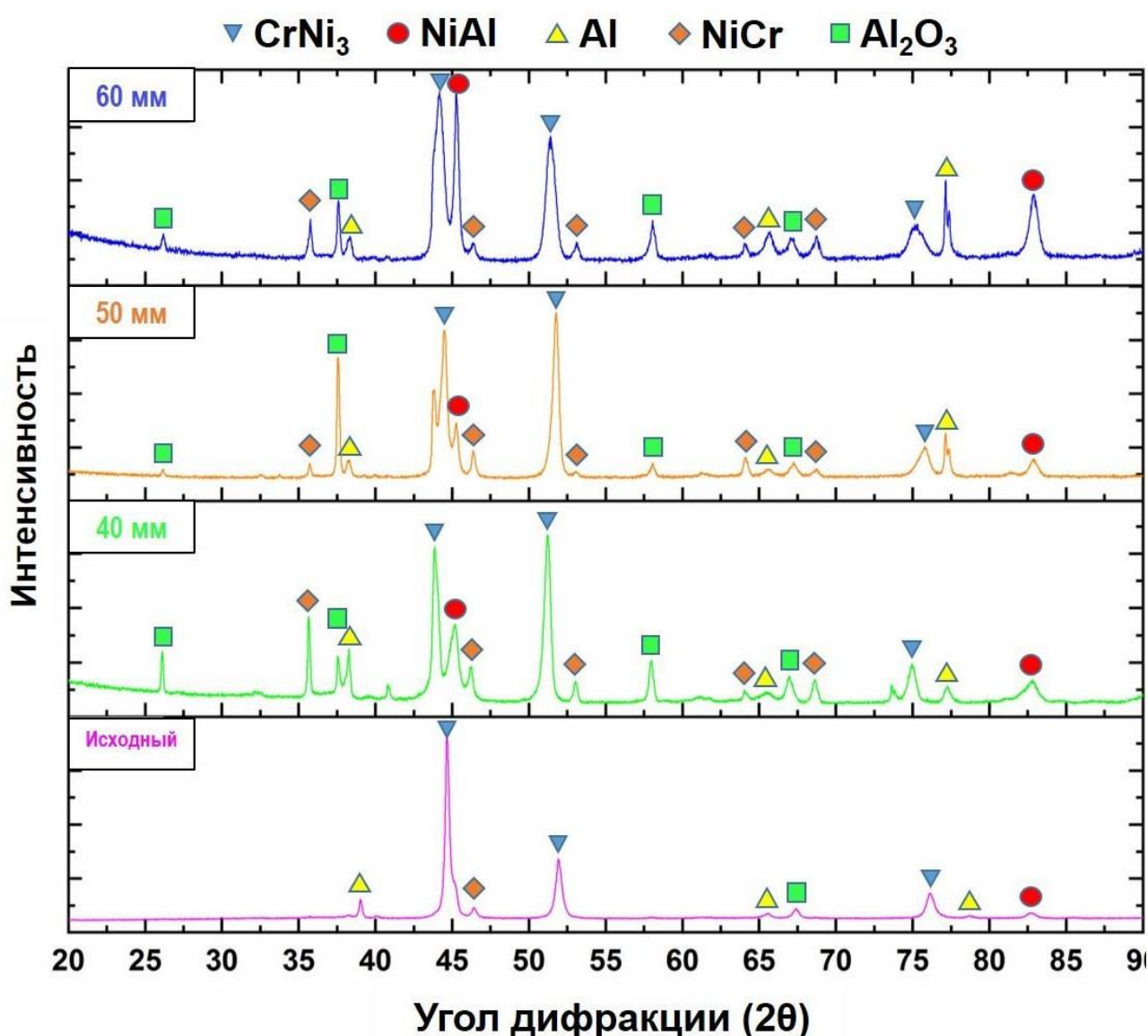


Рисунок 5. Дифракционные спектры метода рентгеноструктурного анализа (XRD) покрытий Ni-Cr-Al, нанесенных методом DS (исходное состояние) и после PPT (40, 50 и 60 мм)

На рисунке 6 показаны 3D-изображения поверхности покрытий Ni-Cr-Al до и после PPT расстояниями 40, 50 и 60 мм, полученные с помощью профилометрии. Видно, что PPT влияет на морфологию поверхности. В частности, значительно снижается шероховатость поверхности (см. таблицу 1); PPT разглаживает поверхность и уменьшает неровности. Среднее отклонение R_a до PPT составило 9,83 мкм, а среднее отклонение после PPT (для наибольшего расстояния 60 мм между поверхностью и плазменной горелкой) составило 3,82 мкм, что составляет уменьшение примерно на 39%. Это согласуется с предыдущими сообщениями в литературе [22].

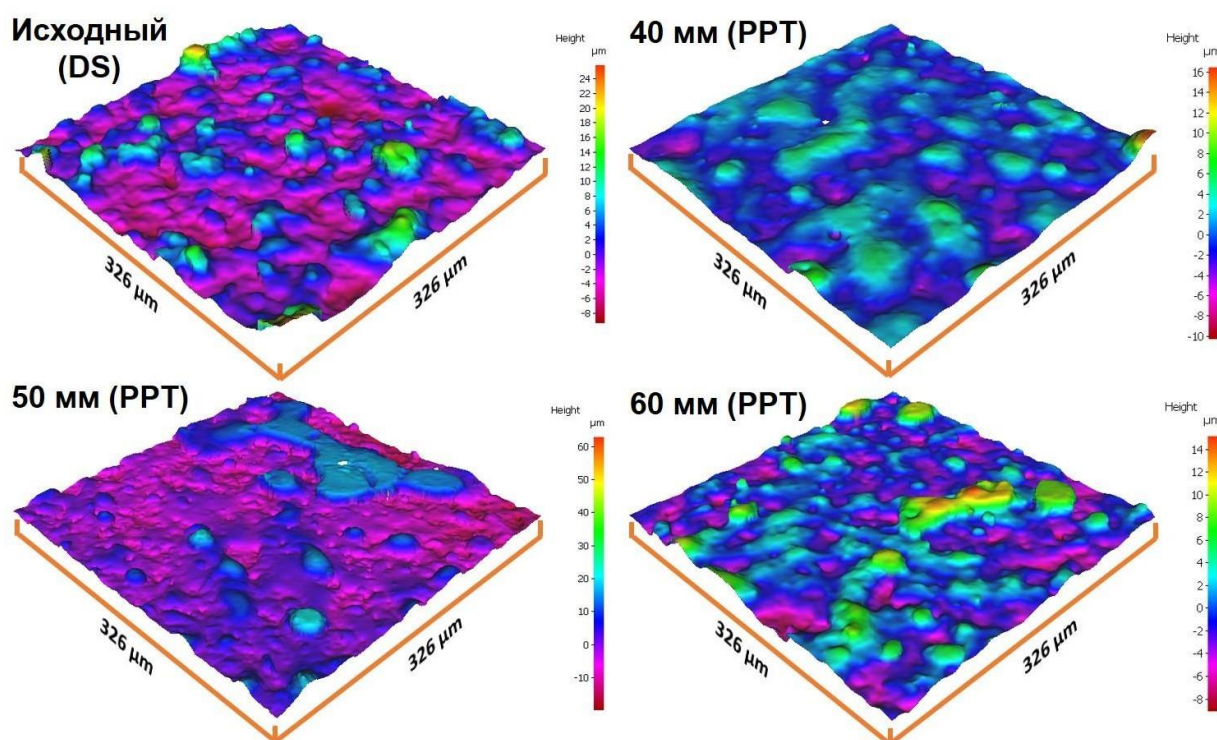


Рисунок 6. 3D цветные карты изображений шероховатости поверхности покрытий Ni-Cr-Al до (исходное состояние) и после (40 мм, 50 мм и 60 мм) PPT, полученные при увеличении окуляра оптического микроскопа в 50 раз

Один из самых универсальных способов быстрой оценки механических свойств покрытия – это измерение его микротвердости [23,24]. Средняя микротвердость покрытий Ni-Cr-Al до PPT (исходная) составляла 4,1 ГПа, а после PPT (40, 50 и 60 мм) – 7,4, 6,2 и 7,6 ГПа соответственно (смотреть таблицу 1). Максимальная твердость 7,6 ГПа достигается при расстоянии $H = 60$ мм между плазменной горелкой и поверхностью образца. Увеличенная твердость и износостойкость связаны с образованием сплава с фазой NiAl, который отличается относительно высокой температурой плавления, а также хорошей стойкостью к коррозии и окислению[25].

На рисунке 7 показаны кривые трения Ni-Cr-Al с покрытием до и после модификации методом PPT в зависимости от расстояния H между поверхностью и плазменной

горелкой. Эксперимент показал, что после PPT коэффициент трения снижается, среднее значение коэффициента трения на дистанции скольжения 50 м (для всех образцов одинаково) в покрытиях Ni-Cr-Al без обработки (образец 1, $H = 0$ мм) составляет $\mu = 0,545$. После обработки PPT с $H = 40$ мм (образец 2) средний коэффициент трения немного увеличивается до $\mu = 0,574$, однако при увеличении H до 50 (образец 3) и 60 мм (образец 4) во время PPT средний коэффициент трения снижается до $\mu = 0,480$ и $\mu = 0,415$ соответственно. Эти результаты ясно показывают, что коэффициент трения уменьшается с увеличением расстояния H между поверхностью и плазмотроном. Это согласуется с измеренной шероховатостью поверхностей: наименьший коэффициент трения соответствует наименьшему значению Ra (смотреть таблицу 1). Проведенные эксперименты показали, что PPT приводит к улучшению трибологических свойств Ni-Cr-Al покрытий. Этот эффект может быть достигнут путем устранения поверхностных дефектов (микротрещин и пор) и изменения структурно-фазового состояния покрытий. В процессе трения на поверхность воздействуют одновременно несколько характеристик, поэтому коэффициент трения не определяется строго значениями твердости. Однако одной из возможных причин снижения коэффициента трения может быть увеличение микротвердости. Согласно ссылке [25], упрочнение поверхности и снижение коэффициента трения имеют прямую корреляцию.

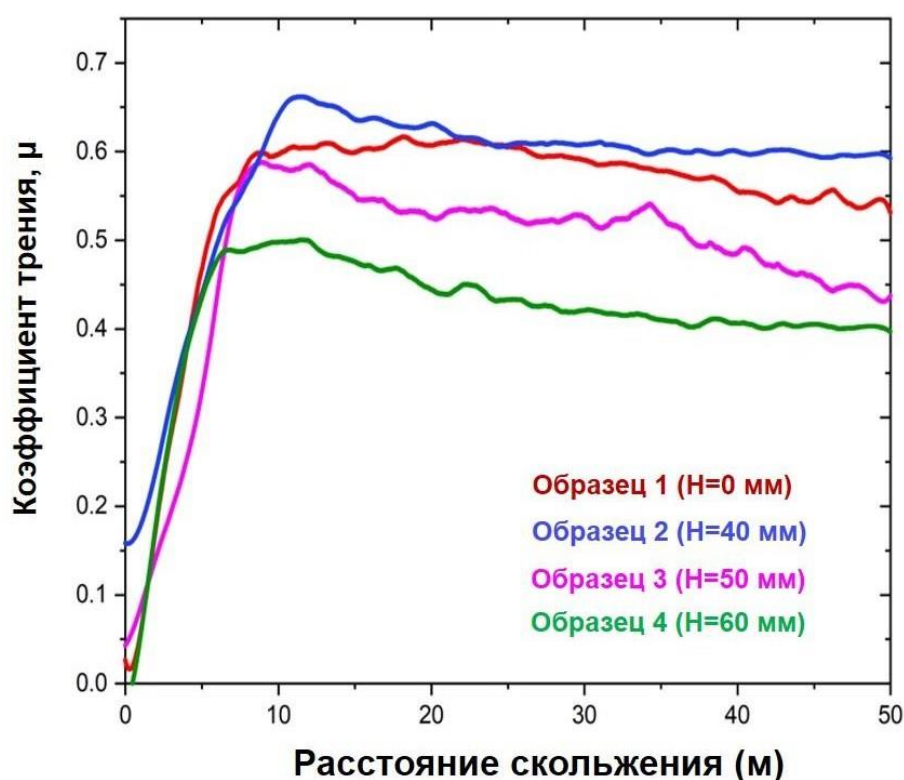


Рисунок 7. Результаты трибологических испытаний покрытий Ni-Cr-Al до и после PPT. Представленные данные были сглажены с помощью фильтра Савицки-Голея (с использованием полинома 4-го порядка и 3000 точек данных)

Известно [26], что твердость покрытий на металлической матрице зависит от измельчения зерен матрицы и дисперсионного упрочнения, что в данной работе было достигнуто с помощью РРТ. Согласно полученным данным, было выявлено, что образец с наименьшей шероховатостью поверхности и коэффициентом трения также имел наибольшее значение микротвердости (смотреть таблицу 1 и рисунок 6).

Рисунок 8 демонстрирует взаимосвязь между шероховатостью поверхности, коэффициентом трения и микротвердостью покрытий на основе Ni-Cr-Al до и после РРТ. Данные указывают на наличие зависимости между значениями микротвердости и как шероховатости, так и коэффициента трения поверхности: чем ниже шероховатость и коэффициент трения, тем выше значения микротвердости. Это наблюдается при сравнении поверхностной шероховатости образца 3 с образцами 2 и 4, где уменьшение значения микротвердости и повышение коэффициента трения соответствуют увеличению шероховатости. Известно, что микротвердость и сопротивление износу покрытий с металлической матрицей обычно зависят от количества и размера диспергированных фаз, в дополнение к матрице. Твердость покрытий с металлической матрицей зависит от двух основных факторов [26]: уточнения зерна матрицы и преципитационного упрочнения, которые были достигнуты благодаря РРТ (смотреть рисунок 2 и 3).

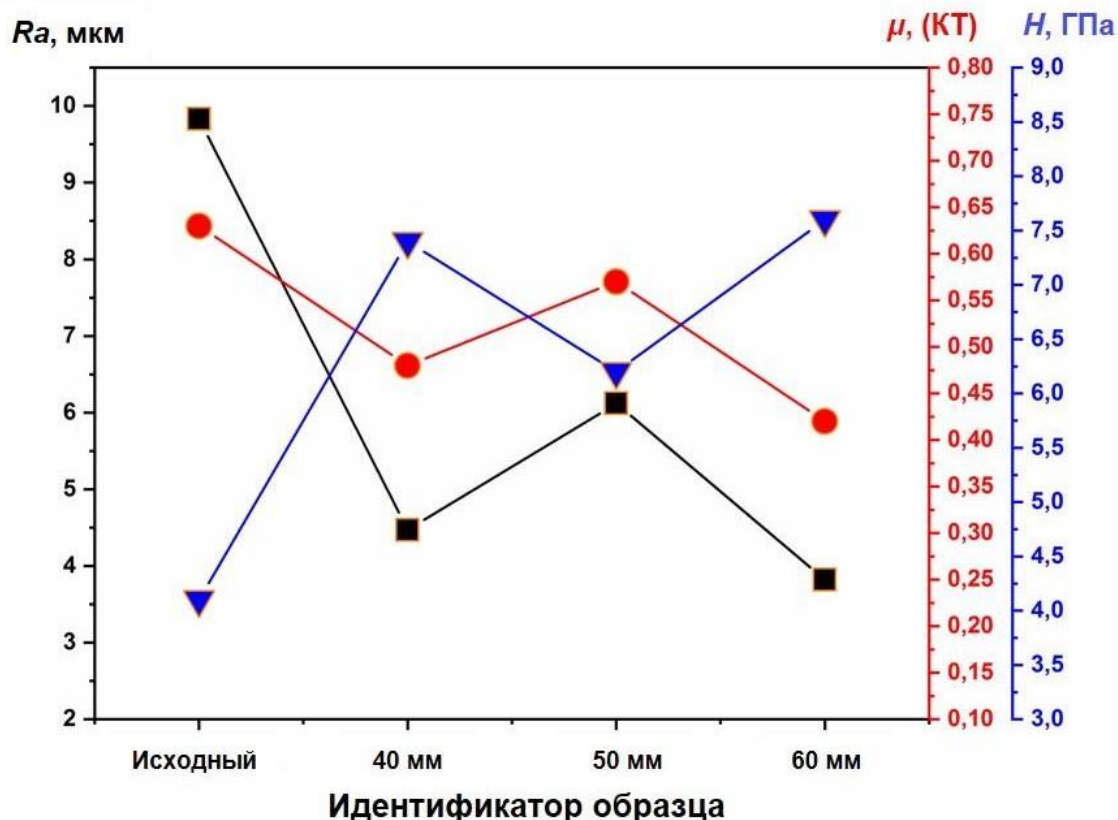


Рисунок 8. Изменение микротвердости (синие треугольники), шероховатости (черные квадраты) и коэффициента трения (красные круги) покрытий Ni-Cr-Al, нанесенных методом детонационного распыления, до (исходный) и после (40 мм, 50 мм и 60 мм) РРТ

Заключение

В данной работе было изучено влияние расстояния обработки импульсной плазмой при модификации поверхности покрытий на основе Ni-Cr-Al, полученных детонационным методом. Было установлено, что импульсная плазменная обработка снижает шероховатость поверхности и уменьшает неровности независимо от расстояния обработки. Шероховатость поверхности Ra после обработки импульсной плазмой была примерно на 39% ниже после обработки импульсной плазмой. Эксперимент, проведенный в этой работе, показал, что после обработки импульсной плазмой коэффициент трения уменьшается с 0,545 до 0,415 (для наибольшего расстояния обработки). Средняя микротвердость покрытий Ni-Cr-Al до обработки импульсной плазмой составляла 4,1 ГПа, а после обработки увеличивалась в 1,5-1,8 раза в зависимости от расстояния между поверхностью и плазмотроном. Таким образом, мы продемонстрировали, что импульсная плазменная обработка может быть использована для улучшения механических и трибологических свойств поверхности покрытий, полученных методом напыления из детонационной пушки, и что большее расстояние между поверхностью и плазмотроном приводит к более твердому поверхностному покрытию.

Благодарность, конфликт интересов

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP22683206).

Авторы выражают благодарность ТОО «PlasmaScience» (Усть-Каменогорск, Казахстан), Научно-исследовательскому центру «Поверхностная обработка и трибология» при ВКУ им. С.Аманжолова (Усть-Каменогорск, Казахстан).

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Вклад авторов. Д.К. Ескермесов, Б.К. Рахадиллов, Ж.Т. Толеуханова, С. Пазылбек и А.С. Ескермесова: концептуализация, исследование, методология, визуализация, написание оригинального текста, авторский надзор, ресурсы, рецензирование, редактирование и финансирование.

Список литературы

1. Lakhwinder Singh, Vikas Chawla, J.S. Grewal(2012) A review on detonation gun sprayed coatings. J Min Mater Char Eng 11 243 265. <https://doi.org/10.4236/jmmce.2012.113019>
2. J.M. Guilemany, N. Espallargas, P.H. Suegama, A.V. Benedetti a b (2006) Comparative study of Cr₃C₂-NiCr coatings obtained by HVOF and hard chromium coatings. Corros Sci 48: 2998-3013. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2005.10.016>
3. Ionut Claudiu Roata, Catalin Croitoru, Alexandru Pascu, Elena Manuela Stanciu(2019) Photocatalytic coatings via thermal spraying: a mini-review. AIMS Mater Sci 6(3): 335-353. doi: 10.3934/matricsci.2019.3.335

4. Czupryński Artur (2019) Flame Spraying of Aluminum Coatings Reinforced with Particles of Carbonaceous Materials as an Alternative for Laser Cladding Technologies. *Materials* 12: 3467(1-18). doi.org/10.3390/ma12213467
5. Gedzevicius Irmantas, Valiulis Argirdas Vaclovas (2006) Analysis of wire arc spraying process variables on coatings properties. *J Mater Process Technol* 175: 206-211. <https://doi.org/10.1016/j.JMATPROTEC.2005.04.019>
6. Liuyang Bai, Gewen Yi, Shanhong Wan, Wenzhen Wang, Huwei Sun (2023) Comparison of tribological performances of plasma sprayed YSZ, YSZ/Ag, YSZ/MoO₃ and YSZ/Ag/MoO₃ coatings from 25 to 800 °C. *Wear* 526-527: 204944. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2023.204944>
7. Dmitrii Ushmaev, Andy Norton, James Kell (2023) Thermally sprayed coatings resistant to environmental degradation: Columnar-like coatings through laser ablation and surface melting approach. *Surf. Coat. Technol.* 460: 129394. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2023.129394>
8. Hai-Long Yao, Chao Yang, Deng-Liang Yi, Meng-Xian Zhang, Hong-Tao Wang, Qing-Yu Chen, Xiao-Bo Bai, Gang-Chang Ji (2020) Microstructure and mechanical property of high velocity oxy-fuel sprayed WC-Cr₃C₂-Ni coatings. *Surf. Coat. Technol.* 397: 126010. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.126010>
9. T.L.Talako, M.S.Yakovleva, E.A.Astakhov, A.I. Letsko (2018) Structure and properties of detonation gun sprayed coatings from the synthesized FeAlSi/Al₂O₃ powder. *Surf. Coat. Technol.* 353: 93-104. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.08.063>
10. Buta Singh Sidhu, D. Puri, S. Prakash (2005) Mechanical and metallurgical properties of plasma sprayed and laser remelted Ni-20Cr and Stellite-6 coatings. *J Mater Process Technol* 159: 347-355. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2004.05.023>
11. V.A.D Souza., Anne G. Neville (2007) Aspects of microstructure on the synergy and overall material loss of thermal spray coatings in erosion-corrosion environments. *Wear* 263: 339-346. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2007.01.071>
12. Xingli Wang, Deli Zhou, Zongxiao Guo, Fan Wang, Yunming Qiu, Jianjun Huang (2023) Manufacturing and the process-structure-property correlation of detonation sprayed iron coatings under an unconventional coating deposition mechanism. *Surf. Coat. Technol.* 466: 129634. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2023.129634>
13. Denis K. Rybin, Igor S. Batraev, Dina V. Dudina, Arina V. Ukhina, Vladimir Yu Ulianitsky (2021) Deposition of tungsten coatings by detonation spraying. *Surf. Coat. Technol.* 409: 126943. doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.126943
14. A.A.Sova, D.A.Pervushin, I Smurov (2010) Development of multimaterial coatings by cold spray and gas detonation spraying. *Surf. Coat. Technol.* 205: 1108-1114. doi.org/10.1016/j.surfcoat.2010.07.092
15. Nurgamit Kantay, Bauyrzhan Rakhadilov, Sherzod Kurbanbekov, et al. (2021) Influence of Detonation-Spraying Parameters on the Phase Composition and Tribological Properties of Al₂O₃ Coatings. *Coatings* 11: 793. <https://doi.org/10.3390/coatings11070793>
16. Yu N. Tyurin, O.V.Kolisnichenko (2009) Plasma-detonation technology for modification of the surface layer of metal parts. *Open Surf. Sci. J.* 1: 13-19. <https://doi.org/10.2174/1876531900901010013>
17. Maulet M, Rakhadilov B.K., Sagdoldina Zh.B., et al. (2020) Influence of the detonation-spraying mode on the phase composition and properties of Ni-Cr coatings. *Eurasian Eurasian J. Phys. Funct. Mater.* 4: 184-189. <https://doi.org/10.29317/ejpfm.2020040307>

18. A. I. Potekaev, A. A. Chaplygina, P. A. Chaplygin, M. D. Starostenkov, V. V. Kulagina, A. A. Klopotov & L. S. Grinkevich (2019) The influence of grain size on low-stability pre-transitional structural-phase states of NiAl intermetallide. Russ. Phys. J. 62: 519–526. <https://doi.org/10.1007/s11182-019-01740-w>
19. Ulianitsky V., Batraev I., Dudina D., Smurov I. (2017) Enhancing the properties of WC/Co detonation coatings using two-component fuels. Surf. Coat. Technol. 318: 244–249. <https://doi.org/10.1016/J.SURFCOAT.2016.08.008>
20. Alexander D Pogrebnjak, Maxim Il'jashenko, Olga P Kul'ment'eva, Vladimir S Kshnjakin, Alexander P Kobzev, Yurii N Tyurin, Oleg Kolisnichenko (2001) Structure and properties of Al₂O₃ and Al₂O₃ + Cr₂O₃ coatings deposited to steel 3 (0.3 wt% C) substrate using pulsed detonation technology. Vacuum 62: 21–26. [https://doi.org/10.1016/S0042-207X\(01\)00109-9](https://doi.org/10.1016/S0042-207X(01)00109-9)
21. Bauyrzhan Rakhadilov, Dastan Buitkenov, Zhanat Idrisheva, Manira Zhamanbayeva, Sapargali Pazylbek, Daryn Baizhan (2021) Effect of Pulsed-Plasma Treatment on the Structural-Phase Composition and Tribological Properties of Detonation Coatings Based on Ti–Si–C. Coatings 11: 795. <https://doi.org/10.3390/coatings11070795>
22. Kakimzhanov D, Rakhadilov Bauyrzhan, Tyurin Yu.N., Zhurerova L.G.. (2021). Influence of pulsed plasma treatment on phase composition and hardness of Cr₃C₂-NiCr coatings. Eurasian j. phys. funct. mater. 5: 45–51. <https://doi.org/10.32523/ejpfm.2021050106>
23. Gabriela Strnad, Laszlo Jakab-Farkas (2014) Improving the Accuracy of Low-load Vickers Microhardness Testing of Hard Thin Films. Procedia Technol. 12: 289–294. <https://doi.org/10.1016/j.protcy.2013.12.488>
24. Lin-dong WANG, Min LI, Tai-hua ZHANG, Nai-gang LIANG (2003). Hardness Measurement and Evaluation of Thin Film on Material Surface. Chinese J. Aeronaut. 16: 52–58. [https://doi.org/10.1016/S1000-9361\(11\)60171-4](https://doi.org/10.1016/S1000-9361(11)60171-4)
25. Bauyrzhan Rakhadilov, Meruyert Maulet, Madi Abilev, Zhuldyz Sagdoldina, Rauan Kozhanova (2021). Structure and Tribological Properties of Ni–Cr–Al-Based Gradient Coating Prepared by Detonation Spraying. Coatings 11: 218(1–13). <https://doi.org/10.3390/coatings11020218>
26. Xiuying Yang, Yuebo Zhou, Mingyu Zhao, Pai Liu, Hualong Qi, Yufang Yang (2023). Impact of Al nanoparticles upon the microstructure and wear properties of Ni-Cr-Al nanocomposite coatings. J of the Ind Chem Soc 100(1):100822. <https://doi.org/10.1016/j.jics.2022.100822>

Д.К. Ескермесов¹, Б.К. Рахадиллов^{2,3}, Ж.Т. Төлеуханова^{*1}, С. Пазылбек⁴, А.С. Ескермесова²

¹КЕАҚ «Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті»,
Өскемен, Қазақстан

²КЕАҚ «Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті», Өскемен, Қазақстан

³ЖШС «PlasmaScience», Өскемен, Қазақстан

⁴Жұмабек Ахметұлы Тәшенев атындағы Университет, Шымкент, Қазақстан

Импульсті плазмалық өңдеу (PPT) әдісімен Ni-Cr-Al негізіндегі алынған (DS) жабындардың беттік модификациясы

Андатпа. Материалдарды абразивті коррозиядан қорғау үшін әр түрлі термиялық бүрку әдістерін қолдануға болады, мысалы, ұнтақты газ жалынымен бүрку, плазмалық бүрку, тұндыру

және балқыту, жоғары жылдамдықты оттегі-газ бүрку және детонациялық бүрку. Термиялық бүрку материалды тозудан және коррозиядан қорғаудың ең тиімді әдістерінің бірі болып табылады, осылайша материалдың қызмет ету мерзімін ұзартады. Бұл мақалада плазмалық генераторды қолдана отырып, импульсті плазмалық өңдеу әдісімен Ni-Cr-Al негізіндегі жабындардың бетінің өзгеруі келтірілген. Жабындар детонациялық бүрку (DS) әдісімен алынды, содан кейін импульсті плазмалық өңдеу (PPT) өтті. Плазмалық ағынның әсерінен жабындардың құрылымдық-фазалық күйінің өзгеруі зерттелді. Жұмыста сканерлеуші электронды микроскопия (SEM), рентгендік энергиялық дисперсиялық спектроскопия (EDX), рентгендік құрылымдық талдау (XRD), беттің кедір-бұдырлық сипаттамасы, қаттылық сынақтары және детонациялық Ni-Cr-Al жабындарының сипаттамаларының өзгеруін кешенді талдау үшін трибологиялық сынақтар қолданылды. Импульсті плазмалық өңдеумен жабындардың беткі модификациясы олардың беткі қабатының тозуға төзімділігінің жоғарылауына әкелетіні көрсетілген үйкеліс коэффициентінің төмендеуі және микроқаттылықтың жоғарылауымен сипатталады. Рентгендік фазалық талдау нәтижелеріне сәйкес, алынған беттердің трибомеханикалық қасиеттерінің жақсаруы өңделген жабындардағы CrNi₃, NiAl және NiCr фазаларының жоғарылауымен байланысты.

Түйін сөздер: жабын, термиялық бүрку, детонациялық бүрку, импульсті плазмалық өңдеу, үйкеліс коэффициенті, кедір-бұдырлығы, микроқаттылық.

D.K. Yeskermessov¹, B.K. Rakhadilov², Zh.T. Toleukhanova^{*1}, S. Pazylbek³, A.S. Yeskermessova²

¹NJSC «D. Serikbayev East Kazakhstan technical university», Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

²NJSC «Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University», Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

³LLP «PlasmaScience», Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

⁴Zhumabek Tashenev University, Shymkent, Kazakhstan

Surface modification of (DS) coatings based on Ni-Cr-Al by pulsed plasma treatment (PPT) method

Abstract. To safeguard materials against abrasive corrosion, various thermal spraying techniques can be employed, including powder spraying with a gas flame, plasma spraying, deposition and melting, high-speed oxygen-gas spraying, and detonation spraying. Thermal spraying is highly effective for protecting materials from wear and corrosion, thus extending their service life. This article discusses the changes in the surface of Ni-Cr-Al coatings subjected to pulsed plasma treatment using a plasma generator. The coatings were initially applied via detonation spraying (DS) and then underwent pulsed plasma treatment (PPT). The study investigates alterations in the structural and phase states of the coatings under plasma exposure. A comprehensive analysis of the detonation Ni-Cr-Al coatings' characteristics was conducted using scanning electron microscopy (SEM), X-ray energy dispersive spectroscopy (EDX), X-ray diffraction (XRD), surface roughness measurements, hardness tests, and tribological assessments. The findings indicate that pulsed plasma treatment enhances the wear resistance of the coatings' surface layer by reducing the coefficient of friction and increasing microhardness. X-ray phase analysis reveals that the improved tribomechanical properties of the treated surfaces are linked to an increased presence of CrNi₃, NiAl, and NiCr phases in the coatings.

Keywords: coating, thermal spraying, detonation spraying, pulsed plasma treatment, coefficient of friction, roughness, microhardness.

Сведения об авторах:

Ескермесов Д.К. – доктор PhD, ассоциированный профессор Центра физики, ведущий научный сотрудник Международной Школы инженерии НАО «Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева», ул. Серикбаева, 19, 070004, Усть-Каменогорск, Казахстан.

Рахадиллов Б.К. – доктор PhD, ассоциированный профессор, Член правления- проректор по научной работе НАО «Восточно-Казахстанский университет имени Сарсена Аманжолова», ул.30-ой Гвардейской дивизии,34, 070002, Усть-Каменогорск, Казахстан.

Толеуханова Ж.Т. – автор для корреспонденции,руководитель проекта, постдокторант по проекту «Жас ғалым» 2024-2026, НАО «Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева», ул. Серикбаева, 19, 070004, Усть-Каменогорск, Казахстан.

Пазылбек С. – доктор PhD, ассоциированный профессор,заведующий кафедрой “Математика и информатика”, Университет имени Жумабека Ахметулы Ташенева, проспект Кунаева, 21, 160012, Шымкент, Казахстан.

Ескермесова А.С. – магистр естественных наук по специальности «Физика», научный сотрудник ТОО «PlasmaScience», ул. Гоголя, 7г, 070018, Усть-Каменогорск, Казахстан.

Yeskermessov D.K. – PhD, Associate Professor at the Center of Physics, Leading Researcher at the International School of Engineering of the NJSC "D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University", 19 Serikbayev str., 070004, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Rakhadilov B.K. – PhD, Associate Professor, Member of the Board - Vice-Rector for Scientific Work of NJSC Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, 34 30th Guards Division str., 070002, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Toleukhanova Zh.T. – correspondence author, project manager, postdoctoral fellow on the project "Zhas galim" 2024-2026, NJSC "D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University", 19 Serikbayev str., 070004, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Pazylbek S. – PhD, Associate Professor,Head of the Department of "Mathematics and Informatics", Tashenev University, Kunaev Avenue 21, 160012, Shymkent, Kazakhstan

Yeskermessova A.S. – Master of Natural Sciences in Physics, Researcher at PlasmaScience LLP, 7g Gogol str., 070018, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Ескермесов Д.К. – PhD докторы, физика орталығының қауымдастырылған профессоры, Халықаралық Инженерия Мектебінің жетекші ғылыми қызметкері КЕАҚ «Д. Серікбаев ат. Шығыс Қазақстан техникалық университеті», Серікбаев көшесі 19, 070004, Өскемен, Қазақстан

Рахадиллов Б.К. – PhD докторы, қауымдастырылған профессор, Басқарма мүшесі – ғылыми жұмыс жөніндегі іпроректоры КЕАҚ «Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті», 30-шы Гвардиялық дивизия көшесі, 34, 070002, Өскемен, Қазақстан

Төлеуханова Ж.Т. – хат-хабар авторы, жоба жетекшісі, «Жас ғалым» жобасы бойынша постдокторант 2024-2026, КЕАҚ «Д. Серікбаева ат. Шығыс Қазақстан техникалық университеті», Серікбаев көшесі 19, 070004, Өскемен, Қазақстан

Пазылбек С. – PhD докторы, қауымдастырылған профессор, математика және информатика кафедрасының меңгерушісі, Жұмабек Ахметұлы Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

Ескермесова А.С. – “Физика” мамандығы бойынша жаратылыстану ғылымдарының магистрі, “PlasmaScience” ЖШС ғылыми қызметкері, Гоголь көшесі 7г, 070018, Өскемен, Қазақстан



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 29.19.03
scientific article

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-148-3-117-125>

Reanalysis of $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ elastic scattering angular distributions within various interaction potentials

Sh. Hamada¹ 

¹Faculty of Science, Tanta University, Tanta, Egypt

(E-mail: sh.m.hamada@science.tanta.edu.eg)

Abstract: The angular distributions (ADs) for ^{20}Ne elastically scattered from a ^{24}Mg target were measured experimentally many years ago at $E_{\text{lab}} = 50\text{--}100$ MeV. Unfortunately, these data received little attention and were analyzed only from a phenomenological perspective at that time. This work is essentially devoted to investigating these data from a microscopic point of view, with a special interest given to the probable $\alpha + ^{16}\text{O}$ cluster structure of the ^{20}Ne nucleus. The considered data are fairly well reproduced by the implemented potentials. The study demonstrated the success of the proposed $\alpha + ^{16}\text{O}$ cluster model of the ^{20}Ne nucleus in reproducing the considered $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ ADs over a wide range of energies.

Keywords: Density distributions, Elastic scattering, Optical potential, Cluster folding, Brazilian Nuclear potential.

Received 29.08.2024. Revised 04.09.2024. Accepted 05.09.2024. Available online 30.09.2024

Introduction

The traditional view of the nucleus is that it has a uniform distribution of neutrons and protons. However, from the early days of nuclear research, it has been recognized that nucleon clusters, or nuclear clustering, might be crucial for a deeper understanding of nuclear interactions and structure. In the 1950s, Morinaga [1] made a bold prediction that alpha particles could align linearly. He suggested that cluster structures would not be present in the ground state of a nucleus but would emerge as the internal energy of the nucleus increased. Thus, a nucleus needs a certain amount of energy to develop a cluster structure, with these structures becoming evident near or just below the cluster decay threshold energy. Ikeda et al. [2] expected that the cluster structure would become most pronounced at excitation energy (E_x) corresponding to specific decay thresholds.

Experimental evidence supporting the concept of clusterization in light nuclei is detailed in M. Freer's work [3]. A clear example is the two alpha-particle system in ^8Be , where the strong

alpha-particle binding energy (~ 28 MeV) implies that ${}^6\text{Li}$ and ${}^7\text{Li}$ nuclei are likely to form $\alpha + \text{d}$ and $\alpha + \text{t}$ cluster structures, respectively. The Hoyle state in ${}^{12}\text{C}$, observed at $E_x = 7.65$ MeV, is an exemplary cluster state. Hoyle [4] had predicted this state to explain the cosmic abundance of carbon, and Cook [5] detected it at an energy very close to Hoyle's prediction.

The ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ system is particularly intriguing and could provide valuable insights for extracting spectroscopic factors for the ${}^{20}\text{Ne} \rightarrow {}^{16}\text{O} + \alpha$ and ${}^{24}\text{Mg} \rightarrow {}^{20}\text{Ne} + \alpha$ configurations. However, only a few studies [6, 7] have investigated this system, and these studies used predominantly phenomenological approaches. In Ref. [6], angular distributions (ADs) for the ${}^{24}\text{Mg} ({}^{20}\text{Ne}, {}^{20}\text{Ne}) {}^{24}\text{Mg}$ at $E_{\text{lab}} = 50\text{--}100$ MeV were measured in the angular range $10^\circ < \theta_{\text{c.m.}} < 75^\circ$. These data were described using optical model potentials (OMPs). Reduced absorption and α -cluster transfer were discussed theoretically but not observed experimentally at this energy range. Volume integrals and total reaction cross-sections for the potentials were also determined. Ref. [7] involved measurements of ADs for a ${}^{20}\text{Ne}$ ion beam at 40 MeV elastically scattered from a ${}^{24}\text{Mg}$ target. The measured ADs exhibited oscillations associated with the ${}^{24}\text{Mg} ({}^{20}\text{Ne}, {}^{24}\text{Mg}) {}^{20}\text{Ne}$ reaction. An α -spectroscopic factor (SF) of 0.08 ± 0.02 was derived from the analysis, considering the coherent sum of scattering amplitudes from elastic scattering and α -transfer.

In a previous study [8], the ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ ADs were analyzed using the São Paulo potential (SPP2) and a cluster folding potential (CFP). The latter was generated based on available phenomenological OMPs for the $\alpha + {}^{24}\text{Mg}$ and ${}^{16}\text{O} + {}^{24}\text{Mg}$ channels. In the current study, the ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ ADs are reanalyzed using a microscopic CFP and the Brazilian Nuclear Potential (BNP), which is independent of both projectile energy and relative velocity. The CFP used in this study was generated from microscopic $\alpha + {}^{24}\text{Mg}$ and ${}^{16}\text{O} + {}^{24}\text{Mg}$ potentials, rather than the phenomenological ones used in Ref. [8].

Overall, the concept of clusterization offers a valuable framework for understanding complex nuclear systems and enhances our knowledge of nuclear physics. This work focuses on exploring the probable $\alpha + {}^{16}\text{O}$ structure model of ${}^{20}\text{Ne}$ nucleus and its ability to reproduce the ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ ADs across a broad energy range within this model. The manuscript is organized as follows: Section II presents the potentials used, Section III covers the analyses and discussion of the results, and Section IV provides a summary and conclusions.

Implemented theoretical methods

The available experimental ADs data for ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ system at $E_{\text{lab}} = 50, 60, 80, 90$, and 100 MeV [6] are initially reanalyzed using the BNP, which incorporates the density distributions of the interacting nuclei. Then, the full microscopic cluster folding potential (CFP) is employed to evaluate the accuracy of reproducing the ${}^{20}\text{Ne} + {}^{24}\text{Mg}$ data using the $\alpha + {}^{16}\text{O}$ model for ${}^{20}\text{Ne}$, a model that has previously demonstrated significant success in describing various nuclear systems induced by ${}^{20}\text{Ne}$ [8–10].

BNP

To eliminate parameter ambiguities associated with OMP calculations, the more microscopic Brazilian Nuclear potential (BNP) was employed to generate the real part of the potential. This was done by folding the projectile (ρ_p) and target (ρ_t) density distributions, obtained from the Dirac-Hartree-Bogoliubov model [11], with an effective potential. Recently, L.C. Chamon et al. [12] suggested two models for the nuclear potential between interacting nuclei: the São Paulo potential (SPP2), which depends on the relative velocity of the nuclei, and the BNP, which is independent of both projectile energy and relative velocity. The effective nucleon-nucleon (NN) interactions for the SPP2 and BNP are given by the following formulas:

$$v_{NN}^{SPP2}(R) = -U_o e^{(-\frac{R}{a})^2} e^{(-\frac{4v^2}{c^2})} \quad (1)$$

with $U_o = 735.813$ MeV, $a = 0.5$ fm, v representing the relative velocity between the interacting nuclei, and c being the speed of light.

$$v_{NN}^{BNP}(R) = -U_o e^{(-\frac{R}{a})^2} \quad (2)$$

with $U_o = 87.226$ MeV and $a = 0.95$ fm.

Data optimization was performed by minimizing the χ^2 value, which quantifies the discrepancy between the data and the theoretical results. The calculations and parameter optimization were carried out using the **FRESCO** and **SFRESCO** code [13]. It is worth noting that in a previous study [8], these ADs data for the $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ system were analyzed within the SPP2 potential. Therefore, it is of interest to compare the SPP2 and BNP potentials in reproducing the considered data.

CFP

The study advances by aiming to match the experimental data for the elastic scattering of $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ ADs using a cluster folding model (CFM). This approach is inspired by the $\alpha + ^{16}\text{O}$ cluster structure in the ground state of the ^{20}Ne . In the CFM framework, both the real and imaginary components of the potential are developed using the cluster folding technique. To conduct the calculations for the $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ system, it is essential to establish the potentials for the $\alpha + ^{24}\text{Mg}$ and $^{16}\text{O} + ^{24}\text{Mg}$ channels as well as the binding potential for the $\alpha + ^{16}\text{O}$ configuration in the ^{20}Ne nucleus. The real and imaginary components of the $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ potential are derived from these $\alpha + ^{24}\text{Mg}$ and $^{16}\text{O} + ^{24}\text{Mg}$ potentials as follows:

$$V^{CF}(\mathbf{R}) = \int \left[V_{\alpha + ^{24}\text{Mg}}\left(\left|\mathbf{R} - \frac{4}{5}\mathbf{r}\right|\right) + V_{^{16}\text{O} + ^{24}\text{Mg}}\left(\left|\mathbf{R} + \frac{1}{5}\mathbf{r}\right|\right) \right] |\chi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (3)$$

$$W^{CF}(\mathbf{R}) = \int \left[W_{\alpha-^{24}\text{Mg}}\left(\mathbf{R} - \frac{4}{5}\mathbf{r}\right) + W_{^{16}\text{O}-^{24}\text{Mg}}\left(\mathbf{R} + \frac{1}{5}\mathbf{r}\right) \right] |\chi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (4)$$

where $V_{\alpha-^{24}\text{Mg}}$, $V_{^{16}\text{O}-^{24}\text{Mg}}$, $W_{\alpha-^{24}\text{Mg}}$, and $W_{^{16}\text{O}-^{24}\text{Mg}}$ are the potentials for $\alpha+^{24}\text{Mg}$ and $^{16}\text{O}+^{24}\text{Mg}$ channels, which reproduce the experimental data at $E_\alpha \approx 1/5 E_{Ne}$ and $E^{16}\text{O} \approx 4/5 E_N$ prepared within the BNP using standard normalizations of 1.0 and 0.78 for the real and imaginary potential parts, respectively. The term is the intercluster wave function for the relative motion of α and ^{16}O in the ground state of ^{20}Ne , and is the relative coordinate between the centers of mass of α and ^{16}O . The bound state form factor $\alpha + ^{16}\text{O}$ represents a $5S$ state, is taken from Ref. [14]. The real and imaginary components of the cluster folding potential used in the current work are illustrated in Fig. 1.

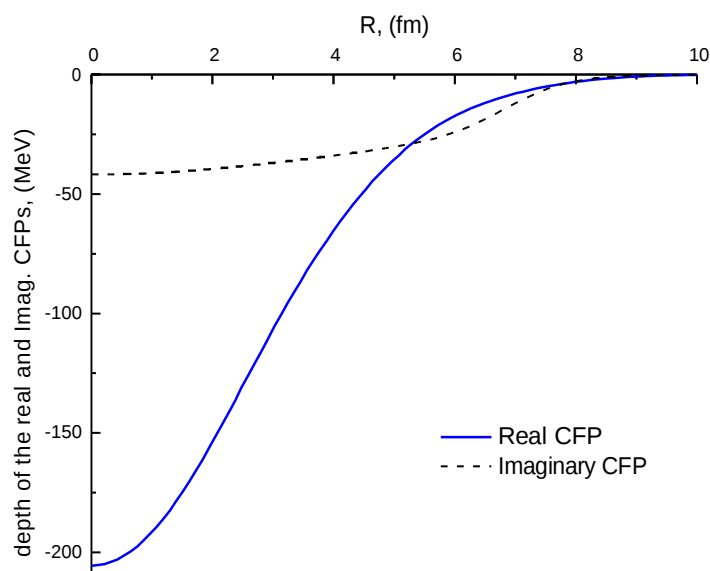


Fig. 1: The real and imaginary CFPs for the $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ system

Results and Discussions

$^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ data analysis using BNP

As depicted in Fig. 2, the experimental ADs for $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ are compared with theoretical calculations using a real BNP component and an imaginary potential, which is a factor multiplied by the real BNP. This approach, referred to as BNP Real + BNPIImag, involves fitting the data with two adjustable parameters: N_R and N_I , which are normalization factors for the real and imaginary BNP strengths. The optimal extracted parameters using this method are listed in Table I. The total potential is expressed as follows:

$$U(R) = V_C(R) - N_R V^{BNP}(R) - i N_I V^{BNP}(R) \quad (5)$$

The agreement between the data and theoretical calculations is generally good across the entire angular range, as shown in Fig. 2, using the potential parameters listed in Table I. The data is well fitted using an average extracted N_R and N_I values are 0.74 ± 0.14 and 0.75 ± 0.1 , respectively, which are close to the previously extracted values 0.87 ± 0.18 and 0.75 ± 0.1 from previous analysis [8] within SPP2. The experimental angular distribution reveals a Coulomb-nuclear interference peak, which shifts toward smaller scattering angles as the bombarding energy increases.

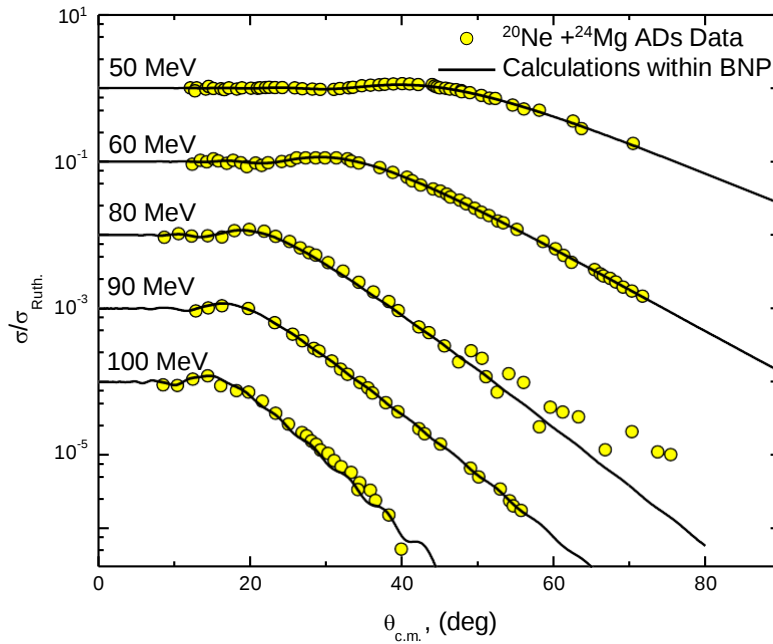


Fig. 2: Comparison between $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ ADs and calculations within BNP at $E_{lab} = 50\text{--}100$ MeV

$^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ data analysis using CFM

As illustrated in Fig. 3, the comparison between the experimental ADs for the $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ system and the theoretical calculations using CFP model is quite accurate when employing the optimal extracted parameters listed in Table I. In this analysis, the data is fitted using two parameters N_R and N_I , which represent the normalization factors for the real and imaginary parts of the CFP, as shown in Fig. 1. The total potential is described by the following form:

$$U(R) = V_C(R) - N_R V^{CFP}(R) - i N_I V^{CFP}(R) \quad (6)$$

The average values extracted for N_R and N_I within the CFP model are 0.81 ± 0.09 and 0.86 ± 0.38 , respectively. While those extracted from previous study [8] are 0.61 ± 0.08 and 1.46 ± 0.26 .

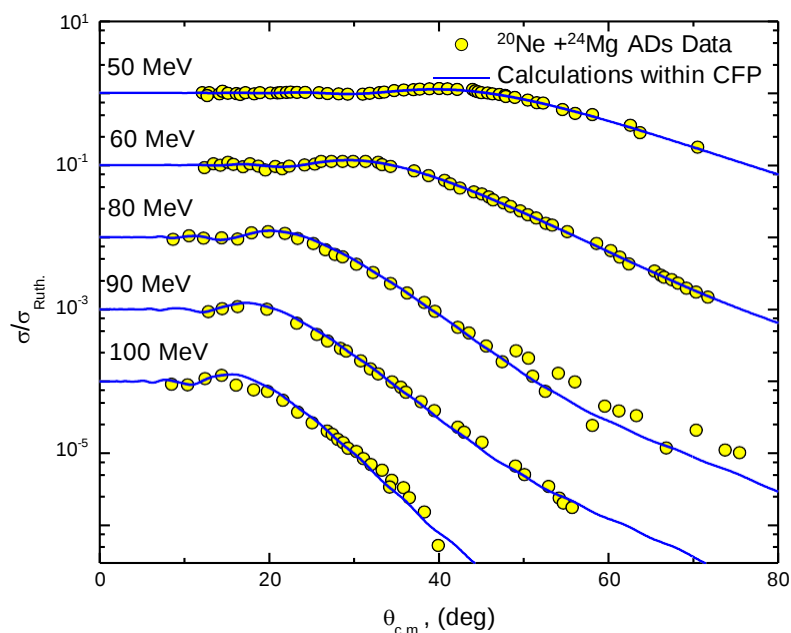


Fig. 3: Comparison between $^{20}\text{Ne}+^{24}\text{Mg}$ ADs and calculations within CFP at $E_{\text{lab}} = 50\text{-}100$ MeV

Table I: Optimal potential parameters for $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ system at different energies extracted from the analyses within BNP and CFP

E_{lab} (MeV)	Model	N_R	N_I	χ^2/N
50	BNP	0.57	0.60	0.11
	CFP	0.79	1.26	0.08
60	BNP	0.69	0.74	0.19
	CFP	0.97	1.28	0.20
80	BNP	0.81	0.86	5.95
	CFP	0.79	0.64	4.85
90	BNP	0.67	0.83	0.18
	CFP	0.77	0.66	1.42
100	BNP	0.94	0.703	4.31
	CFP	0.75	0.45	4.30

Summary

In summary, the angular distributions for elastic scattering of stable ^{20}Ne a ^{24}Mg target at energies ranging from 50 to 100 MeV show a classical Fresnel diffraction scattering pattern, asdepicted in Figs. 2 and 3. However, a distinct deviation from this pattern is observed in

the case of elastic scattering involving weakly-bound nuclei, such as ^{11}Be one-neutron halo nucleus [15], when interacting with different targets like ^{64}Zn [16], ^{120}Sn [17], ^{197}Au [18], and ^{209}Bi [19]. These interactions exhibit significant suppression of the Fresnel peak due to the break-up effects. Theoretical calculations within CFM, which is based on the $\alpha + ^{16}\text{O}$ cluster structure for ^{20}Ne , successfully reproduce the considered data, providing evidence supporting this proposed structural model for the ^{20}Ne nucleus.

References

1. H. Morinaga. Interpretation of Some of the Excited States of 4n Self-Conjugate Nuclei // Phys. Rev. 101, 254 (1956), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.101.254>.
2. K. Ikeda, N. Tagikawa, and H. Horiuchi. The Systematic Structure-Change into the Molecule-like Structures in the Self-Conjugate 4n Nuclei // Prog. Theo. Phys. Suppl. E68, 464-475 (1968), DOI: <https://doi.org/10.1143/PTPS.E68.464>.
3. M. Freer. The clustered nucleus-cluster structures in stable and unstable nuclei // Reports on Progress in Physics 70, 2149 (2007), DOI: [10.1088/0034-4885/70/12/R03](https://doi.org/10.1088/0034-4885/70/12/R03)
4. F. Hoyle. On Nuclear Reactions Occuring in Very Hot STARS.I. the Synthesis of Elements from Carbon to Nickel // Astrophys.J.Suppl. 1, 121-146 (1954), DOI: [10.1086/190005](https://doi.org/10.1086/190005)
5. C. Cook, W. A. Fowler and T. Lauritsen. 12B, 12C, and the Red Giants // Phys. Rev. 107, 508 (1957), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.107.508>
6. P. Belery, Th. Delbar, Gh. Grégoire, K. Grotowski, N. S. Wall, T. Kozik, and S. Micek. Elastic scattering of $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ at $E_{\text{lab}} = 50, 60, 80, 90$, and 100 MeV // Phys. Rev. C 23, 2503 (1981), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.23.2503>
7. W. J. Naudé, H. S. Bradlow, O. Dietzsch, A. A. Pilt, W. D. M. Rae and D. Sinclair. Elastic scattering of ^{20}Ne on ^{24}Mg // Z. Phys. A - Atoms and Nuclei 311, 297-302 (1983), DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01415684>
8. Sh. Hamada, A.H. Al-Ghamdi, Arafa A. Alholaisi, Awad A. Ibraheem, N. Amangeldi, Y. Abdou. Analysis of elastic scattering of ^6Li and ^{20}Ne from ^{24}Mg nucleus using microscopic potentials // Int.J.Mod.Phys.E 32, 2350015 (2023), DOI: [10.1142/S0218301323500155](https://doi.org/10.1142/S0218301323500155)
9. Sh. Hamada, N. Keeley, K. W. Kemper and K. Rusek. Cluster folding analysis of $^{20}\text{Ne} + ^{16}\text{O}$ elastic transfer // Phys. Rev. C 97, 054609 (2018), DOI: [10.1103/PhysRevC.97.054609](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.97.054609)
10. Sh. Hamada, Nourhan M. Elmedalaa, I. Bondouk, N. Darwish, Awad A. Ibraheem. Role of α -Cluster Transfer in the Formation of $^{20}\text{Ne} + ^{16}\text{O}$ Cross-Sections at Backward Angles // Braz.J.Phys. 51, 780-787 (2021) 3, DOI: [10.1007/s13538-021-00900-z](https://doi.org/10.1007/s13538-021-00900-z)
11. B. V. Carlson and D. Hirata. Dirac-Hartree-Bogoliubov approximation for finite nuclei // Phys. Rev. C 62, 054310 (2000), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.62.054310>
12. L. C. Chamon, B. V Carlson, and L. R. Gasques. São Paulo potential version 2 (SPP2) and Brazilian nuclear potential (BNP) // Comput. Phys. Commun. 267, 108061 (2021), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108061>
13. I. J. Thompson. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics // Comput. Phys. Rep. 7, 167 (1988), DOI: [https://doi.org/10.1016/0167-7977\(88\)90005-6](https://doi.org/10.1016/0167-7977(88)90005-6)
14. B. Buck, J. C. Johnston, A. C. Merchant, S. M. Perez. Unified treatment of scattering and cluster structure in α -closed shell nuclei: ^{20}Ne and ^{44}Ti // Phys. Rev. C 52, 1840 (1995), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.1840>

15. T. Aumann, A. Navin, D. P. Balamuth, D. Bazin, B. Blank, B. A. Brown, J. E. Bush, J. A. Caggiano, B. Davids, T. Glasmacher, V. Guimarães, P. G. Hansen, R. W. Ibbotson, D. Karnes, J. J. Kolata, V. Maddalena, B. Pritychenko, H. Scheit, B. M. Sherrill, J. A. Tostevin. One-Neutron Knockout from Individual Single-Particle States of ^{11}Be // Phys. Rev. Lett. 84, 35 (2000), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.35>
16. Di Pietro, V. Scuderi, A. M. Moro, L. Acosta, F. Amorini, M. J. G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L. M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M. G. Pellegriti, F. Perez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A. Maira Vidal, D. Voulot, F. Wenander, M. Zadro. Experimental study of the collision $^{11}\text{Be} + ^{64}\text{Zn}$ around the Coulomb barrier // Phys. Rev. C. 85, 054607 (2012), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.85.054607>
17. L. Acosta, M. A. G. Alvarez, M. V. Andres, M. J. G. Borge, M. Cortes, J. M. Espino, D. Galaviz, J. Gomez-Camacho, A. Maira, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, F. Perez-Bernal, E. Reillo, D. Rodriguez, K. Rusek, A. M. Sanchez-Benitez, O. Tengblad. Signature of a strong coupling with the continuum in $^{11}\text{Be} + ^{120}\text{Sn}$ scattering at the Coulomb barrier // Eur. Phys. J. A42, 461–464 (2009), DOI: [10.1140/epja/i2009-10822-6](https://doi.org/10.1140/epja/i2009-10822-6)
18. V. Pesudo, M. J. G. Borge, A. M. Moro, J. A. Lay, E. Nácher, J. Gómez-Camacho, O. Tengblad, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, C. Andreoiu, P. C. Bender, R. Braid, M. Cubero, A. Di Pietro, J. P. Fernández-García, P. Figuera, M. Fisichella, B. R. Fulton, A. B. Garnsworthy, G. Hackman, U. Hager, O. S. Kirsebom, K. Kuhn, M. Lattuada, G. Marquínez-Durán, I. Martel, D. Miller, M. Moukaddam, P. D. O'Malley, A. Perea, M. M. Rajabali, A. M. Sánchez-Benítez, F. Sarazin, V. Scuderi, C. E. Svensson, C. Unsworth, and Z. M. Wang. Scattering of the Halo Nucleus ^{11}Be on ^{197}Au at Energies around the Coulomb Barrier // Phys. Rev. Lett. 118, 152502 (2017), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.152502>
19. M. Mazzocco, C. Signorini, M. Romoli, R. Bonetti, A. De Francesco, A. De Rosa, M. DiPietro, L. Fortunato, T. Glodariu, A. Guglielmetti, G. Inglima, T. Ishikawa, H. Ishiyama, R. Kanungo, N. Khai, S. Jeong, M. La Commara, B. Martin, H. Miyatake, T. Motobayashi, T. Nomura, D. Pierrousakou, M. Sandoli, F. Soramel, L. Stroe, I. Sugai, M. H. Tanaka, E. Vardaci, Y. Watanabe, A. Yoshida, K. Yoshida. Elastic scattering for the system $^{11}\text{Be} + ^{209}\text{Bi}$ at Coulomb barrier energies // Eur. Phys. J. Special Topics 150, 37–40 (2007), DOI: [10.1140/epjst/e2007-00260-2](https://doi.org/10.1140/epjst/e2007-00260-2)

Ш. Хамада

Факультет естественных наук, Университет Танта, Танта, Египет
(E-mail: sh.m.hamada@science.tanta.edu.eg)

Повторный анализ угловых распределений упругого рассеяния $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ в различных потенциалах взаимодействия

Аннотация. Угловые распределения (УР) для упруго рассеянного ^{20}Ne от мишени ^{24}Mg были измерены экспериментально много лет назад при $E_{\text{lab}} = 50\text{--}100$ МэВ. К сожалению, эти данные получили мало внимания и были проанализированы только с феноменологической точки зрения в то время. Эта работа в основном посвящена исследованию этих данных с микроскопической точки зрения, при этом особый интерес уделяется вероятной кластерной структуре $\alpha + ^{16}\text{O}$ ядра ^{20}Ne . Рассмотренные данные достаточно хорошо воспроизводятся

реализованными потенциалами. Исследование продемонстрировало успешность предложенной кластерной модели $\alpha + ^{16}\text{O}$ ядра ^{20}Ne в воспроизведении рассматриваемых $\text{AD}^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ в широком диапазоне энергий.

Ключевые слова: распределение плотности, упругое рассеяние, оптический потенциал, кластерное соединение, Бразильский ядерный потенциал.

Номер(а) PACS: «21.10.Jx, 21.60.Cs, 24.10.Eq, 25.70.Hi»

Ш. Хамада

Жаратылыстану факультеті, Танта университеті, Танта, Египет
(E-mail: sh.m.hamada@science.tanta.edu.eg)

Әртүрлі өзара әрекеттесу потенциалдарында $^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ серпімді шашыраудың бұрыштық үлестірімдерін қайта талдау

Аңдатпа. ^{24}Mg нысанасынан серпімді шашыраңқы ^{20}Ne үшін бұрыштық үлестірулер (y) көптеген жылдар бұрын $E_{\text{lab}} = 50\text{-}100$ МэВ кезінде эксперименталды түрде өлшенді. Өкінішке орай, бұл мәліметтерге назар аударылды және сол кезде тек феноменологиялық тұрғыдан талданды. Бұл жұмыс негізінен осы деректерді микроскопиялық тұрғыдан зерттеуге бағытталған, ^{20}Ne ядросының $\alpha + ^{16}\text{O}$ кластерлік құрылымына ерекше қызығушылық танытады. Қарастырылған деректер іске асырылған әлеуеттермен жақсы ойнатылады. Зерттеу ұсынылған $\alpha + ^{16}\text{O}$ ^{20}Ne ядросының кластерлік моделінің қарастырылып отырған $\text{ad}^{20}\text{Ne} + ^{24}\text{Mg}$ -ді кең энергия диапазонында ойнаудағы сәттілігін көрсетті.

Түйін сөздер: тығыздықтың таралуы, серпімді шашырау, оптикалық потенциал, кластерлік байланыс, бразилиялық ядролық потенциал

Information about authors:

Sh. Hamada – corresponding author, Faculty of Science, Tanta University, Tanta, Egypt

Сведения об авторах:

Ш. Хамада – автор для корреспонденции, Факультет естественных наук, Университет Танта, Танта, Египет.

Авторлар туралы мәліметтер:

Ш. Хамада – корреспондент автор, Жаратылыстану ғылымдары факультеті, Танта университеті, Танта, Египет



Copyright: © 2024 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

Бас редакторы: К.Ш. Жумадилов
Компьютерде беттеген: Д. Нурушева

Авторларға арналған нұсқаулықтар,
жарияланым этикасы журнал сайтында берілген: <http://bulphysast.enu.kz>

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
Физика. Астрономия сериясы.
3(148)/2024 – Астана: ЕҰУ. – 126 б.
Шартты б.т. – 13,8. Таралымы – сұраныс бойынша
Басуға қол қойылды: 30.09.2024 ж.
Ашық қолданыстағы электронды нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz>

Мазмұнына типография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы: 010008, Қазақстан Республикасы Астана қ., Сәтбаев көшесі, 2.
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті Тел.: +7(71-72) 70-95-00 (ішкі 31-410)
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды.