

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

№4(149)/ 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 Курчатова 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, Turkiye
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
Луцник 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

- Б.Б.Абдуалиев, Ф.У.Абуова, Б.М.Сатанова, А.У.Абуова, Г.Д.Кабдрахимова.** Қазақстандағы ядролық медицина үшін 2024 жылғы ұлттық диагностикалық анықтамалық деңгейлер негізінде 18F-FDG ПЭТ/КТ инъекциялық дозасын оңтайландыру..... 8
- B.V.Abdualiev, F.U.Abuova, B.M.Satanova, A.U.Abuova, G.D.Kabdrakhimova, R.N. Assylbayev** Optimization of the injection dose of PET/CT 18F-FDG for nuclear medicine in Kazakhstan based on the national diagnostic reference levels of 2024.....
- Б.Б.Абдуалиев, Ф.У.Абуова, Б.М.Сатанова, А.У.Абуова, Г.Д.Кабдрахимова.** Оптимизация инъекционной дозы пэт/кт 18f-fdg для ядерной медицины в казахстане на основе национальных диагностических эталонных уровней 2024 года..... 8
- Р.Н. Асылбаев, А.К. Сейтханова, А.А. Кисабекова, Е.К. Жетписбаев.** Хе₁₃₂ ауыр иондарымен сәулеленген CaF₂ монокристалдарындағы индукцияланған оптикалық жұтылу-дың температуралық күйдірілуін және құрылымдық бұзылыстарды зерттеу.....
- R. Assylbayev, A. Seitkhanova, A.Kissabekova, E. Zhetpisbayev.** Study of temperature annealing induced optical absorption and structural disorder in CaF₂ single crystals irradiated with He₁₃₂ heavy ions.....
- Р.Н. Асылбаев, А.К. Сейтханова, А.А. Кисабекова, Е.К. Жетписбаев.** Исследование температурного отжига индуцированного оптического поглощения и структурной разупорядоченности в монокристаллах CaF₂, облученных тяжелыми ионами Хе₁₃₂..... 22
- Д.С. Ергалиев, Д.С. Ким, М. Ш. Шинжирбеков, Д.М. Калманова, О.К. Абдирашев** Атом қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажын иондаушы сәулеленуден биологиялық қорғау.....
- D.S. Ergaliev, D.S. Kim, M. Sh. Shinzhirbekov, D.M. Kalmanova, O.K. Abdirashev.** Biological protection of the flight crew of a nuclear-powered aircraft from ionizing radiation.....
- Д.С. Ергалиев, Д.С. Ким, М.Ш. Шинжирбеков, Д.М. Калманова, О.К. Абдирашев** Биологическая защита летного экипажа воздушного судна с атомным двигателем от ионизирующего излучения..... 36
- Б. Ержанов, А.М. Балагуров, Б. Мұхаметұлы, Н.Ю. Самойлова, С.В. Сумников, В.В. Палачева, И.С. Головин.** Fe-Ga-RE үштік қорытпаларындағы құрылымдар мен фазалық ауысуларды нейтрондық дифракциялық зерттеулер (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb) ...
- Б. Ержанов, А.М. Балагуров, Б. Мухаметулы, Н.Ю. Самойлова, С.В. Сумников, В.В. Палачева, И.С. Головин.** Нейтронные дифракционные исследования структур и фазовых переходов в тройных сплавах Fe-Ga-RE (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb).....
- V. Yerzhanov, A. M. Balagurov, B. Mukhametuly, N.Yu. Samoylova, S.V. Sumnikov, V.V. Palacheva, I.S. Golovin.** Neutron diffraction studies of structures and phase transitions in ternary Fe-Ga-RE alloys (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb)..... 52

С.К.Тлеуқенов, К.Н.Балабеков, З.К.Жалғасбекова. Моноклиндік анизотропияның жартмылай жабық жазық толқынындағы ТЕ және ТМ толқындарының дисперсия теңдеулері.....	
S.K. Tleukenov, K.N.Balabekov, Z.K. Zhalgasbekova. The equations of dispersion of TE and TM waves in a semi-closed plane waveguide of monoclinic anisotropy.....	
С.К.Тлеуқенов, К.Н.Балабеков, З.К.Жалғасбекова. Уравнения дисперсии ТЕ и ТМ волн в полузакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии.....	75
М.Н. Ильясов, А.Н. Исадыков. Кварктардың Ковариантты Моделі Негізінде $B \rightarrow P$ Ыдырауының Форм-Факторы Және Жартылайлептондық Бренчингтерін Есептеу.....	
M.N. Iyassov, A.N. Issadykov. Calculation Of Form Factors And Semi-Lepton Branchings Of The $B \rightarrow P$ Transition In The Covariant Quark Model.....	
М.Н. Ильясов, А.Н. Исадыков. Вычисление Форм-Факторов И Полулептонных Бренчинговперехода $B \rightarrow P$ В Рамках Ковариантной Модели Кварков.....	88
А. Кисабекова, А. Красников, Р. Асылбаев, Г. Баубекова. Висмут қосылған лантанидті ниобаттардың катодолюминесценция сипаттамалары.....	
A. Kissabekova, A. Krasnikov, R. Assylbayev, G. Baubekova. Cathodoluminescence characteristics of bismuth-doped lanthanide niobates	
А. Кисабекова, А. Красников, Р. Асылбаев, Г. Баубекова. Катодолюминесцентные характеристики легированных висмутом ниобатов лантаноидов.....	100
Ғ.Қ. Мамытбеков, Н.М. Шаяхметов, М.Б. Курмансеіт, Н.Б. Иссабаев Ғ.К. Радионуклидтердің қоршаған ортаға таралуын тежейтін гибридті композиттік матрицалар	
Ғ.К. Мамытбеков, Н.М. Шаяхметов, М.Б. Курмансеит, Н.Б. Иссабаев. Гибридные композитные матрицы для предотвращения распространения радионуклидов в окружающую среду.....	
G.K. Mamytbekov, N.M. Shayakhmetov, M.B. Kurmanseii, N.B. Issabayev. Hybrid Composite Matrices To Prevent Radionuclides From Spreading Into The Environment.....	115
Д.К.Наурузбаев, А.Тихонов, Г.Е.Серикбаева, А.К.Нурмуханбетова. ДЦ60 циклотронындағы резонанстық реакцияларды ККҚН және ұшу уақыты әдістерін қолдану арқылы зерттеу.....	
D.K. Nauruzbayev, A.Tikhonov, G.E. Serikbayeva, A.K.Nurmukhanbetova. Study of resonance reactions at the DC-60 cyclotron using the TTK and time-of-flight techniques.....	
Д.К.Наурузбаев, А.Тихонов, Г.Е.Серикбаева, А.К.Нурмуханбетова Изучение резонансных реакций на циклотроне ДЦ-60 с использованием методов ТМОК и времени пролета.....	128
А.Ж.Несіпбай. ССР-Қ зерттеу реакторының көлденең тәжірибелік арнасының шығысындағы нейтрондардың кеңістіктік-энергетикалық таралуына сүзгілердің материалдық құрамының әсері.....	
A.Zh.Nessipbay. Influence of Material Composition of Filters on Spatial-Energy Distribution of Neutrons at the Outlet of the Horizontal Experimental Channel of WWR-K Research Reactor.....	
А.Ж.Несіпбай. Влияние материального состава фильтров на пространственно-энергетическое распределение нейтронов на выходе горизонтального экспериментального канала исследовательского реактора ВВР-К.....	142
К. Нурлан. $\eta(1295,1475)$ мезондарының жартылайлептонды ыдырау ендерін талдау.....	
K. Nurlan. Analysis of semileptonic decay widths of $\eta(1295,1475)$ mesons.....	
К. Нурлан. Анализ ширин полулептонных распадов $\eta(1295,1475)$ мезонов.....	153
С.А.Пазылбек, А.Карейва, О. Шалха, Б.Е. Жакипбаев, Д.К. Ескермесов, Б.З. Әбдіқадыр, М.Т. Катбаева, К.Ж. Мүтәлі. Жоғары энтропиялы $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu$ немесе $Ce)_xAl_5O_{12}$ қосылыстарының синтезі мен оптикалық қасиеті.....	

S. Pazylybek, A. Kareiva, O. Shalkhar, B.Zhakupbayev, D. Yeskermessov, B. Abdikadyr, M.Katbaeva, K.Mutali. *Synthesis and optical property of the high entropy compounds*

$Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,0}1(Eu \text{ or } Ce)_xAl_5O_{12}$

С.А.Пазылбек, А.Карейва, О. Шалха, Б.Е. Жакипбаев, Д.К. Ескермесов, Б.З. Әбдіқадыр, М.Т. Катбаева, К.Ж. Мүтәлі. *Синтез и оптические свойства соединений*

$Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,0}1(Eu \text{ или } Ce)_xAl_5O_{12}$ с высокой энтропией.....

162

Ж.М. Салиходжа, Т.Н.Нурахметов, А.Ж.Кайнарбай, Ф.У.Абуова, А.С. Ахмедов, Сулеймен Р.Н., Байрбаева Г.Б. *Na₂SO₄-V кристалының серпимділік қасиеттерін DFT әдісімен зерттеу.....*

Zh.M. Salikhodja, T.N.Nurakhmetov, A.Zh.Kainarbay, F.U.Abuova, A.S. Akhmedov, Suleimen R.N., Bairbayeva G.B. *Study of elastic properties of Na₂SO₄-V crystal by DFT method*

Ж.М. Салиходжа, Т.Н.Нурахметов, А.Ж.Кайнарбай, Ф.У.Абуова, А.С. Ахмедов, Сулеймен Р.Н., Байрбаева Г.Б. *Исследование упругих свойств кристалла Na₂SO₄-V методом DFT.....*

178

Шамиева Р.К., Балапанов М.Х., Салиходжа Ж.М., Садыкова Б.М., Нурпеисов А.С., Юсупбекова Б.Н., Кәрібай Б.А., Батишева А.Т. *CaSO₄-Pb²⁺ люминофорындағы рекомбинациялық сәулелену.....*

R.K.Shamiyeva, M.H.Balapanov, Zh.M.Salikhodzha, A.Zh.Kainarbay, B.M.Sadykova, K.V.Zhangylyssov, A.S.Nurpeissov, B.A.Karibay, A.T.Batisheva. *Recombination emission in the phosphor CaSO₄-Pb²⁺*

Шамиева Р.К., Балапанов М.Х., Салиходжа Ж.М., Садыкова Б.М., Нурпеисов А.С., Юсупбекова Б.Н., Кәрібай Б.А., Батишева А.Т. *Рекомбинационное излучение в люминофоре CaSO₄-Pb²⁺*

199



ХҒТАР 29.15.01
Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-8-21>

Қазақстандағы ядролық медицина үшін 2024 жылғы ұлттық диагностикалық анықтамалық деңгейлер негізінде 18F-FDG ПЭТ/КТ инъекциялық дозасын оңтайландыру

Б.Б. Абдуалиев¹ , Б.М. Сатанова*¹ , Ф.У. Абуова¹ , А.У. Абуова¹ , Г.Д. Кабдрахимова¹ 

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

(E-mail: clever_s.balzhan@mail.ru)

Аңдатпа. 18F-фтор-2-дезоксид-глюкозаны (18 F-FDG) қолданатын (ПЭТ/КТ) неопластикалық зақымдануларды функционалды диагностикалау, қатерлі ісіктердің сатысын анықтау және метастаздарды анықтау үшін пайдалы. Жақында ПЭТ/КТ процедураларының көбеюіне байланысты сурет сапасының нашарлауынсыз пациентке тиімді сәулелік әсерді бақылау маңызды бола бастады. Бүгінгі таңда қазіргі заманғы медициналық радиациялық технологиялар, соның ішінде радиофармпрепаратты қолдана отырып, кеңінен қолданылуда. Айта кету керек, бұл технологиялардың өздері радиациялық қауіпсіздікті арттыру бағытында айтарлықтай эволюцияға ұшырады. Бірақ егер радиациялық технологиялар тұрақты түрде жетілдірілсе, онда иондаушы сәулелену көздерімен қызметті бақылау және реттеу саласындағы тәсілдер консерватизмнің жоғары дәрежесін сақтайды. Бұл жұмыста иондаушы сәулелену көздерін пайдалану кезінде қызметті нормалау және реттеу мәселелерін жетілдіру жолдары негізделген. Зерттеудің мақсаты-ПЭТ-орталықтардағы еңбек жағдайларына радиациялық-гигиеналық бағалау жүргізу және қазіргі заманғы технологиялардың ерекшеліктерін ескере отырып, реттеуші талаптарды жетілдіру бойынша ұсыныстар әзірлеу.

Түйін сөздер: радиациялық технологиялар, иондаушы сәулелену көзі, ПЭТ-КТ, изотоптық зертхана, тиімді доза, эквивалентті доза, радиофармпрепарат.

Жіберілді 31.10.2024. Өзгертілді 26.11.2024. Қабылданды 26.11.2024. Онлайн қол жетімді 25.12.2024

¹* хат-хабар авторы

Кіріспе

(ПЭТ/КТ) 18F-2-фтор-2-дезоксид-глюкозаны (18F-FDG) қолдана отырып, неопластикалық зақымдануларды функционалды диагностикалау, қатерлі ісіктерді анықтау, метастаздар мен қайталануларды анықтау үшін қолданылады. Жақында ПЭТ / КТ процедураларының көбеюімен пациенттің тиімді сәулеленуін кескін сапасының нашарлауынсыз бақылау маңызды бола бастады [1]. Диагностикалық анықтамалық деңгейлер (Drl) америка құрама штаттарында және Еуропа елдерінде ядролық медицина процедураларында радиациялық әсерді оңтайландырудың маңызды құралы ретінде ұсынылды [2]. Жапонияда алғашқы Drl 2015 жылы ұсынылды және ПЭТ/КТ ісіктерін 18F-FDG бағалау үшін инъекция дозасы 240 Мбк тұрақты радиоактивтілікке орнатылды. Дегенмен, Жапондық Ядролық Медицина Қоғамы шығарған FDG ПЭТ бейнелеуіне арналған клиникалық нұсқаулар инъекция дозасын дене салмағы сияқты кескін сапасына әсер ететін факторларды ескере отырып оңтайландыру керек екенін және дене салмағына негізделген инъекцияның түзетілген дозасын DRLs 2020, жаңартылған DRLs [3] ұсынды. Инъекция дозасын бұл оңтайландыру пациент пен қызметкерлерге сәулеленудің тиімді әсеріне ықпал етуі мүмкін, сонымен бірге ПЭТ/КТ процедурасында алынған санау санын өзгертуі мүмкін, Бұл ПЭТ/КТ кескінінің сапасына қатысты жаңа мәселелерді тудыруы мүмкін. [4].

Алдыңғы зерттеуде инъекция дозасы мен кескін сапасы арасындағы байланыс кескін сапасының сандық индексі ретінде бауыр сигналының шуылға қатынасы (SNR_{liver}) арқылы зерттелді. SNR_{liver}-ді оңай есептеуге болатынына қарамастан, бұл көрсеткіш кескінді қалпына келтіру әдісіне және тексеру кезінде қолдың орналасуына байланысты екені хабарланды [5]. Шу эквивалентінің саны (NEC) - бұл кескін сапасының тағы бір индексі, ол кескінді қалпына келтіру шарттарына тәуелді емес, дегенмен оның формуласы SNR_{liver} формуласына қарағанда күрделірек. Шудың эквивалентті санау тығыздығы (NEC_{density}) 2 пациенттің дене өлшемі ескерілетін өзгертілген NEC. Сондай-ақ, қажеттілік қолдың орналасуына байланысты және есепте бұл көрсеткіштің визуалды көрсеткіштермен жоғары корреляциясы бар екендігі көрсетілген. Нәтижесінде NEC_{density} кескін сапасын бағалау үшін танымал бола бастады.

Материалдар мен әдістер

Бұл зерттеу жұмысы 8 пациент арасында жүргізілді. Салмағына байланысты дозаны қабылдаған пациенттерді 4 топқа бөліп қарастырдық 1-топ (< 49 кг), 2-топ (50-59 кг), 3-топ (60-69 кг) және 4-топ (≥ 70 кг). ПЭТ ФДГ сәулеленуінің тиімді дозасы № 106 радиологиялық қорғау жөніндегі халықаралық комиссияның жарияланымына сәйкес 0,019 мЗв/Мбк қайта есептеу коэффициентін пайдалана отырып есептелді. Кескін сапасы ми мен қуық есептегіштерін алып тастау арқылы есептелген эквивалентті санау шу тығыздығы (NEC тығыздығы) арқылы бағаланды. Сәулелену дозасы мен кескін сапасы тұрғысынан инъекция дозасын оңтайландырудың пайдалылығы талданды.

Бұл зерттеуге пациенттердің екі тобы енгізілді: 4 пациент 2024 жылдың сәуірінен 2024 жылдың шілдесіне дейінгі төрт айлық кезең ішінде 240 МБк ФДГ тұрақты дозасы бар ПЭТ/КТ-дан өтті және 4 пациент оңтайландырылған ФДГ инъекциялық дозасы бар ПЭТ/КТ-дан өтті. 2023 жылдың желтоқсанынан 2024 жылдың сәуіріне дейінгі төрт айлық кезеңде дене салмағының 3,7 МБк/кг екі топтың өлшенген инъекциялық дозалары және олардың стандартты ауытқулары кестеде көрсетілген.

Кесте 1 – Дозаны оңтайландыруға дейінгі және кейінгі зерттеу субъектілерінің сипаттамалары

	Дейін	Кейін
	(n =8)	(n = 3)
Жасы	64,9 ± 13,2 (18-89)	66,7 ± 12,5 (18-90)
Биіктігі (м)	1,63 ± 0,09 (1,37-1,87)	1,62 ± 0,08 (1,35-1,85)
Денесалмағы (кг)	60,3 ± 9,8 (33-87)	58,8 ± 10,7 (34-88)
ВМІ (кг / м2)	22,6 ± 3,1 (14,7-36,5)	22,4 ± 3,3 (14,7-36,8)
Инъекцияға арналған Доза (МБк)*	239,0 ± 6,3 (220,5-261,6)	213,2 ± 40,4 (118,9-329,5)
Доза / салмақ (МБк / кг)*	4,08 ± 0,73 (2,70-7,38)	3,62 ± 0,08 (3,34-4,06)
Қандағы қант деңгейі(мг / дл)	102,0 ± 14,9 (45-147)	99,3 ± 15,0 (61-149)
Ассимиляция уақыты (мин)	72,1 ± 9,7 (54-102)	63,4 ± 8,2 (50-115)
Қармау уақыты	120	120

ВМІ, дене салмағының индексі

Жұлдызшалар (*) нақты өлшенген мәндерді білдіреді. Орташа мәндер және олардың стандартты ауытқулары көрсетіледі.

Бұл зерттеуде біз Discovery IQ-бұл бүкіл денені зерттеуге арналған ПЭТ/КТ жүйесінің жаңа нұсқасы, ол эволюциялық платформаның клиникалық маңызды инновациялық шешімдерін қамтиды, ол жаңа және инвазивті емес диагностикалық бейнелеу мүмкіндіктерін кеңейтуге арналған[6].

Ішкі жүйелердің көпшілігі ПЭТ көмегімен сандық бейнелеуді жүзеге асыруда, пациенттің тыныс алу функциясы мен жүрегінің жұмысын бақылауды жүзеге асыруда, ПЭТ пен КТ қайталанатын қайта құру технологияларын енгізуде және жұмыс процесінің тиімділігін арттыруда қосымша мүмкіндіктерді қамтамасыз ету үшін жетілдірілді.

ПЭТ / КТ жүйесі (КТ 16 немесе 32 кесу)

Ашылу IQ платформасы жарық жарылуы жетілдірілген ПЭТ детекторымен жабдықталған, оның сезімталдығы мен шу-эквивалентті санау жылдамдығының (NECR) параметрлері төмен және жоғары белсенділікпен жұмыс істегенде ПЭТ/КТ жүргізу үшін оңтайландырылған, бұл сканерлеу уақытын және сәулелену дозасын қысқартуға мүмкіндік береді.

Жарық жарылуы екі арналы технологияға ие, ол санау дәлдігін айтарлықтай арттырады, бұл барлық изотоптар үшін, соның ішінде 18F, 11C, 68Ga, 82Rb үшін ПЭТ-тің дәлірек сандық өлшемдерін жасауға мүмкіндік береді.

IQашылуы платформасын Optima ct540 дербес КТ сканері ретінде де қолдануға болады, оның клиникалық қосымшалары кең (гентри көлбеуі жоқ). Ол ерекше мүмкіндіктерді қамтамасыз етеді: жоғары жылдамдық, төмен сәулелену дозасында жоғары сурет сапасы және диагностикалық функциялардың толық көлемі.

Ашылу IQ қозғалысты бақылау құралдары сканерлеу кезінде қозғалыс туралы ақпаратты жинау және ПЭТ/КТ кескіндерін өңдеу кезінде осы деректерді пайдалану арқылы тыныс алу мен жүрек соғуына байланысты артефактілердің санын азайтуға мүмкіндік береді.

IQ ашылуы үшін тиімді және жылдам күнделікті сапаны бақылау сканерлеудің басында жасалады. Күнделікті сапаны бақылау процедурасы қарапайым хаттаманы орындау кезінде басталады, 10 минуттан азуақытты алады, есеп жасалады. Қуатты үнемдеу модулі басқару консолін, компьютерлерді және гентриді күту режиміне қояды, бұл энергияны тұтынуды және қосалқы құрылғылардың жылу шығаруын азайтады. Бұл өзгерістерді анықтаудың оңтайлы тиімділігі мен клиникалық икемділікке қол жеткізуге арналған жағдайы – жетілдірілген ПЭТ детекторы бар. Жаңа жарық жарылуы ПЭТ детекторының сезімталдығы және шу эквивалентті санау жылдамдығының (NECR) параметрлері төмен және жоғары санау жылдамдығында ПЭТ/КТ жүргізу үшін оңтайландырылған, бұл ПЭТ сканерлеу уақытын және/немесе сәулелену дозасын қысқартады [7-9].

Шудың эквивалентті санау тығыздығын есептеу (NECтығыздығы)

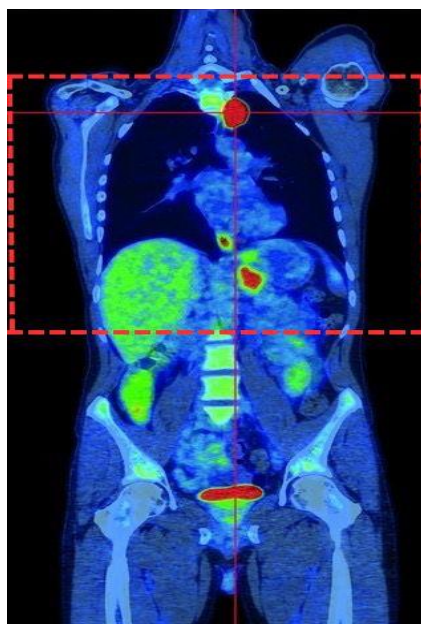
PET/CT қатерлі ісігін бейнелеу әдісі бойынша ұсыныстарға сәйкес әр кереует позициясы үшін NEC өрнек арқылы анықталады:

$$NEC_i = (1 - SF)^2 \frac{(P_i - R_i)^2}{(P_i - P_i) + (1 + K)R_i}$$

Мұндағы, NEC_i – шудың эквивалентті, SF – шашырау үлесі, P_i – қабат позициясындағы лездік сәйкестіктер саны, R_i – қабат позициясындағы кездейсоқ сәйкестіктер саны.

Шашырау фракциясының фантомы (SF фантомы) ұлттық электр өндірушілері қауымдастығының (NEMA) стандартына сәйкес 0,37 құрады [15]. Әр сәйкестік нөмірі DICOM тегінен алынды. NEC тығыздығы өрнек арқылы анықталды:

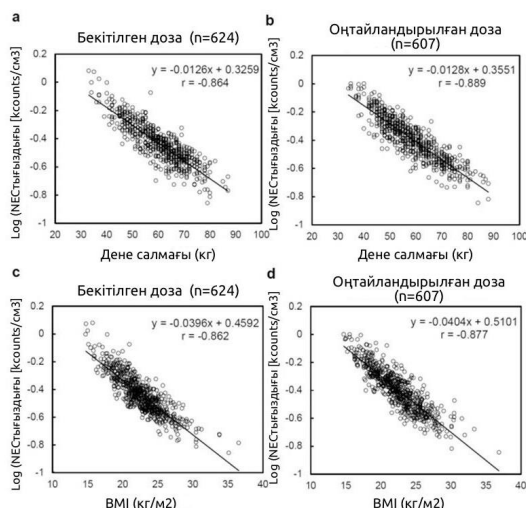
$$NEC_{\text{тығыздығы}} = \frac{\sum_{i=1}^n NEC_i}{V_{\text{науқас}}}$$



Сурет 1. Пациент тіңшуының эквивалентті санын бағалауға арналған аймақтар

Алынған нәтижелер

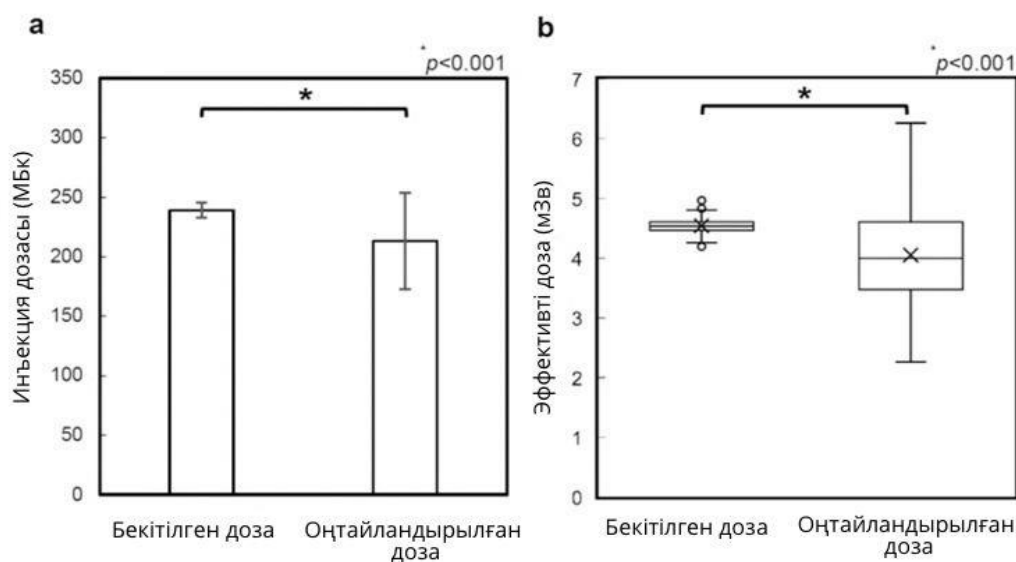
Инъекция дозасын оңтайландырған және онсыз пациенттердің сипаттамалары 1 кестеде келтірілген. Науқастардың корреляция коэффициенттерін есептеу кезінде дене салмағы мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасында тұрақты дозада ($r = -0,864$, $p < 0,001$) және оңтайландырылған дозада ($r = -0,889$, $p < 0,001$) статистикалық күшті теріс корреляция байқалды. BMI мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасында тұрақты дозада ($r = -0,862$, $p < 0,001$) және оңтайландырылған дозада ($r = -0,877$, $p < 0,001$) ұқсас корреляция байқалды.



Сурет 2. Дене салмағының және дене салмағының индексінің санаудың шу эквивалентті тығыздығымен корреляциясы

Дене салмағы, дене салмағының индексі (BMI) және эквивалентті шу санының тығыздығының логарифмі ($NEC_{\text{тығыздық}}$) арасындағы байланыс науқастың корреляция коэффициенті арқылы бағаланды. а инъекция дозасын оңтайландырусыз дене салмағы мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасындағы корреляция; б Инъекция дозасын оңтайландыру кезінде дене салмағы мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасындағы корреляция; сBMI мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасындағы корреляция инъекция дозасын оңтайландырусыз; d инъекция дозасын оңтайландыру кезінде BMI мен $NEC_{\text{тығыздығының}}$ логарифмі арасындағы корреляция.

Инъекция дозасы және дене салмағына байланысты дозаны оңтайландыратын және онсыз тиімді доза суретте көрсетілген. 3. Дене салмағына байланысты инъекция дозасын оңтайландыру тиімді дозаны 11%-ға, $4,54 \pm 0,1$ -ден $4,05 \pm 0,8$ мЗв-ға дейін айтарлықтай төмендетті. Статистикалық маңызды айырмашылық Манн-Уитнидің U сынағы арқылы көрсетілді ($p < 0,001$). $NEC_{\text{тығыздығы}}$ бойынша бағаланған кескін сапасы 10%-ға айтарлықтай жақсарды, $0,39 \pm 0,1$ -ден $0,43 \pm 0,2$ -ге дейін ($p < 0,001$)[10-11].



Сурет 3. Инъекция дозасы және дене салмағына негізделген дозаны оңтайландырумен және онсыз тиімді доза. Манн-Уитнидің U-сынағы жүргізілді, статистикалық маңыздылығы $p < 0,05$ деңгейінде белгіленді. а инъекцияға арналған доза; б тиімді доза

2-ші кестеде дене салмағының төрт тобындағы науқастардың сипаттамаларын көрсетеді. Әр топқа келетін болсақ, пациенттердің орташа дене салмағы мен BMI дозаны оңтайландырумен және онсыз айтарлықтай ерекшеленбеді. Инъекциялық дозаға келетін болсақ, Манн-Уитни U критерийі бойынша 1, 2 және 3 топтарда оңтайландыру статистикалық маңызды төмендеуді көрсетті ($p < 0,001$). Алайда статистикалық маңызды өсім 4-ші топта көрсетілді ($p < 0,001$).

Кесте 2 – Дозаны оңтайландыруға дейінгі және кейінгі 1,2,3,4-топтағы науқастардың сипаттамалары

1-топ (≤ 49 кг)	Дейін	Кейін	статистикалықталдау
	($n = 100$)	($n = 130$)	p -белгі
Денесалмағы (кг)	$44,8 \pm 3,9$	$45,0 \pm 3,6$	НС
		(34–49)	
BMI (кг/м ²)	$18,9 \pm 1,9$	$18,7 \pm 2,0$	НС
		(14,7–23,8)	
Инъекциялық доза (МВq)	$239,3 \pm 7,0$	$160,9 \pm 13,5$	$< 0,001$
	(223,5–252,3)	(118,9–182,3)	
Доза/салмағы (МБк/кг)	$5,36 \pm 0,54$	$3,58 \pm 0,07$	$< 0,001$
	(4,61–7,38)	(3,41–4,00)	
Тиімді доза(мЗв)	$4,52 \pm 0,1$	$3,06 \pm 0,3$	$< 0,001$
	(4,25–4,79)	(3,06–3,47)	
2-топ (50–59 кг)	Дейін	Кейін	Статистикалықталдау
	($n=174$)	($n=208$)	p -белгі
Денесалмағы (кг)	$55,0 \pm 2,8$	$54,5 \pm 2,9$	NS
	(50–59)	(50–59)	NS
	$21,2 \pm 2,0$	$21,4 \pm 2,1$	
BMI (кг/м ²)	(16,4–27,2)	(16,7–27,6)	
	$238,8 \pm 5,9$	$197,7 \pm 12,0$	$< 0,001$
Инъекциялық доза (МВq)	(220,5–260,6)	(174,1–235,3)	
	$4,35 \pm 0,25$	$3,62 \pm 0,08$	$< 0,001$
Доза/салмағы (МБк/кг)	(3,88–5,11)	(3,34–4,06)	
Тиімді доза(мЗв)	$4,54 \pm 0,1$	$3,76 \pm 0,2$	$< 0,001$
	(4,19–4,95)	(3,31–4,47)	
3-топ (60–69 кг)	Дейін	Кейін	статистикалық талдау
	($n=240$)	($n=148$)	p -белгі
Дене салмағы (кг)	$64,4 \pm 2,9$	$63,9 \pm 2,7$	
	(60–69)	(60–69)	NS
	$23,6 \pm 2,0$	$23,9 \pm 2,0$	
BMI (кг/м ²)	(18,9–29,8)	(18,9–30,5)	
	$239,3 \pm 7,0$	$232,2 \pm 10,5$	$< 0,001$

Инъекциялық доза (МВq)	(222.5–261.6)	(212.6–259.1)	
	3.73±0.19	3.64±0.07	<0.001
Доза/салмағы (МБк/кг)	(3.29–4.16)	(3.39–3.93)	
Тиімді доза(мЗв)	4.55±0.1	4.41±0.2	<0.001
	(4.23–4.97)	(4.04–4.92)	
4-топ (≥ 70 кг)	Дейін	Кейін	статистикалық талдау
	(n=110)	(n=121)	p-белгі
Дене салмағы (кг)	74.1±3.9	74.6±4.4	NS
	(70–87) 26.0±2.7	(70–88) 26.3±2.4	NS
BMI (кг/м ²)	(20.9–36.5)	(22.3–36.8)	
	239.6±6.0	272.5±17.6	<0.001
Инъекциялық доза (МВq)	(223.5–261.3)	(242.0–329.5)	
	3.24±0.17	3.65±0.06	<0.001
Доза/салмағы (МБк/кг)	(2.70–3.60)	(3.43–3.80)	
Тиімді доза(мЗв)	4.55±0.1	5.18±0.3	<0.001
	(4.25–4.96)	(4.60–6.26)	

Sfphantom қажеттілікті есептеу үшін пайдаланылған кезде, төмен салмақ тобында қажеттілікті жете бағаламау және жоғары салмақ тобында асыра бағалау ықтималдығы жоғары. Сондықтан қажеттілікті есептеу үшін SFpatient қолданылуы керек. Бұл нәтижелерді Хосокава және басқалар ұсынды, фантомды қолдану арқылы алынған және Монте-Карлодағы модельдеу арқылы әр пәннен алынған SF арасындағы сәйкессіздікті күтті [12].

Біз DRLs 2020 тұжырымдамасына негізделген сәулелену дозасын төмендетумен қатар, дозаны оңтайландырудың кескін сапасын жақсартуға әсерін зерттедік. Нәтижелер дозаны дене салмағына қарай реттеу сәулелену дозасының 11%-ға төмендеуіне және кескін сапасының 10%-ға жақсаруына ықпал еткенін көрсетті. Дене салмағына негізделген инъекция дозасын оңтайландыру жағдайлардың 74%. дозаны азайтты және қажеттілік 0,2-ден төмен деңгейге дейін төмендеген жағдайлар болған жоқ, бұл нұсқаулықта қарастырылған төменгі шек. Сондықтан Жапониядағы DRLs 2020 көрмесінде ұсынылған дене салмағына негізделген инъекция дозасын оңтайландыру кескін сапасы тұрғысынан пайдалы деп айта аламыз.

Бекітілген және оңтайландырылған топтар үшін инъекцияның нақты дозалары кейбір ауытқулармен бөлінді. Белгіленген дозалар тобы үшін инъекция дозаларының стандартты ауытқуы 6,3 Мбк, жоспарланған 240 Мбк инъекция дозасының 2,6%.

Керісінше, оңтайландырылған дозалар тобы үшін инъекция дозаларының стандартты ауытқуы 0,08 Мбк/кг құрады, бұл дене салмағына шаққанда 3,7 Мбк/кг шед - улед инъекция дозаларының 2,2% құрады. Тиімді доза мен қажеттілік әр жағдай үшін инъекцияның нақты дозасын қолдану арқылы есептелгендіктен, инъекциялық дозалардың ауытқуы тиімді доза мен қажеттілік нәтижелеріне әсер етпейді [13-16].

Бұл зерттеуде біз инъекция дозасын оңтайландыру үшін дене салмағының 3,7 Мбк/кг қолдандық. Бұл мән Жапонияда DRLs 2020-да ұсынылған қол жеткізуге болатын доза (AD) болып табылады. 50-ші процентильді құрайтын AD Америка құрама штаттарындағы Drl-де эталондық деңгейге жеткен нысандар үшін ұсынылатын мақсатты мән болып табылады. Біздің *sur-gent* зерттеуіміздің нәтижелері Жапониядағы Drl-ді болашақта қайта қарауға ықпал етуі мүмкін.

Қазіргі зерттеудің кейбір шектеулері бар. Инъекция дозасын оңтайландыру кескін сапасы мен сәулелену дозасы бойынша 4-топқа жіктелген субъектілер үшін пайдалы болмады. Дене салмағы жоғары емделушілерге инъекция дозасын түзетудің орнына сатып алу уақытын ұзарту арқылы кескін сапасы жақсарады деп күтілуде. Сонымен қатар, біз дозаны оңтайландырудың үй жануарларының суреттерін визуалды бағалауға әсерін зерттеген жоқпыз. Дәрігерлердің суреттерді түсіндіруін болашақта зерттеу керек [18].

Қорытынды

Дене салмағына байланысты инъекция дозасын оңтайландыру алғаш рет Жапонияда DRLs 2020 көрмесінде ұсынылды. Біздің етроспективті зерттеуіміз үй жануарларының FDG кескін сапасының индексі ретінде қажеттілікті пайдалана отырып, дозаны оңтайландырудың бұл әдісі, әсіресе салмағы 50-ден 69 кг-ға дейінгі пациенттер үшін кескін сапасын жақсартуға және сәулеленуді азайтуға мүмкіндік беретінін көрсетті. Бұл жағдайларда дене салмағына негізделген инъекцияның оңтайландырылған дозасы FDG ПЭТ-тағы белгіленген дозадан жоғары болады.

Авторлардың қосқан үлесі

Абдуалиев Б.Б. – мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қарау, зерттеу нәтижелерін жинау, талдау, зерттеу жұмысын жүргізу.

Абуова Ф.У. – деректердің дұрыстығына, мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді реттеу, жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту.

Сатанова Б.М. – идея қалыптастыру, негізгі мақсаттар мен идеяларды дамыту, мақаланың рәсімделуіне үлес.

Абуова А.У. – зерттеулер жүргізу, деректерді және дәлелдемелерді жинау талдау және алынған деректерді түсіндіру.

Кабдрахимова Г.Д. – зерттеу нәтижелеріне статистикалық талдау жүргізу.

Әдебиеттер тізімі

1. Ильин Л.А., Коренков И.П., Наркевич Б.Я. Радиационная гигиена. – Москва: ГЕОТАР-Медиа, 2019 – **кітап**
2. Ильин Л.А. Радиационная медицина. Руководство для врачей-исследователей, организаторов здравоохранения и специалистов по радиационной гигиене. Том I. Теоретические основы радиационной медицины. – Москва: ИздаТ, 2004 – **кітап**
3. Ярмоненко С.П., Вайнсон А.А. Радиобиология человека и животных. – Москва: Высшая школа, 2004 – **кітап**
4. Ильин Л.А., ред. Глобальные и аварийные выпадения ^{137}Cs ^{90}Sr . – Москва: Медицина, 2008 – **кітап**
5. Коренков И.П., Лашенцова Т.Н., Шандала Н.К., Соболев А.И. Защита окружающей среды при эксплуатации и выводе из эксплуатации радиационно опасных объектов. – Москва: Бином, 2014 – **кітап**
6. Шандала Н.К., Исаев Д.В., Титов А.В., Шалыгин В.В., Бельских Ю.С., Старинский В.Г. Радиационное обследование судостроительных предприятий, участвующих в выводе из эксплуатации и демонтаже атомных судов//Медицинская радиология и радиационная безопасность. – 2019. - № 5. – С. 9–14. <https://doi.org/10.12737/1024-2019-64-5-9-14> - **журнал мақаласы**
7. Ильин Л.А., Губанов В.А., ред. Радиационные аварии. – Москва, 2001 – **кітап**
8. Чипига Л.А. Оптимизация радиационной защиты пациентов при диагностических исследованиях с использованием позитронно-эмиссионной томографии: – Санкт-Петербург, 2018 – **кітап**
9. Балонов М.И. Научные основы радиационной защиты в современной медицине. – Санкт-Петербург, 2019 – **кітап**
10. Balonov M.I., Golikov V.Yu., Kalnitsky S.A., Chipiga L.A., Sarycheva S.S., Shatskiy I.G., et al. Russian practical guidance on radiological support for justification of X-ray and nuclear medicine examinations. Rad. Prot. Dosim. 2015; 165(1–4): 39–42. <https://doi.org/10.1093/rpd/ncv127> - ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
11. Zvonova I., Chipiga L., Balonov M., Ermolina E. Nuclear Medicine Examinations of Children in Russia. Rad. Prot. Dosim. 2015; 165(1-4): 216–9. <https://doi.org/10.1093/rpd/ncv101>
12. Балонов М.И., Голиков В.Ю., Звонова И.А., Калницкий С.А., Репин В.С., Сарычева С.С. и др. Современные уровни медицинского радиационного воздействия в России//Радиационная гигиена – 2015. -№8(3). - С. 67–79. - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**
13. Звонова И.А., Чипига Л.А., Балонов М.И., Сухов В.Ю. Радионуклидная диагностика в Санкт-Петербурге: современное состояние и проблемы развития// Радиационная гигиена – 2015. - №8(4). – С. 32–41. - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**
14. Chipiga L., Bernhardsson C. Patient doses in computed tomography examinations in two regions of the Russian Federation. Rad. Prot. Dosim. 2016; 169(1–4): 240–4. **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
15. Chipiga L., Sydoff M., Zvonova I., Bernhardsson C. Investigation of partial volume effect in different PET/CT systems: a comparison of results using the MADEIRA phantom and the NEMA NU-2 2001 phantom. Rad. Prot. Dosim. 2016; 169(1-4): 365–70. **-ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
16. Чипига Л.А., Голиков В.Ю., Шлеенкова Е.Н., Поздняков А.В. Оценка коэффициентов перехода от произведения дозы на длину сканирования к эффективной дозе для КТ всего тела с использованием фантомов//Медицинская физика -2016. - №72(3).- С. 55–62. - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

17. Водоватов А.В., Голиков В.Ю., Калницкий С.А., Шацкий И.Г., Чипига Л.А. Анализ уровней радиационного воздействия на взрослых пациентов при наиболее распространенных рентгенологических исследованиях в Российской Федерации в 2009–2014 гг.//Радиационная гигиена- 2017. - №10(3). С. 66–75. <https://doi.org/10.21514/1998-426X-2017-10-3-66-75> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

18. Kassym Zhumadilov, Alima Amangeldina, Valerii Stepanenko, Masaharu Hoshi , Comparative study of dose for different fluence of neutron , BULLETIN OF THE L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS. ASTRONOMY SERIES: Vol. 146 No. 1 (2024) – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

Б.Б.Абдуалиев¹, Б.М.Сатанова*¹, Ф.У.Абуова¹, А.У.Абуова¹, Г.Д.Кабдрахимова¹
¹*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

Оптимизация инъекционной дозы пэт/кт 18f-fdg для ядерной медицины в Казахстане на основе национальных диагностических эталонных уровней 2024 года

Аннотация. Использование 18F-2-фтор-2-дезоксид-глюкозы (18F-FDG) (ПЭТ/КТ) полезно для функциональной диагностики неопластических поражений, определения стадии рака и выявления метастазов. В последнее время становится все более важным контролировать эффективное лучевое воздействие на пациента без ухудшения качества изображения из-за увеличения количества процедур ПЭТ/КТ. Сегодня широко применяются современные медицинские радиационные технологии, в том числе с применением радиофармпрепаратов. Следует отметить, что сами эти технологии претерпели значительную эволюцию в направлении повышения радиационной безопасности. Но если радиационные технологии постоянно совершенствуются, то подходы в области контроля и регулирования деятельности источниками ионизирующего излучения сохраняют высокую степень консерватизма. В данной работе обоснованы пути совершенствования вопросов нормирования и регулирования деятельности при использовании источников ионизирующего излучения. Цель исследования - проведение радиационно-гигиенической оценки условий труда в ПЭТ-центрах и выработка предложений по совершенствованию регуляторных требований с учетом особенностей современных технологий.

Ключевые слова: радиационные технологии; источник ионизирующего излучения; ПЭТ-КТ; изотопная лаборатория; эффективная доза; эквивалентная доза; радиофармпрепарат.

В.В.Абдуалиев¹, В.М.Сатанова*¹, Ф.У.Абуова¹, А.У.Абуова¹, Г.Д.Кабдрахимова¹
¹*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

Optimization of the injection dose of PET/CT 18F-FDG for nuclear medicine in Kazakhstan based on the national diagnostic reference levels of 2024

Annotation. The use of 18F-2-fluoro-2-deoxy-D-glucose (18 F-FDG) (PET/CT) is useful for the functional diagnosis of neoplastic lesions, determining the stage of cancer and detecting metastases. Recently, it has become increasingly important to monitor effective radiation exposure to the patient

without compromising image quality due to an increase in the number of PET/CT procedures. Modern medical radiation technologies, including the use of radiopharmaceuticals, are widely used today. It should be noted that these technologies themselves have undergone significant evolution in the direction of improving radiation safety. But if radiation technologies are constantly being improved, the approaches in the field of control and regulation of activities with ionizing radiation sources retain a high degree of conservatism. In this paper, the ways to improve the issues of standardization and regulation of activities in the use of ionizing radiation sources are substantiated. The purpose of the study is to conduct a radiation-hygienic assessment of working conditions in PET centers and develop proposals for improving regulatory requirements, taking into account the features of modern technologies.

Keywords: radiation technologies; ionizing radiation source; PET-CT; isotope laboratory; effective dose; equivalent dose; radiopharmaceutical.

References

1. Il'in L.A., Korenkov I.P., Narkevich B.Ya. Radiation Hygiene [Radiatsionnaya gigiena]. Moscow: GEOTAR-Media; 2019. [in Russian]
2. Il'in L.A., ed. Radiation Medicine. A Guide for Physicians, Researchers and Healthcare Professionals and Specialists in Radiation Hygiene. Volume I. Theoretical Foundations of Radiation Medicine [Radiatsionnaya meditsina. Rukovodstvo dlya vrachey-issledovateley organizatorov zdravookhraneniya i spetsialistov po radiatsionnoy gigiene. Tom I. Teoreticheskie osnovy radiatsionnoy meditsiny]. Moscow: IZdaT; 2004. [in Russian]
3. Yarmonenko S.P., Vaynson A.A. Radiobiology of Man and Animals [Radiobiologiya cheloveka i zhivotnykh]. Moscow: Vysshaya shkola; 2004. [in Russian]
4. Il'in L.A., ed. Global and Emergency Fallout 137Cs 90Sr [Global'nye i avariynye vypadeniya 137Cs 90Sr]. Moscow: Meditsina; 2008. [in Russian]
5. Korenkov I.P., Lashchenova T.N., Shandala N.K., Sobolev A.I. Environmental Protection During Operation and Decommissioning of Radiation Hazardous Facilities [Zashchita okruzhayushchey sredy pri ekspluatatsii i vyvode iz ekspluatatsii radiatsionno opasnykh ob'ektov]. Moscow: Binom; 2014. [in Russian]
6. Shandala N.K., Isaev D.V., Titov A.V., Shalygin V.V., Bel'skikh Yu.S., Starinskiy V.G. Radiobiological Survey of the Shipyards Involved in Decommissioning and Dismantlement of Nuclear Ships. Meditsinskaya radiologiya i radiatsionnaya bezopasnost'. 2019; (5): 9–14. <https://doi.org/10.12737/1024-2019-64-5-9-14> [in Russian]
7. Il'in L.A., Gubanov V.A., eds. Radiation Accidents [Radiatsionnye avarii]. Moscow: 2001. [in Russian]
8. Chipiga L.A. Optimization of radiation protection of patients during diagnostic studies using positron emission tomography: Diss. St. Petersburg; 2018. [in Russian]
9. Balonov M.I., ed. Scientific bases of radiation protection in modern medicine. St. Petersburg; 2019. [in Russian]
10. Balonov M.I., Golikov V.Yu., Kalnitsky S.A., Chipiga L.A., Sarycheva S.S., Shatskiy I.G., et al. Russian practical guidance on radiological support for justification of X-ray and nuclear medicine examinations. Rad. Prot. Dosim. 2015; 165(1–4): 39–42. <https://doi.org/10.1093/rpd/ncv127>
11. Zvonova I., Chipiga L., Balonov M., Ermolina E. Nuclear Medicine Examinations of Children in Russia. Rad. Prot. Dosim. 2015; 165(1–4): 216–9. <https://doi.org/10.1093/rpd/ncv101>

12. Balonov M.I., Golikov V.Yu., Zvonova I.A., Kal'nitskiy S.A., Repin V.S., Sarycheva S.S., et al. Modern levels of medical radiation exposure in Russia. *Radiatsionnaya gigiena*. 2015; 8(3): 67–79. [in Russian]
13. Zvonova I.A., Chipiga L.A., Balonov M.I., Sukhov V.Yu. Radionuclide diagnostics in Saint Petersburg: current state and development problems. *Radiatsionnaya gigiena*. 2015; 8(4): 32–41. ([in Russian]
14. Chipiga L., Bernhardsson C. Patient doses in computed tomography examinations in two regions of the Russian Federation. *Rad. Prot. Dosim.* 2016; 169(1–4): 240–4.
15. Chipiga L., Sydoff M., Zvonova I., Bernhardsson C. Investigation of partial volume effect in different PET/CT systems: a comparison of results using the MADEIRA phantom and the NEMA NU-2 2001 phantom. *Rad. Prot. Dosim.* 2016; 169(1-4): 365–70.
16. Chipiga L.A., Golikov V.Yu., Shleenkova E.N., Pozdnyakov A.V. Estimation of transition coefficients from the product of the dose per scan length to the effective dose for whole-body CT by phantom experiments. *Meditinskaya fizika*. 2016; 72(3): 55–62. [in Russian]
17. Vodovatov A.V., Golikov V.Yu., Kal'nitskiy S.A., Shatskiy I.G., Chipiga L.A. Analysis of radiation levels of adult patients during the most common radiographic studies in the Russian Federation in 2009–2014. *Radiatsionnaya gigiena*. 2017; 10(3): 66–75. <https://doi.org/10.21514/1998-426X-2017-10-3-66-75> [in Russian]
18. Kassym Zhumadilov, Alima Amangeldina, Valerii Stepanenko, Masaharu Hoshi, Comparative study of dose for different fluence of neutron, *BULLETIN OF THE L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS. ASTRONOMY SERIES: Vol. 146 No. 1 (2024)*

Авторлар туралы мәліметтер:

Абдуалиев Б.Б. – 2 курс магистранты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан.

Сатанова Б.М. – хат-хабар авторы, PhD, оқытушы Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Абуова А.У. – PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Information about authors:

Abdualiyev B. – Master's student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan.

Satanova B. – corresponding author, PhD, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Abuova F. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Abuova A. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

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

Сведения об авторах:

Абдуалиев Б.Б. – магистрант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Сатанова Б.М. – автор для корреспонденции, PhD, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Абуова Ф.У. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Абуова А.У. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, и.о. доцента, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.



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/>).



МРНТИ 29.19.11; 29.19.21

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-22-35>

Научная статья

Исследование температурного отжига индуцированного оптического поглощения и структурной разупорядоченности в монокристаллах CaF_2 , облученных тяжелыми ионами Xe^{132}

Р.Н. Асылбаев*¹, А.К. Сейтханова¹, А.А. Кисабекова¹, Е.К. Жетписбаев¹

¹Павлодарский педагогический университет имени А. Маргулана, г. Павлодар, Республика Казахстан

(E-mail: ruslanassylbay@yandex.kz, ainur1179@mail.ru, akisabekova@mail.ru, ersain.zhetpisbaev@mail.ru)

Аннотация. В данной статье исследуются радиационные процессы в монокристаллах фторида кальция (CaF_2), облученных тяжелыми ионами Xe^{132} с энергией 230 МэВ. В исследовании были использованы методы абсорбционной спектроскопии и термоактивационной спектроскопии. Проведено изучение влияния термического отжига на структурные изменения и оптическое поглощение, вызванное радиационными дефектами. Образцы CaF_2 подвергались поэтапному нагреву до температур от 295 К до 1023 К, что позволило проследить динамику восстановления кристаллической структуры и изменения оптических характеристик. Экспериментальные результаты по оптической спектроскопии были проанализированы в координатах Тауца и Урбаха. Результаты показывают, что при повышении температуры отжига происходит уменьшение интенсивности полос поглощения, что свидетельствует о рекомбинации дефектных центров и снижении структурного разупорядочения. Также выявлено, что при температурах выше 800 К наблюдается рост энергии Урбаха и смещение края фундаментального поглощения, связанные с образованием новых структурных дефектов. Работа предоставляет новые данные о механизмах образования и эволюции радиационных дефектов в ионно-облученных материалах и открывает перспективы для повышения радиационной стойкости оптических материалов на основе CaF_2 .

Ключевые слова: фторид кальция, радиационные дефекты, абсорбционная спектроскопия, облучение быстрыми тяжелыми ионами, термический отжиг, метод Тауца, энергия Урбаха.

Поступила 11.11.2024 После доработки 20.11.2024. Принята к печати 21.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹* автор для корреспонденции

Введение

Монокристаллы фторида кальция (CaF_2) благодаря своим уникальным оптическим свойствам, высокой прозрачности в широком спектральном диапазоне и радиационной стойкости являются важными оптическими материалами в науке и технике. Эти свойства делают CaF_2 перспективным материалом для использования в оптических системах, работающих в экстремальных условиях с высоким радиационным фоном [1].

Активированный Eu кристалл CaF_2 :Eu является довольно известным сцинтилляционным материалом [2]. В то же время CaF_2 :Dy, CaF_2 :Tm и CaF_2 :Mn используются в дозиметрах TLD-200 [3], TLD-300 [4] и TLD-400 [5], соответственно. Однако воздействие высокоэнергетического ионизационного излучения на материал во время его эксплуатации ведет к его постепенной деградации за счет создания и накопления радиационных дефектов.

Облучение быстрыми тяжелыми ионами дает возможность моделировать процессы радиационного дефектообразования. Тяжелые ионы обладают большой энергией и высокой тормозной способностью, что способствует созданию локальных зон повреждения, схожих с теми, что возникают при длительном воздействии высокоэнергетического излучения в реальных условиях эксплуатации материалов. Это позволяет изучать фундаментальные процессы, связанные с образованием и эволюцией радиационных дефектов, что особенно важно для разработки радиационно-стойких материалов. Изучению радиационных процессов в кристаллах CaF_2 под ионным облучением посвящен ряд работ (смотрите, например, [6-11]).

Образование радиационных дефектов в кристалле CaF_2 под воздействием ионизирующего излучения вызывает изменения в спектрах оптического поглощения. Эти изменения выражаются в наведении дополнительных полос поглощения, связанных с радиационными дефектами. Кроме того, может происходить и смещение края фундаментального поглощения (ФП), что свидетельствует о нарушении структурного порядка в кристалле.

При термическом воздействии кристалл частично или полностью восстанавливает свою структуру за счет взаимной рекомбинации электронных и дырочных дефектов [12]. Для понимания механизмов образования радиационных дефектов и их эволюции при изменении температуры необходимо исследовать динамику оптических и структурных изменений в материалах после достижения различных температурных режимов.

Цель данного исследования заключается в изучении влияния термического отжига на радиационные дефекты и структурную разупорядоченность в облученных монокристаллах CaF_2 , а также в определении температурных зависимостей энергии фундаментального поглощения и энергии Урбаха. Полученные результаты позволят глубже понять механизмы образования и эволюции радиационных дефектов в кристаллических материалах при воздействии тяжелых ионов, а также предложить пути улучшения радиационной стойкости материалов на основе CaF_2 . Настоящая статья является логическим продолжением исследований радиационных процессов в CaF_2 , опубликованных в [10,11].

Материалы и методы

Исследуемые монокристаллы CaF_2 были выращены в Государственном оптическом институте имени Валилова методом Бриджмана-Стокбаргера и сколоты вдоль плоскости (111) на пластинки с размерами $5 \times 5 \times 0.8$ мм³.

Облучение быстрыми тяжелыми ионами Xe^{132} производилось на циклотроне ДЦ-60 в Астане. Параметры облучения: ион Xe^{132} , энергия 230 МэВ, флюенс 5×10^{13} ион/см².

Измерение спектров оптического поглощения выполнялось на двухлучевом спектрофотометре Jasco-660. Пошаговый отжиг индуцированного оптического поглощения производился посредством ряда предварительных нагревов облученного образца до определенных температур и последующего измерения его оптического поглощения после охлаждения до комнатной температуры. Нагрев образца до температуры 773 К выполнялся на установке ТЛДридер в атмосфере азота со скоростью линейного нагрева 2 К/с, тогда как нагрев до более высокой температуры 1023 К был реализован в печи GSL-1700-KS со скоростью линейного нагрева 10 К/мин, также в атмосфере азота.

Анализ полученных спектров поглощения выполнялся в координатах Тауца и Убраха. Поскольку кристалл CaF_2 является прямозонным диэлектрическим материалом с прямыми разрешенными переходами [13], линейная область около края запрещенной зоны в спектре поглощения подчиняется следующему закону [14]:

$$(\alpha h\nu)^2 = A (h\nu - E_g),$$

где α – коэффициент поглощения, $h\nu$ – энергия фотона, E_g – энергия края ФП, A – постоянная, принимаемая за единицу. Представляя спектры оптического поглощения в так называемых координатах Тауца $(h\nu, (\alpha h\nu)^2)$, мы можем оценить ширину запрещенной зоны (энергии края ФП) и исследовать её изменение при различных воздействиях на материал, таких, как облучение, температурные изменения или примесное легирование [14]. Изменение энергии края ФП может быть вызвано двумя факторами – колебаниями решетки (динамическое разупорядочение) и дефектами радиационной и нерадиационной природы (статическое разупорядочение) и выражается в виде локализованных состояний в запрещенной зоне. Данные состояния могут представляться в виде хвостов плотности состояний около валентной зоны и зоны проводимости. Такие состояния известны как Урбаховские хвосты и их ширина называется энергией Урбаха [15].

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 представлены спектры оптического поглощения монокристалла CaF_2 , облученного ионами Xe^{132} с энергией 230 МэВ до флюенса 5×10^{13} ион/см². О природе радиационных дефектов в CaF_2 сделан обзор в [1]. Согласно литературным данным, за структурную полосу около 2.2 эВ отвечают электронные агрегатные центры окраски F-типа и коллоиды кальция [16]. К элементарным электронным центрам F-типа можно отнести F-центры (анионная вакансия с захваченным электроном) и их агрегаты (F_2 ,

F_3 и более крупные). При большой агрегации анионных вакансий в кристалле могут образовываться области микрометровых размеров, где отсутствуют ионы фтора. Данная область будет состоять из ионов кальция, что соответствует коллоидам кальция. Все вышеперечисленные центры имеют электронную природу и их оптическое поглощение лежит в видимой области спектра. Как можно заметить, с увеличением температуры отжига заметно выделяется структурность данной полосы при 2.2 эВ (см. вставку на рисунке 1).

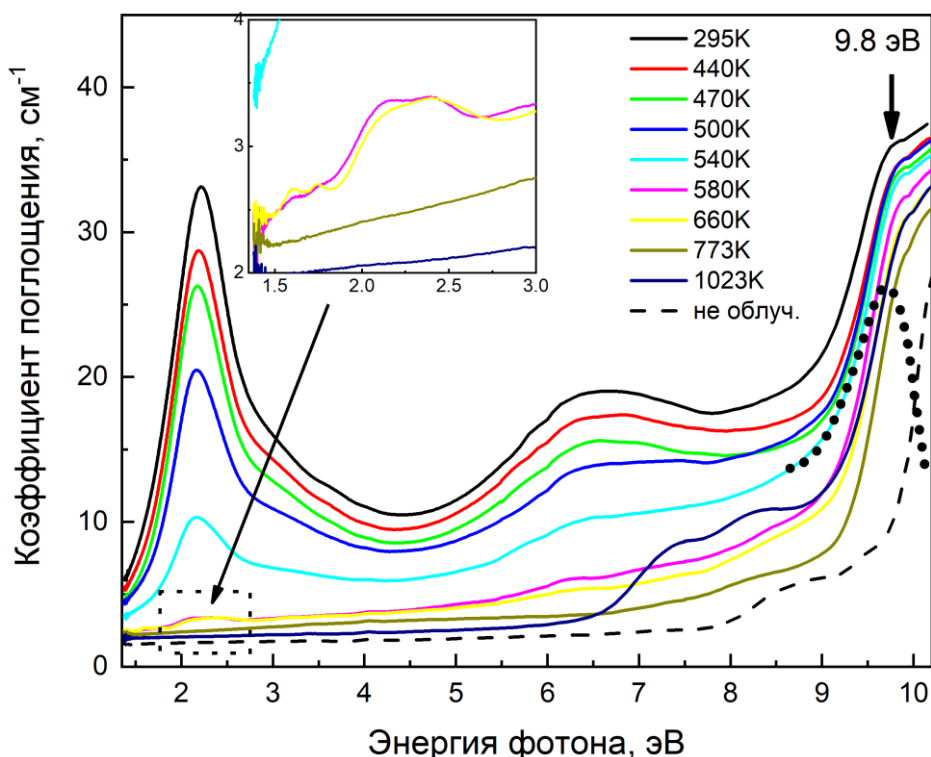


Рисунок 1. Спектры оптического поглощения CaF_2 , необлученного (пунктирная кривая) и облученного ионами Xe^{132} с энергией 230 МэВ до флюенса 5×10^{13} ион/см² после предварительного нагрева до определенных температур (сплошные кривые). Точечный график в области 9.8 эВ показывает разность коэффициентов поглощения облученного и необлученного образцов при 295К. Все спектры измерены при комнатной температуре [11]

Полоса около 6.5 эВ имеет дырочную природу. Согласно литературным данным, наиболее стабильными при комнатной температуре дырочными центрами окраски являются трехгалогидные квазимолекулы фтора F_3^- , представляющие собой линейную цепочку трех атомов фтора [9]. За поглощение при 6.5 эВ могут отвечать и более сложные дырочные дефекты.

С ростом температуры отжига интенсивность всех полос поглощения уменьшается. Поглощение в видимой и УФ областях спектра полностью исчезает. Разрушение дефектов и восстановление кристаллической структуры с ростом температуры, очевидно, связаны с рекомбинацией электронных и дырочных центров. При температуре 430

К дырочные центры разрушаются и дырки становятся подвижными и, мигрируя по решетке, рекомбинируют с электронными центрами [9]. В результате при достижении температуры отжига около 600-700 К мы видим практически полное исчезновение оптического поглощения в области до 7 эВ.

Особое внимание привлекает спектральная область вблизи ФП. Здесь очевидно смещение края ФП в низкоэнергетическую сторону спектра для облученного образца по сравнению со спектром поглощения необлученного образца. Данное смещение обусловлено наведением ионным облучением полосы поглощения с максимумом около 9.8 эВ (смотрите точечный график на рисунке 1). О природе данной полосы сделано предположение в статье [11]. Интенсивность полосы 9.8 эВ уменьшается с повышением температуры отжига, но по сравнению с полосами при 2.2 и 6.5 эВ спад интенсивности данной полосы незначителен. Более того, при нагреве до температуры 1023 К очевиден обратный рост полосы при 9.8 эВ. Также при этой температуре появляются две новые полосы поглощения около 7.4 и 8.3 эВ.

На рисунке 2 все спектры поглощения из рисунка 1 представлены в координатах Тауца. Линейная экстраполяция прямой области спектра дает возможность оценить энергию края ФП.

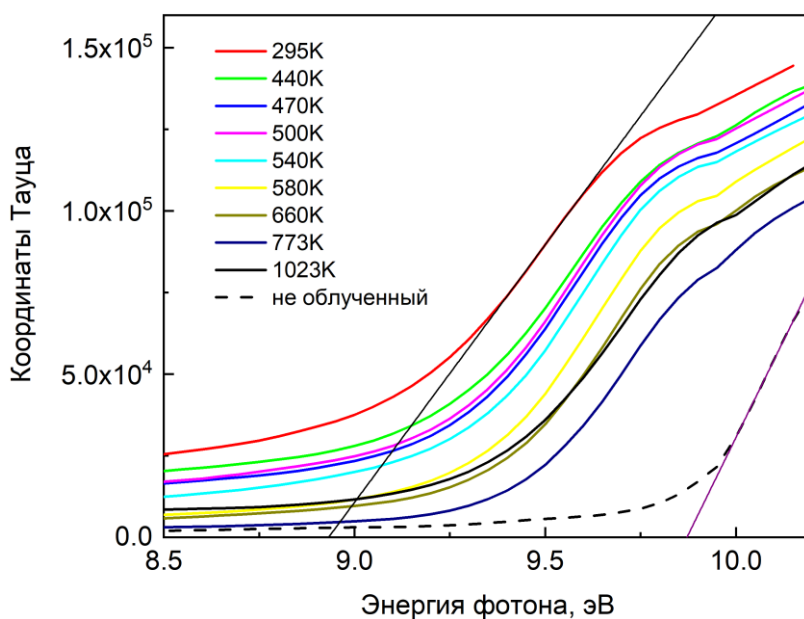


Рисунок 2. Спектры оптического поглощения в координатах Тауца монокристаллов CaF_2 , облученных при комнатной температуре ионами Xe^{132} , а также необлученного образца CaF_2 (пунктирная кривая). Прямые линии – результат аппроксимации

На рисунке 3 все спектры представлены в координатах Урбаха. Аналогично рисунку 2 линейная экстраполяция прямой области спектра дает возможность определить энергию Урбаха.

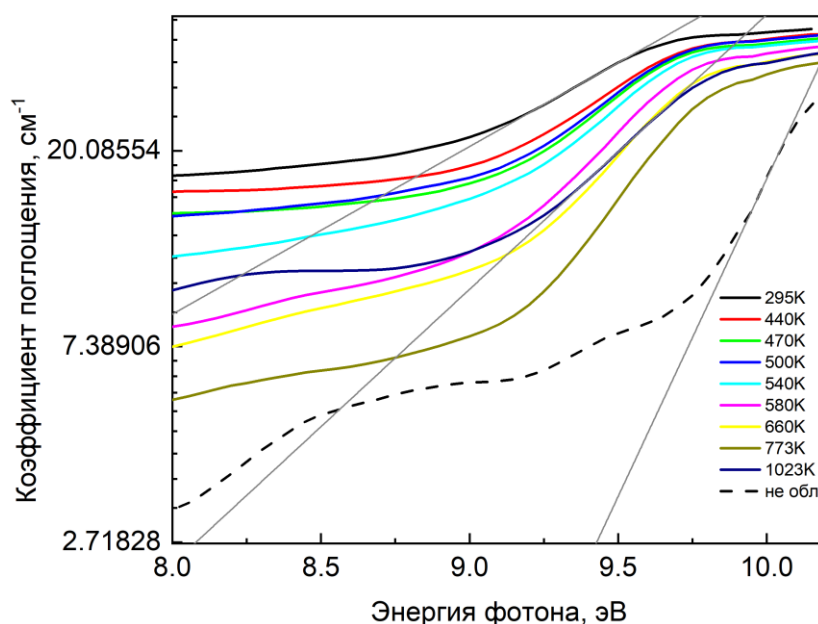


Рисунок 3. Спектры оптического поглощения в логарифмических координатах монокристаллов CaF_2 , облученных при комнатной температуре ионами Xe^{132} , а также необлученного образца CaF_2 (пунктирная кривая). Прямые линии – результат аппроксимации.

В таблице 1 представлены результаты аппроксимации спектров поглощения в координатах Тауца и Урбаха.

Таблица 1. Значения энергии ФП и Урбаха для монокристаллов CaF_2 при разных температурах отжига

T, K	295 (дооблуч.)	295	440	470	500	540	580	660	773	1023
Энергия ФП, эВ	9.87	8.93	9.07	9.12	9.13	9.18	9.26	9.32	9.41	9.30
Энергия Урбаха, эВ	0.31	1.17	1.02	0.85	0.89	0.79	0.63	0.60	0.48	0.71

На рисунках 4 и 5 представлены зависимости от температуры отжига энергии края ФП и энергии Урбаха, соответственно. Как можно видеть из рисунка 4 и таблицы 1, энергия края ФП для необлученного кристалла соответствует 9.87 эВ. Данное значение ниже энергии первого экситонного пика более чем на 1 эВ (первый анионный экситон поглощает на 11.2 эВ [13]). Как было указано выше, на структурную разупорядоченность влияют два фактора: статический и динамический. Так как все эксперименты проводились при комнатной и выше температурах, на данное смещение края основное влияние оказывает динамический эффект колебаний решетки и присутствующие в кристалле дорадиационные дефекты. После облучения кристалла ионами Xe^{132} заметно еще большее смещение края ФП (8.93 эВ при комнатной температуре), что обусловлено дополнительным статическим эффектом (создание радиационных дефектов).

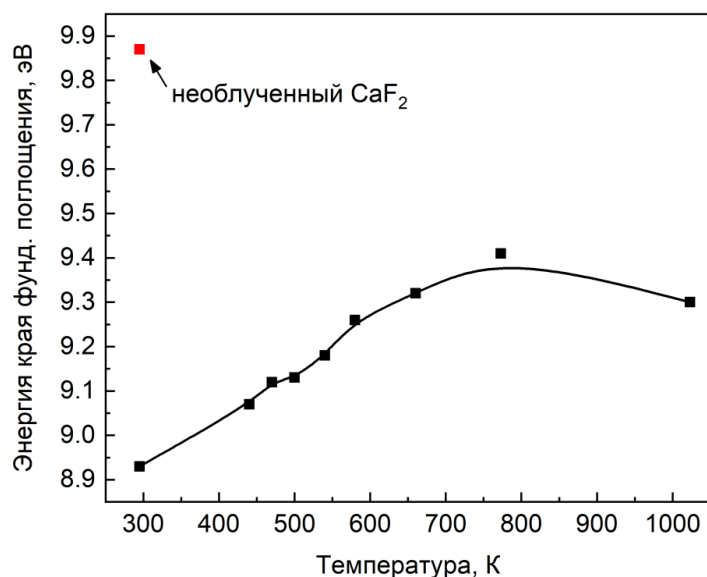


Рисунок 4. Зависимость энергии края ФП от температуры отжига для монокристалла CaF_2 , облученного ионами He^{132} . Красной точкой указана соответствующая энергия для необлученного образца при 295К.

Аналогичную ситуацию мы можем наблюдать и для энергии Урбаха (рисунок 5 и таблица 1). Для необлученного кристалла энергия Урбаха равна 0.31 эВ, что в основном связано с динамическим эффектом решеточных колебаний. Однако после ионного облучения происходит рост энергии разупорядочения до 1.17 эВ.

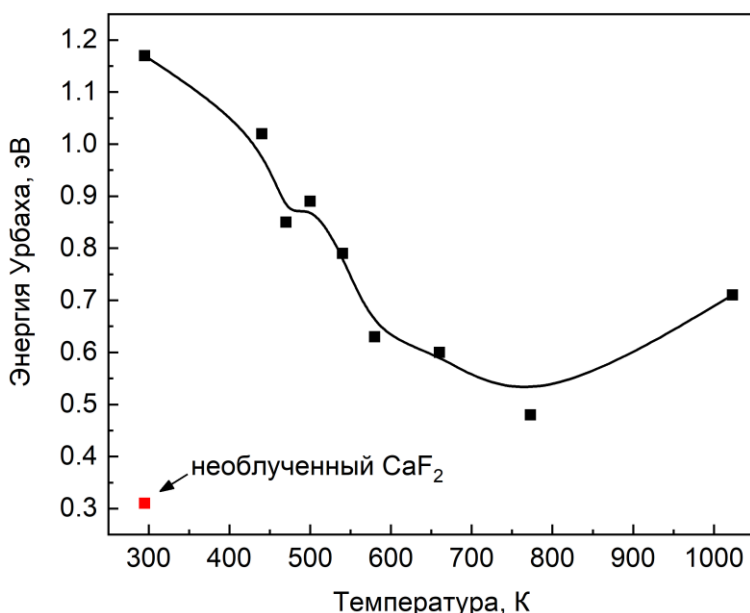


Рисунок 5. Зависимость энергии Урбаха от температуры отжига для монокристалла CaF_2 , облученного ионами He^{132} . Красной точкой указана соответствующая энергия для необлученного образца при 295К.

Известно, что в кристаллах флюорита при высоких температурах ниже температуры плавления возникают сложные структурные дефекты нерадиационного характера. Данные структурные изменения связаны с образованием анионных кластеров, состоящих из анионных вакансий, анионных интерстициалов и окружающих релаксированных анионов [17]. При низких температурах данные кластеры исчезают. В работе [18] показано, что при резком охлаждении (закалке) нагретого до высокой температуры кристалла флюорита термически образованные кластеры могут быть «заморожены». Аналогичная ситуация может возникнуть при ионном облучении.

Согласно модели термического пика [19], при прохождении тяжелого иона через материал он передаёт свою энергию электронной подсистеме через процессы возбуждения и ионизации. Это приводит к образованию локальной зоны высокой плотности энергии в области ионного трека и вокруг него. Далее энергия перераспределяется между электронами через электрон-электронное взаимодействие. Термализованные электроны передают свою энергию атомам решетки посредством электрон-фононного взаимодействия, что приводит к локальному нагреву. Для аморфных и полупроводниковых материалов локальный нагрев может быть достаточным для перехода материала в жидкую фазу вдоль трека иона. Зона плавления начинает охлаждаться за счёт теплопроводности и рассеивания тепла в окружающий материал. Время охлаждения зависит от теплопроводности материала. В аморфных материалах трек может состоять из рекристаллизованных областей или сохранять измененную аморфную структуру. Что касается кристаллических материалов, там возможно образование локальных зон повреждения – локального разупорядочения кристаллической структуры. Из-за высокой теплопроводности кристаллических материалов по сравнению с аморфными в них имеет место быстрое рассеяние энергии, и расплавление материала вдоль трека происходить не должно. Тем не менее, локальные изменения в кристалле присутствуют, и за счет высокой теплопроводности при резком охлаждении они «замораживаются». По этому механизму могут образовываться анионные кластеры в результате ионного облучения.

Как предположено в статье [11], оптическое поглощение при 9.8 эВ и соответствующее смещение края ФП может быть связано с поглощением анионного экситона как раз таки около анионных кластеров. В эксперименте по отжигу оптического поглощения с ростом температуры отжига мы можем видеть постепенное смещение края ФП (рисунок 4) и уменьшение энергии разупорядоченности кристалла (рисунок 5). Данный процесс, очевидно, связан с разрушением ответственных за полосу при 9.8 эВ анионных кластеров посредством их рекомбинации с подвижными дырочными центрами, а также с тем, что с ростом температуры отжига анионные кластеры сами становятся нестабильными и их распад ускоряется. Тем не менее, при более высоких температурах мы можем наблюдать обратный эффект. Отжиг до 1023 К приводит к обратному уменьшению энергии края ФП и увеличению энергии Урбаха. Данную ситуацию, вероятно, можно объяснить следующим образом. Образованные во время облучения все дырочные центры до определенной температуры отжига могли прорекомбинировать с электронными центрами и дальнейшее их воздействие на анионные кластеры будет незначительным. Кроме того, как выше было сказано, само повышение температуры способствует образованию анионных кластеров.

Заклучение

В данном исследовании были изучены экспериментальные данные о влиянии термического отжига на оптические и структурные характеристики облученных ионами Xe^{132} монокристаллов CaF_2 . Спектры поглощения облученных CaF_2 демонстрируют ряд широких комплексных полос поглощения в спектральном диапазоне 1.3-10 эВ, связанных с электронными и дырочными центрами окраски. Показано, что с повышением температуры отжига интенсивности полос поглощения снижается за счет взаимной рекомбинации дырочных и электронных дефектов, что указывает на частичное восстановление кристаллической структуры. Вычислены значения энергии края фундаментального поглощения и энергии Урбаха для облученных образцов при разных температурах отжига. Рост энергии Урбаха и смещение края фундаментального поглощения в низкоэнергетическую область при облучении высокоэнергетическими ионами связано с формированием новых структурных дефектов в анионной подрешетке (анионные кластеры).

Вклад авторов

Асылбаев Р.Н. – проведение основных экспериментов, написание текста статьи, интерпретация результатов исследования, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Сейтханова А.К. – анализ результатов экспериментов, критический пересмотр его содержания, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Кисабекова А.А. – анализ результатов экспериментов, критический пересмотр содержания статьи, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Жетписбаев Е.К. – проведение расчетов, анализ экспериментальных данных, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Список литературы

1. Hayes W. Crystals with the fluorite structure - electronic, vibrational and defect properties. London: Clarendon Press, 1974. 448 p. - **книга**
2. Michail C., Kalyvas N., Bakas A., Konstantinos N., Sianoudis I., Fountos G., Kandarakis I., Panayiotakis G., Valais I. Absolut elumine scence efficiency of europium-doped calcium fluoride (CaF_2 : Eu) single crystals under X-ray excitation // Crystals. – 2019. – Vol. 9., No.5. – P. 234. <https://doi.org/10.3390/cryst9050234> – **журнал на англ языке**

3. Yazici A.N., Chen R., Solak S., Yegingil, Z. The analysis of their moluminescent glow peaks of CaF_2 : Dy (TLD-200) after β -irradiation // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2002. – Vol. 35, №20. – P. 2526. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3727/35/20/311/meta-журнал на англ языке>
4. Rasheedy M.S., Nishimura F., Ichimori T. Studies on the dosimetric properties of TLD-300 // Radiation Physics and Chemistry. – 1994. – Vol. 44, №1-2. – P. 63–67. [https://doi.org/10.1016/0969-806X\(94\)90105-8](https://doi.org/10.1016/0969-806X(94)90105-8) –журнал на англ языке
5. Danilkin M., Lust A., Ratas A., Seeman V., Kerikmäe M. Afterglow kinetics and storage mechanism in CaF_2 :Mn (TLD-400) // Radiat Meas. – 2008. – Vol. 43, №2–6. – P. 300–302. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2007.11.042>–журнал на англ языке
6. Cooke D.W., Bennett B.L. Optical absorption and luminescence of 14-MeV neutron-irradiated CaF_2 single crystals // Journal of Nuclear Materials. – 2003. – Vol. 321, №2–3. – P. 158–164. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(03\)00240-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(03)00240-X)–журнал на англ языке
7. Pandurangappa C., Lakshminarasappa B. N., Singh F., Nagabhushana K. R. Optical absorption and thermoluminescence studies in 100 MeV swift heavy ion irradiated CaF_2 crystals // Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2011. – Vol. 269, №2. – P. 185–188. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.10.022>–журнал на англ языке
8. Bocciafuso M., Benyagoub A., Schwartz K., Trautmann C., Toulemonde M. Study of the damage produced in CaF_2 by swift heavy ion irradiation // Nucl Instrum Methods Phys Res B. – 2002. – Vol. 191, №1–4. P. 301–305. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)00580-3](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)00580-3)–журнал на англ языке
9. Davidson A.T., Kozakiewicz A.G., Comins J. D., Derry T. E., Schwartz K., Trautmann C. 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. <https://doi.org/10.1080/10420150215811>–журнал на англ языке
10. Assylbayev R., Akilbekov A., Dauletbekova A., Lushchik A., Shablonin E., Vasil'chenko E. Radiation damage caused by swift heavy ions in CaF_2 single crystals // Radiation measurements. – 2016. – Vol. 90., P. 18–22. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2015.12.034>–журнал на англ языке
11. Assylbayev R., Lushchik A., Lushchik Ch., Kudryavtseva I., Shablonin E., Vasil'chenko E., Akilbekov A., Zdorovets M. Structural defects caused by swift ions in fluorite single crystals // Optical materials. – 2018. – Vol. 75. – P. 196–203. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.10.026>–журнал на англ языке
12. Xiang X., Zu X. T., Zhu S., Ding T. H., Wang L. M. Effects of electron irradiation and subsequent annealing on the optical absorption and photoluminescence of CaF_2 single crystals // Optical Materials. – 2006. – Vol. 28, №8–9. – P. 930–934. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2005.05.002>–журнал на англ языке
13. Rubloff G. W. Far-ultraviolet reflectance spectra and the electronic structure of ionic crystals // Physical review B. – 1972. – Vol. 5, №2. – P. 662. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.662>–журнал на англ языке
14. Tauc J. Amorphous and Liquid Semiconductors. 1st ed. / ed. Tauc J. London: Plenum Publishing Company Ltd, 1974. 460 p. -книга
15. Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids // Physical Review. – 1953. – Vol. 92, № 5. – P. 1324–1324. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.92.1324>–журнал на англ языке
16. Rix S., Natura U., Loske F., Letz M., Felser C., Reichling M. Formation of metallic colloids in CaF_2 by intense ultraviolet light // Applied Physics Letters. – 2011. – Vol. 99, №26. – P. 261909. <https://doi.org/10.1063/1.3673301>–журнал на англ языке

17. Hutchings M.T., Clausen K., Dickens M.H., Hayes W., Kjems J.K., Schnabel P.G., Smith C. 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. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3719/17/22/011/meta>–**журнал на англ языке**

18. Ryskin A. I., Fedorov P. P., Bagraev N. T., Lushchik A., Vasil'chenko E., Angervaks A. E., Kudryavtseva I. Stabilization of high-temperature disorder of fluorine sub lattice by quenching in calcium fluoride crystals // Journal of Fluorine Chemistry. – 2017. – Vol. 200, P. 109-114. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2017.06.013>–**журнал на англ языке**

19. Toulemonde M., Dufour C., Paumier E. Transient thermal process after a high-energy heavy-ion irradiation of amorphous metals and semiconductors // Physical review B. – 1992. – Vol. 46, №22 – P. 14362. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.14362>–**журнал на англ языке**

Р.Н. Асылбаев*¹, А.К. Сейтханова¹, А.А. Кисабекова¹, Е.К. Жетписбаев¹

¹Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті,

Павлодар қ., Қазақстан Республикасы

(E-mail: ruslanassylbay@yandex.kz, ainur1179@mail.ru, akisabekova@mail.ru, ersain.zhetpisbaev@mail.ru)

Хе¹³² ауыр иондарымен сәулеленген СаF₂ монокристалдарындағы индукцияланған оптикалық жұтылудың температуралық күйдірілуін және құрылымдық бұзылыстарды зерттеу

Андатпа. Бұл мақалада энергиясы 230 МэВ болатын Хе¹³² ауыр иондарымен сәулеленген кальций фториді (СаF₂) монокристалдарындағы радиациялық процестер қарастырылады. Зерттеуде абсорбциялық спектроскопия және термо белсендірілген спектроскопия әдістері қолданылды. Термиялық күйдірудің радиациялық ақаулардан болатын құрылымдық өзгерістерге мен оптикалық жұтуға әсері зерттелді. СаF₂ үлгілері 295 К-нен 1023 К-ге дейінгі температура аралығында сатылы түрде қыздырылды, бұл кристалдық құрылымның қалпына келу динамикасын және оптикалық сипаттамалардың өзгеруін зерттеуге мүмкіндік берді. Оптикалық спектроскопияның эксперимент нәтижелері Тауц және Урбах координаттарында талданды. Нәтижелер күйдіру температурасы жоғарылаған сайын жұту жолақтарының қарқындылығы төмендейтінін көрсетеді, бұл ақау орталықтарының рекомбинациясын және құрылымдық бұзылыстың төмендеуін айқындайды. Сондай-ақ, 800 К-нен жоғары температурада Урбах энергиясының жоғарылауы және жаңа құрылымдық ақаулардың пайда болуымен байланысты іргелі жарық жұту жиегінің ығысуы анықталды. Жұмыс иондармен сәулеленген материалдардағы радиациялық ақаулардың пайда болу және эволюциясы механизмдері туралы жаңа мәліметтерді береді және СаF₂ негізіндегі оптикалық материалдардың сәулеленуге төзімділігін арттыру перспективаларын ашады.

Түйін сөздер: кальций фториді, радиациялық ақаулар, абсорбциялық спектроскопия, жылдам ауыр иондармен сәулелену, термиялық күйдіру, Тауц әдісі, Урбах энергиясы.

R. Assylbayev *¹, A. Seitkhanova¹, A. Kissabekova¹, E. Zhetpisbayev¹

*¹Pavlodar Pedagogical University named after A. Margulan, Pavlodar, Republic of Kazakhstan
(E-mail: ruslanassylbay@yandex.kz, ainur1179@mail.ru, akisabekova@mail.ru,
ersain.zhetpisbaev@mail.ru)*

Study of temperature annealing induced optical absorption and structural disorder in CaF₂ single crystals irradiated with Xe¹³² heavy ions

Abstract. This article studies radiation processes in calcium fluoride (CaF₂) single crystals irradiated with 230 MeV Xe¹³² heavy ions. The study utilized absorption spectroscopy and thermal activation spectroscopy. The effect of thermal annealing on structural changes and optical absorption caused by radiation defects was studied. CaF₂ samples were subjected to step-by-step heating to temperatures from 295 K to 1023 K, which made it possible to trace the dynamics of crystal structure restoration and changes in optical characteristics. The experimental results on optical spectroscopy were analyzed in Tauc and Urbach coordinates. The results show that with increasing annealing temperature, the intensity of absorption bands decreases, indicating recombination of defect centers and a decrease in structural disorder. It was also revealed that at temperatures above 800 K, there is an increase in the Urbach energy and a shift in the fundamental absorption edge, which is associated with the formation of new structural defects. The work provides new data on the mechanisms of formation and evolution of radiation defects in ion-irradiated materials and it also opens up new perspectives for increasing the radiation resistance of CaF₂-based optical materials.

Key words: calcium fluoride, radiation defects, absorption spectroscopy, fast heavy ion irradiation, Thermal annealing, Tauc method, Urbach energy.

References

1. Hayes W. Crystals with the fluorite structure - electronic, vibrational and defect properties. London: Clarendon Press, 1974. 448 p.
2. Michail C., Kalyvas N., Bakas A., Konstantinos N., Sianoudis I., Fountos G., Kandarakis I., Panayiotakis G., Valais I. Absolute luminescence efficiency of europium-doped calcium fluoride (CaF₂: Eu) single crystal under X-ray excitation // Crystals. – 2019. – Vol. 9, No.5. – P. 234. <https://doi.org/10.3390/cryst9050234>
3. Yazici A. N., Chen R., Solak S., Yegingil, Z. The analysis of thermoluminescent glow peaks of CaF₂: Dy (TLD-200) after β-irradiation // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2002. – Vol. 35., №20. – P. 2526. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3727/35/20/311/meta>
4. Rasheedy M.S., Nishimura F., Ichimori T. Studies on the dosimetric properties of TLD-300 // Radiation Physics and Chemistry. – 1994. – Vol. 44, №1-2. – P. 63–67. [https://doi.org/10.1016/0969-806X\(94\)90105-8](https://doi.org/10.1016/0969-806X(94)90105-8)
5. Danilkin M., Lust A., Ratas A., Seeman V., Kerikmäe M. Afterglow kinetics and storage mechanism in CaF₂:Mn (TLD-400) // Radiat Meas. – 2008. – Vol. 43, №2–6. – P. 300–302. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2007.11.042>

6. Cooke D.W., Bennett B.L. Optical absorption and luminescence of 14-MeV neutron-irradiated CaF₂ single crystals // *Journal of Nuclear Materials*. – 2003. – Vol. 321, №2–3. – P. 158–164. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(03\)00240-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(03)00240-X)
7. Pandurangappa C., Lakshminarasappa B. N., Singh F., Nagabhushana K. R. Optical absorption and thermoluminescence studies in 100 MeV swift heavy ion irradiated CaF₂ crystals // *Nucl Instrum Methods Phys Res B*. – 2011. – Vol. 269, №2. – P. 185–188. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.10.022>
8. Boccanfuso M., Benyagoub A., Schwartz K., Trautmann C., Toulemonde M. Study of the damage produced in CaF₂ by swift heavy ion irradiation // *Nucl Instrum Methods Phys Res B*. – 2002. – Vol. 191, №1–4. P. 301–305. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)00580-3](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)00580-3)
9. Davidson A. T., Kozakiewicz A. G., Comins J. D., Derry T. E., Schwartz K., Trautmann C. The colouration of CaF₂ crystals by keV and GeV ions // *Radiation effects and defects in solids*. – 2002. – Vol. 157., №6–12. – P. 637–641. <https://doi.org/10.1080/10420150215811>
10. Assylbayev R., Akilbekov A., Dauletbekova A., Lushchik A., Shablonin E., Vasil'chenko E. Radiation damage caused by swift heavy ions in CaF₂ single crystals // *Radiation measurements*. – 2016. – Vol. 90., P. 18–22. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2015.12.034>
11. Assylbayev R., Lushchik A., Lushchik Ch., Kudryavtseva I., Shablonin E., Vasil'chenko E., Akilbekov A., Zdorovets M. Structural defects caused by swift ions in fluorite single crystals // *Optical materials*. – 2018. – Vol. 75. – P. 196–203. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.10.026>
12. Xiang X., Zu X. T., Zhu S., Ding T. H., Wang L. M. Effects of electron irradiation and subsequent annealing on the optical absorption and photoluminescence of CaF₂ single crystals // *Optical Materials*. – 2006. – Vol. 28, №8–9. – P. 930–934. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2005.05.002>
13. Rubloff G. W. Far-ultraviolet reflectance spectra and the electronic structure of ionic crystals // *Physical review B*. – 1972. – Vol. 5, №2. – P. 662. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.662>
14. Tauc J. *Amorphous and Liquid Semiconductors*. 1st ed. / ed. Tauc J. London: Plenum Publishing Company Ltd, 1974. 460 p.
15. Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids // *Physical Review*. – 1953. – Vol. 92, № 5. – P. 1324–1324. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.92.1324>
16. Rix S., Natura U., Loske F., Letz M., Felser C., Reichling M. Formation of metallic colloids in CaF₂ by intense ultraviolet light // *Applied Physics Letters*. – 2011. – Vol. 99, №26. – P. 261909. <https://doi.org/10.1063/1.3673301>
17. Hutchings M. T., Clausen K., Dickens M. H., Hayes W., Kjems J. K., Schnabel P. G., Smith C. 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. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0022-3719/17/22/011/meta>
18. Ryskin A. I., Fedorov P. P., Bagraev N. T., Lushchik A., Vasil'chenko E., Angervaks A. E., Kudryavtseva I. Stabilization of high-temperature disorder of fluorine sub lattice by quenching in calcium fluoride crystals // *Journal of Fluorine Chemistry*. – 2017. – Vol. 200, P. 109–114. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2017.06.013>
19. Toulemonde M., Dufour C., Paumier E. Transient thermal process after a high-energy heavy-ion irradiation of amorphous metals and semiconductors // *Physical review B*. – 1992. – Vol. 46, №22 – P. 14362. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.14362>

Сведения об авторах:

Асылбаев Р.Н. – автор для корреспонденции, PhD, доцент НАО «Павлодарский педагогический университет имени А.Маргулана», ул. Олжабай батыра, 60, 140008, г. Павлодар, Республика Казахстан.

Сейтханова А.К. – PhD, ассоциированный профессор, профессор НАО «Павлодарский педагогический университет имени А.Маргулана», ул. Олжабай батыра, 60, 140008, г. Павлодар, Республика Казахстан.

Кисабекова А.А. – PhD, ассоциированный профессор НАО «Павлодарский педагогический университет имени А.Маргулана», ул. Олжабай батыра, 60, 140008, г. Павлодар, Республика Казахстан.

Жетписбаев Е.К. – преподаватель-эксперт НАО «Павлодарский педагогический университет имени А.Маргулана», ул. Олжабай батыра, 60, 140008, г. Павлодар, Республика Казахстан.

Assylbayev R.N. – corresponding author, PhD, docent of NJSC “Pavlodar Pedagogical University named after A. Margulan”, Olzhabay batyr str., 60, 140008, Pavlodar, Republic of Kazakhstan.

Seitkhanova A.K. – PhD, associate professor, professor of NJSC “Pavlodar Pedagogical University named after A. Margulan”, Olzhabay batyr str., 60, 140008, Pavlodar, Republic of Kazakhstan.

Kissabekova A.A. – PhD, associate professor of NJSC “Pavlodar Pedagogical University named after A. Margulan”, Olzhabay batyr str., 60, 140008, Pavlodar, Republic of Kazakhstan.

Zhetpisbayev Y.K. – teacher expert of NJSC “Pavlodar Pedagogical University named after A. Margulan”, Olzhabay batyr str., 60, 140008, Pavlodar, Republic of Kazakhstan.

Асылбаев Р.Н. – хат-хабар авторы, PhD, «Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ доценті, Олжабай батыр, 60, 140008, Павлодар қ., Қазақстан Республикасы.

Сейтханова А.К. – PhD, қауымдастырылған профессор, «Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ профессоры, Олжабай батыр, 60, 140008, Павлодар қ., Қазақстан Республикасы.

Кисабекова А.А. – PhD, «Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ қауымдастырылған профессоры, Олжабай батыр, 60, 140008, Павлодар қ., Қазақстан Республикасы.

Жетписбаев Е.К. – «Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ сарапшы оқытушысы, Олжабай батыр, 60, 140008, Павлодар қ., Қазақстан Республикасы.



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/>).



МРНТИ 29.19.11; 29.19.21

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-36-51>

Научная статья

Атом қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажын иондаушы сәулеленуден биологиялық қорғау

Д.С. Ергалиев¹, Д.С. Ким¹, М.Ш. Шинжирбеков², Д.М. Калманова³,
Ө.К.Әбдірашев^{3*}

¹ АО «Азаматтық авиация академиясы», Алматы қ.

² Авиациялық персоналды даярлау орталығы

³ Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

(E-mail: ¹des-67@yandex.kz, ¹dmitriy.kim@ukr.net, ²m.shinzhirbekov@agakaz.kz,
³dinara_kalmanova@mail.ru, ³omeke_92@mail.ru)

Аңдатпа. Атомдық қозғалтқышы бар ұшақтарды (атомолеттерді) қарқынды дамыту 40-шы жылдардың ортасынан бастап ХХ ғасырдың 60-шы жылдарының ортасына дейін жүргізілді. Сол кезеңдегі жетекші ядролық державалардың конструкторлық бюролары атомолет жобаларында уран-235 энергия өндірудің жоғары тығыздығын пайдалану арқылы дәстүрлі отынның шектеулі қорынан тұратын ұзақ қашықтықтағы ұшақтардың негізгі мәселесін шешті, оның бірнеше грамы ондаған сағат бойы ұшудың үздіксіздігін қамтамасыз етуге жеткілікті. Ядролық күш қондырғысы және құйрық бөлігінде орналасқан 2-4 атомды турбореактивтік қозғалтқышы бар атомолет экипажы 2 апта бойы мүлдем қонбай ауада барражирлей тосқауылдай алатын еді. Ядролық отынның ерекше өнімділігі түріндегі айқын артықшылықпен қатар, атомолеттердің үлкен өлшемдері мен реакторлық қондырғының үлкен массасы, апаттардың апатты салдары және кең аумақтардың немесе акваториялардың радиоактивті ластануының болуы сөзсіз, сондай-ақ тізбекті реакция нәтижесінде пайда болатын радионуклидті иондаушы сәулелену көздерімен ұшу экипажының созылмалы сәулеленуі сияқты елеулі кемшіліктері болды. Егер Атомолеттерге арналған ядролық реактордың массалық-габариттік өлшемдері мәселесі "Туполев" КБ-да шешілсе, ал апат болған жағдайда реактордың қауіпсіздігін оны фюзеляждан бөліп, кейіннен парашют жүйесіне жұмсақ қону жолымен қамтамасыз ету ұсынылса, онда ұшу экипаждарының сәулелену дозаларын азайту мәселесі ашық күйінде қалды. Осы мақалада қорғаныс материалын таңдау және оның қалыңдығын есептеу әдісі ұсынылған, олардың жобалары бүгінгі күнде қайтадан өзекті және перспективалы болған атомолеттердің ұшқыштарының радиациялық қауіпсіздігін қамтамасыз ету үшін қажет.

Түйін сөздер: атомдық күш қондырғы, ядролық реактор, атомолет, радиациялық қауіпсіздік, сәулелену дозасы, әлсіреу еселігі.

Жіберілді 07.10.2024. Өзгертілді 19.11.2024. Қабылданды 20.11.2024. Онлайн қол жетімді 25.12.2024

¹* хат-хабар авторы

Кіріспе

1960 жылдардың ортасында атомолеттер құру жөніндегі мемлекеттік бағдарлама жабылғанға дейін КБ "Туполев" ядролық реакторы және әрқайсысы 15000 ат күші бар төрт турбовинтті қозғалтқышы бар Ту-95М бомбалаушысын шығарды. Егер біз осы жобаны негіз ретінде қабылдайтын болсақ және атомдық шағын электр генераторынан жұмыс істейтін 4 бұрандалы электр қозғалтқыштарының КБ «Туполев»-да жасалған күштік сұлбасын қолданатын болсақ, онда соңғысының жылу және энергетикалық қуаты сәйкесінше 15 және 20 МВт болуы керек. Болжамды есептеулерге сәйкес, осы атомолеттің ұшу экипажы мүшелерінің сәулелену дозаларының жеке баламалары тәулігіне шамамен 2,5 бэр (25 мЗв) [1] құрайды, ал иондаушы сәулелену көздерімен кәсіби қызметпен айналысатын персоналдың тиімді сәулелену дозасы жылына 2 бэрден (20 мЗв) аспауы тиіс [2]. Радиациялық қауіпсіздікті нормалау қағидатын сақтау үшін атомолеттің ұшу экипажын қорғауды ескеру қажет. Әуе кемесінің шектеулі өлшемдеріне байланысты қашықтықтан қорғауды қолдану мүмкін емес, ал уақытты қорғау оны ұзақ мерзімді ұшақ ретінде пайдалануды болдырмайды, сондықтан экрандау ALARA-ның атомдық күш қондырғысы шығаратын сәулелену дозаларын рұқсат етілген шектерге дейін азайту үшін мүмкін болатын жалғыз әдісі болып қала береді.

Мәселені қою

Әуе кемесінің атом күштік қондырғысы ретінде қызмет ететін жұмыс істейтін реактордың белсенді аймағында ұшу экипажының мүшелеріне әсер ететін нейтрондар мен гамма-сәулелену көздері жасалады. Иондаушы сәулеленудің басқа түрлерінің көздері контейнменттің регерметизациялануымен болған апаттық жағдайларды қоспағанда, белсенді аймақтан тыс болмайды, сондықтан жоспарлы пайдалану жағдайында А тобының персоналына жататын ұшқыштардың сәулелену дозалары қалыптастырылмайды [3].

Реактордың белсенді аймағында түзілетін нейтрондардың 4 түрінің ішінде персонал үшін қауіптің негізгі көзі лезде ^{235}U , ^{233}U и ^{239}U уран атомдарының ядроларының бөліну процесінде жүретіндер болады. Бұл радионуклидтерді бөлу кезінде сәйкесінше шамамен $2,5 \pm 0,03$, $2,47 \pm 0,03$ және $2,9 \pm 0,04$ нейтрондар болады. Салыстыру үшін, жартылай ыдырау периоды 0,18–54,5 секунд болатын жеке бөлшектенген радиоизотоптар шығаратын кешіктірілген нейтрондарды өндірудің қарқындылығы орташа есеппен 0,002–0,007 нейтр./бөлу [4].

Отынның, баяулатқыштың, жылу тасымалдағыштың және құрылымдық материалдардың құрамына кіретін элементтердің ядроларымен жылу нейтрондарын ұстау нәтижесінде 10 МэВ дейінгі энергиямен ұсталатын гамма-сәулелену пайда болады. Гамма – сәулеленудің нақты спектрі мен энергетикалық таралуы белсенді аймақтың құрамына байланысты, бірақ негізгі бөліну өнімдері: ^{51}Cr , ^{54}Mn , ^{58}Co , ^{59}Fe , ^{60}Co , ^{65}Zn , ^{93}Nb , ^{95}Zr , ^{110m}Ag , $^3\text{H}(\text{T})$, ^{14}C , ^{41}Ar [5].

Нейтрондардан қорғауды есептеудің қолданыстағы әдісі [6] құрамында сутегі бар материалдың (мысалы, парафин) қабатының қалыңдығын есептеуге мүмкіндік береді, бұл олардың атомолет экипажына әсерін болдырмайды. Қатты және енетін гамма-сәулеленуден қорғау үшін материалды таңдау және оның қалыңдығын анықтау 2015 жылдан бері орын алған радиациялық қауіпсіздік нормалары мен ережелерінің өзгерістерін ескере отырып, есептеу алгоритмін нақтылауды талап етеді.

Жоғарыда аталған гамма-сәуле шығаратын радионуклидтердің максималды энергиясы ^{60}Co ($E \approx 1,25 \text{ МэВ}$), ол басқа көздермен бірдей белсенділікпен үлкен керма мен сіңірілген сәулелену дозасын жасайды, сондықтан қорғаныс экранының қалыңдығының типтік есебі берілген изотоптың физикалық параметрлері бойынша жасалады.

Зерттеудің мақсаты мен міндеттері

Осы бапта жүргізілген зерттеудің мақсаты қамтамасыз ету және бақылау саласындағы ұлттық және халықаралық заңнаманың бүгінгі талаптарына сәйкес сәулеленудің есептік және нормаланатын дозаларын айқындау қағидаларындағы өзгерістерді ескере отырып, атом күштік қондырғысы бар әуе кемесінің бортындағы ядролық реактордың белсенді аймағында пайда болатын гамма-сәулелену көздерінен қорғаныш экранының қалыңдығын есептеу әдістемесін ұсыну болып табылады радиациялық қауіпсіздік жағдайлары.

Мақсатқа жету барысында келесі міндеттер шешілді:

1. қорғаныс материалын және оның қалыңдығын таңдаудың қолданыстағы әдісінің сипаттамасы келтірілген;
2. жеке радионуклид көздерінің белсенділігіне байланысты экспозициялық дозаның қуатын есептеуге негізделген, бірақ оның ауа кермасына және жеке баламасына қажетті түрлендірулерін қамтитын сәулелену қарқындылығының әлсіреу еселігін есептеу әдісі ұсынылды;
3. Атом қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажының тиімді сәулелену дозасын есептеудің үш тәсіліне салыстырмалы талдау жүргізілді;
4. әуе кемелерінің ұшу экипаждарының ғарыштық сәулеленуінің жеке дозаларын геомагниттік ендік пен ұшу орындалатын теңіз деңгейінен биіктік негізінде есептеудің бұрын әзірленген әдісі сипатталған.

Зерттеу материалдары мен әдістері

Тақырыпты қарастыру барысында ұсынылған материалдардың ұшаққа берілген модель бөлшектері пайдаланылады, олардың өндіріске қазіргі заманға дейінгі пайдаланысқа сипатталып келмеді, негізгі материалға прототиптің көп уақыт негізінде пайдаланбады. И.В. Курчатовтың жетекшілік ете отырып Ту-95 атомолеті негізінде дайындалынған азды реактор прототиптері болған кезде, Атом қондырғысына бақылау жүргізетін амбиенттік доза эквиваленттеріне шамасын өлшенетін және фотондарды

иондайтын зарядталып алған бөлшектерге негізгі бөліктерінің құлдырауына әкелетінің байқап, берілген бөліктердің қалыңдығына негізгі есептеулер жүргізуге болады. Қорғаныс қалыңдығына және экранға ұсынылған материалдың тығыздығына қарай пайдалы байланыстар ұсынамыз. Негізгі, гамма-сәулеленуде жартылай әлсіздікке ұшырауы үшін қорғасынның қорғанатын қабаттарына қалыңдықтары 1,3 см, темірден – 3,6 см, бетоннан – 13 см, модификацияланғандықтан арболиттен – 20 м, Судан – 27 см.

Жартылай әлсіреу қабаттарының саны әлсіреудің қажетті еселігіне байланысты және формула бойынша анықталады:

$$k = 2^n, \quad (1)$$

k – әлсіреудің қажетті еселігі, n – жартылай әлсіреу қабаттарының саны.

Формула бойынша k логарифмі арқылы n иррационалды есептеуге жүгінбеу үшін:

$$n = \frac{\ln k}{0,693}, \quad (2)$$

1-кестедегі шамамен алынған деректерді пайдалануға болады.

Кесте 1. (k) еселігі мен жартылай әлсіреу қабаттарының саны (n) арасындағы шамамен байланысы

k	2	4	8	16	32	64	125	250	500	1000
n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

Егер ИИ-ны 8000 есе әлсірету қажет болса, яғни (1) $8000 = 2^n$ болса, онда k (3) немесе 8 және 1000 есе әлсіреуді қамтамасыз ету үшін қажетті N қабаттарын қосу арқылы есептелуі мүмкін:

$$n = 3 + 10 = 13. \quad (3)$$

Алайда, гамма-сәуле шығаратын радионуклидті көздерден атомдық күштік қондырғысы бар әуе кемесінің ұшу экипажы үшін оның радиациялық қауіптілігін бағалау мақсатында реактордан әр түрлі қашықтықтағы амбиентті доза эквиваленттерінің қуаттарын нақты өлшеу деректері болмаған жағдайда, ең алдымен олардың жиынтық белсенділігін ($A(\tau)$, Бк) формуланы қолдана отырып есептеу қажет [8]:

$$A(\tau) = 6,3 \times 10^6 \times (1 - 0,9\tau - 0,16) \times W\tau, \quad (4)$$

мұндағы τ – реактордың жұмыс уақыты, ч; $W\tau$ – реактордың жылу қуаты, Вт.

Егер үздіксіз ұзақтығы 24 сағаттан кем емес ұзақ мерзімді рейстер жасауға қабілетті атомолет үшін жылу қуаты 15 МВт реактор қажет болса [9], онда (4) формула бойынша есептелген оның белсенді аймағындағы радиоактивті бөліну өнімдерінің жиынтық белсенділігі 43,35 ТБк құрайды:

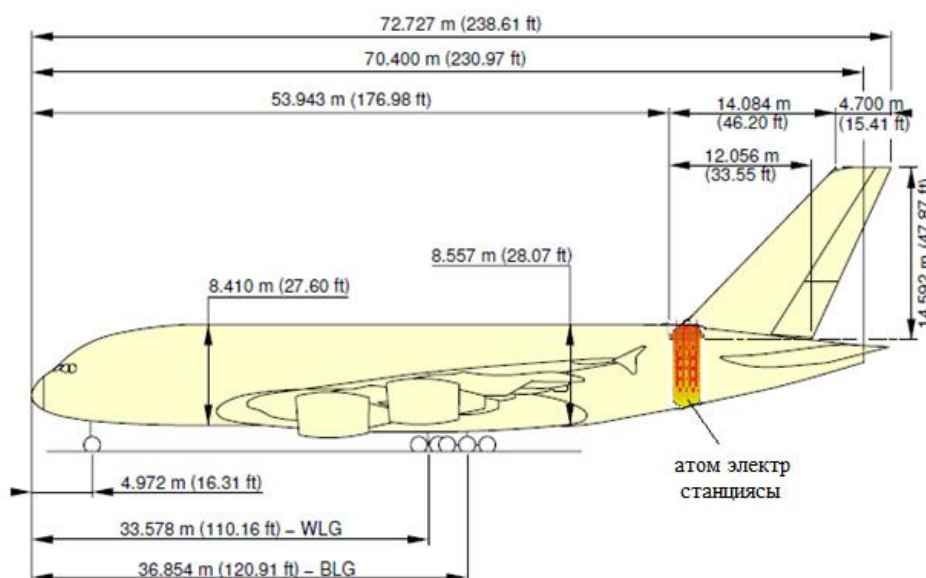
$$A(\tau) = 6,3 \times 10^6 \times (1 - 0,9 \times 24 - 0,16) \times 15\,000\,000 = 43\,350\,602\,871\,392 \text{ Бк.} \quad (5)$$

Дозаның қуатын консервативті есептеу үшін ^{60}Co энергиясын ескеру қажет, бұл реактордың өзегіндегі басқа сынық гамма-сәуле шығарғыштармен салыстырғанда максималды. Радионуклидтің белгілі белсенділігімен ол жасаған дозаның экспозициялық қуатын формула бойынша есептеуге болады:

$$P_X = \frac{\lambda \times A}{R^2} \quad (6)$$

мұнда P_X – дозаның экспозициялық қуаты, Р/ч; λ – ыдырау тұрақтысы (^{60}Co $\lambda = 12,853$); A – радионуклидтің белсенділігі, мКи (1 Ки = $3,7 \times 10^{10}$ есебімен Бк (5) өрнекте анықталған белсенділік $1,17 \times 10^6$ мКи); R – радионуклидтен қашықтығы, см.

Радионуклидтен қашықтықты (R) реакторлық күштік қондырғының ұшу экипажының кабинасынан қашықтығына тең қабылдау керек. Егер атомолетке гипотетикалық түрлендіруге арналған негізгі әуе кемесі ретінде бүгінгі күнге дейін ең ірі өндірістік әуе лайнерін Airbus A-380 таңдаса, онда атомдық күш қондырғысының құйрық бөлігіндегі орналасқан жерінен ұшқыштар кабинасына дейінгі қашықтық 45,5 м [10] болады, оны 1-суреттен оңай анықтауға болады.



Сурет 1 – Airbus A-380 типтік әуе кемесінің өлшемдері

Осылайша, Airbus A380 базасында құрылған ұшақтың ұшқыштар кабинасында құйрық бөлігінде орналасқан жылу қуаты 15 МВт жұмыс істейтін атом электр станциясының гамма-сәулеленуінен болатын дозаның экспозициялық қуаты:

$$P_X = \frac{12,853 \times 1,17 \times 10^6}{4550^2} = 0,73 \frac{\text{P}}{\text{ч}}, \quad (7)$$

1 зиверт пен 100 рентген теңдігі негізінде эквивалентті доза қуатын (P_H) есептеп:

$$P_H = 0,01 \times P_X = 7,3 \text{ мЗв/ч}, \quad (8)$$

анықтамалық кітаптан белгілі бір материалдан қорғаныстың қалыңдығын таңдауға мүмкіндік беретін әлсіреу коэффициентін анықтауға болады.

Иондаушы сәулеленудің әлсіреу еселігі белгілі бір көзден эквивалентті доза қуатының А тобы персоналы үшін белгіленген рұқсат етілген жылдық доза қуатының шегіне қатынасы ретінде есептеледі:

$$K = \frac{P_H}{P_{\text{доп}}}, \quad (9)$$

K – иондаушы сәулеленудің әлсіреу еселігі, P_H – иондаушы сәулелену көзінен эквивалентті дозаның қуаты, Зв/ч; $P_{\text{доп}}$ – А тобы персоналы үшін рұқсат етілген доза қуаты, Зв/ч.

Гигиеналық нормативтерге сәйкес [2], иондаушы сәулелену көздерімен тікелей жұмыс істейтін барлық қызметкерлер, соның ішінде қауіпті радиоактивті жүктерді тасымалдайтын жүргізушілер кіретін А тобы персоналының жылдық кәсіптік сәулеленуінің рұқсат етілген дозасы 20 мЗв-қа тең. Сондай-ақ А тобының қызметкерлеріне арналған гигиеналық нормативтермен 1700 сағатты құрайтын қысқартылған жылдық жұмыс уақыты анықталды [3]. Осылайша, А тобының қызметкерлері үшін рұқсат етілген доза қуатын есептеуге болады:

$$P_{\text{доп}} = \frac{20}{1700} = 11,76 \text{ мкЗв/ч}. \quad (10)$$

Егер әуе кемесінің құйрық бөлігіндегі атомдық күш қондырғысынан 45,5 м қашықтықта P_H 7,3 мЗв/сағ тең болса, онда әлсіреудің қажетті еселігі (k) 621 құрайды:

$$k = \frac{7300 \frac{\text{мкЗв}}{\text{ч}}}{11,76 \frac{\text{мкЗв}}{\text{ч}}} \approx 621. \quad (11)$$

Қажетті әлсіреу коэффициентін, ^{60}Co изотопы (1,25 МэВ) тудыратын гамма-сәулелену энергиясын және қорғаныс экранының материалын біле отырып, оның қалыңдығын анықтамалық [11] арқылы оңай анықтауға болады: қорғасынды пайдаланған кезде ол 12,3 см болады.

Осыған ұқсас, 1 мЗв жылдық тиімді дозасының шегіне және 8800 сағатқа тең иондаушы сәулеленудің әсер ету уақытына сүйене отырып, қуаты 0,11 мкЗв/сағ-тан асатын техногендік сәулеленуге ұшырамауға тиіс халықты қосымша қорғаудың қалыңдығы есептеледі, оның әсер ету қуаты атомдық күш қондырғысынан 45,5м қашықтықта 7,3 мЗв/сағ болғанда ұшқыштар кабинасында халықтың сәулелену дозасынан асып кетпеуі үшін қалыңдығы 7,7 см қорғасыннан қосымша қорғаныс қажет.

Алайда, егер эквивалентті дозадан емес, экспозициялық доза жылдамдығынан шығатын болсақ, 1 зиверт 100 рентгенге тең деген болжаммен шектелуге болмайтын бірқатар түрлендірулерді жүргізу қажет. Мысалы, 45,5 метр (4550 см) қашықтықта өлшенген немесе (7) формула бойынша есептелген ⁶⁰Со көзінен алынған гамма-сәулеленудің әсер ету дозасының жылдамдығы (RD) 0,73 Р/сағ болса, онда оны ескеру қажет. Электрондық тепе-теңдік жағдайында белгілі бір көлемге шығатын және түсетін электрондардың жалпы энергиялары тең болғанда, әсер ету өлшем бірліктері мен ауадағы жұтылатын доза арасында мынадай байланыс орнатылады:

$$1 \text{ Р} = 0,0087 \text{ Гр}, \quad (12)$$

яғни, 1 Р экспозициялық дозасы 0,87 рад-қа тең ауадағы сіңірілген дозаға сәйкес келеді, алайда бұл мән сол өрісте сәулеленудің әсерінен адам алатын дозадан өзгеше. Ауадағы доза негізінен азоттың, көміртектің және оттегінің болуына байланысты, ал биологиялық тінде сутегі (массасы бойынша 10,1%) бар, ол басқа элементтермен салыстырғанда екі есе көп сіңіру қабілетімен сипатталады, сондықтан биологиялық тінде 1 р экспозициялық доза 0,0095 гр-ге тең сіңірілген дозаға сәйкес келеді [12].

Рентген, бета және гамма – сәулелену үшін эквивалентті доза сіңірілгенге тең болғандықтан, 1 Р/сағ 0,0095 Зв/сағ-қа тең болуы мүмкін, содан кейін 45,5 м қашықтықтағы атомдық күш қондырғысындағы гамма-сәуле шығаратын радионуклидтердің эквивалентті дозасының (РН) қуаты:

$$\text{РН} = 0,73 \times 0,0095 = 6,9 \text{ мЗв/ч}. \quad (13)$$

Сыртқы сәулеленудің әсерлі дозасы (Е) формула бойынша есептеледі:

$$E = \text{РН} \times \text{КП}, \quad (14)$$

КП – эквивалентті дозадан әсерлі дозаға ауысу коэффициенті:

– 0,642-0,7-ні 1,09-ға бөлуге байланысты. Ауада сіңірілген доза туралы деректерге негізделген, қоршаған ортада барлық гамма-сәулелендіретін радионуклидтерден тиімді дозаны есептеу үшін БҰҰ-ның Атом радиациясының әсері бойынша Ғылыми комитеті 0,7 [13] аудару коэффициентін қолдануды ұсынды, бұл әртүрлі органдар мен

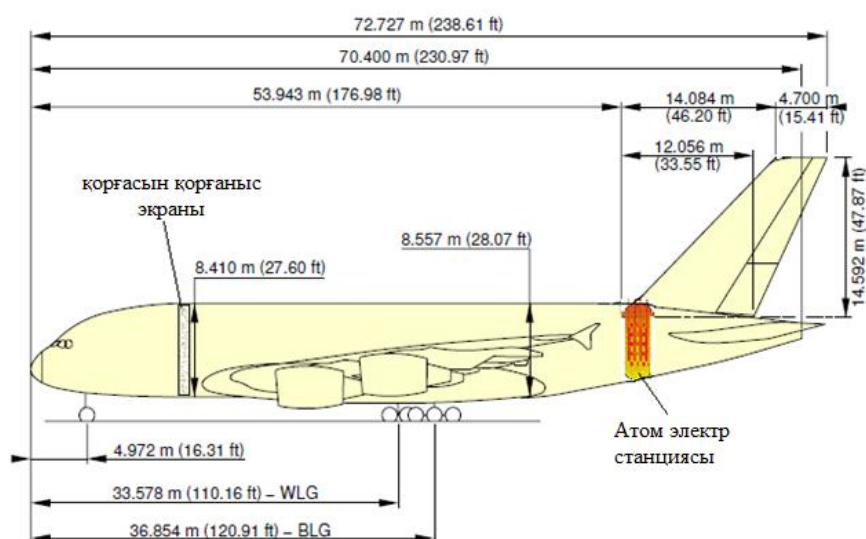
тіндермен сәуленің шығарылуын және оның кері таралуын ескеру үшін, және ауада сіңірілген дозаны түрлі энергиялы фотондар үшін тиімді дозаға аудару үшін нақтырақ коэффициенттерді көрсетті. Гамма-сәулеленудің сіңірілген дозасын ауаэквивалентті дозиметрлермен өлшеу кезінде өлшенген нәтижелерді биологиялық тіндегі эквивалентті доза бірліктеріне аудару қажет, бұл үшін гамма-сәулеленудің спектрін білу қажет. Спектр туралы деректердің болмауы және дозаның қуатының фоннан шағын айырмашылықтары кезінде ауада сіңірілген дозадан тіндегі эквивалентті дозаға өту коэффициентін 1,09 деп қабылдауға болады, бұл биологиялық тіндегі (0,0095 Гр) жүйеден тыс экспозициялық дозаның эквивалентінің бірлігінің (1 Р) ауадағы (0,0087 Гр) ұқсас көрсеткішіне қатынасының нәтижесінде анықталады;

– 1.903 – [14] III.1a кестесіне сәйкес пластиналық фантомдағы ауа кермасының эквивалентті дозаға (Hr(6)/K) айналу коэффициентінің максималды мәні;

– 1 – [3]-дегі әсерлі дозаның анықтамасына сәйкес, өйткені әртүрлі мүшелер мен тіндердің радиосезімталдықты есепке алатын салмақ коэффициенттерінің қосындысы бірлікке тең.

Бірінші жағдайда экспозициялық доза күші 0,73 Р/сағ әсерлі доза күшіне 4,43 мЗв/сағ тең болады, екіншісінде – 13,13 мЗв/сағ, үшіншісінде – 6,9 мЗв/сағ. Бұл доза күштерінің қажетті әлсірету мөлшерлері 377, 1117 және 587 болып табылады, ал қорғасын қорғаныс қалыңдығы: тиісінше 11,3 см, 13,5 см және 12 см.

Сәулелік қауіптіліктің гиперпрофилактикасы принципіне сүйене отырып, 15 МВт термиялық қуаттылығы бар атомдық энергетикалық қондырғысы бар әуе кемесінің ұшқыш экипажының кабинасын, фюзеляждың құйрық бөлігінде, 2-суретте көрсетілгендей, 13,5 см қалыңдығындағы қорғасын қабырғамен қорғау керек.



Сурет 2 – Airbus A-380 үлгілі әуе кемесінің бортындағы ұшқыш экипажын сәулелік қорғау үшін атомдық күш қондырғысы мен қорғасын экранының орналасу схемасы

Қорғасын экранының массасы, Airbus A-380 үлгілі әуе кемесінің ұшқыш экипажын 15 МВт термиялық қуаттылығы бар атомдық күш қондырғымен радионуклидтік гамма-сәулелену көздерінен, мысалы, жоғары энергетикалық ^{60}Co -дан қорғау үшін, фюзеляждың биіктігі 8,410 м, ені 7,1 м және қорғасынның тығыздығы 11 350 кг/м³ есептеуінен 91,5 кг құрайды.

Осы қорғасын экранын, нейтрондардан қорғау үшін парафин қабатымен жабылған кезде, атомолет пилоттарының сәулелену дозасы, сондай-ақ қалыпты әуе кемелерінің ұшқыш экипажының дозасы тек космостық сәулелену көздерінен болатын болады, оның әсері әзірге зиянды өндірістік фактор ретінде ескерілмейді. Қазіргі уақытта азаматтық авиация әуе кемелерінің ұшқыш экипажының жеке дозиметрлік бақылауын тек космостық сәулеленудің жеке дозаларының тікелей және жинақталған өлшеулері арқылы жүргізуге болады [15]. Дегенмен, азаматтық авиация әуе кемелерінің ұшқыш экипаждарының космостық сәулеленудің жеке дозаларын өлшеу көпжылдық деректеріне сүйене отырып, космостық сәулеленудің иондаушы компонентінің жылдық эквивалентті дозасының (H_{cosmic}) келесі формуласы шығарылған [16]:

$$H_{\text{cosmic}} = 15 + 0,118 \times (\textit{latitude} - 25^\circ) + 11 \times e^{\frac{h}{1,96 \times e^{-0,0028 \times (\textit{latitude} - 10^\circ)}}} \quad (15)$$

мұндағы H_{cosmic} – жылдық эквивалентті доза, мбэр/год; *latitude* – геомагниттік ендік, град. (Қазақстан үшін *latitude* = 30°–44°); *h* – теңіз деңгейінен биіктік, км.

Жоғары өтімді космостық сәулелену (мюондар, пиондар) үшін биологиялық тіндерде әлсіреу өте аз, сондықтан әуе кемелерінің ұшқыш экипаждарының космостық сәулеленуден жеке тиімді дозасын (E_{cosmic}) космостық сәулеленудің иондаушы компонентінің эквивалентті дозасымен бірдей деп қабылдау керек:

$$E_{\text{cosmic}} = H_{\text{cosmic}} \quad (16)$$

Азаматтық авиация әуе кемелерінің ұшу экипаждары әрбір ұшудың ұзақтығын, геомагниттік ендігін және биіктігін белгілейді, содан кейін бұл деректерді (15) формула бойынша ғарыштық сәулеленудің иондаушы компонентінің жылдық эквивалентті дозасын есептеу үшін пайдаланады. Егер Азаматтық авиацияның әуе кемесі Қазақстан Республикасының тропосферасында геомагниттік ендікте жұмыс уақыты нормаларын сақтай отырып, бір жыл ішінде ұшатыны белгілі болса, онда ұшу экипажының әрбір мүшесі үшін ғарыштық сәулеленудің иондаушы компонентінің (H_{cosmic}) жылдық эквивалентті дозасы шамамен 30 миллизивертті (мЗв) құрайды:

$$H_{\text{cosmic}} = 15 + 0,118 \times (44^\circ - 25^\circ) + 11 \times e^{\frac{10}{1,96 \times e^{-0,0028 \times (44^\circ - 10^\circ)}}} \approx 3027 \text{ мбэр} \approx 30 \text{ мЗв} \quad (17)$$

бұл Гигиеналық нормативтермен белгіленген жылына 20 мЗв доза шегінен асады, бірақ атомдық күш қондырғысын қолдануға байланысты компоненттер жоқ.

Зерттеу нәтижелері

1. Қорғаныс қалыңдығын анықтаудың қолданыстағы әдісінің сипаттамасынан ол экспозициялық доза қуатының жартылай әлсіреу қабаттары немесе оның әр түрлі материалдармен амбиентті эквиваленті туралы мәліметтер болған кезде және иондаушы сәулелену көзін экрандау құрылғысы туралы жедел шешім қабылдау қажет болған жағдайда қолданылады.

2. Радионуклидтердің жекелеген көздерінің белсенділігіне байланысты экспозициялық дозасының қуатын, оның ішінде оның қоршаған орта немесе жеке эквивалентке қажетті түрлендірулерін есептеуге негізделген сәулелену қарқындылығының әлсіреу коэффициентін есептеудің ұсынылған әдісі сәулеленудің қалыңдығын дәлірек анықтау үшін қорғаныш материалы иондаушы сәулелену көздерін қорғайды, дөңгелектеу 1 зиверттен 100 рентгенге дейін қолданылмайды, ауа кермасының операциялық есебі үшін жарамды.

3. Атом қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажының тиімді сәулелену дозасын анықтаудың үш тәсіліне жүргізілген салыстырмалы талдау эквивалентті дозаны әсерлі дозаға қайта есептеудің максималды коэффициентін таңдау арқылы радиациялық қауіптіліктің гиперпрофилактикасы қағидаты бойынша қорғаныш экранының консервативті есебін қолданудың орындылығын көрсетті.

4. Ұшу экипаждарының геомагниттік ендік пен теңіз деңгейінен биіктікке негізделген ғарыштық сәулеленудің жеке дозаларын есептеудің сипатталған әдісі атомолеттер мен қарапайым әуе кемелерінің ұшқыштарына созылмалы әсер ететін негізгі радиациялық қауіпті өндірістік факторды ескеруге мүмкіндік береді.

Зерттеу нәтижелерін талқылау

Бүгінгі күні иондаушы сәулеленуден қорғаудың қалыңдығын есептеу кезінде олардың радиосезімталдығын ескере отырып, адамның бүкіл денесіне және оның жеке мүшелері мен тіндеріне радиациялық әсердің алыс салдарларының пайда болу қаупінің өлшемін сипаттайтын тиімді дозаны анықтау негіз болып табылады. Бүкіл денедегі дозаның жеке эквивалентін тиімді дозаға қайта есептеу ережесі түбегейлі маңызды, өйткені тиімді доза ұғымы бүкіл дененің біркелкі емес сәулеленуінің стохастикалық әсерінің қаупін бағалау үшін енгізілген және оның мәндері қазіргі уақытта халықаралық және ұлттық стандарттармен белгіленген адам ағзасына радиациялық әсердің нормаланған шамалары болып табылады. Радиациялық қауіпсіздік санитарлық ережелерімен ұсынылған формула бойынша тиімді дозаны есептеу [3] органдарда эквивалентті доза туралы ақпараттың болмауына байланысты өте қиын, сондықтан практикалық жұмыста негізінен (14) формуламен анықталған тиімді дозаның аддитивтілікке пайымдалған жуықтау әдістерінде жүргізіледі.

Қорытынды

1. Қолданыстағы операциялық жолмен есептелген атомдық күш қондырғысы бар әуе кемесінің ұшу экипажын гамма-сәулелену көздерінен қорғасын қалыңдықтары 11,7 см құрады.

2. Жекелеген радионуклидті көздердің белсенділігіне байланысты экспозициялық дозаның қуатын есептеуге негізделген сәулелену қарқындылығының әлсіреу еселігін есептеудің ұсынылған әдісі, оның амбиентті немесе жеке эквиваленттіге қажетті түрлендірулерін қоса алғанда, атомдық күш қондырғысы бар әуе кемесінің ұшу экипажының гамма-сәулелену көздерінен қорғасын қорғанысының қалыңдығының неғұрлым дәл мәні 13,5 см-ге тең екенін көрсетті.

3. Атомдық қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажы үшін тиімді сәулелену дозасын анықтаудың үш әдісінің салыстырмалы талдауы көрсеткендей, гамма-сәулелену көздерінен әуе кемесінің ұшу экипажына арналған қорғасын қорғаныс құрылғысының қалыңдығы 13,5 см және салмағы 91,5 кг, атомдық күш қондырғысынан 45,5 м қашықтықта олардың жеке тиімді дозаларын есептеу консервативті әдіспен жүзеге асырылса да, атомелет ұшқыштары үшін кәсіптік доза шегінен асып кетпеуін қамтамасыз етеді.

4. Ұшу экипаждарының геомагниттік ендік пен теңіз деңгейінен биіктік негізінде есептелген ғарыштық сәулеленудің жеке дозаларының болжамды шамасы атомелеттің немесе кәдімгі әуе кемесінің әрбір ұшқышы үшін жылына шамамен 30 мЗв құрайды, бұл А тобы персоналының кәсіптік сәулелену дозасының шегінен 10 мЗв артық.

Авторлардың қосқан үлесі.

Ергалиев Д.С. – атом қозғалтқышы бар әуе кемесінің ұшу экипажын иондаушы сәулеленуден биологиялық қорғаудағы операциялық жолмен есептеді.

Ким Д.С. – атомдық күш қондырғысы бар әуе кемесінің ұшу экипажын гамма-сәулелену көздерінен қорғасын қалыңдықтары мен радиациялық қауіпсіздік санитарлық ережелерін ұсынды.

Шинжирбеков М.Ш. – формула бойынша тиімді дозаны есептеді.

Калманова Д.М. – органдарда эквивалентті доза туралы ақпараттың болмауына байланысты өте қиын, сондықтан практикалық жұмыста негізінен формулалармен анықталған тиімді дозаның аддитивтілікке пайымдалған жуықтау әдістеріне зерттеу жүргізді.

Әбдірашев Ө.К. – иондаушы сәулеленуден қорғаудың қалыңдығын есептеу кезінде олардың радиосезімталдығын ескере отырып, адамның бүкіл денесіне және оның жеке мүшелері мен тіндеріне радиациялық әсердің алыс салдарларының пайда болу қаупінің өлшемін сипаттайтын тиімді дозаны анықтады.

Әдебиеттер тізімі

1. Pourmikaeil K., Sadeghi M. Air Carriage of Nuclear Materials and Compensation of Third Parties // Journal of Nuclear Science and Technology. – Iran: Nuclear Science and Technology Research Institute, 2018. – 38(1396).– P. 18–27. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
2. Гигиенические нормативы к обеспечению радиационной безопасности. – Приказ Министра здравоохранения Республики Казахстан. – 2.08.2022. – № ҚР ДСМ-71. – 132 с. - **кітап**
3. Санитарные правила «Санитарно-эпидемиологические требования к обеспечению радиационной безопасности». – Приказ Министра здравоохранения Республики Казахстан. – 15.12.2020. – № ҚР ДСМ-275/2020. – 88 с. - **кітап**
4. Kalesh Khan A., Rama M. Finite Element Analysis and simulation of missile impact on Nuclear Reactor Containment Structure // Electronic Journals for Science and Engineering. – 22(2). – PP. 27–32. <https://doi.org/10.56748/ejse.223142>– **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
5. Kim D.S. et al. Spectrometry analysis of fumes of mixed nuclear fuel (U0.80Pu0.20)O2.00 samples heated up to the temperature 2000 0C and evaluation of accidental irradiation of living organisms by plutonium as the most radiotoxic fission product of mixed nuclear fuel // Scientific journal «Nuclear Engineering and Technology», – 2016. –48(1). – P. 274–284. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
6. Sutondo T., Syarip S. Shielding Design for the PGNAE Experimental Facility at Kartini Reactor // Atom Indonesia. – 44(3). – PP. 131–135. <https://doi.org/10.17146/aij.2018.904>– **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
7. Курманбекова Э.Б, Жумагулова Р.Е., Ким Д.С. Повышение прочности арболита заполнением термически обработанной рисовой лузгой // Научный журнал строительства и архитектуры, №2(50). – Воронеж: ФГБОУВО «Воронежский государственный технический университет», 2018. – С. 46–55. - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**
8. Li Ch. et al. Calculation for Dose Distribution and for Equipment Shielding of Molten Salt Reactor Cooling Circuit // YUANZINENG KEXUE JISHU. – Vol. 56. – No. 11. – PP. 2422–2430. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
9. Paluszek M. et al. Nuclear fusion powered Titan aircraft // Acta Astronautica. – 2023. – 210. – PP. 82–94. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.04.029> – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
10. Moiz M., Mohammed Ahmed H. Analysis and design of pre-engineering steel building for Airbus A-380 Hangar Using is Code // PROCEEDINGS ON ENGINEERING SCIENCES. – Serbia, 2023. – 5(S1) – PP. 1–10. <https://doi.org/10.24874/PES.SI.01.001> – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
11. Козлов В.Ф. Справочник по радиационной безопасности. – 5-е изд. – М.: Энергоатомиздат, 1999. – 523 с. - **кітап**
12. Ким Д.С. Индивидуальный дозиметрический контроль: основные виды, методы и средства. – Алматы: Казахский национальный университет имени аль-Фараби, 2021. – 154 с. - **кітап**
13. Моисеев А.А., Иванов В.И. Справочник по дозиметрии и радиационной гигиене. – Изд. 4, перераб. и доп. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – С. 182. - **кітап**
14. General Safety Requirements «Radiation Protection and Safety of Radiation Sources: International Basic Safety Standards». – IAEA Safety Standards, No. GSR Part 3. – Vienna: IAEA, 2015. – 518 p. - **кітап**
15. Kim D.S., Murayama K., Nurtazin Y., Koguchi Y., Kenzhin Y., Kawamura H. Intercomparison Exercise at Harshaw 6600, DVG-02TM, and D-Shuttle Dosimeters for the Individual Monitoring of Ionizing Radiation // Journal of Radiation Protection and Research 2019. - 44(2) – p. 79–88 <https://doi.org/10.14407/jrpr.2019.44.2.79>– **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

16. Kudryashev V.A., Kim D.S. Determination of the total effective dose of external and internal exposure by different ionizing radiation sources // Radiation Protection Dosimetry. – 2019. - 184(2). <https://doi.org/10.1093/rpd/ncz170>– ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

Д.С. Ергалиев¹, Д.С. Ким¹, М. Ш. Шинжирбеков², Д.М. Калманова³, О.К. Абдірашев³

¹ АО «Академия гражданской авиации», Алматы қ.

² Центр подготовки авиационного персонала

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

Биологическая защита летного экипажа воздушного судна с атомным двигателем от ионизирующего излучения

Аннотация. Интенсивная разработка самолетов с атомными двигателями (атомолетов) проводилась с середины 40-х до середины 60-х годов XX столетия. Конструкторские бюро ведущих на тот период ядерных держав в проектах атомолетов решили главную проблему дальнемагистральных самолетов, состоящую в ограниченных запасах традиционного топлива, путем использования высокой плотности энерговыделения урана-235, нескольких граммов которого достаточно для обеспечения непрерывности полета в течение десятков часов. Экипаж атомолета с ядерной силовой установкой и 2-4 атомными турбореактивными двигателями, расположенными в хвостовой части, вовсе мог бы беспосадочно барражировать в воздухе на протяжении 2 недель. Наряду с очевидным преимуществом в виде экстраординарной производительности ядерного топлива атомолеты обладали существенными недостатками, такими, как крупные габариты и большая масса реакторной установки, катастрофические последствия аварий и неминуемое радиоактивное загрязнение обширных территорий или акваторий, а также хроническое облучение летного экипажа радионуклидными источниками ионизирующего излучения, образующимися в результате цепной реакции. Если проблема с массо-габаритными размерами ядерного реактора для атомолетов была решена в КБ «Туполев», а безопасность реактора в случае аварии предложено обеспечить путем его отделения от фюзеляжа и последующего мягкого приземления на парашютной системе, то вопрос уменьшения доз облучения летных экипажей остался открытым. В настоящей статье предложен способ выбора защитного материала и расчета его толщины, необходимой для обеспечения радиационной безопасности пилотов атомолетов, проекты которых на сегодняшний день вновь стали актуальными и перспективными. Предлагаемый способ вычисления толщины защитного экрана отличается от общепринятых методов тем, что учитывает изменения в правилах определения расчетных и нормируемых доз облучения согласно сегодняшним требованиям национального и международного законодательства в области обеспечения и контроля состояния радиационной безопасности.

Ключевые слова: атомная силовая установка, ядерный реактор, атомолет, радиационная безопасность, доза облучения, кратность ослабления, принцип оптимизации.

D.S. Ergaliev¹, D.S. Kim¹, M. Sh. Shinzhirbekov², D.M. Kalmanova³, O.K. Abdirashev³

¹JSC Academy of Civil Aviation, Almaty

²Aviation personnel training center L.N. Gumilyov

³Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Biological protection of the flight crew of a nuclear-powered aircraft from ionizing radiation

Abstract. Intensive development of aircraft with nuclear engines (nuclear aircraft) was carried out from the mid-40s to the mid-60s of the twentieth century. The design bureaus of the leading nuclear powers of that period in nuclear-powered aircraft projects solved the main problem of long-range aircraft, which was limited supplies of traditional fuel, by using the high energy density of uranium-235, a few grams of which is enough to ensure flight continuity for tens of hours. The crew of an aircraft with a nuclear power plant and 2–4 nuclear turbojet engines located in the tail section could patrol the air non-stop for 2 weeks. Along with the obvious advantage in the form of extraordinary productivity of nuclear fuel, nuclear-powered aircraft had significant disadvantages. These included the substantial size and weight of the reactor unit, the potential for catastrophic consequences in the event of accidents, the risk of radioactive contamination of vast territories or water areas, as well as chronic exposure of the flight crew to radionuclide sources of ionizing radiation generated in the result of a chain reaction. If the problem with the mass-dimensional dimensions of a nuclear reactor for nuclear aircraft was solved at the Tupolev Design Bureau, and the safety of the reactor in the event of an accident was proposed to be ensured by separating it from the fuselage and subsequent soft landing on a parachute system, then the issue of reducing radiation doses to flight crews remained open. This article proposes a method for selecting a protective material and calculating its thickness necessary to ensure the radiation safety of nuclear aircraft pilots, projects of which today have again become relevant and promising. The proposed method for calculating the thickness of the protective shield differs from generally accepted methods in that it takes into account changes in the rules for determining calculated and standardized radiation doses in accordance with today's requirements of national and international legislation in the field of ensuring and monitoring the state of radiation safety.

Key words: nuclear power plant, nuclear reactor, aircraft, radiation safety, radiation dose, attenuation factor, optimization principle.

References

1. Pourmikaeil K., Sadeghi M. Air Carriage of Nuclear Materials and Compensation of Third Parties // Journal of Nuclear Science and Technology. – Iran: Nuclear Science and Technology Research Institute, 2018. – 38(1396).– P. 18–27.
2. Gigienicheskie normativy k obespecheniyu radiatsionnoy bezopasnosti//Prikaz Ministra zdravookhraneniya Respubliki Kazakhstan [Hygienic Standards for Ensuring Radiation Safety//Order of the Minister of Health of the Republic of Kazakhstan] – 2.08.2022.– p. 132 [In Russian]
3. Sanitarnye pravila «Sanitarno-epidemiologicheskie trebovaniya k obespecheniyu radiatsionnoy bezopasnosti»//Prikaz Ministra zdravookhraneniya Respubliki Kazakhstan [Sanitary Rules "Sanitary-Epidemiological Requirements for Ensuring Radiation Safety"//Order of the Minister of Health of the Republic of Kazakhstan] – 15.12.2020. –275/2020. –p. 88 [In Russian]

4. Kalesh Khan A., Rama M. Finite Element Analysis and simulation of missile impact on Nuclear Reactor Containment Structure // *Electronic Journals for Science and Engineering*. – 22(2). – PP. 27–32. <https://doi.org/10.56748/ejse.223142>
5. Kim D.S. et al. Spectrometry analysis of fumes of mixed nuclear fuel (U0.80Pu0.20)O2.00 samples heated up to the temperature 2000 0C and evaluation of accidental irradiation of living organisms by plutonium as the most radiotoxic fission product of mixed nuclear fuel // *Scientific journal «Nuclear Engineering and Technology»*, —2016. —48(1). — P. 274—284.
6. Sutondo T., Syarip S. Shielding Design for the PGNAA Experimental Facility at Kartini Reactor // *Atom Indonesia*. – 44(3). – PP. 131–135. <https://doi.org/10.17146/aij.2018.904>
7. Kurmanbekova E.B., Zhumagulova R.E., Kim D.S. а Р.Е., Ким Д.С. Povyshenie prochnosti arbolita zapolneniem termicheski obrabotannoy risovoy luzgoy // *Nauchnyy zhurnal stroitel'stva i arkhitektury*[Improving the Strength of Arbolite by Filling it with Thermally Treated Rice Husk // *Scientific Journal of Construction and Architecture*], №2(50). –Voronezh: Voronezh State Technical University, 2018. – P. 46–55[In Russian]
8. Li Ch. et al. Calculation for Dose Distribution and for Equipment Shielding of Molten Salt Reactor Cooling Circuit // *YUANZINENG KEXUE JISHU*. – Vol. 56. – No. 11. – PP. 2422–2430.
9. Paluszek M. et al. Nuclear fusion powered Titan aircraft // *Acta Astronautica*. – 2023. – 210. – PP. 82–94. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.04.029>
10. M. Moiz, H. Mohammed Ahmed. Analysis and design of pre-engineering steel building for Airbus A-380 Hangar Using is Code // *PROCEEDINGS ON ENGINEERING SCIENCES*. – Serbia, 2023. – 5(S1) – PP. 1–10. <https://doi.org/10.24874/PES.SI.01.001>
11. Kozlov V.F. Spravochnik po radiatsionnoy bezopasnosti [Handbook on Radiation Safety.] – 5th ed. – M.: Energoatomizdat, 1999. – p. 523 [In Russian]
12. Kim D.S. Individual'nyy dozimetricheskiy kontrol': osnovnye vidy, metody i sredstva[Individual Dosimetric Monitoring: Main Types, Methods, and Tools] – Almaty: Kazakh National University named after al-Farabi, 2021. – p. 154 [In Russian]
13. Moiseev A.A., Ivanov V.I. Spravochnik po dozimetrii i radiatsionnoy gigiyene[Handbook on Dosimetry and Radiation Hygiene]– 4th ed.,– Moscow: Energoatomizdat, 1991. – P. 182 [In Russian]
14. General Safety Requirements «Radiation Protection and Safety of Radiation Sources: International Basic Safety Standards». – IAEA Safety Standards, No. GSR Part 3. – Vienna: IAEA, 2015. – 518 p.
15. Kim D.S., Murayama K., Nurtazin Y., Koguchi Y., Kenzhin Y., Kawamura H. Intercomparison Exercise at Harshaw 6600, DVG-02TM, and D-Shuttle Dosimeters for the Individual Monitoring of Ionizing Radiation // *Journal of Radiation Protection and Research* 2019. - 44(2) – p. 79—88 <https://doi.org/10.14407/jrpr.2019.44.2.79>
16. Kudryashev V.A., Kim D.S. Determination of the total effective dose of external and internal exposure by different ionizing radiation sources // *Radiation Protection Dosimetry*. – 2019. - 184(2). <https://doi.org/10.1093/rpd/ncz170>

Авторлар туралы ақпарат:

Ергалиев Д.С. – «Авиациялық техника және технологиялар» кафедрасының профессоры, Азаматтық Авиация Академиясы, Ахметов көшесі 44, Алматы, Қазақстан, des-67@yandex.kz

Ким Д.С. – «Авиациялық техника және технологиялар» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Азаматтық Авиация Академиясы, Ахметов көшесі 44, Алматы, Қазақстан, dmitriy.kim@ukr.net

Шинжирбеков М.Ш. – Авиациялық персоналды даярлау орталығының директоры, Ахметов көшесі 44, Алматы, Қазақстан, m.shinzhibekov@agakaz.kz

Калманова Д.М. – педагогика ғылымдарының кандидаты, «Ғарыштық техника және технологиялар» кафедрасының доценті, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі 2, Астана, Қазақстан, dinara_kalmanova@mail.ru.

Әбдірашев Ә.К. – хат-хабар авторы, «Ғарыштық техника және технологиялар» кафедрасының доцент м.а., PhD, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі 2, Астана, Қазақстан, omeke_92@mail.ru

Ергалиев Д.С. – профессор кафедрасы «Авиационная техника и технологии», Академия гражданской авиации, ул. Ахметова, 44, Алматы, Казахстан, des-67@yandex.kz

Ким Д.С. – ассоциированный профессор кафедрасы «Авиационная техника и технологии», Академия гражданской авиации, ул. Ахметова, 44, Алматы, Казахстан, dmitriy.kim@ukr.net

Шинжирбеков М.Ш. – директор Центра подготовки авиационного персонала, Академия гражданской авиации, ул. Ахметова, 44, Алматы, Казахстан, m.shinzhibekov@agakaz.kz

Калманова Д.М. – кандидат педагогических наук, доцент кафедрасы «Космическая техника и технологии», Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан, dinara_kalmanova@mail.ru.

Абдірашев Ә.К. – автор для корреспонденции, PhD, и.о. доцента кафедрасы «Космическая техника и технологии», Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан, omeke_92@mail.ru

Yergaliev D.S. – Professor of the Department of Aviation Engineering and Technology, Academy of Civil Aviation, st. Akhmetova 44, Almaty, Kazakhstan, des-67@yandex.kz

Kim D.S. – Associate Professor of the Department of Aviation Engineering and Technology, Academy of Civil Aviation, st. Akhmetova 44, Almaty, Kazakhstan, dmitriy.kim@ukr.net

Shynzhirbekov M.Sh. – Director of the Aviation Personnel Training Center, Academy of Civil Aviation, st. Akhmetova 44, Almaty, Kazakhstan, m.shinzhibekov@agakaz.kz

Kalmanova D.M. – Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor, Department Space Technique and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev str., Astana, Kazakhstan, dinara_kalmanova@mail.ru.

Abdirashev A.K. – correspondence author, PhD, acting Associate Professor, Department of Space Engineering and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, st. Satpayev 2, Astana, Kazakhstan, omeke_92@mail.ru



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/>).



МРНТИ 29.19.15, 29.19.19

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-52-74>

Обзорная статья

Нейтронные дифракционные исследования структур и фазовых переходов в тройных сплавах Fe-Ga-RE (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb)

Б. Ержанов^{*1,2,3}, А.М. Балагуров^{1,4,5}, Б. Мухаметулы^{1,2,6}, Н.Ю. Самойлова¹,
С.В. Сумников^{1,5}, В.В. Палачева^{1,5}, И.С. Головин^{1,5}

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Институт ядерной физики министерства энергетики Республики Казахстан, Алматы, Казахстан

³Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

⁴Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁵Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

⁶Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

(E-mail: ¹bekarys@jinr.ru, bala@nf.jinr.ru, bogda@nf.jinr.ru, rny03@nf.jinr.ru,
sumnikovsv@gmail.com, lera.palacheva@mail.ru, i.golovin@misis.ru)

Аннотация: Приведены новые данные о фазовых составах и структурных превращениях в сплавах $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}$ и $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}$, легированных микродобавками ($\sim 0.1-0.5$ ат.%) редкоземельных элементов (RE) (Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb). Структурные данные получены в нейтронных дифракционных экспериментах, выполненных с высоким разрешением и в режиме непрерывного сканирования по температуре при нагреве до 900°C и последующем охлаждении со скоростью $2^\circ\text{C}/\text{мин}$. При малом количестве RE-элемента (≤ 0.2 ат. %) структурные перестройки протекают в целом одинаковым образом и в исходных $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}$ и $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}$ сплавах, и в их легированных аналогах. Наоборот, в сплавах $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}\text{RE}$ с RE в количестве ~ 0.5 ат. % как последовательность образующихся и исчезающих структурных фаз, так и финальное состояние сплава зависят от типа редкоземельного элемента. В исходном (as-cast) состоянии микроструктура сплавов $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}\text{RE}$ преимущественно представляет собой неупорядоченную матрицу (фаза A2) с областями ближнего порядка по типу $\text{D}0_3$. Процесс непрерывного медленного нагрева приводит к формированию кластеров упорядоченной фазы $\text{D}0_3$ с размерами в диапазоне $(200-300)$ Å. Микроструктура большей части сплавов $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}\text{RE}$ с RE в количестве 0.5 ат. % в исходном состоянии представляет собой структурно неупорядоченную матрицу (фаза A2) с дисперсно встроенными в нее кластерами фазы $\text{D}0_3$ с характерными размерами ~ 900 Å. В процессе медленных нагрева и охлаждения в этих сплавах формируется однородное состояние. Обнаруженная ранее в электронно-дифракционных исследованиях поверхностных слоев аналогичных сплавов тетрагональная фаза $\text{L}6_0$ в нейтронных дифракционных спектрах, формирующихся всем объемом образцов, ни в одном из исследованных Fe-Ga-RE сплавов не найдена.

Ключевые слова: сплавы Fe-Ga, редкоземельные элементы, структурные фазовые переходы, дифракция нейтронов, магнитострикция.

Поступила 03.10.2024. После доработки 7.11.2024. Принята к печати 19.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹*автор для корреспонденции

Введение

Открытие повышенных магнитострикционных свойств сплавов Fe-Ga при добавлении Ga к α -Fe, привело к появлению большого числа работ, в которых изучалось влияние добавок третьих элементов на константу магнитострикции. Известно, что легирование RE элементами сплавов Fe-Ga могут заметно улучшать магнитострикционные свойства этих сплавов. Этот факт отражен в многочисленных оригинальных статьях и обзорах [1-6]. Особенно подробно изучено влияние Tb на физические и структурные свойства Fe-Ga сплавов [1, 4-9]. Значительное увеличение магнитострикции, вызванное микропримесями RE элементов, в основном объясняется (i) наличием у них сильной магнитной анизотропии, (ii) формированием локальных микронапряжений в кристаллитах вокруг ионов RE и (iii) стимулированием образования нанонеоднородностей в виде тетрагональной фазы $L6_0$, часто обозначаемой как *m*-D03 (modified-D03).

Присутствие $L6_0$ структуры в сплаве в количестве достаточном для влияния на такое объемное свойство, как магнитострикция, остается предметом дискуссий. Можно сказать, что достоверных свидетельств формирования объемных областей с упорядоченной по типу $L6_0$ структурой пока не найдено. Фактически все сведения, которые можно рассматривать как подтверждающие присутствие этой фазы в сплаве, получены методом SAED (selected area electron diffraction) (см., напр., [5, 9, 10]). Но использование этого метода предполагает специфическую подготовку образцов путем утоньшения сплава сфокусированным пучком ионов (focused ion-milling beam technique), которая может приводить к формированию разнообразных выделений на поверхности сплава. Ни в одном эксперименте с использованием излучений с относительно большой глубиной проникновения (рентгеновского, синхротронного или нейтронного) дифракционные пики, присущие только фазе $L6_0$, до сих пор зарегистрированы не были.

Помимо влияния на магнитострикционные свойства Fe-Ga сплавов и на формирование тетрагональных фаз, присутствие RE в сплаве может менять протекание в них структурных переходов в ходе температурных воздействий. В частности, как установлено в нейтронных исследованиях [4, 6], присутствие Tb в количестве (0.15-0.5) ат.% в сплавах с ~27 ат.% Ga подавляет образование плотноупакованных фаз $L1_2$ и $D0_{19}$. Эффективность нейтронных дифракционных исследований фазовых переходов в сплавах типа Fe-Ga была продемонстрирована в ряде работ, результаты которых представлены в обзорах [6, 11]. В основном, она определяется объемным характером получаемой информации и возможностью проводить эксперименты в режиме *insitu* и в реальном времени со скоростью набора данных на уровне 1 минуты, что является необходимым условием для детального прослеживания структурных изменений в ходе непрерывного нагрева или охлаждения сплава.

В настоящей работе приведены новые данные о структурах и фазовых превращениях в сплавах $Fe_{81}Ga_{19}$ и $Fe_{73}Ga_{27}$, легированных микродобавками (~0.1-0.5 ат.%) RE элементов (Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb), что соответствуют двум пикам на зависимости магнитострикции от содержания Ga в двойном сплаве [12]. Данные получены в нейтронных дифракционных экспериментах в диапазоне температур от комнатной (КТ) до 900°C. Представленные

результаты частично вошли в наши предыдущие работы [13,14,15]. Физические и материаловедческие характеристики этих сплавов обсуждаться не будут, поскольку они уже подробно рассмотрены в обзоре [6]. Что касается фазы L6₀, то каких-либо следов ее присутствия в изученных составах найти не удалось и пришлось ограничиться верхней оценкой на долю объема образца, которую она могла бы занимать.

Образцы и эксперимент

Литые образцы Fe_{81-x}Ga₁₉RE_x и Fe_{73-x}Ga₂₇RE_x (x ≈ 0.1-0.5 ат. %) с шестью разными редкоземельными элементами были получены плавлением соответствующей смеси чистых Fe, Ga и RE элементов в индукционной печи, заполненной аргоном, и последующей кристаллизацией в медной изложнице. Анализ химического состава слитков, проведенный методом энергодисперсионной спектроскопии (EDX) с точностью ±0.2 ат.%, выявил содержание Fe и Ga, близкое к номинальному Fe₈₁Ga₁₉ (содержание Ga варьировалось от 18.5 до 19.5 ат.%) и Fe₇₃Ga₂₇ (содержание Ga варьировалось от 26.7 до 27.5 ат.%), и следующее содержание RE-элемента для сплавов Fe₈₁Ga₁₉: Dy_{0.11}, Er_{0.2}, Dy_{0.05}Tb_{0.05}, Tb_{0.15}, Yb_{0.1}, и для сплавов Fe₇₃Ga₂₇: Dy_{0.5}, Er_{0.5}, Tb_{0.5}, Yb_{0.5}; Er_{0.24}, Pr_{0.20}, Sm_{0.20}, Tb_{0.08}, Yb_{0.20}. Для краткости далее будет использоваться обозначение Fe₈₁Ga₁₉-RE_x и Fe₇₃Ga₂₇-RE_x. Из полученных слитков для нейтронных экспериментов вырезались образцы в форме параллелепипеда, размерами 4x8x50 мм.

Измерения дифракционных спектров выполнены на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (HRFD) на импульсном реакторе ИБР-2 в ОИЯИ (Дубна) [16]. Особенностью HRFD является возможность переключения между модами высокого разрешения ($\Delta d/d \approx 0.002$, время накопления полного спектра – 1 час) и высокой светосилы со средним разрешением ($\Delta d/d \approx 0.015$). Во второй моде полный спектр в диапазоне $d_{hkl} = (1 - 5) \text{ \AA}$ с необходимой статистикой набирался за 1 минуту. Калибровка HRFD по длине волны и измерение функции разрешения дифрактометра были выполнены с использованием стандартного поликристалла La¹¹B₆ (из серии NIST standard). По спектрам высокого разрешения определяли фазовые состояния в исходном (до нагрева) и в конечном (после нагрева-охлаждения) состояниях и выполняли анализ профилей дифракционных пиков, что позволяло делать заключения о микроструктуре сплавов. Уровень разрешающей способности HRFD позволяет определять характерные размеры областей когерентного рассеяния (ОКР), если $L < 3000 \text{ \AA}$, и микродеформации в кристаллитах (статические флуктуации метрических параметров элементарной ячейки (микронапряжениями), $\varepsilon \approx \Delta a/a$, a – параметр ячейки), если $\varepsilon > 3 \cdot 10^{-4}$. Измерения дифракционных спектров в реальном времени вели в ходе нагрева до 900°C и последующего охлаждения до КТ при скоростях изменения температуры ±2 °C/мин. По этим спектрам определяли температурные зависимости интенсивностей, положений и ширин нескольких характерных дифракционных пиков, которые затем переводились в кристаллографические характеристики структурных фаз.

Результаты

1. Структурные состояния сплавов до нагрева и после охлаждения

С качественной точки зрения экспериментальные структурные данные, полученные для разных составов, в первом приближении оказались схожими. Их различия относятся, прежде всего, к некоторым количественным характеристикам, таким как температура начала (конца) упорядочения при охлаждении (нагреве), уровень упорядочения, характерные размеры упорядоченных областей и др. В связи с этим, общие свойства иллюстрируются далее только для отдельных составов, в которых они наиболее ярко проявляют себя, а особенно важные количественные характеристики обсуждаются для всех изученных составов. Более подробно отдельные аспекты проведенных исследований приведены в публикациях [13, 14, 15].

1.1. Структурные состояния сплавов $Fe_{81-x}Ga_{19}RE_x$

Типичный нейтронный дифракционный спектр высокого разрешения сплава $Fe_{81}Ga_{19}Er_{0.2}$ в исходном литом (as-cast) состоянии (до нагрева) показан на рис. 1. Видно, что какие-либо признаки сверхструктурных пиков (111, 200, 311 и т.д.) фазы $D0_3$ отсутствуют.

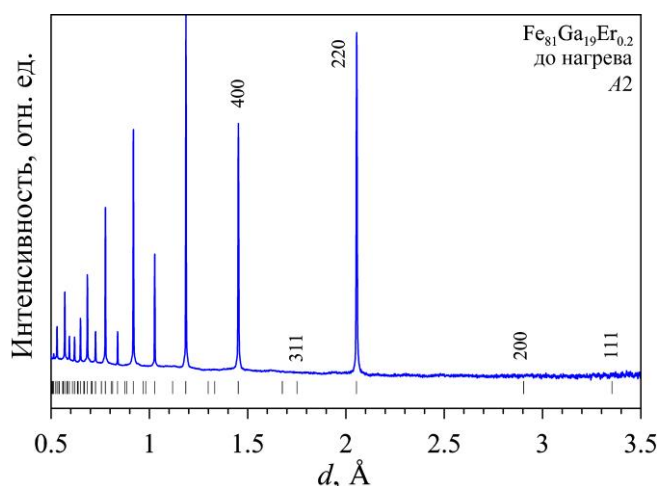


Рис. 1. Нейтронный дифракционный спектр сплава $Fe_{81}Ga_{19}Er_{0.2}$, измеренный на HRFD (высокое разрешение) при комнатной температуре. Расчетные положения пиков (штрихи) и индексы Миллера приведены для ячейки $D0_3$

Это означает, что структура сплава неупорядочена. Профили дифракционных пиков регулярные, и могут быть хорошо аппроксимированы функцией Войта. В исходном состоянии все дифракционные пики несколько уширены по сравнению с пиками от стандарта $La^{11}B_6$. Для выявления причин уширения дифракционных пиков был проведен анализ с использованием метода Вильямсона-Холла. Он показал, что экспериментальные зависимости величин W^2 от d^2 , где W – ширина пика, d – межплоскостное расстояние, связаны с наличием статических флуктуаций размеров элементарной ячейки, $\varepsilon = \Delta a/a$.

Экспериментальные значения величин $W^2(d^2)$ для сплава $Fe_{81}Ga_{19}(Dy,Tb)_{0.1}$ хорошо ложатся на линейные зависимости, что означает отсутствие эффектов размера и анизотропии уширения [17], как показано рис. 2, где указаны индексы Миллера пиков, цифрами указаны величины микронапряжений в состояниях до нагрева и после охлаждения, пунктирная линия – вклад от функции разрешения дифрактометра, а ошибки точек близки к размеру символов.

В исходном (до нагрева) литом состоянии все сплавы, кроме содержащих Tb, находятся в неупорядоченном состоянии (фаза A2). В сплавах с Tb ($Fe_{81}Ga_{19}Tb_{0.15}$ и $Fe_{81}Ga_{19}(Dy,Tb)_{0.1}$) слабые и широкие сверхструктурные пики, принадлежащие фазе DO_3 , видны уже в исходном состоянии, а после медленного нагрева и последующего охлаждения образцов пики становятся заметно уже и интенсивнее. Анализ ширин сверхструктурных пиков по методу Вильямсона-Холла показал, что значения величин $W^2(d^2)$ являются линейными для основных и параболическими для сверхструктурных пиков и таким образом определено, что микроструктура сплавов организована в виде кластеров упорядоченной DO_3 фазы с размерами областей когерентного рассеяния не превышающими 300 Å, встроенных в матрицу неупорядоченной фазы A2. Сплав с 0.15 ат.% Tb выделяется присутствием в нем уже в исходном состоянии небольшого количества фазы A1, которая во всех других сплавах появляется только после нагрева-охлаждения.

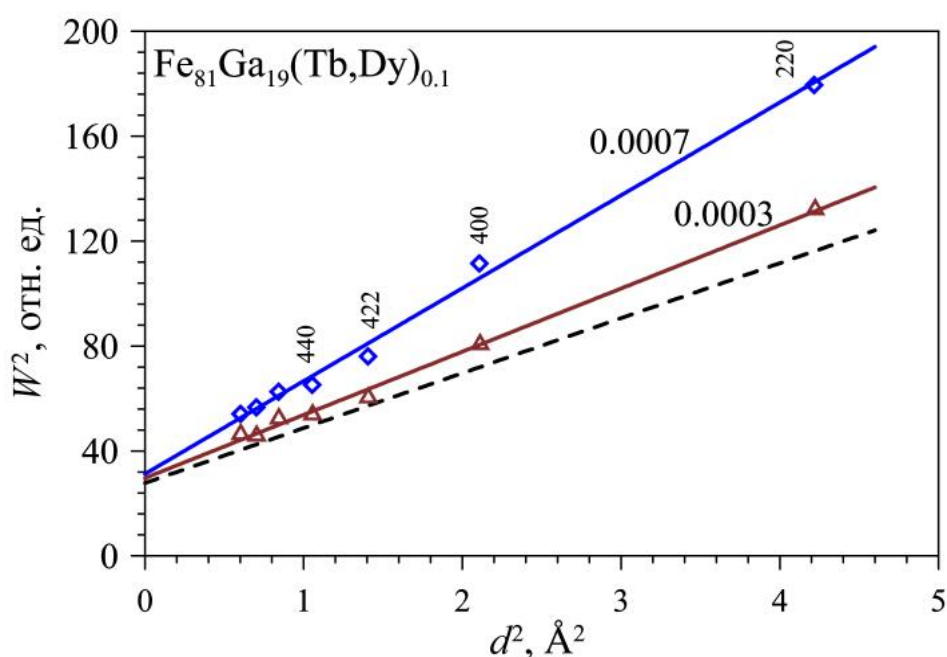


Рис. 2. Построение Вильямсона-Холла для ширин фундаментальных дифракционных пиков сплава $Fe_{81}Ga_{19}(Dy,Tb)_{0.1}$ в состояниях до нагрева (ромбы) и после охлаждения (треугольники)

Информация о фазовых составах сплавов в исходном состоянии и после нагрева-охлаждения приведена в табл. 1, где приведены параметры ячейки матрицы, характерные размеры кластеров упорядоченной фазы DO_3 (L_{coh}), определенные по методу Шеррера,

ошибка параметра элементарной ячейки составляет $\pm 0.001 \text{ \AA}$, величины L_{coh} определены с ошибкой около 30 \AA , объемная доля фазы A1 не превышает 1%.

Таблица 1. Фазовые составы литых сплавов $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}\text{-RE}$ до (1) и после нагрева до 900°C и охлаждения до КТ (2)

Состав	1	$a, \text{ \AA}$	$L_{\text{coh}}, \text{ \AA}$	2	$a, \text{ \AA}$	$L_{\text{coh}}, \text{ \AA}$
$\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}$	A2	2.905		$A2+D0_3+A1$	2.904	290
+ Dy _{0.10}	A2	2.906		$A2+D0_3+A1$	2.903	230
+ Er _{0.20}	A2	2.906		$A2+D0_3+A1$	2.904	310
+ Yb _{0.10}	A2	2.906		$A2+D0_3+A1$	2.904	290
+ Tb _{0.15}	$A2+D0_3+A1$	2.904	70	$A2+D0_3+A1$	2.906	330
+ (Dy,Tb) _{0.1}	$A2+D0_3$	2.904	60	$A2+D0_3+A1$	2.905	250

1.2. Структурные состояния сплавов $\text{Fe}_{73-x}\text{Ga}_{27}\text{RE}_{xx} = 0.5 \text{ ат.}\%$

Нейтронные дифракционные спектры четырех сплавов $\text{Fe}_{73-x}\text{Ga}_{27}\text{RE}_{xx} = 0.5 \text{ ат.}\%$, RE = Dy, Er, Tb, Yb в начальном литом состоянии (до нагрева, as-cast), измеренные в моде высокого разрешения, в первом приближении одинаковы и содержат только основные и сверхструктурные пики фазы $D0_3$. Финальные состояния, после процедуры нагрева-охлаждения, оказались одинаковы для сплавов с Er, Tb и Yb (сохранилась фаза $D0_3$), но сплав с Dy практически полностью перешел в равновесную фазу $L1_2$ (осталась небольшая примесь фазы A2). В исходном состоянии основные дифракционные пики для всех сплавов несколько уширены по сравнению с пиками от La^{11}B_6 ($\Delta d/d \approx 0.0024$ вместо 0.0020) и остаются практически неизменными для сплавов с Er, Tb и Yb после их нагрева-охлаждения. Исключением является сплав с Dy, находящийся после нагрева-охлаждения в фазе $L1_2$, пики которого значительно и нерегулярно уширены. Анализ с использованием метода Вильямсона-Холла показал, что микроструктура сплавов с Er, Tb и Yb в исходном состоянии представляет собой структурно неупорядоченную матрицу фазы A2 с дисперсно встроенными в нее кластерами упорядоченной фазы $D0_3$, характерные размеры которых составляют $\sim 900 \text{ \AA}$. В результате медленных нагрева и охлаждения атомная структура всего объема сплавов упорядочилась, превратившись в фазу $D0_3$. Некоторое превышение ширин основных дифракционных пиков над вкладом функции разрешения HRFD связано исключительно с наличием статических флуктуаций параметра элементарной ячейки (микродеформациями). Следует отметить, что параметры элементарных ячеек, определенные по основным и по сверхструктурным дифракционным пикам практически идентичны, что означает высокую степень когерентности элементарных ячеек матрицы и кластеров (подробнее см. [11]). Совершенно другая ситуация реализуется для сплава с Dy, как показано на рис. 3, на котором сплошные линии – описание экспериментальных точек с использованием метода наименьших квадратов, штриховая линия по точкам фазы $L1_2$ на (рис. 3б) проведена для наглядности, приведены индексы Миллера первых дифракционных пиков, цифрами указаны величины микродеформаций, штриховая линия внизу –

вклад в ширины пиков от функции разрешения дифрактометра. Исходное состояние – однородное (фаза $D0_3$), состояние после нагрева-охлаждения (фаза $L1_2$) – сильно и анизотропно напряженное. Параметры элементарных ячеек вместе с информацией о фазовых состояниях сплавов в исходном состоянии и после нагрева и охлаждения приведены в табл. 2, где до нагрева приведены параметры ячейки фазы $D0_3$, в последней колонке приведены атомные объемы основной ($L1_2$ или $D0_3$) и дополнительной ($D0_{19}$ или $A2$) фаз после охлаждения сплава, ошибки параметров ячейки составляют около $\pm 0.0005 \text{ \AA}$, ошибки атомных объемов – $\pm 0.05 \text{ \AA}^3$. Поскольку после охлаждения в сплавах присутствуют разные структурные фазы, то размеры их элементарных ячеек удобнее анализировать, сравнивая атомные объемы (объем ячейки, приходящийся на один атом).

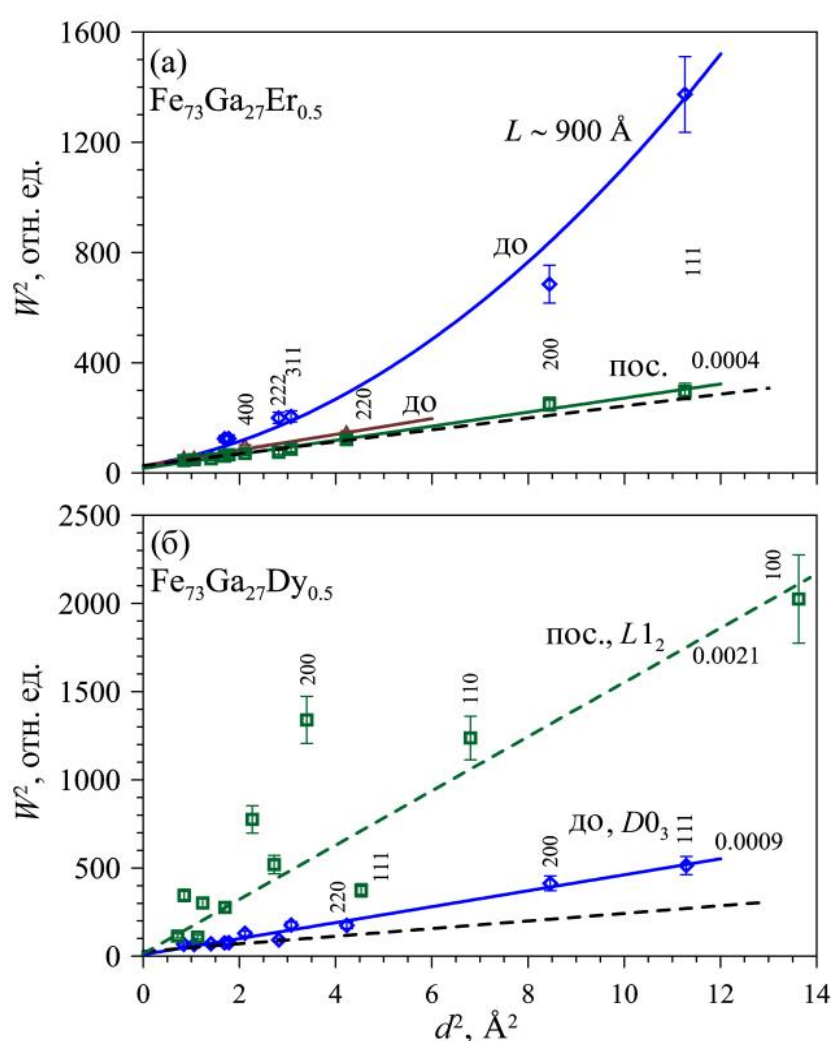


Рис. 3. Построение Вильямсона-Холла для ширины дифракционных пиков сплавов $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}\text{Er}_{0.5}$ (а) и $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}\text{Dy}_{0.5}$ (б) в исходном состоянии (ромбы, обозначены до) и после охлаждения (квадраты, обозначены пос.)

Таблица 2. Фазовые состояния сплавов Fe₇₃Ga₂₇-RE (0.5 ат.%) до нагрева и после охлаждения.

Состав	до нагрева	a, Å	после охлаждения	Va, Å ³
Fe ₇₃ Ga ₂₇	D0 ₃	5.817	L1 ₂ + D0 ₁₉	12.52 / 12.48
+ Dy _{0.5}	D0 ₃	5.819	L1 ₂ + A2	12.54 / 12.29
+ Er _{0.5}	A2 + D0 ₃	5.810	D0 ₃	12.30
+ Tb _{0.5}	A2 + D0 ₃	5.819	D0 ₃	12.32
+ Yb _{0.5}	A2 + D0 ₃	5.806	D0 ₃	12.26

1.3. Структурные состояния сплавов Fe_{73-x}Ga₂₇RE_{xx} = 0.1–0.2 ат. %

Нейтронogramмы всех Fe₇₃Ga₂₇RE_{xx} = 0.1–0.2 ат. % сплавов, за исключением Fe₇₃Ga₂₇Yb_{0.2}, в исходном (литом) состоянии, измеренные в режиме высокого разрешения, в первом приближении одинаковы и содержат только основные и сверхструктурные пики фазы D0₃. Медленный нагрев и последующее охлаждение сплавов (скорость ±2°C/мин) приводит к формированию преимущественно равновесной фазы L1₂ со следами A2/D0₃ и A3/D0₁₉. От общей картины заметно отличается сплав с Yb. В его исходном состоянии дополнительно к D0₃ присутствует фаза L1₂ с объемной долей ~17%, параметр ячейки которой заметно превышает стандартную величину. При охлаждении сплава с Yb, также как в других составах, формируется стандартная фаза L1₂-I с параметром ячейки a ≈ 3.687 Å, которая становится основной при T < 500°C, но дополнительно к ней в сплаве остается необычная фаза L1₂-II (ее доля ~20%) с параметром ячейки a ≈ 3.708 Å. Соответственно, все дифракционные пики этой фазы выглядят раздвоенными (рис. 4).

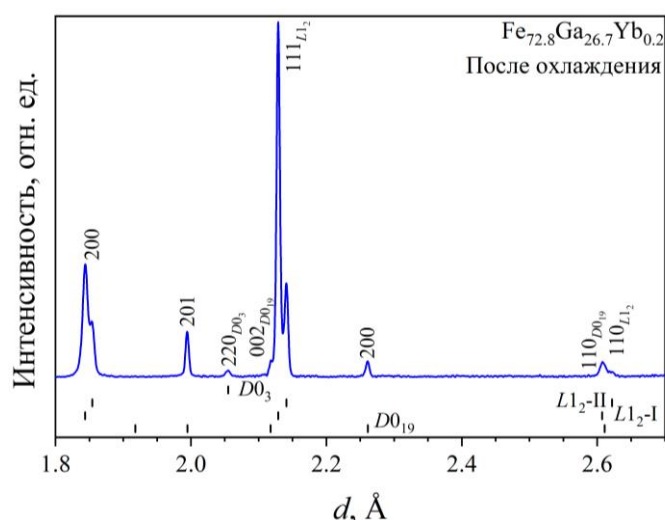


Рис. 4. Участок спектра Fe₇₃Ga₂₇Yb_{0.2} сплава после его охлаждения: фазы L1₂, D0₁₉ и D0₃. Фаза L1₂ присутствует в виде двух модификаций (I и II) с разными параметрами ячейки

В исходном состоянии основные дифракционные пики для всех сплавов немного уширены по сравнению с пиками от La¹¹B₆ ($\Delta d/d \approx 0.0023$ вместо 0.0020) и остаются

уширенными ($\Delta d/d \approx 0.003$) после медленного нагрева и охлаждения сплавов. Анализ показал, что микроструктура для большинства сплавов, кроме сплавов с Tb и Yb, является однородной с большими ($>3000 \text{ \AA}$) ОКР. Микроструктура сплава с Tb представляет собой частично упорядоченную матрицу фазы B2 с дисперсно встроенными в нее кластерами упорядоченной фазы $D0_3$ с размерами ОКР $\sim 400 \text{ \AA}$. У сплава с Yb зависимость ширины пиков фазы $L1_2$ линейная, а для фазы $D0_3$ наблюдается анизотропное уширение пиков, анализ которого с использованием модифицированного метода Вильямсона-Холла [18], показал влияние дислокационного фактора анизотропии как причины уширения пиков этой фазы (подробнее см. [17]). После нагрева-охлаждения во всех сплавах обнаружено резко выраженное анизотропное уширение пиков фазы со структурой $L1_2$. Для сплавов с Pr, Sm, Tb и Yb его причиной уширения является дислокационный фактор, тогда как в сплаве с Er более вероятной причиной является размерный эффект. В табл. 3 приведена информация о фазовых составах сплавов в исходном состоянии и после нагрева-охлаждения. Также на табл. 3 приведены атомные объемы основных ($D0_3$ или $L1_2$) и дополнительных ($D0_{19}$, A2 или A3) фаз до нагрева и после охлаждения сплавов, ошибки определения атомных объемов: $\pm 0.025 \text{ \AA}^3$, а радиусы RE-ионов взяты из таблиц Шеннона для валентного состояния +3 и координации VI.

Таблица 3. Фазовые состояния сплавов $Fe_{73}Ga_{27}RE$ (0.1 - 0.2 ат.%) до нагрева и после охлаждения

RE	R, \AA	as-cast	Va, \AA^3	после охлаждения	Va, \AA^3
Er	1.03	$D0_3$	12.30	$L1_2, D0_{19}$	12.52, 12.50
Pr	1.13	$D0_3$	12.32	$L1_2, D0_3, D0_{19}$	12.54, 12.30, 12.51
Sm	1.098	$D0_3$	12.27	$L1_2, D0_3, A3$	12.51, 12.28, 12.47
Tb	1.063	$D0_3$	12.32	$L1_2, D0_3, A3$	12.54, 12.29, 12.51
Yb	1.008	$D0_3, L1_2$	12.25, 12.68	$L1_2\text{-I}, L1_2\text{-II}, D0_3, D0_{19}$	12.53, 12.74, 12.27, 12.49

2. Фазовые переходы при нагреве и охлаждении

Используя моду высокой светосилы, на HRFD были проведены термодифрактометрические эксперименты с рассматриваемыми сплавами. Анализ нейтронных дифракционных спектров, измеренных в ходе непрерывного нагрева и последующего охлаждения сплава со скоростью изменения температуры $\pm 2^\circ\text{C}/\text{мин}$, позволяет детально проследить за происходящими в нем структурными фазовыми переходами. Для количественного анализа характеристик фаз определяли температурные зависимости интегральных интенсивностей, положений и ширин отдельных характерных дифракционных пиков.

2.1 Нагрев и охлаждение сплавов $Fe_{81-x}Ga_{19}RE_x$

Пример визуализации происходящих в сплаве фазовых превращений в ходе его медленного нагрева до 900°C и последующего охлаждения до КТ показан на рис. 5, где исходное состояние сплава – фаза A2, при охлаждении в матрице фазы A2 образовались кластеры упорядоченной фазы $D0_3$ и в незначительном количестве присутствует A1, индексы Миллера пиков, принадлежащих фазам A2 и $D0_3$, приведены для ячейки $D0_3$, а время измерения одного спектра – 1 минута, всего 2D карта содержит около 900 спектров.

Типичной особенностью, видимой на такого рода картах, является исчезновение при нагреве и появление при охлаждении дифракционных линий, соответствующих сверхструктурным пикам 111, 200 и т.д. кластеров фазы $D0_3$ в матрице A2.

В сплавах $Fe_{81}Ga_{19}$, $Fe_{81}Ga_{19}Er_{0.2}$ и $Fe_{81}Ga_{19}Yb_{0.1}$ кластеры фазы $D0_3$ отсутствовали в исходном состоянии, но образовывались в ходе первого нагревания [19]. Имеющиеся нерегулярности (особенно заметные при первом нагреве) коррелируют с появлением или исчезновением упорядоченных кластеров и связаны с экстинкционными эффектами. А именно, увеличение экстинкции при упорядочении структуры и ее уменьшение при переходе в неупорядоченное состояние приводят к уменьшению или увеличению интенсивности сильных пиков. Характерный провал интенсивности, сопровождающийся последующим ее скачкообразным увеличением, присутствует и для $Fe_{81}Ga_{19}Dy_{0.1}$ сплава в диапазоне $(320-450)^\circ\text{C}$, хотя явного появления сверхструктурных пиков в этом случае не наблюдается. Однако изменения интенсивностей основных пиков явно указывают на происходящий в этом диапазоне температур процесс формирования кластеров упорядоченной фазы $D0_3$, который, однако, не приводит к установлению в них дальнего порядка.

В подобных сплавах, помимо поведения интенсивностей сверхструктурных пиков, о переходах порядок-беспорядок можно судить по зависимости параметров элементарной ячейки (атомного объема) от температуры. Поведение параметра кристаллической решетки является более чувствительным индикатором перехода, чем интенсивности сверхструктурных пиков. Для сплава $Fe_{81}Ga_{19}$ это проявляется в том, что при первом нагреве образца сплава в литом состоянии явных признаков сверхструктурных пиков не появляется, как показано на рис. 6, где наклонные линии – описание экспериментальных точек линейной функцией в некотором интервале температур, а цифрами указан температурный коэффициент линейного расширения (в ед. $10^{-5} 1/\text{K}$). В то же время, в зависимости $a(T)$ хорошо видно отклонение от линейного роста в интервале температур $(200 \div 500)^\circ\text{C}$. Аналогичное S-образное поведение $a(T)$ наблюдается и для всех составов сплавов, содержащих RE-элемент.

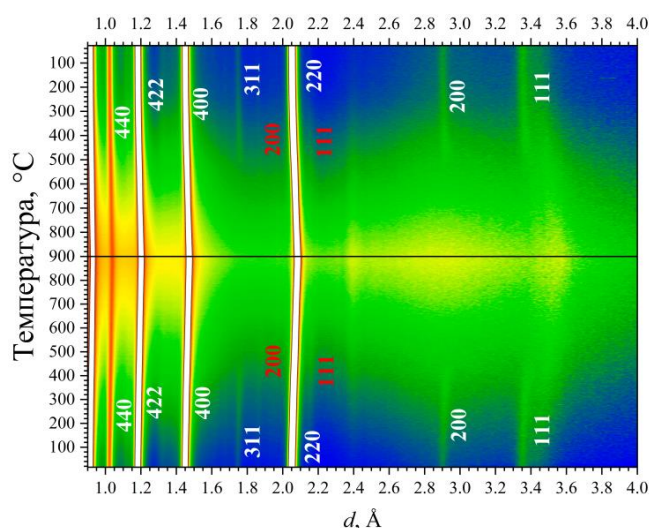


Рис. 5. Дифракционные спектры сплава $Fe_{81}Ga_{19}Dy_{0.1}$, измеренные в ходе его повторного нагрева до 900°C ($+2^\circ\text{C}/\text{мин}$) и последующего охлаждения до КТ ($-2^\circ\text{C}/\text{мин}$).

Ось температуры – снизу вверх, ось межплоскостных расстояний – слева направо.

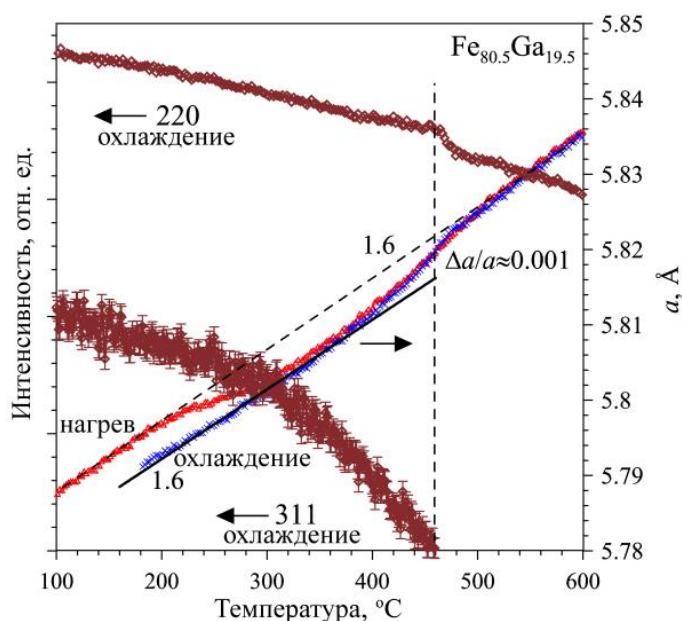


Рис. 6. Зависимость от температуры параметра элементарной ячейки (правая шкала) сплава $Fe_{80.5}Ga_{19.5}$ при его нагреве и последующем охлаждении и интенсивностей основного (220) и сверхструктурного (311) пиков (левая шкала) в ходе охлаждения (переход $A2 \rightarrow A2 + D0_3$)

2.2 Нагрев и охлаждение сплавов $Fe_{73-x}Ga_{27}RE_{x\%} = 0.5 \text{ ат.}\%$

3D визуализация фазовых переходов сплава $Fe_{73}Ga_{27}Dy_{0.5}$ представлена на рис. 7, где видны сильные основные и слабые сверхструктурные дифракционные пики всех четырех структурных фаз, существующих в этом сплаве при разных температурах. На рис. 7 исходное состояние образца – фаза $D0_3$, при нагреве происходят переходы $D0_3 \rightarrow L1_2 \rightarrow D0_{19} \rightarrow B2 \rightarrow A2$, при охлаждении происходят переходы $A2 \rightarrow B2 \rightarrow D0_3 \rightarrow L1_2$, индексы Миллера пиков, принадлежащих фазам $A2$, $B2$ и $D0_3$, приведены для ячейки $D0_3$, а время измерения одного спектра – 1 минута, всего 3D карта содержит около 900 спектров.

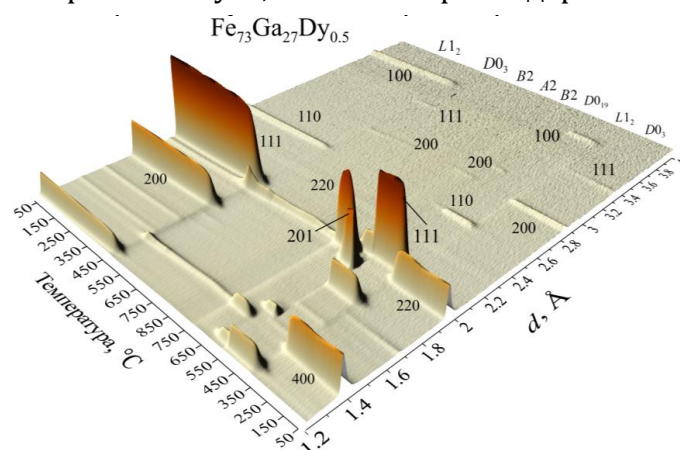


Рис. 7. Дифракционные спектры сплава $Fe_{73}Ga_{27}Dy_{0.5}$, измеренные в ходе нагрева и последующего охлаждения со скоростью $\pm 2^\circ\text{C}/\text{мин}$. Ось температуры (и времени) направлена снизу вверх, ось межплоскостных расстояний – слева направо

В этом сплаве трансформации структуры во многом повторяют фазовые переходы, наблюдавшиеся для исходного сплава $Fe_{73}Ga_{27}$ [17, 20]. Отличием от переходов в исходном сплаве стало формирование фазы $B2$ при нагреве в интервале $(680 - 795)^\circ\text{C}$ и при охлаждении в интервале $(810 - 500)^\circ\text{C}$ и формирование фазы $D0_3$ при охлаждении в интервале $(635 - 500)^\circ\text{C}$. Интенсивности сверхструктурных пиков этих фаз относительно малы. Можно предполагать, следовательно, что либо эти фазы формируются в малых изолированных объемах образца, либо мала степень упорядочения их структуры. Но основной особенностью фазовых переходов в сплаве с Dy является полное отсутствие гексагональной фазы $D0_{19}$ при охлаждении, тогда как при охлаждении исходного сплава (без Dy) ее объемная доля и доля фазы $L1_2$ становились примерно одинаковыми при КТ.

Совершенно другая ситуация наблюдается в сплавах с Er и Tb, а именно, при нагреве происходит почти полное подавление образования плотноупакованных фаз $D0_{19}$ и $L1_2$, а при охлаждении они вообще не появляются. Возникающие при нагреве *fcc* и *hcp* фазы неупорядочены ($A1$ вместо $L1_2$ и $A3$ вместо $D0_{19}$), а температурные интервалы их существования невелики: $(450 - 580)^\circ\text{C}$ для $A1$ и $(580 - 650)^\circ\text{C}$ для $A3$. Фазы, основанные на *bcc*-решетке, существуют во всем температурном интервале: $D0_3$ до $\approx 620^\circ\text{C}$, а далее следует $A2$. При охлаждении упорядоченная фаза $D0_3$ образуется при $T \approx 620^\circ\text{C}$. В сплаве с Yb картина переходов еще более упростилась – плотно упакованные фазы отсутствуют не только при охлаждении, но и при нагреве.

2.3 Нагрев и охлаждение сплавов $Fe_{73-x}Ga_{27}RE_{xx} = 0.1 - 0.2 \text{ ат.}\%$

Во всех исследованных сплавах трансформации структуры схожи и в основных чертах повторяют фазовые переходы, наблюдающиеся для исходного сплава $Fe_{73}Ga_{27}$. Основное отличие состоит в том, что в то время как в $Fe_{73}Ga_{27}$ после охлаждения фазы $L1_2$ и $D0_{19}$ присутствуют в примерно равной пропорции [20], во всех сплавах с RE-элементами гексагональная фаза ($D0_{19}$ или $A3$) практически отсутствует. В сплавах, содержащих Er, Pr, Sm и Tb, повышается стабильность фаз со структурами $A2$, $B2$ и $D0_3$ и происходит частичное подавление фазы с $A1$, $L1_2$ при нагреве, что подтверждает выводы, сделанные ранее [4]. В сплаве с Yb в отличие от всех остальных составов структура на основе *fcc*-ячейки ($L1_2$ -II или $A1$ -II) присутствует в количестве 17 % уже в исходном состоянии и сохраняется вплоть до 900°C . Образование в этом составе двух фаз $L1_2$ с различающимися параметрами ячейки происходит при $T \approx 400^\circ\text{C}$ в процессе нагрева и при $T \approx 600^\circ\text{C}$ (рис. 8) в процессе охлаждения. В режиме среднего разрешения расщепления пиков почти не видно, но их ширина увеличивается сразу на $\sim 20\%$. При этой же температуре заметно смещается положение максимумов пиков. Формирование двухфазного состояния происходит в довольно узком температурном интервале, $\Delta T \approx 50^\circ\text{C}$. Такое поведение обусловлено образованием фазы со структурой $L1_2/A1$ -I характерной для сплава $Fe_{73}Ga_{27}$ при нагреве и охлаждении при уже имеющейся после отливки фазы со структурой $L1_2/A1$ -II, у которой, как ранее было подмечено, параметр ячейки чуть больше.

Так же по скачкообразным изменениям атомного объема определялась степень упорядоченности структуры. Параметр ячейки определяется с высокой точностью из положений интенсивных основных пиков, что делает его более чувствительным

показателем переходов порядок-беспорядок по сравнению с анализом интенсивностей слабых сверхструктурных пиков. Так, у исследованных сплавов наблюдается, что появившееся при охлаждении сверхструктурные пики 111 и 200 фазы $D0_3$, исчезают при достижении определенной температуры. Однако, видимое S-образное изменение атомного объема этой фазы свидетельствует о том, что фаза $D0_3$ продолжает присутствовать, но ее доля в образце слишком мала для регистрации сверхструктурных пиков. Подобное поведение обнаружено во всех исследованных сплавах, в которых после охлаждения сохранились структуры на основе бсс-ячейки.

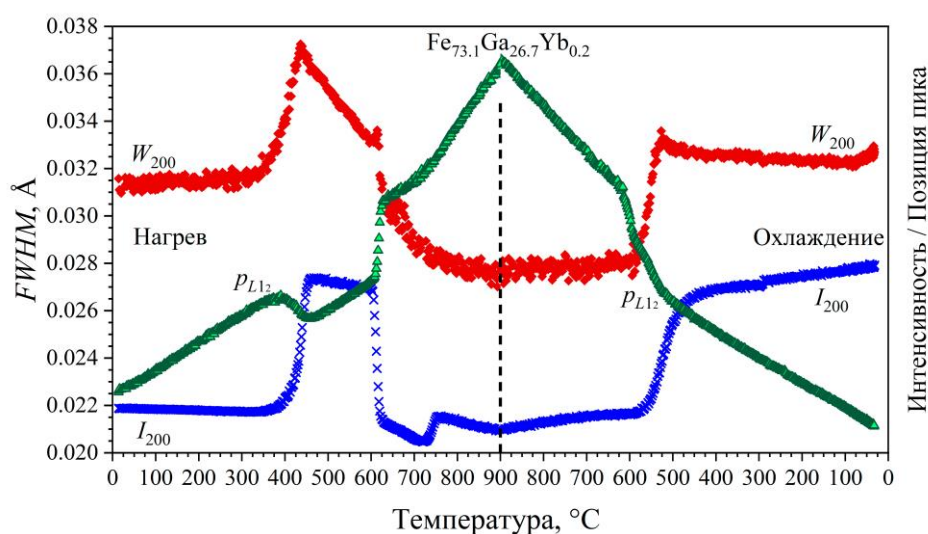


Рис. 8. Корреляция между резким увеличением интенсивности основного пика фазы $L1_2$ (I_{200}), изменением его положения (p_{L1_2}), резким увеличением его ширины (W_{200}) при нагреве и охлаждении сплава $Fe_{73}Ga_{27}Yb_{0.2}$

3. Оценка объемной долитетрагональной $L6_0$ фазы.

Большая часть работ, в которых обсуждается формирование тетрагональной фазы в сплавах Fe-Ga, относится к сплавам с ~19 ат.% Ga. Данные по присутствию этой фазы в сплавах с ~27 ат.% Ga, полученные методом SAED, приведены в работе [10]. Признаков наличия сверхструктурных пиков (011, 211 и т.д.) и характерного расщепления профилей основных дифракционных пиков, которые можно было бы отнести к тетрагональным фазам, ни в одном из измеренных нейтронных дифракционных спектров обнаружено не было (рис. 9). На рис. 9. штрихами отмечены положения основных и сверхструктурных пиков фазы $L1_2$ (100, 110, 111, 200) и расчетные положения пиков возможных тетрагональных фаз $L6_0$ и $D0_{22}$ (сверху вниз), указаны пики, связанные с окружением образца (печь) и следами фазы A2.

Поэтому была сделана попытка оценить возможную долю фазы $L6_0$ в образцах с помощью анализа флуктуаций фона в нейтронограммах. Из сравнения уровня фона с интенсивностями сверхструктурных пиков фазы $D0_3$ и из оценки доли объема, занимаемого кластерами $D0_3$, следует, что если тетрагональная $L6_0$ фаза и присутствует

во всех упомянутых в этом исследовании образцах (как это отмечалось в ряде ТЕМ исследований [7, 5, 9]), то она занимает не более 3% их объема. Подробная информация о том, как проводилась оценка описана в нашем исследовании [13].

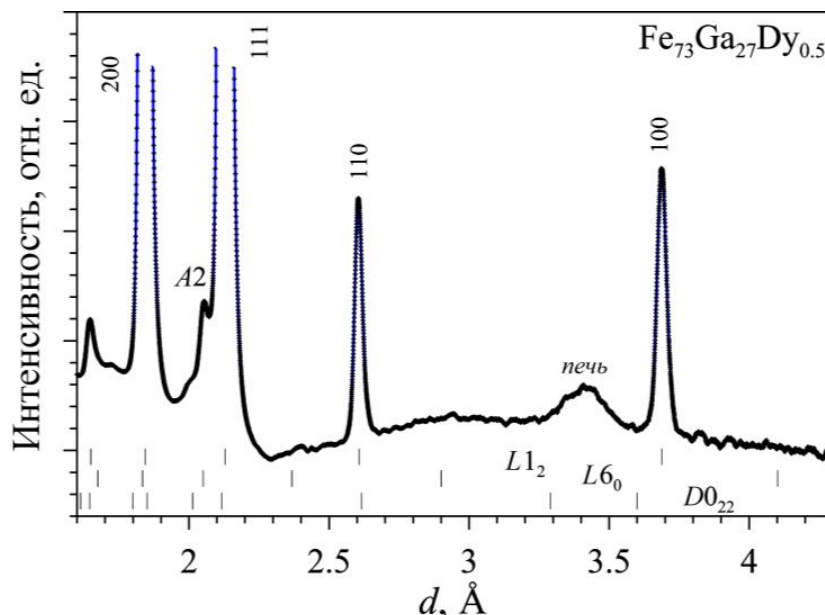


Рис. 9. Нейтронный дифракционный спектр $\text{Fe}_{73}\text{Ga}_{27}\text{Dy}_{0.5}$, измеренный в области больших $dhkl$ после нагрева и охлаждения сплава. Масштаб по оси ординат увеличен

Обсуждение и выводы

Из приведенных данных по анализу нейтронограмм при высоком разрешении следует, что в исходном as-cast состоянии сплавы $\text{Fe}_{81-x}\text{Ga}_{19}\text{RE}_x$ ($x \approx 0.1$ ат.%) с RE = Dy, Er, Tb и Yb в большинстве своем однородны с фазой неупорядоченной структуры A2, как и исходный сплав $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}$. Только в сплавах с Tb уже в исходном состоянии присутствуют упорядоченные $D0_3$ -кластеры с характерными размерами на уровне 60 Å. Это различие, может определяться тем, что в составах с Tb реальное содержание Ga несколько больше, чем в других составах. В исходном состоянии сплавов с другими RE-элементами упорядочение по типу $D0_3$ тоже присутствует, но в виде областей ближнего порядка, не приводящего к появлению дифракционных пиков.

Медленный нагрев и последующее охлаждение сплавов (скорость $\pm 2^\circ\text{C}/\text{мин}$) приводит к формированию кластеров фазы $D0_3$ с размерами в диапазоне (200 ÷ 300) Å. Температура их формирования при охлаждении примерно одинакова для всех составов сплавов, а именно, около 480°C . Из анализа ширин сверхструктурных дифракционных пиков следует, что размеры и объемная доля кластеров (~ 0.3 от объема образца) слабо зависят от температуры.

Методом *in situ* дифракции нейтронов в режиме реального времени получена детальная информация о фазовых превращениях в ряде сплавов $(\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19})_{1-x}\text{RE}_x$ (RE = Dy, Er, Tb, Yb)

в диапазоне температур от комнатной до 900°C. Установлено, что в сплавах с ~19 ат.% Ga и $x \leq 0.2$ ат.% структурные перестройки протекают одинаково как в исходном $Fe_{81}Ga_{19}$ сплаве, так и в его легированных микроколичествами RE-элементов аналогах.

При легировании $Fe_{73}Ga_{27}$ сплава редкоземельными элементами RE = Dy, Er, Tb и Yb в количестве ~0.5 ат.% фаза $D0_3$ сохраняется, но организация микроструктуры сплава заметно изменяется. Построения Вильямсона-Холла позволяют сделать вывод, что при легировании Dy микроструктура сплава становится более однородной, что отражается в значительном увеличении характерных размеров ОКР ($L > 3000 \text{ \AA}$). Наоборот, при легировании Er, Tb и Yb микроструктура становится неоднородной, превращаясь в матрицу со структурой фазы A2 с дисперсно встроенными в нее кластерами фазы $D0_3$ с характерными размерами ~900 Å. В результате процедуры контролируемого нагрева и охлаждения со скоростью $\pm 2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ кластеры фазы $D0_3$ в сплавах с Er, Tb и Yb значительно увеличиваются в размерах (сливаются), что переводит микроструктуру сплавов в однородное состояние с большими размерами ОКР ($L > 3000 \text{ \AA}$).

Структурные перестройки в сплавах $Fe_{73}Ga_{27}RE_{0.5}$ при их нагревании и последующем охлаждении протекают существенно по-разному для разных RE элементов. Фазовые переходы в сплаве с Dy во многом аналогичны переходам в исходном сплаве $Fe_{73}Ga_{27}$, хотя их финальные состояния после охлаждения различаются существенно. В сплавах с Er и Tb в значительной степени подавляется образование плотноупакованных фаз и происходит замещение их упорядоченных состояний на неупорядоченные аналоги. В сплаве с Yb образования плотноупакованных фаз не происходит.

В исходном as-cast состоянии сплавы $Fe_{73}Ga_{27}RE$ с RE = Er, Pr, Sm и Tb в количестве ~0.1 – 0.2 ат.% находятся в метастабильном состоянии со структурой фазы $D0_3$. В сплаве с 0.2 ат.% Yb уже в исходном состоянии присутствует в количестве 17 % фазы $L1_2$. Микроструктура всех сплавов, за исключением $Fe_{73}Ga_{27}Tb_{0.1}$, в исходном состоянии однородная с большими ($>3000 \text{ \AA}$) характерными размерами ОКР и малым (<0.001) уровнем микродеформаций. В сплаве с Tb микроструктура представляет собой матрицу частично упорядоченной фазы B2 с дисперсно встроенными в нее кластерами упорядоченной фазы $D0_3$ с характерными размерами ОКР ~400 Å.

В ходе медленных нагрева и последующего охлаждения сплавов (скорость $\pm 2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$) происходит серия структурных переходов в общих чертах почти одинаковых во всех изученных составах. При нагреве структурные перестройки в сплавах с RE-элементами протекают в целом схоже с $Fe_{73}Ga_{27}$ сплавом. Добавка малого количества Er приводит к небольшой стабилизации структур на основе bcc-ячейки. Сплавы с Pr, Tb и Sm оказались близки друг другу, во всех трех составах повышается стабильность фаз со структурами на основе bcc-ячейки и происходит частичное подавление фазы с $A1/L1_2$ и $A3/D0_{19}$ при нагреве. Причем эффект подавления $A1/L1_2$ и $A3/D0_{19}$ фаз и стабилизации фаз со структурами на основе bcc-ячейки сильнее проявляется у сплава с Tb в количестве 0.08 ат.%, нежели у сплавов с Pr и Sm в которых количество RE больше в 2.5 раза, что указывает на явное влияние конкретного RE на вышеупомянутый процесс. Со сплавом содержащий Yb в количестве 0.2 ат.% все происходит иначе, структуры с fcc-ячейкой, а именно неупорядоченная A1 и упорядоченная $L1_2$ просуществовали во всем исследованном

температурном интервале, чего в сплаве $Fe_{73}Ga_{27}$ не происходило. Подробный анализ дифрактограмм показал, что фаза (II) со структурой на основе *fcc*-ячейки, которая существует с момента отливки сплава, изначально отличается от характерной для сплава $Fe_{73}Ga_{27}$ фазы (I) $A1/L1_2$ возникающей в процессе медленного нагрева и охлаждения. Причем фаза (II) не исчезает полностью, а лишь разупорядочивается в процессе нагрева и аналогично фазе (I) упорядочивается в процессе охлаждения. Достоверные причины такого поведения сплава с Yb не установлены и требуют дальнейших исследований.

Поскольку ни в одном из изученных сплавов не было обнаружено признаков тетрагональной фазы со структурой $L6_0$, была сделана попытка оценить возможную долю этой фазы в образцах с помощью анализа флуктуаций фона в нейтронограммах. Из сравнения уровня фона с интенсивностями сверхструктурных пиков фазы DO_3 и из оценки доли объема, занимаемого кластерами DO_3 , следует, что если фаза $L6_0$ и присутствует в образцах, то она занимает не более 3% их объема.

Резюмируя, можно сказать, что результаты нейтронных дифракционных экспериментов демонстрируют отсутствие особых отличий при легировании сплавов $Fe_{81}Ga_{19}RE$ элементами в количестве ~ 0.1 ат.%, однако сплавы с большим количеством галлия $Fe_{73}Ga_{27}$ показывают явные отличительные признаки при добавлении к сплавам микроколичества RE элемента, будь то ~ 0.1 или 0.5 ат.%. Результаты нейтронных дифракционных экспериментов подтверждают выводы, сделанные в [4] и [8] о подавлении формирования фаз со структурами на основе *fcc*- ($L1_2/A1$) и *hcp*-ячеек ($DO_{19}/A3$) и стабилизации фаз со структурами на основе *bcc*-ячейки при легировании $Fe_{73}Ga_{27}$ сплавов RE элементами. Достоверные причины этих эффектов пока не ясны. Можно предполагать разные фактические доли RE элементов, встроенных в структуру сплава и сконцентрированных по границам кристаллитов. Некоторое различие использованных RE элементов по ионным радиусам вряд ли может вызывать столь значимые следствия. Одной из вероятных причин, может быть, влияние магнитных характеристик этих элементов

Благодарность, конфликт интересов

Авторы благодарят **А. Мохамеда** за помощь в подготовке образцов для исследований. Нейтронные дифракционные эксперименты проведены на нейтронном источнике ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна). Работа выполнена при финансовой поддержке проекта «Жас ғалым» ИРН AP14971722 (**А.М. Балагуров** и **Б. Мухаметулы**) и РФФ, проект 22-42-04404.

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Вклад авторов

Ержанов Б. – существенный вклад в концепцию и дизайн работы; анализ и интерпретация результатов работы, написание текста;

Балагуров А.М. – руководство по исследованию, утверждение окончательного варианта статьи для публикации;

Мухаметулы Б. – проведение инструментальных исследований (нейтронных дифракционных экспериментов);

Самойлова Н.Ю. – анализ результатов работы;

Сумников С.В. – проведение инструментальных исследований (нейтронных дифракционных экспериментов);

Палачева В.В. – пробоподготовка образцов (отливка исследованных образцов);

Головин И.С. – пробоподготовка образцов (отливка исследованных образцов), утверждение окончательного варианта статьи для публикации.

Список литературы

1. Ma T.Y., Hu S.S., Bai G.H., Yan M., Lu Y.H., Li H.Y., Peng X.L., Ren X.B. Structural origin for the local strong anisotropy in melt-spun Fe–Ga–Tb: Tetragonal nanoparticles//Appl. Phys. Lett.-2015.-№106.-P.112401. <https://doi.org/10.1063/1.4915308> – журнал на англ языке

2. He Y., Jiang C., WuW., Wang B., Duan H., Wang H., Zhang T., Wang J., Liu J., Zhang Z., Stamenov P., Coey J.M.D., Xu H. Giant heterogeneous magnetostriction in Fe–Ga alloys: Effect of trace element doping//Acta Mater.-2016.-№109.-P.177-186.<http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2016.02.056> – журнал на англ языке

3. He Y., Ke X., Jiang C., Miao N., Wang H., Coey J.M.D., Wang Y., Xu H. Interaction of trace rare earth dopants and nanoheterogeneities induces giant magnetostriction in Fe-Ga alloys//Adv. Funct. Mater.-2018.-№28.-P.1800858.<https://doi.org/10.1002/adfm.201800858> – журнал на англ языке

4. Emdadi A., Palacheva V.V., Balagurov A.M., Bobrikov I.A., Cheverikin V.V., Cifre J., Golovin I.S. Tb-dependent phase transitions in Fe-Ga functional alloys//Intermetallics.-2018.-№93.-P.55-62.<https://doi.org/10.1016/j.intermet.2017.10.017> – журнал на англ языке

5. Wu Y., Chen Y., Meng Ch., Wang H., Ke X., Wang J., Liu J., Zhang T., Yu R., Coey J.M.D., Jiang C., Xu H. Multiscale influence of trace Tb addition on the magnetostriction and ductility of <100> oriented directionally solidified Fe-Ga crystals//Phys. Rev. Mat.-2019.-№3.-P.033401.<https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.033401> – журнал на англ языке

6. Головин И.С., Палачева В.В., Мохамед А.К., Балагуров А.М. Структура и свойства Fe-Ga сплавов - перспективных материалов для электроники//ФММ.-2020.-№121.-С.937-980.<http://dx.doi.org/10.31857/S0015323020090053> – журнал на англ языке

7. Jin T., Wang H., Golovin I. S., Jiang C. Microstructure investigation on magnetostrictive Fe_{100-x}Ga_x and (Fe_{100-x}Ga_x)_{99.8}Tb_{0.2} alloys for 19 ≤ x ≤ 29//Intermetallics.-2019.-№115.-P.106628.<https://doi.org/10.1016/j.intermet.2019.106628> – журнал на англ языке

8. Golovin I.S., Mohamed A.K., Palacheva V.V., Zanaeva E.N., Cifre J., Samoylova N.Yu., Balagurov A.M. Mechanical spectroscopy of phase transitions in Fe-(23-38)Ga-RE alloys//J. Alloy and Comp.-2021.-№874.-P.159882.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159882> – журнал на англ языке

9. Jin T., Wang H., Chen Y., Li T., Wang J., Jiang C. Evolution of nanoheterogeneities and correlative influence on magnetostriction in FeGa-based magnetostrictive alloys//Materials Characterization.-2022.-№186.-P.111780.<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2022.111780> – журнал на англ языке

10. Gou J., Yang T., Qiao R., Liu Y., Ma T. Formation mechanism of tetragonal nanoprecipitates in Fe-Ga alloys that dominate the material's large magnetostriction//Scr. Mater. 2020. V. 185. P. 129-133.<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2020.04.024> – журнал на англ языке
11. Балагуров А.М., Головин И.С. Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe-Ga, Fe-Al)//УФН.-2021.-№191(7).-С.738-759.<https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.11.038886> – журнал на англ языке
12. Summers E.M., Lograsso T.A., Wun-Fogle M.J. Magnetostriction of binary and ternary Fe-Ga alloys//Mater. Sci.-2007.-№42.-P.9582.<https://doi.org/10.1007/s10853-007-2096-6> – журнал на англ языке
13. Balagurov A.M., Yerzhanov B., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., Order-disorder phase transitions in Fe₈₁Ga₁₉-RE alloys (RE = Dy, Er, Tb, Yb) according to neutron diffraction data//Phys.Met.Metallogr.-2024.-№125.-P.185–195. <http://dx.doi.org/10.1134/S0031918X2360286X> – журнал на англ языке
14. Balagurov A.M., Yerzhanov B., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., Phase States and Structural Phase Transitions in Fe₇₃Ga₂₇RE_{0.5} (RE = Dy, Er, Tb, Yb) Alloys: A Neutron Diffraction Study//Phys.Met.Metallogr.-2024.-№125.-P.525–534, <http://dx.doi.org/10.1134/S0031918X24600131> – журнал на англ языке
15. Yerzhanov B., Balagurov A.M., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., RE-dependent structures and phase transformations in Fe₇₃Ga₂₇-RE alloys//submitted. – журнал на англ языке
16. Balagurov A.M. Scientific reviews: high-resolution Fourier diffraction at the IBR-2 reactor//Neutron News.-2005.-№16.-P.8–12.<http://dx.doi.org/10.1080/10446830500454346> – журнал на англ языке
17. Balagurov A.M., Golovin I.S., Bobrikov I.A., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Zlokazov V.B. Comparative study of structural phase transitions in bulk and powdered Fe-27Ga alloy by real-time neutron thermodiffraction//J. Appl.Cryst.-2017.-№50.-P.198–210.<https://doi.org/10.1107/S1600576716020045> – журнал на англ языке
18. Ungar T., Borbely A. The effect of dislocation contrast on x-ray line broadening: a new approach to line profile analysis//Appl.Phys.Letters.-1996.-№69.-P.3173–3175.<https://doi.org/10.1063/1.117951> – журнал на англ языке
19. Golovin I.S., Palacheva V.V., Mohamed A.K., Cifre J., Dubov L.Yu., Samoylova N.Yu., Balagurov A.M. Mechanical spectroscopy of atomic ordering in Fe-(16-21)Ga-RE alloy//J. Alloy and Comp.-2021.-№864.-P.158819.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.158819> – журнал на англ языке
20. Golovin I.S., Mohamed A.K., Palacheva V.V., Cheverikin V.V., Pozdnyakov A.V., Korovushkin V.V., Balagurov A.M., Bobrikov I.A., Fazel N., Mouas M., Gasser J.- G., Gasser F., Tabary P., Lan Q., Kovacs A., Ostendorp S., Hubek R., Divinski S., Wilde G. Comparative study of structure and phase transitions in Fe-(25-27)%Ga alloys//J. Alloy and Comp.-2019.-№811.-P.152030.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152030> – журнал на англ языке

**Б. Ержанов^{*1,2,3}, А.М. Балагуров^{1,4,5}, Б. Мұхаметұлы^{1,2,6}, Н.Ю. Самойлова¹, С.В. Сумников^{1,5},
В.В. Палачева^{1,5}, И.С. Головин^{1,5}**

¹Ядролық зерттеулердің біріккен институты, Дубна, Ресей

²Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігінің Ядролық физика институты,
Алматы, Қазақстан

³Қазан федералды университеті, Қазан, Ресей

⁴М.В. Ломоносов атындағы Мәскеу мемлекеттік университеті, Мәскеу, Ресей

⁵«МИСиС» Ұлттық зерттеу технологиялық университеті, Мәскеу, Ресей

⁶Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

Fe-Ga-RE үштік қорытпаларындағы құрылымдар мен фазалық ауысуларды нейтрондық дифракциялық зерттеулер (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb)

Аңдатпа. Сирек жер элементтерінің (RE) (Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb) микроқоспаларымен (~0.1 – 0.5 ат.%) легирленген Fe₈₁Ga₁₉ және Fe₇₃Ga₂₇ қорытпаларындағы фазалық құрамдар мен құрылымдық өзгерістер туралы жаңа деректер ұсынылған. Құрылымдық деректер 900°C дейін қыздыру және 2 °C/мин жылдамдықпен кейінгі салқындату кезінде жоғары рұқсатпен және үздіксіз температураны сканерлеу режимінде орындалған нейтрондық дифракциялық тәжірибелерде алынды. RE элементінің аздаған мөлшерінде (≤ 0.2 ат.%) құрылымдық қайта құрулар бастапқы Fe₈₁Ga₁₉ және Fe₇₃Ga₂₇ қорытпаларында да, олардың легирленген аналогтарында да бірдей жүреді. Керісінше, ~0.5 ат.% мөлшерінде RE бар Fe₇₃Ga₂₇RE қорытпаларында құрылымдық фазалардың түзілу және жойылу реттілігі де, қорытпаның соңғы күйі де сирек жер элементінің түріне байланысты. Бастапқы (құйылған) күйде Fe₈₁Ga₁₉RE қорытпаларының микроқұрылымы негізінен D03 типті қысқа диапазонды ретті аймақтары бар ретсіз матрица (A2 фазасы) болып табылады. Үздіксіз баяу қыздыру процесі (200 – 300) Å диапазонында өлшемдері бар реттелген D0₃ фазасының кластерлерінің пайда болуына әкеледі. Көптеген Fe₇₃Ga₂₇RE қорытпаларының бастапқы күйінде 0.5 ат.% мөлшерінде RE бар микроқұрылымы ~ 900 Å тән өлшемдері бар D0₃ фазасының кластерлері дисперсті түрде енгізілген құрылымдық ретсіз матрица (A2 фазасы) болып табылады. Баяу қыздыру және салқындату процесі кезінде бұл қорытпаларда біртекті күй пайда болады. Үлгілердің барлық көлемінен құрылған нейтрондық дифракциялық спектрлердегі ұқсас қорытпалардың беткі қабаттарының электронды дифракциялық зерттеулерінде бұрын ашылған тетрагональды фаза L6₀ зерттелген Fe-Ga-RE қорытпаларының ешқайсысында табылмады.

Түйін сөздер: Fe-Ga қорытпалары, сирек жер элементтері, құрылымдық фазалық ауысулар, нейтрондық дифракция, магнитострикция

B. Yerzhanov*^{1,2,3}, **A.M. Balagurov**^{1,4,5}, **B. Mukhametuly**^{1,2,6},
N.Yu. Samoylova¹, **S.V. Sumnikov**^{1,5}, **V. V. Palacheva**^{1,5}, **I. S. Golovin**^{1,5}

¹Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

²Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan,
Almaty, Republic of Kazakhstan

³Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, Russian Federation

⁴Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

⁵National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russian Federation

⁶Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Republic of Kazakhstan

Neutron diffraction studies of structures and phase transitions in ternary Fe-Ga-RE alloys (RE = Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb)

Abstract. New data on the phase compositions and structural transformations in Fe₈₁Ga₁₉ and Fe₇₃Ga₂₇ alloys doped with trace amount (~0.1 – 0.5 at.%) of rare earth elements (RE) (Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb) are presented. The structural data were obtained in neutron diffraction experiments performed with high resolution and in the continuous temperature scanning mode during heating to 900°C and subsequent cooling at a rate of 2 °C/min. At a small amount of the RE element (≤ 0.2 at.%), structural rearrangements proceed in generally the same way both in the initial Fe₈₁Ga₁₉ and Fe₇₃Ga₂₇ alloys and in their alloyed analogs. On the contrary, in Fe₇₃Ga₂₇ RE alloys with RE in the amount of ~0.5 at.%, both the sequence of forming and disappearing structural phases and the final state of the alloy depend on the type of rare earth element. In the initial (as-cast) state, the microstructure of Fe₈₁Ga₁₉RE alloys is predominantly a disordered matrix (phase A2) with regions of short-range order of the D0₃ type. The process of continuous slow heating leads to the formation of clusters of the ordered phase D0₃ with sizes in the range of (200 – 300) Å. The microstructure of most Fe₇₃Ga₂₇RE alloys with RE in the initial state is a structurally disordered matrix (phase A2) with dispersedly embedded clusters of the D0₃ phase with characteristic sizes of ~900 Å. During slow heating and cooling, a homogeneous state is formed in these alloys. The tetragonal phase L6₀, previously discovered in electron diffraction studies of surface layers of similar alloys, was not found in neutron diffraction spectra formed by the entire volume of samples in any of the studied Fe-Ga-RE alloys.

Keywords: Fe-Ga alloys, rare earth elements, structural phase transitions, neutron diffraction, magnetostriction

References

1. Ma T.Y., Hu S.S., Bai G.H., Yan M., Lu Y.H., Li H.Y., Peng X.L., Ren X.B. Structural origin for the local strong anisotropy in melt-spun Fe–Ga–Tb: Tetragonal nanoparticles//Appl. Phys. Lett.-2015.-№106.-P.112401. <https://doi.org/10.1063/1.4915308>
2. He Y., Jiang C., WuW., Wang B., Duan H., Wang H., Zhang T., Wang J., Liu J., Zhang Z., Stamenov P., Coey J.M.D., Xu H. Giant heterogeneous magnetostriction in Fe–Ga alloys: Effect of trace element doping//Acta Mater.-2016.-№109.-P.177-186.<http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2016.02.056>
3. He Y., Ke X., Jiang C., Miao N., Wang H., Coey J.M.D., Wang Y., Xu H. Interaction of trace rare earth dopants and nanoheterogeneities induces giant magnetostriction in Fe-Ga alloys//Adv. Funct. Mater.-2018.-№28.-P.1800858.<https://doi.org/10.1002/adfm.201800858>

4. Emdadi A., Palacheva V.V., Balagurov A.M., Bobrikov I.A., Cheverikin V.V., Cifre J., Golovin I.S. Tb-dependent phase transitions in Fe-Ga functional alloys//Intermetallics.-2018.-№93.-P.55-62.<https://doi.org/10.1016/j.intermet.2017.10.017>
5. Wu Y., Chen Y., Meng Ch., Wang H., Ke X., Wang J., Liu J., Zhang T., Yu R., Coey J. M. D., Jiang C., Xu H. Multiscale influence of trace Tb addition on the magnetostriction and ductility of <100> oriented directionally solidified Fe-Ga crystals//Phys. Rev. Mat.-2019.-№3.-P.033401.<https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.033401>
6. Головин И.С., Палачева В.В., Мохамед А.К., Балагуров А.М. Структура и свойства Fe-Ga сплавов - перспективных материалов для электроники//ФММ.-2020.-№121.-С.937-980.<http://dx.doi.org/10.31857/S0015323020090053>
7. Jin T., Wang H., Golovin I. S., Jiang C. Microstructure investigation on magnetostrictive Fe_{100-x}Ga_x and (Fe_{100-x}Ga_x)_{99.8}Tb_{0.2} alloys for 19 ≤ x ≤ 29//Intermetallics.-2019.-№115.-P.106628.<https://doi.org/10.1016/j.intermet.2019.106628>
8. Golovin I.S., Mohamed A.K., Palacheva V.V., Zanaeva E.N., Cifre J., Samoylova N.Yu., Balagurov A.M. Mechanical spectroscopy of phase transitions in Fe-(23-38)Ga-RE alloys//J. Alloy and Comp.-2021.-№874.-P.159882.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.159882>
9. Jin T., Wang H., Chen Y., Li T., Wang J., Jiang C. Evolution of nanoheterogeneities and correlative influence on magnetostriction in FeGa-based magnetostrictive alloys//Materials Characterization.-2022.-№186.-P.111780.<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2022.111780>
10. Gou J., Yang T., Qiao R., Liu Y., Ma T. Formation mechanism of tetragonal nanoprecipitates in Fe-Ga alloys that dominate the material's large magnetostriction//Scr. Mater. 2020. V. 185. P. 129-133.<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2020.04.024>
11. Балагуров А.М., Головин И.С. Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe-Ga, Fe-Al)//УФН.-2021.-№191(7).-С.738-759.<https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.11.038886>
12. Summers E.M., Lograsso T.A., Wun-Fogle M.J. Magnetostriction of binary and ternary Fe-Ga alloys//Mater. Sci.-2007.-№42.-P.9582.<https://doi.org/10.1007/s10853-007-2096-6>
13. Balagurov A.M., Yerzhanov B., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., Order-disorder phase transitions in Fe₈₁Ga₁₉-RE alloys (RE = Dy, Er, Tb, Yb) according to neutron diffraction data//Phys.Met.Metallogr.-2024.-№125.-P.185-195. <http://dx.doi.org/10.1134/S0031918X2360286X>
14. Balagurov A.M., Yerzhanov B., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., Phase States and Structural Phase Transitions in Fe₇₃Ga₂₇RE_{0.5} (RE = Dy, Er, Tb, Yb) Alloys: A Neutron Diffraction Study//Phys.Met.Metallogr.-2024.-№125.-P.525-534, <http://dx.doi.org/10.1134/S0031918X24600131>
15. Yerzhanov B., Balagurov A.M., Mukhametuly B., Samoylova N.Yu., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Golovin I.S., RE-dependent structures and phase transformations in Fe₇₃Ga₂₇-RE alloys//submitted.
16. Balagurov A.M. Scientific reviews: high-resolution Fourier diffraction at the IBR-2 reactor//Neutron News.-2005.-№16.-P.8-12.<http://dx.doi.org/10.1080/10446830500454346>
17. Balagurov A.M., Golovin I.S., Bobrikov I.A., Palacheva V.V., Sumnikov S.V., Zlokazov V.B. Comparative study of structural phase transitions in bulk and powdered Fe-27Ga alloy by real-time neutron thermodiffraction//J. Appl.Cryst.-2017.-№50.-P.198-210.<https://doi.org/10.1107/S1600576716020045->

18. Ungar T., Borbely A. The effect of dislocation contrast on x-ray line broadening: a new approach to line profile analysis//Appl. Phys. Letters.-1996.-№69.-P.3173–3175.<https://doi.org/10.1063/1.117951>
19. Golovin I.S., Palacheva V.V., Mohamed A.K., Cifre J., Dubov L.Yu., Samoylova N.Yu., Balagurov A.M. Mechanical spectroscopy of atomic ordering in Fe-(16-21)Ga-RE alloy//J. Alloy and Comp.-2021.-№864.-P.158819.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.158819>
20. Golovin I.S., Mohamed A.K., Palacheva V.V., Cheverikin V.V., Pozdnyakov A.V., Korovushkin V.V., Balagurov A.M., Bobrikov I.A., Fazel N., Mouas M., Gasser J.- G., Gasser F., Tabary P., Lan Q., Kovacs A., Ostendorp S., Hubek R., Divinski S., Wilde G. Comparative study of structure and phase transitions in Fe-(25-27)%Ga alloys//J. Alloy and Comp.-2019.-№811.-P.152030.<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152030>

Сведения об авторах:

Ержанов Б. – автор для корреспонденции, аспирант казанского федерального университета, 420008, ул. Кремлевская, 18, Казань, Россия; стажер-исследователь объединенного института ядерных исследований, лаборатории нейтронной физики, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия; научный сотрудник Института ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, ул. Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Казахстан;

Балагуров А.М. – доктор физико-математических наук, профессор Московского государственного университета, главный научный сотрудник объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия;

Мухаметулы Б. – PhD, заместитель директора лаборатории по научной работе, объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия; заместитель главного инженера КИР ВВР-К Института ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, ул. Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Казахстан;

Самойлова Н.Ю. – PhD, старший научный сотрудник объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия;

Сумников С.В. – младший научный сотрудник объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия;

Палачева В.В. – PhD, младший научный сотрудник Университета науки и технологий МИСИС, Ленинский проспект, д. 4, стр. 1, 119049, Москва, Россия;

Головин И.С. – доктор физико-математических наук, профессор Университета науки и технологий МИСИС, Ленинский проспект д. 4, стр. 1, 119049, Москва, Россия.

Yerzhanov B. – corresponding author, postgraduate student, Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya str., 18, Kazan, Russia; research assistant, Joint Institute for Nuclear Research, Laboratory of Neutron Physics, Joliot-Curie str., 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia; research associate, Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Ibragimova str., 1, 050032 Almaty, Kazakhstan;

Balagurov A.M. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Moscow State University, Chief Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie str., 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia;

Mukhametuly B. – PhD, Deputy Director of the Laboratory for Research, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia; Deputy Chief Engineer of the WWR-K Research and Development Department of the Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Ibragimova str., 1, 050032 Almaty, Kazakhstan;

Samoylova N.Y. – PhD, Senior Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia;

Sumnikov S.V. – Junior Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia;

Palacheva V.V. – PhD, Junior Researcher, MISiS University of Science and Technology, Leninsky pr-kt, 4, building 1, 119049, Moscow, Russia;

Golovin I.S. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, MISiS University of Science and Technology, Leninsky st., 4, building 1, 119049, Moscow, Russia.

Ержанов Б. – хат-хабар авторы, Қазан федералды университетінің аспиранты, 420008, Кремлевская, 18, Қазан, Ресей; Біріккен ядролық зерттеулер институтының нейтрондық физика зертханасының стажер-зерттеушісі, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей; Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Қазақстан;

Балагуров А.М. – физика-математика ғылымдарының докторы, Мәскеу мемлекеттік университетінің профессоры, Біріккен ядролық зерттеулер институтының бас ғылыми қызметкері, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей;

Мұхаметұлы Б. – PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты зертханасы директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей; Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі КИР ВВР-К Ядролық физика институты бас инженерінің орынбасары, Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Қазақстан;

Самойлова Н.Ю. – PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институтының аға ғылыми қызметкері, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей;

Сумников С.В. – ғылыми дәрежесі жоқ, Біріккен ядролық зерттеулер институтының кіші ғылыми қызметкері, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей;

Палачева В.В. – PhD, Ғылым және технология университетінің кіші ғылыми қызметкері МИСиС, Ленинский даңғылы, 4, 1 ғимарат, 119049, Мәскеу, Ресей;

Головин И.С. – физика-математика ғылымдарының докторы, Ғылым және технология университетінің профессоры МИСиС, Ленинский даңғылы, 4, 1 корпус, 119049, Мәскеу, Ресей.



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/>).



МРНТИ 29.31.15

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-75-87>

Научная статья

Уравнения дисперсии ТЕ и ТМ волн в полужакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии

С.К. Тлеукенов*¹, К.Н. Балабеков², З.К. Жалгасбекова³

^{1,2}Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

³Казахский университет технологии и бизнеса, Астана, Казахстан

(E-mail: ¹matricant@inbox.ru, ²balabekov_kn@enu.kz, ³zhalgasbekova68@mail.ru)

Аннотация. В этой статье рассматривается исследование распространения электромагнитных волн в полужакрытом плоском слое с моноклинной анизотропией, в плоскости координат (yz) . Понимание характеристик электромагнитных волновых процессов играет важную роль в различных областях науки и техники. Хотя традиционно основное внимание уделялось распространению волн в оптическом диапазоне с учетом анизотропиров тензора диэлектрической проницаемости и изотропии тензора магнитной проницаемости [1-8], изучение волноводных процессов имеет свои преимущества в разработке новых устройств и приборов. Волновые процессы в волноводах обладают свойством дисперсии, что открывает возможности для управления и формирования необходимых характеристик волновых процессов. Характеристики дисперсии волн зависят от частоты, и для их описания используются уравнения дисперсии, которые устанавливают связь между фазовыми и групповыми скоростями волн. В данной работе были получены уравнения дисперсии для волн ТЕ и ТМ поляризации в плоском диэлектрическом волноводе с моноклинной анизотропией. Одна из границ этого слоя является металлизированной, тогда как другая соприкасается с полубесконечной средой. С другой стороны, при изучении упругих волн SH поляризации в полужакрытых волноводах, эти волны называют волнами Лява. Здесь одна граница упругого слоя остается свободной, а другая контактирует с полубесконечной упругой средой. Волны Лява являются важным объектом изучения в таких областях, как сейсмология и геофизика. Волны Лява рассматриваются в задачах сейсмологии, геофизики и т.д.

Ключевые слова: дисперсия, полужакрытый плоский волновод, моноклинная анизотропия, волны Лэмбовского типа, поверхностные волны, предельные скорости, фазовая и групповая скорости.

Поступила 6.09.2024. После доработки 15.10.2024. Принята к печати 29.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹*автор для корреспонденции

Введение

Индикатрисы фазовой и групповой скорости волн ТЕ и ТМ поляризации рассматривались в работах [9-12]. Построение уравнений дисперсии ТЕ и ТМ волн в открытых волноводах рассматривались в работах [13-14]. Уравнения дисперсии электромагнитных волн в слое моноклинного кристалла определяются, когда диэлектрические и магнитные параметры имеют вид:

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_y & \epsilon_{yz} \\ 0 & \epsilon_{yz} & \epsilon_z \end{pmatrix}; \quad \epsilon_{yz} \neq 0; \quad \hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & \mu_{yz} \\ 0 & \mu_{yz} & \mu_z \end{pmatrix}; \quad \mu_{yz} \neq 0 \quad (1)$$

Уравнения Максвелла, при отсутствии зарядов и токов ($\rho = 0, j = 0$), имеют вид:

$$\text{rot}\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}; \quad \text{rot}\vec{H} = \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}; \quad \text{div}\vec{D} = 0; \quad \text{div}\vec{B} = 0; \quad (2)$$

Материальные соотношения

$$D_x = \epsilon_x E_x;$$

$$D_y = \epsilon_y E_y + \epsilon_{yz} E_z;$$

$$D_z = \epsilon_{yz} E_y + \epsilon_z E_z. \quad (3)$$

$$B_y = \mu_y H_y + \mu_{yz} H_z;$$

$$B_z = \mu_{yz} H_y + \mu_z H_z. \quad (4)$$

Абсолютные диэлектрическая ϵ_0 и магнитная μ_0 проницаемости содержатся в ϵ_{ij} и μ_{ij} , соответственно. Распространение электромагнитных волн в волноводе рассматривается в координатной плоскости yz :

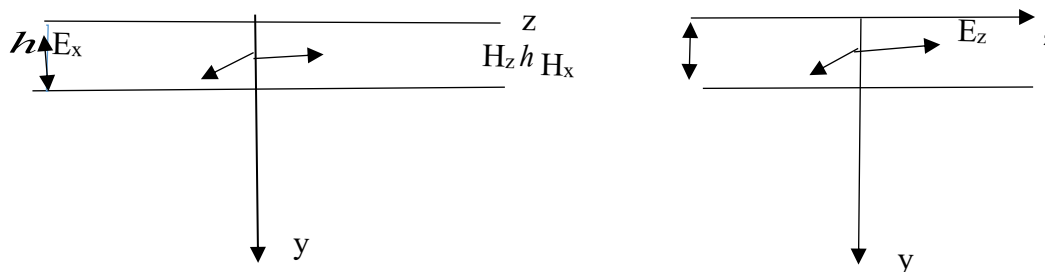


Рисунок 1. Распространение ТЕ и ТМ волн

Представление решений искомых функций в виде

$$F(y, z, t) = f(y)e^{i\omega t - ik_z z} \quad (5)$$

позволяет систему уравнений Максвелла и материальных соотношений привести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{d\vec{W}}{dy} = B\vec{W}; \quad \vec{W} = (E_x, H_z, H_x, E_z)^t$$

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{33} & b_{34} \\ 0 & 0 & b_{43} & b_{33} \end{pmatrix}; \quad (6)$$

$$b_{11} = ik_z \frac{\mu_{yz}}{\mu_y}; \quad b_{12} = i\omega\mu_z^*; \quad \mu_z^* = \mu_z - \frac{\mu_{yz}^2}{\mu_y};$$

$$b_{21} = i\omega \left(\varepsilon_x - \frac{k_z^2}{\omega^2 \mu_y} \right); \quad b_{33} = ik_z \frac{\varepsilon_{yz}}{\varepsilon_y}; \quad b_{34} = -i\omega\varepsilon_z^*; \quad \varepsilon_z^* = \varepsilon_z - \frac{\varepsilon_{yz}^2}{\varepsilon_y}; \quad (7)$$

$$b_{43} = -i\omega \left(\mu_x - \frac{k_z^2}{\omega^2 \varepsilon_y} \right);$$

Из (6) и (7) следуют две независимые системы уравнений:

$$\frac{d\vec{W}_1}{dy} = B_1\vec{W}_1; \quad B_1 = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{11} \end{pmatrix}; \quad \vec{W}_1 = (E_x, H_z)^t \quad (8)$$

$$\frac{d\vec{W}_2}{dy} = B_2\vec{W}_2; \quad B_2 = \begin{pmatrix} b_{33} & b_{34} \\ b_{43} & b_{33} \end{pmatrix}; \quad \vec{W}_2 = (H_x, E_z)^t \quad (9)$$

Из независимости систем уравнений (8), (9) следует, что в координатной плоскости уз электромагнитные волны ТЕ и ТМ поляризации в слое распространяются независимо, без взаимной трансформации.

Система уравнений (8), описывающая распространение волн ТЕ поляризации, имеет точное аналитическое решение в форме матрицанта [15-20]:

$$T(y) = e^{iby} \left[I \cos \psi y + \frac{1}{\psi} B_0 \sin \psi y \right] \quad (10)$$

$$b = b_{11}; \quad \psi^2 = -b_{12}b_{21}; \quad B_0 = \begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

Элементы b_{11}, b_{12}, b_{21} – определены в (7).

Аналогично, система уравнений (9) для ТМ волн имеет решение (10) с учетом

$$b = b_{33}; \quad \text{ш}^2 = -b_{34}b_{43}; \quad B_0 = \begin{pmatrix} 0 & b_{34} \\ b_{43} & 0 \end{pmatrix}; \quad (12)$$

Элементы b_{33}, b_{34}, b_{43} также определены в (7).

Материалы и методы

Статья посвящена исследованию волноводного распространения электромагнитных волн в полужакрытом плоском слое моноклинной анизотропии $\varepsilon_{yz} \neq 0, \mu_{yz} \neq 0$ в координатной плоскости (yz). Закономерности электромагнитных волновых процессов имеют важное значение во многих областях техники и научных исследований. Традиционно более изучено распространение волн оптического диапазона при анизотропии тензора диэлектрической проницаемости и изотропности тензора магнитной проницаемости [1-8].

1. Уравнение дисперсии волн ТЕ поляризации в полужакрытом волноводе моноклинной анизотропии.

Условие металлизированности границы слоя при $y=0$ означает равенство нулю Ехкомпоненты напряженности электрического поля на этой границе. Электромагнитные поля волны проникает в область $y \leq 0$. Из условия следует:

$$\vec{W}_1 = \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix}_{y=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ H_z \end{pmatrix}_{y=0} \quad (1.1)$$

При $y=h$ выполняются условия непрерывности компонент электрического и магнитного полей:

$$\vec{W}_1|_{y=h} = \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix}_{h-} = \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix}_{h+} \quad (1.2)$$

$\vec{W}_1(h-)$ поле волны в слое на границе $y = h$

$\vec{W}_1(h+)$ поле, проникающее в полубесконечную среду, на границе $y=h$, т.е. поле в полубесконечной среде при $y=h$. Условием волноводного процесса в слое является экспоненциальное затухание амплитуды электрических и магнитных компонент поля при $y \geq 0$:

$$E_x \propto e^{-Sy}, \quad H_z \propto e^{-Sy} \quad (1.3)$$

Если полубесконечная среда ($y > h$) является изотропной с параметрами ε и μ , то:

$$\begin{aligned} \frac{dE_x}{dy} &= iw\mu H_z \\ \frac{dH_z}{dy} &= iw \left(\varepsilon - \frac{k_z^2}{w^2 \mu} \right) E_x \end{aligned} \quad (1.4)$$

Учитывая (1.3) в первом уравнении (1.4), получен:

$$-SE_x = iw\mu H_z; \quad E_x = -iwjH_z; \quad j = \frac{M}{S} \quad (1.5)$$

Из условия затухания, спадаания амплитуд поля в области $y > h$ следует:

$$S^2 = k_z^2 - w^2 \beta_0 > 0. \quad \beta_0 = \varepsilon\mu = \frac{1}{V^2} \quad (1.6)$$

V-фазовая скорость волн.

Из решения (10) следует:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix}_0; \quad \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ H_z \end{pmatrix}_0 \quad (1.7)$$

Учитывая (1.1), (1.2) и (1.5), получим

$$\begin{pmatrix} -iwjH_z \\ H_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O_x \\ H_{z0} \end{pmatrix}_0; \quad E_{x0} = 0 \quad (1.8)$$

Соотношение (1.8) есть однородная система алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} t_{12}H_{z0} + jH_z &= 0 \\ t_{11}H_{z0} - H_z &= 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{pmatrix} t_{12} & j \\ t_{11} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{z0} \\ H_z \end{pmatrix} = 0 \quad (1.9)$$

Условием существования нетривиальных решений однородной системы алгебраических уравнений является:

$$\det \begin{pmatrix} t_{12} & j \\ t_{11} & -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.10)$$

Из (1.10) имеем:

$$jt_{11} + t_{12} = 0 \quad (1.11)$$

Подстановка элементов t_{11} и t_{12} матрицанта из аналитического представления (10) дает

$$tg\psi h = -\frac{j\psi}{\mu_z^*} = -\frac{\mu}{\mu_z^*} \frac{\psi}{S} \quad (1.12)$$

$$\psi^2 = -b_{12}b_{21} = -iw\mu_z^* \left(iw\varepsilon_x - \frac{ik_z^2}{w\mu_y} \right) = w^2 \varepsilon_x \mu_z^* - \frac{\mu_z^*}{\mu_y} k_z^2$$

$$\psi = \sqrt{w^2 \varepsilon_x \mu_z^* - \frac{\mu_z^*}{\mu_y} k_z^2}$$

Уравнение (1.12) есть искоемое уравнение дисперсии волн ТЕ поляризации в полузакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии в координатной плоскости (yz).

2. Уравнение дисперсии волн ТМ поляризации в полузакрытом волноводе моноклинной анизотропии

Условие металлизированности границы слоя при $y=0$ для волн ТМ поляризации записывается в виде:

$$\vec{W}_2|_{y=0} = \begin{pmatrix} H_x \\ E_z \end{pmatrix}_{y=0} = \begin{pmatrix} H_{x0} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

При $y=h$ выполняется равенство:

$$\vec{W}_2|_{y=h} = \begin{pmatrix} H_x \\ E_z \end{pmatrix}_{y-} = \begin{pmatrix} H_x \\ E_z \end{pmatrix}_{h+} \quad (2.2)$$

Условие экспоненциального затухания сохраняется:

$$H_x \propto e^{-Sy}; \quad E_z \propto e^{-Sy}; \quad y > h \quad (2.3)$$

В случае изотропности полубесконечной среды $y \geq h$ поле ТМ волн описывается системой уравнений:

$$\frac{dH_x}{dy} = -iw\epsilon E_z \quad (2.4)$$

$$\frac{dE_z}{dy} = -iw \left(\mu - \frac{k_z^2}{w^2 \epsilon} \right) H_x$$

Из (2.3) и первого уравнения (2.4) следует:

$$\begin{aligned} -SH_x &= -iw\epsilon E_z \\ E_z &= -\frac{iS}{w\epsilon} H_x; \quad j = \frac{S}{\epsilon}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Из условия затухания в области $y > h$ имеем:

$$S^2 = k_z^2 - w^2 \beta_0 \geq 0; \quad \beta_0 = \epsilon\mu = \frac{1}{V^2} \quad (2.6)$$

где V -фазовая скорость волн

Из аналитического решения (10), с учетом (12) получим

или:

$$\begin{pmatrix} H_x \\ -\frac{i}{w} j H_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{33} & t_{34} \\ t_{43} & t_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{x0} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

$$\det \begin{vmatrix} t_{33} & -1 \\ t_{43} & \frac{i}{w} j \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow i \frac{j}{w} t_{33} + t_{43} = 0 \quad (2.8)$$

откуда:

$$t_{33} = e^{ibh} \cos \psi h; \quad t_{43} = e^{ibh} \frac{t_{43}}{\psi} \sin \psi h \quad (2.9)$$

Из (2.9) следует искомое уравнение

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \psi h &= \frac{\varepsilon_z^* S}{\varepsilon \psi} \\ \psi^2 &= w^2 \mu_x \varepsilon_z^* - \frac{\varepsilon_z^*}{\varepsilon_y} k_z^2 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Уравнение (2.10) определяет дисперсию волн ТМ поляризации в полузакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии в координатной плоскости (yz).

Обзор литературы

Данная работа посвящена исследованию волноводного распространения электромагнитных волн в полузакрытом плоском слое моноклинной анизотропии $\varepsilon_{yz} \neq 0$, $\mu_{yz} \neq 0$ в координатной плоскости (yz). Закономерности электромагнитных волновых процессов имеют важное значение во многих областях техники и научных исследований. Традиционно более изучено распространение волн оптического диапазона при анизотропии тензора диэлектрической проницаемости и изотропности тензора магнитной проницаемости. Анизотропия материальных параметров сред, существенно влияющая на все волновые процессы, проявляется главным образом в зависимости фазовых и групповых скоростей электромагнитных волн от направления их распространения, в несовпадении направления векторов этих скоростей, а также вектора потока энергии и волнового вектора [1-8].

Индикатрисы фазовой и групповой скорости волн ТЕ и ТМ поляризации рассматривались в работах [9-12].

Построение уравнений дисперсии ТЕ и ТМ волн в открытых волноводах рассматривалось в работах [13-14].

Система уравнений (8), описывающая распространение волн ТЕ поляризации, имеет точное аналитическое решение в форме матрицанта. В современном приборостроении действительно существуют среды с анизотропией магнитной проницаемости, которые в настоящее время пользуются большим спросом. В частности, материалы, обладающие пьезоэлектрическими и пьезомагнитными, магнитострикционными и магнитоэлектрически выраженными свойствами, нашли многочисленные применения [15-20].

Результаты и обсуждение

Закономерности распространения волн в волноводах используются при создании приборов и устройств различного назначения.

Волновые процессы в волноводах обладают дисперсией. Наличие дисперсии позволяет управлять, формировать необходимые свойства волновых процессов в волноводах.

Закономерности дисперсии волн описываются зависимостью фазовых и групповых скоростей волн в волноводах от частоты. Решения уравнений дисперсии определяют эту зависимость.

В данной работе получены уравнения дисперсии волн ТЕ и ТМ поляризации в плоском диэлектрическом волноводе моноклинной анизотропии. Одна граница слоя металлизирована, другая находится в контакте с полубесконечной средой. В случае упругих волн SH поляризации, волновые процессы в полужакрытых волноводах называют волнами Лява. Одна из границ упругого слоя свободна, другая находится в контакте с полубесконечной упругой средой. Волны Лява рассматриваются в задачах сейсмологии, геофизики и т.д.

Заключение

В работе было рассмотрено волноводное распространение электромагнитных волн в полужакрытом плоском слое моноклинной анизотропии, в координатной плоскости (yz). Одна граница слоя металлизирована, другая находится в контакте с полубесконечной средой. Получены уравнения дисперсии волн ТЕ и ТМ поляризации.

Вклад авторов

Тлеуменов С.К. – постановка проблемы, задачи «Уравнения дисперсии ТЕ и ТМ волн в полужакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии», обсуждение и помощь в математическом методе решения.

Балабеков К.Н. – обсуждение, обзор статьи «Уравнения дисперсии ТЕ и ТМ волн в полужакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии».

Жалгасбекова З.К. – анализ, исследование и решение задач статьи «Уравнения дисперсии ТЕ и ТМ волн в полужакрытом плоском волноводе моноклинной анизотропии».

Список литературы

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – Москва: Наука. – 1982. – **книга**
2. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. – Москва: Наука. – 1987. – **книга**
3. Рязанов М.И. Электродинамика конденсированного вещества. – Москва: Наука. – 1984. – **книга**
4. Vinogradova M.B., Rudenko O.V., and Sukhorukov A.P. Theory of Waves. – Moscow: Nauka Press. – 1990. [in Russian] – **книга**

5. Balakirev M.K., Gilinsky I.A. Waves in Piezocrystals. – Novosibirsk: Nauka Press. – 1982. [in Russian] – **книга**
6. Rabinovitch M.I., Trubetskov D.I. Introduction to the Theory of Oscillations and Waves. – Moscow, Russia: Nauka Pres. – 1984. [in Russian] – **книга**
7. Tleukenov S.K., Ospanov, A.T. Radiation of Electromagnetic Fields in Anisotropic Media. – Almaty, Kazakhstan: Kenje Press. – 2001. [in Russian] – **книга**
8. Tleukenov S.K. Electromagnetic Waves in Anisotropic Media. – Almaty, Kazakhstan: Epigraph Press. – 2017. [in Russian] – **книга**
9. Tleukenov S.K., A.M. Assilbekova A.M. Surface of wave vectors of electromagnetic waves in anisotropic dielectric media with rhombic symmetry // Telecommunication and Radio Engineering. – 2017. – 76(14). – P. 1231-1238. DOI:10.1615/TelecomRadEng.v76.i14.20 – **журнал на англ. языке**
10. Tleukenov S.K., Zhalgasbekova Z.K., Sirenko Yu.K. Phase and group velocities of electromagnetic waves in a monoclinic crystal // Telecommunication and Radio Engineering. – 2019. – 78(1). – P. 1-10. – **журнал на англ. языке**
11. Тлеукенов С.К., Балабеков К.Н., Жалгасбекова З.К. Групповая скорость и поток электромагнитной энергии в ромбических кристаллах // Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Серия: Физика. Астрономия. – 2019. – №1(126). – С. 90-98. – **журнал на русс. языке**
12. Tleukenov, S.K., Balabekov K.N., Zhalgasbekova Z.K. Laws of reflection and refraction of TE and TM polarization waves on the border of rhombic crystals // Вестник КарГУ. – 2020. – №1(97). – P. 70-81. – **журнал на англ. языке**
13. Sirenko Yu.K., Tleukenov S.K., Yashina N.P., Zhalgasbekova Z.K. Propagation of Electromagnetic Waves in Structures with Biaxial Anisotropic Media of Monoclinic Syngony. Part 1: Unlimited Media // Telecommunications and Radio Engineering. – 2020. – 79(5). – P. 363-381. – **журнал на англ. языке**
14. Sirenko Yu.K., Tleukenov S.K., Yashina N.P., Zhalgasbekova Z.K. Propagation of electromagnetic waves in structures with biaxial anisotropic media of monoclinic syngony. part 2: waveguide structures // Telecommunications and Radio Engineering. – 2020. – 79(6). – P. 453-470. – **журнал на англ. языке**
15. Смирнов В.И. Курс высшей математики. – Москва: ГИТТЛ. – 1953. – **книга**
16. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – Москва: Наука. – 1988. – **книга**
17. Tleukenov S. K. A method for the analytical description of coupled-field waves in various anisotropic media // Acta Mech. – 2014. – P. 3535-3547. – **журнал на англ. языке**
18. Тлеукенов С.К., Айтбаев А. Б. О волнах Лэмба в упругих слоях ромбической симметрии // Акустический журнал. – 2015. – Т. 61. № 2. – С. 161-164. **журнал на русс. языке**
19. Filippov D.A., Galichyan T.A., Laletin, V.M. Magnetolectric effect in bilayer magnetostrictive-piezoelectric structure // Theory and experiment, Applied Physics A. – 2014. – 115(3). – P. 1087-1091. – **журнал на англ. языке**
20. Bichurin M.I., Petrov V.M., Averkin S.V., Filippov A.V. Electromechanical resonance in magnetolectric layered structures // Phys. Solid State. – 2010. – 52. – P. 2116-2122. – **журнал на англ. языке**

С.К.Тлеуменов*¹, К.Н.Балабеков², З.К.Жалгасбекова³

^{1,2}Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

³Қазақ технология және бизнес университеті, Астана, Қазақстан

Моноклиндік анизотропияның жартылай жабық жазық толқынындағы ТЕ және ТМ толқындарының дисперсия теңдеулері

Андатпа. Бұл мақала координаталық жазықтықта (yz) моноклиндік анизотропияның жартылай жабық жалпақ қабатында электромагниттік толқындардың таралуын зерттеуге арналған. Электромагниттік толқындық процестердің заңдылықтары технология мен ғылыми зерттеулердің көптеген салаларында маңызды мәнге ие. Дәстүрлі түрде, оптикалық диапазон толқындарының диэлектрлік тұрақты тензордың анизотропиясы мен магнит өткізгіштігінің тензорының изотропиясы кезінде таралуы көбірек зерттелген [1-8].

Толқындардағы толқындардың таралу заңдылықтары әртүрлі мақсаттағы құрылғылар мен қондырғыларды құру барысында қолданылады.

Толқындардағы толқындық процестер дисперсияға ие. Дисперсияның болуы толқындардағы толқындық процестердің қажетті қасиеттерін басқаруға, қалыптастыруға мүмкіндік береді. Толқындар дисперсиясының заңдылықтары толқындардағы толқындардың фазалық және топтық жылдамдықтарының жиілікке тәуелділігімен сипатталады. Дисперсия теңдеулерінің шешімдері бұл тәуелділікті анықтайды. Бұл жұмыста моноклиндік анизотропияның жазық диэлектрлік толқынында ТЕ және ТМ поляризация толқындарының дисперсиясының теңдеулері алынды. Қабаттың бір шекарасы металдандырылған, екіншісі жартылай шексіз ортамен байланыста болады.

SH поляризациясының серпімді толқындары жағдайында жартылай жабық толқындардағы толқындық процестер Лява толқындары деп аталады. Серпімді қабаттың шекарасының біреуі бос, ал екіншісі шексіз серпімді ортамен жартылай байланыста. Лява толқындары сейсмология, геофизика және т.б. мәселелерде қарастырылады.

Түйін сөздер: дисперсия, жартылай жабық жазық толқын, моноклиндік анизотропия, Лэмба типті толқындар, беттік толқындар, шекті жылдамдықтар, фазалық және топтық жылдамдықтар.

S.K. Tleukenov*¹, K.N. Balabekov², Z.K. Zhalgasbekova³

^{1,2}L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

³Kazakh University of Technology and Business (KazUTB) – Astana, Kazakhstan

The equations of dispersion of TE and TM waves in a semi-closed plane waveguide of monoclinic anisotropy

Abstract. This article is devoted to the study of electromagnetic waves propagation in a semi-closed flat layer of monoclinic anisotropy, in the coordinate plane (yz). The regularities of electromagnetic wave processes are important in many fields of engineering and scientific research. Traditionally, the

propagation of optical range waves with the anisotropy of the permittivity tensor and the isotropy of the magnetic permeability tensor has been more studied [1-8].

The patterns of wave propagation in waveguides are used in the creation of devices and devices for various purposes. Wave processes in waveguides have dispersion. The presence of dispersion allows you to control and form the necessary properties of wave processes in waveguides.

The patterns of wave dispersion are described by the dependence of the phase and group velocities of waves in waveguides on frequency. The solution of the dispersion equations determines this dependence. In this paper, the equations of dispersion of TE and TM polarization waves in a plane dielectric waveguide of monoclinic anisotropy are obtained. One boundary of the layer is metallized, the other is in contact with a semi-infinite medium. In the case of elastic waves of SH polarization, wave processes in semi-closed waveguides are called Love waves. One of the boundaries of the elastic layer is free, the other is in contact with a semi-infinite elastic medium. Love waves are considered in problems of seismology, geophysics, etc.

Key words: dispersion, semi-closed plane waveguide, monoclinic anisotropy, Lamb type waves, surface waves, limiting velocities, phase and group velocities.

References

1. Landau L.D., Lifshits E.M. *Elektrodinamika Sploshnykh Sred* [Electrodynamics of Continuous Media] – Moscow: Nauka. – 1982 [in Russian]
2. Yariv A., Yuh P. *Opticheskie volny v kristallakh* [Optical Waves in Crystals] – Moscow: Nauka. – 1987 [in Russian]
3. Ryazanov M.I. *Elektrodinamika kondensirovannogo veshchestva* [Ryazanov M.I. *Elektrodinamika kondensirovannogo veshchestva*. – Moscow: Nauka. – 1984 [in Russian]
4. Vinogradova M.B., Rudenko O.V., and Sukhorukov A.P. *Theory of Waves*. – Moscow: Nauka Press. – 1990 [in Russian]
5. Balakirev M.K., Gilinsky I.A. *Waves in Piezocrystals*. – Novosibirsk: Nauka Press. – 1982 [in Russian]
6. Rabinovitch M.I., Trubetskov D.I. *Introduction to the Theory of Oscillations and Waves*. – Moscow, Russia: Nauka Pres. – 1984 [in Russian]
7. Tleukenov S.K., Ospanov, A.T. *Radiation of Electromagnetic Fields in Anisotropic Media*. – Almaty, Kazakhstan: Kenje Press. – 2001 [in Russian]
8. Tleukenov S.K. *Electromagnetic Waves in Anisotropic Media*. – Almaty, Kazakhstan: Epigraph Press. – 2017 [in Russian]
9. Tleukenov S.K., A.M. Assilbekova A.M. Surface of wave vectors of electromagnetic waves in anisotropic dielectric media with rhombic symmetry // *Telecommunication and Radio Engineering*. – 2017. – 76(14). – P. 1231-1238. DOI:10.1615/TelecomRadEng.v76.i14.20
10. Tleukenov S.K., Zhalgasbekova Z.K., Sirenko Yu.K. Phase and group velocities of electromagnetic waves in a monoclinic crystal // *Telecommunication and Radio Engineering*. – 2019. – 78(1). – P. 1-10.
11. Tleukenov S.K., Balabekov K.N., Zhalgasbekova Z.K. Gruppovaya skorost' i potok elektromagnitnoi energii v rombicheskikh kristallakh // *Vestnik. Evraziiskogo natsional'nogo universiteta imeni L.N. Gumileva. Seriya Fizika. Astronomiya* [Group Velocity and Electromagnetic Energy Flow in Rhombic

Crystals // Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series] -- 2019. – No. 1(126). – P. 90-98[In Russian]

12. Tleukenov, S.K., Balabekov K.N., Zhalgasbekova Z.K. Laws of reflection and refraction of TE and TM polarization waves on the border of rhombic crystals // Вестник КарГУ. – 2020. – №1(97). – P. 70-81.

13. Sirenko Yu.K., Tleukenov S.K., Yashina N.P., Zhalgasbekova Z.K. Propagation of Electromagnetic Waves in Structures with Biaxial Anisotropic Media of Monoclinic Syngony. Part 1: Unlimited Media // Telecommunications and Radio Engineering. – 2020. – 79(5). – P. 363-381.

14. Sirenko Yu.K., Tleukenov S.K., Yashina N.P., Zhalgasbekova Z.K. Propagation of electromagnetic waves in structures with biaxial anisotropic media of monoclinic syngony. part 2: waveguide structures // Telecommunications and Radio Engineering. – 2020. – 79(6). – P. 453-470.

15. Smirnov V.I. Kurs vysshei matematiki [Course of Higher Mathematics] – Moskva: GITTL. – 1953 [In Russian]

16. Gantmakher F.R. Teoriya matrits [Matrix Theory] – Moscow: Nauka. – 1988 [In Russian]

17. Tleukenov S.K. A method for the analytical description of coupled-field waves in various anisotropic media // Acta Mech. – 2014. – P. 3535-3547.

18. Tleukenov S.K., Aitbaev A.B. O volnakh Lemba v uprugikh sloyakh rombicheskoi simmetrii // Akusticheskii zhurnal [On Lamb Waves in Elastic Layers with Rhombic Symmetry // Acoustical Journal] – 2015. – Vol. 61. No. 2. – P. 161-164 [In Russian]

19. Filippov D.A., Galichyan T.A., Laletin, V.M. Magnetolectric effect in bilayer magnetostrictive-piezoelectric structure // Theory and experiment, Applied Physics A. – 2014. – 115(3)– P. 1087-1091.

20. Bichurin M.I., Petrov V.M., Averkin S.V., Filippov A.V. Electromechanical resonance in magnetolectric layered structures // Phys. Solid State. – 2010. – 52. – P. 2116-2122.

Сведения об авторах:

Тлеуенов С.К. – автор для корреспонденции, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан. E-mail: matricant@inbox.ru

Балабеков К.Н. – кандидат физико-математических наук, доцент, профессор кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.М.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан. E-mail: Kairgan_55@mail.ru

Жалгасбекова З.К. – преподаватель, Казахский университет технологии и бизнеса, ул. Кайыма Мухамедханова, 37А, Астана, Казахстан. E-mail: Zhalgasbekova68@mail.ru

Tleukenov S.K. – corresponding author, doctor of physical and mathematical sciences, Professor of the Department of technical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan. E-mail: matricant@inbox.ru

Balabekov K.N. – candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, head of the Department of Technical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan. E-mail: Kairgan_55@mail.ru

Zhalgasbekova Z.K. – lecturer of the Kazakh University of Technology and Business, Kayum Mukhamedkhanov str.,37A,Astana, Kazakhstan. E-mail: Zhalgasbekova68@mail.ru

Тлеуменов С.К. – хат-хабар авторы, физика-математика ғылымдарының докторы, техникалық физика кафедрасының профессоры.Л.Н.Гумилов атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі 13, Астана, Қазақстан. E-mail: matricant@inbox.ru

Балабеков К.Н. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, техникалық физика кафедрасының профессоры. Л.Н.Гумилов атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі 13, Астана, Қазақстан. E-mail: Kairgan_55@mail.ru

Жалгасбекова З.К.–Қазақ технология және бизнес университетінің оқытушысы, Қайым Мұхамедханов көшесі 37А, Астана, Қазақстан. E-mail: Zhalgasbekova68@mail.ru



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/>).



МРНТИ 29.05.23

научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-88-99>

Вычисление форм-факторов и полулептонных брэнчингов перехода $B \rightarrow \rho$ в рамках ковариантной модели кварков

М.Н. Ильясов^{1,2} , А.Н. Исадыков^{*1,3} 

¹ Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

² Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

(E-mails: ¹vifi5960@gmail.com, ²a.issadykov@inp.kz)

Аннотация. В данной работе исследован переход $B \rightarrow \rho$ в рамках ковариантной модели кварков с конфайнментом. Ковариантная модель кварков с конфайнментом является квантово-полевым подходом к адронным взаимодействиям, основанный на лагранжиане взаимодействия адронов, взаимодействующих с составляющими их кварками. Важным отличием модели от других теоретических моделей является то, что численные результаты (форм-факторы, брэнчинги, ширины и угловые наблюдаемые) вычисляются во всем кинематическом диапазоне переданного импульса q^2 . Переход $B \rightarrow \rho$ является предметом интереса для области физики высоких энергий. В разных теоретических подходах были получены форм-факторы и брэнчинги. Экспериментаторы из коллаборации LHCb в будущем планируют померить данный распад, поскольку этот переход идет с изменяющимся ароматом нейтрального тока. В этой работе нами были вычислены форм-факторы для перехода $B \rightarrow \rho$ во всем кинематическом диапазоне переданного импульса q^2 . Мы сравнили численные результаты из нашей модели с предсказаниями из других теоретических подходов. Для сравнения с другими теоретическими подходами мы привели наши форм-факторы в вид форм-факторов Бауэр-Стеч-Вирбель (BSW). Теоретические предсказания находятся в удовлетворительном согласии между собой. Используя эти форм-факторы, были рассчитаны брэнчинги для полулептонного распада $B^+ \rightarrow \rho^+ l^+ l^-$, где l^- - лептоны. Нами были построены графики с поведением форм-факторов и брэнчингов в зависимости от квадрата переданного импульса. Результаты, полученные в ходе данной работы, продемонстрировали высокую степень согласия с предсказаниями других теоретических моделей, таких, как правила сумм на световом конусе, квантовая хромодинамика на решетке и релятивистская модель кварков. Это подтверждает надежность и точность ковариантной модели кварков с конфайнментом для изучения редких распадов, в которых участвуют тяжелые кварки.

Ключевые слова: Стандартная модель, квантовая теория поля, В мезоны, форм-факторы, брэнчинг.

Поступила 24.10.2024. После доработки 11.11.2024. Принята к печати 19.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹*автор для корреспонденции

Введение

Процессы $b \rightarrow sl^+ l^-$ и $b \rightarrow dl^+ l^-$ запрещены на уровне дерева в Стандартной модели и чувствительны к вкладам Новой физики в петлях. Переход $b \rightarrow d$ подавляется сильнее, чем переход $b \rightarrow s$ из-за значения элементов матрицы СКМ.

Тем не менее интересно изучить распады, проходящие через переход с изменяющимся ароматом нейтрального тока (FCNC). Распады перехода $b \rightarrow d$ наблюдались коллаборацией $LHCb$ для распадов $B \rightarrow \pi^+ \mu^+ \mu^-$ [1,2] и $B^0 \rightarrow K^{(*)0} \mu^+ \mu^-$ [3]. Последний распад особо интересен в свете того, что партнер данного перехода $B \rightarrow K^* l^+ l^-$ активно изучается в свете поиска Новой физики в виду большого отклонения теоретических значений от экспериментальных данных [4-6].

Поиск редкого распада $B^0 \rightarrow \rho^0 (\pi^+ \pi^-) \mu^+ \mu^-$ описан в статье коллаборации $LHCb$ [7]. Формфакторы $B \rightarrow \rho$ перехода изучались в модели правилах сумм светового конуса [8,9] и в других теоретических подходах, таких, как [10-13]. В данной работе мы вычисляем формфакторы и брэнчинги для $B \rightarrow \rho$ перехода в рамках ковариантной модели кварков (CCQM). Принципиальным отличием нашей модели от других моделей является то, что результаты (форм-факторы, брэнчинги, ширины и угловые наблюдаемые) получены во всем кинематическом диапазоне переданного импульса q^2 . В то время как в других моделях эти значения получены лишь для малых q^2 и далее аппроксимированы специальной функцией.

Ковариантная модель кварков

Ковариантная модель кварков с конфайнментом представляет собой эффективный квантово-полевой подход к адронным взаимодействиям, основанный на лагранжиане взаимодействия адронов, взаимодействующих с образующими их кварками. Значение константы связи следует из условия композитности $ZN = 0$ [14-16], где ZN – константа перенормировки волновой функции адрона. Матричные элементы физических процессов генерируются набором кварковых петлевых диаграмм согласно разложению $1/N_c$. Ультрафиолетовые расходимости кварковых петель регуляризованы за счет включения вершинных функций для адрон-кварковых вершин. Эти функции также описывают эффекты конечного размера, связанные с неточечными адронами. Конфайнмент кварков встроен через инфракрасное обрезание на верхнем пределе масштабного интегрирования, чтобы избежать появления сингулярностей в матричных элементах. Параметр инфракрасного обрезания λ универсален для всех процессов. Ковариантная модель ограниченных кварков имеет ограниченное число параметров: массы легких и тяжелых составляющих кварков, параметры размера, которые описывают размер распределения составляющих кварков внутри адрона, и параметр инфракрасного обрезания λ . Они определяются подгонкой к имеющимся экспериментальным данным. Мы фиксируем параметры Λ в соответствии с экспериментальным значением констант лептонного распада.

В рамках Стандартной модели редкие распады типа $b \rightarrow d$ описываются с использованием эффективного гамильтониана, который может быть выражен через разложение операторного произведения. Эффективный гамильтониан для распада

$b \rightarrow dl^+ l^-$ имеет вид [17-22]:

$$H_{SM}^{eff} = -\frac{4G_F}{\sqrt{2}} V_{td}^* V_{td} (\sum_{i=10}^{10} C_i(\mu) O_i(\mu) + \lambda_u \sum_{i=10}^{10} C_i(\mu) [O_i(\mu) - O_i^u(\mu)]) \quad (1)$$

где C_i – коэффициенты Вильсона, а O_i – набор локальных операторов, полученных в рамках SM для перехода $b \rightarrow dl^+ l^-$. Операторы включают такие вклады, как токи кварков, глюонов и фотонов, взаимодействующих с кварками внутри мезонов.

Форм-факторы перехода $B \rightarrow \rho$ выражены в следующем виде в рамках ковариантной модели кварков с конфайнментом

$$\langle \rho(p_2, \epsilon) | \bar{d} O^\mu b | B(p_1) \rangle = \frac{\epsilon_\nu^\dagger}{m_1 + m_2} [-g^{\mu\nu} P \cdot q A_0(q^2) + P^\mu P^\nu A_+(q^2) + q^\mu P^\nu A_-(q^2) + i \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} P_\alpha q_\beta V(q^2)], \quad (2)$$

$$\langle \rho(p_2) | \bar{d} \sigma^{\mu\nu} q_\nu (1 + \gamma^5) b | B(p_1) \rangle = \epsilon_\nu^\dagger \left(- \left(g^{\mu\nu} - \frac{q^\mu q^\nu}{q^2} \right) P \cdot q a_0(q^2) + \left(P^\mu P^\nu - q^\mu P^\nu P \cdot \frac{q}{q^2} \right) a_+(q^2) + i \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} P_\alpha q_\beta g(q^2) \right)$$

где $P = p_1 + p_2$, $q = p_1 - p_2$. В приведенных выше уравнениях p_1 и p_2 импульсы B мезона с массой m_1 и дочернего мезона с массой m_2 , ϵ – вектор поляризации дочернего мезона, а $O^\mu = \gamma^\mu (1 - \gamma^5)$ – слабая матрица Дирака. Также условие «оболочки» требует, чтобы $p_1^2 = m_1^2 = m_b^2$ и $p_2^2 = m_2^2 = m_\rho^2$.

Таблица 1. Параметры ковариантной модели кварков

$m(u/d)$	m_s	m_c	m_b	λ	Λ_B	Λ_ρ	m_B	m_ρ	
0.241	0.428	1.67	4.68	0.181	1.963	0.624	5.279	0.775	ГЭВ

Форм-факторы вычисляются для различных значений переданного импульса q^2 с использованием кодов, написанных на языках программирования FORTRAN и Mathematica. Полученные форм-факторы выражаются через параметризацию двойного полюса, что позволяет упростить дальнейшие вычисления:

$$F(q^2) = \frac{F(0)}{1 - as + bs^2}, s = \frac{q^2}{m_B^2} \quad (3)$$

где $F(0)$, a и b – параметры, определяемые из численных расчетов, а m_B – масса B мезона.

Эта параметризация обеспечивает точное представление форм-факторов на всем диапазоне q^2 и позволяет использовать их в последующих вычислениях брэнчингов распада и других наблюдаемых величин. Ширина этих распадов вычисляется путем интегрирования по q^2 дифференциального распределения [23]

$$\frac{d\Gamma(b \rightarrow dl^+ l^-)}{dq^2} = \frac{G_F^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{\alpha \lambda_d}{2\pi} \right)^2 \frac{|\mathbf{p}_2| q^2 \beta_l}{12 m_1^2} \mathcal{H}_{tot} \quad (4)$$

$$\mathcal{H}_{tot} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_U^{11} + \mathcal{H}_U^{22} + \mathcal{H}_L^{11} + \mathcal{H}_L^{22}) + \delta_{ll} \left(\frac{1}{2} \mathcal{H}_U^{11} - \mathcal{H}_U^{22} + \frac{1}{2} \mathcal{H}_L^{11} - \mathcal{H}_L^{22} + \frac{3}{2} \mathcal{H}_S^{22} \right)$$

В дальнейшем мы используем краткое обозначение $m_1 = m_B$, а m_2 – это масса ρ мезона, $\beta_l = \sqrt{1 - 4m_l^2/q^2}$, $\delta_{ll} = 2m_l^2/q^2$ – коэффициент подавления сдвига спиральности, $|\mathbf{p}_2| = \lambda^{1/2}(m_1^2, m_2^2, q^2)/(2m_1)$ – импульс ρ мезона в системе отсчета с помощью функции Келлена $\lambda(a, b, c) = a^2 + b^2 + c^2 - 2(ab + ac + bc)$. Также $\lambda_d = |V_{tb}^* V_{td}|$ – произведение элементов матрицы Каббиво-Кабаяши-Москава (СКМ) [24], отвечающие за переходы между соответствующими кварками.

В приведенном выше уравнении билинейные комбинации структурной функции спиральности для каналов распада $B \rightarrow \rho$ определяются как [20]:

$$\mathcal{H}_U^{ii} = |H_{+1+1}^i|^2 + |H_{-1-1}^i|^2 \quad \mathcal{H}_L^{ii} = |H_{00}^i|^2 \quad \mathcal{H}_S^{ii} = |H_{t0}^i|^2 \quad (5)$$

где амплитуды выражаются через форм-факторы, входящие в матричный элемент $b \rightarrow dl^* l$ редкого распада, как:

$$\begin{aligned} H_{t0}^i &= \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{1}{2m_2\sqrt{q^2}} (Pq(-A_0^i + A_+^i) + q^2 A_-^i) \\ H_{\pm 1 \pm 1}^i &= \frac{1}{m_1 + m_2} (-PqA_0^i \pm 2m_1 |\mathbf{p}_2| V^i) \\ H_{00}^i &= \frac{1}{m_1 + m_2} \frac{1}{2m_2\sqrt{q^2}} (-Pq(m_1^2 - m_2^2 - q^2)A_0^i + 4m_1^2 |\mathbf{p}_2|^2 A_+^i) \end{aligned} \quad (6)$$

Численные результаты

В данной работе были вычислены форм-факторы для перехода $B \rightarrow \rho$, определенные в уравнении (2), в рамках ковариантной модели кварков во всей кинематической области квадрата переданного импульса q^2 и приведены в таблице 2.

Таблица 2. Форм-факторы перехода $B \rightarrow \rho$ в рамках модели.

Форм-фактор	F(0)	a	b
A_+	0.227 ± 0.018	1.355	0.355
A_-	-0.240 ± 0.019	1.415	0.404
A_0	0.319 ± 0.026	0.528	-0.295
V	0.259 ± 0.021	1.472	0.452
a_0	0.233 ± 0.019	0.575	-0.254
a_+	0.233 ± 0.019	1.362	0.360
g	0.233 ± 0.019	1.477	0.457

На рисунке 1 представлены все форм-факторы перехода $B \rightarrow \rho$ во всей кинематической области $0 \leq q^2 \leq q_{\max}^2$. Форм-факторы приведены следующими линиями: сплошная черная линия – A_0 , прерывистая желтая – A_+ , прерывистая зеленая – A_- , пунктирная оранжевая – V , сплошная красная линия – a_0 , сплошная синяя – a_+ и сплошная салатная – g .

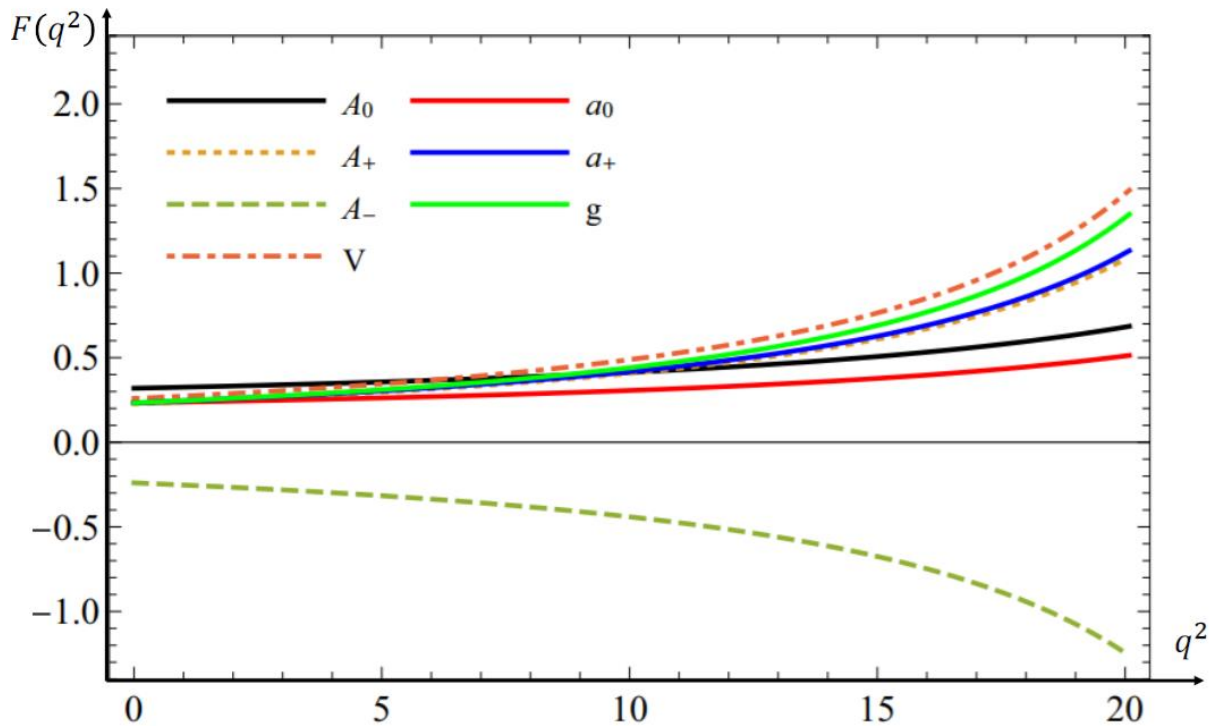


Рисунок 1. Визуализация форм-факторов перехода $B \rightarrow \rho$.

Определив параметры модели и форм-факторы перехода, мы также сравниваем наши результаты с предсказаниями из других теоретических подходов. Для сравнения с другими теоретическими подходами мы используем уравнение, позволяющие приводить наши форм-факторы в вид форм-факторов Бауэр-Стеч-Вирбель (BSW) из работы [25]. Обозначив их надстрочным индексом, чтобы отличать от наших форм-факторов, мы получаем следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
 A_0 &= \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} A_1^c & A_+ &= A_2^c \\
 A_- &= \frac{2m_2(m_1 + m_2)}{q^2} (A_3^c - A_0^c) & V &= V^c \\
 a_+ &= T_2^c + \frac{q^2}{m_1^2 - m_2^2} T_3^c & a_0 &= T_2^c \\
 & & g &= T_1^c
 \end{aligned} \tag{8}$$

Кроме того, мы также отмечаем, что форм-факторы, указанные выше, должны удовлетворять следующим ограничениям:

$$\begin{aligned}
 A_0^c(0) &= A_3^c(0) \\
 2m_2 A_3^c(q^2) &= (m_1 + m_2) A_1^c(q^2) - (m_1 - m_2) A_2^c(q^2)
 \end{aligned} \tag{9}$$

Поскольку $a_0(0) = a_+(0) = g(0)$, мы представляем форм-факторы

$$A_0^c = \frac{(m_1 - m_2)[A_0(0) - A_+(0)]}{2m_2}, A_1^c(0) = \frac{A_0(0)(m_1 - m_2)}{m_1 + m_2}, A_2^c(0) = A_+(0),$$

$T_1^c = g(0)$ и $T_3^c(0) = \lim_{q^2 \rightarrow 0} (m_1^2 - m_2^2)(a_+ - a_0)/q^2$. Необходимо отметить, что для сравнения с другими теоретическими подходами мы опускаем верхний индекс для упрощения. Сравнение форм-факторов, полученных в рамках нашей модели ССQM для перехода $B \rightarrow \rho$, с данными из других теоретических моделей приведены в таблице 3. Теоретические предсказания находятся в удовлетворительном согласии между собой, кроме форм-фактора T_3 из работы [9]. Указаны ошибки для значений, где они были вычислены в рамках моделей.

Таблица 3. Сравнение форм-факторов перехода $B \rightarrow \rho$ с данными из других теоретических подходов

	Наша модель ССQM	LCSR [8]	LCSR [9]	LCSR [10]	LCSR [11]	RQM [12]	CQM [13]
$V(0)$	0.259±0.021	0.323	0.327±0.031	0.27±0.14	0.298	0.295±0.015	0.31
$A_0(0)$	0.266±0.013	0.303	0.356±0.042	-	0.260	0.231±0.012	0.30
$A_1(0)$	0.238±0.019	0.242	0.262±0.026	-	0.227	0.269±0.014	0.26
$A_2(0)$	0.227±0.018	0.221	0.297±0.035	0.19±0.11	0.215	0.282±0.014	0.24
$T_{1,2}(0)$	0.233±0.019	0.267	0.267±0.026	0.24±0.12	0.260	0.290±0.015	0.27
$T_3(0)$	0.179±0.014	0.176	0.747±0.076	-	0.184	0.124±0.007	0.19

Таблица 4 содержит результаты расчета брэнчингов для переходов $B \rightarrow \rho l^+ l^-$, которые были вычислены с использованием полученных форм-факторов. Сравнение с экспериментальными данными и теоретическими предсказаниями показало, что брэнчинги, предсказанные в нашей модели, находятся в хорошем согласии с данными из работ [26] и [12, 27]. Также на рисунке 2 красной кривой представлен брэнчинг для канала $B^+ \rightarrow \rho^+ \mu^+ \mu^-$ и синей кривой представлен брэнчинг для канала $B^+ \rightarrow \rho^+ \tau^+ \tau^-$ в единицах 10^{-9} .

Таблица 4. Значение брэнчингов распада $B \rightarrow \rho l^+ l^-$ в единицах 10^{-9}

	Наша модель ССQM	LCSR [26]	RQM [12, 27]
$B^+ \rightarrow \rho^+ e^+ e^-$	4.82±2.39	4.0±0.4	-
$B^+ \rightarrow \rho^+ \mu^+ \mu^-$	4.05±1.45	3.9±0.4	4.4±0.5
$B^+ \rightarrow \rho^+ \tau^+ \tau^-$	0.63±0.14	0.40±0.04	0.75±0.08

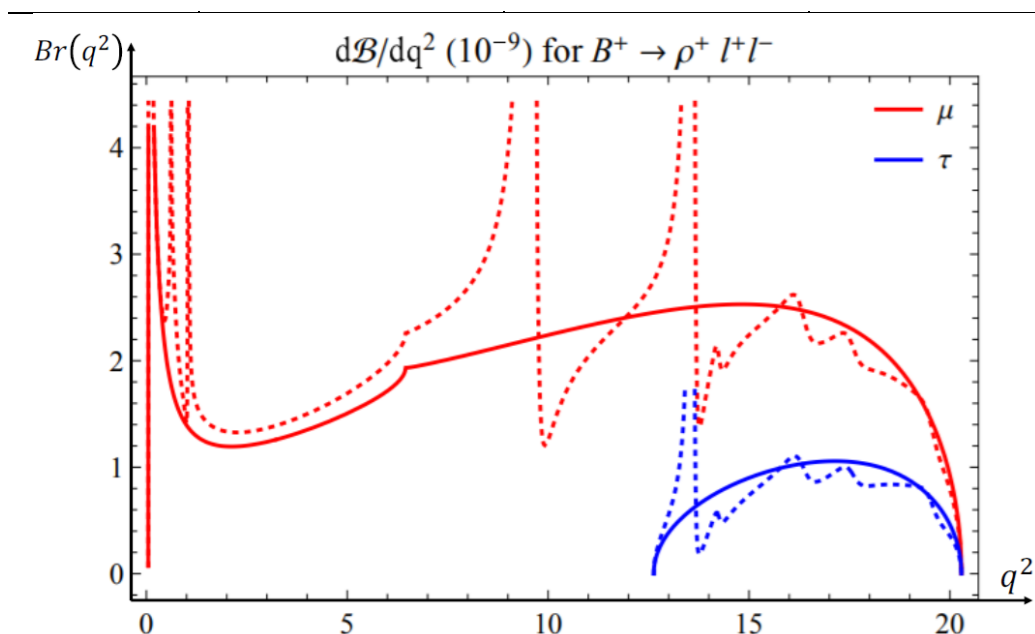


Рисунок 2. Численные значения брэнчингов для каналов $B^+ \rightarrow \rho^+ \mu^+ \mu^-$ и $B^+ \rightarrow \rho^+ \tau^+ \tau^-$

Заклучение

В данной работе были исследованы распады $B \rightarrow \rho$ в рамках ковариантной модели кварков с конфайнментом. Используя этот подход, удалось вычислить форм-факторы переходов для полного диапазона значений переданного импульса q^2 , что позволило предсказать брэнчинги распада $B \rightarrow \rho l^+ l^-$.

Результаты, полученные в ходе данной работы, продемонстрировали высокую степень согласия с предсказаниями других теоретических моделей, таких, как правила сумм на световом конусе, квантовая хромодинамика на решетке и релятивистская модель кварков. Это подтверждает надежность и точность модели для изучения редких распадов, в которых участвуют тяжелые кварки.

Благодарность

Работа выполнена в рамках проекта (грант №BR21881941) при поддержке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан.

Вклад авторов

Исадыков А. – руководство по исследованию, теоретические расчеты, утверждение окончательного варианта статьи для публикации;

Ильясов М. – анализ и интерпретация результатов работы, написание текста.

Список литературы

1. Aaij R. et al. [LHCb], $B \rightarrow \pi l l$ Form Factors for New Physics Searches from Lattice QCD // JHEP 1212, 125 (2012), arXiv:1507.01618 – журнал на англ языке
2. Aaij R. et al. [LHCb], First measurement of the differential branching fraction and CP asymmetry of the $B_{\pm} \rightarrow \pi^{\pm} \mu^+ \mu^-$ decay // JHEP 1510, 034 (2015), arXiv:1509.00414. – журнал на англ языке
3. Aaij R. et al. [LHCb], JHEP 1807, 020 (2018)
4. Aaij R. et al. [LHCb], Measurement of Form-Factor-Independent Observables in the Decay $B^0 \rightarrow K^{*0} \mu^+ \mu^-$ // Phys. Rev. Lett.- Vol. 111, (2013), 191801, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.191801> – журнал на англ языке
5. Aaij R. et al. [LHCb], Test of lepton universality with $B^0 \rightarrow K^{*0} l^+ l^-$ decays // JHEP 08, (2017), 055 [https://doi.org/10.1007/JHEP08\(2017\)055](https://doi.org/10.1007/JHEP08(2017)055) – журнал на англ языке
6. Aaij R. et al. [LHCb], Test of Lepton Universality Using $B^+ \rightarrow K^+ \ell^+ \ell^-$ Decays // Phys. Rev. Lett.- Vol. 113, (2014), 151601, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.151601> – журнал на англ языке
7. Aaij R. et al. [LHCb], Study of the rare B_s^0 and B^0 decays into the $\pi^+ \pi^- \mu^+ \mu^-$ final state // Phys. Lett. B, Vol. 743, (2015), 46, arXiv:1412.6433. – журнал на англ языке
8. Ball P. and Zwicky R., $B, d, s \rightarrow \rho, \omega, K^*, \phi$ decay form factors from light-cone sum rules reexamined // Phys. Rev. D, Vol. 71, (2005), 014029, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.71.014029> – журнал на англ языке
9. Bharucha A. et al., $B \rightarrow V \ell^+ \ell^-$ in the Standard Model from light-cone sum rules // JHEP 1608, 098 (2016), [https://doi.org/10.1007/JHEP08\(2016\)098](https://doi.org/10.1007/JHEP08(2016)098) – журнал на англ языке
10. Gubernari N. et al., $B \rightarrow P$ and $B \rightarrow V$ form factors from B-meson light-cone sum rules beyond leading twist // JHEP 01, 150 (2019), [https://doi.org/10.1007/JHEP01\(2019\)150](https://doi.org/10.1007/JHEP01(2019)150)
11. Lu C.D. et al., Heavy-to-light form factors on the light cone // Phys. Rev. D, Vol. 76, (2007), 014013, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.76.014013> – журнал на англ языке
12. Faustov R.N. and Galkin V.O., Rare $B \rightarrow \pi \ell \ell^-$ and $B \rightarrow \rho \ell \ell^-$ decays in the relativistic quark model // Eur. Phys. J. C.- Vol. 74(6), (2014), 2911, <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-014-2911-6> – журнал на англ языке
13. Melikhov D. and Stech B., Weak form factors for heavy meson decays: An update // Phys. Rev. D.- Vol. 62, (2000), 014006, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.014006>
14. Weinberg S., Elementary particle theory of composite particles // Phys. Rev. -Vol. 130, (1963), No 776. – журнал на англ языке
15. Salam A., Lagrangian theory of composite particles // Nuovo Cimento -Vol. 25, (1962), No. 224. – журнал на англ языке
16. Hayashi K. et al., Compositeness criteria of particles in quantum field theory and S-matrix theory // Fortsch. Phys. -Vol. 15, (1967), No. 625. – журнал на англ языке
17. Buras A.J. and Munz M., Effective Hamiltonian for $B \rightarrow X s e^+ e^-$ beyond leading logarithms in the naive dimensional regularization and 't Hooft-Veltman schemes // Phys. Rev. D.- Vol. 52, (1995), 186, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.52.186> – журнал на англ языке
18. Kruger F. and Sehgal L., CP violation in the decay $B \rightarrow X d e^+ e^-$ // Phys. Rev. D.- Vol. 55, (1997), 2799, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.55.2799> – журнал на англ языке
19. Buchalla G. et al., Weak decays beyond leading logarithms // Rev. Mod. Phys.- Vol. 68, (1996), 1125, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.1125> – журнал на англ языке

20. Issadykov A., Soni N.R., Gadaria A.N., Patel J.J., Pandya J.N., $B \rightarrow \pi$ Decay Form Factors from Covariant Confined Quark Model // Proceedings of Science, 2022, 380, 171 -**сборник**

21. Issadykov A., $B \rightarrow \rho$ decay form factors from covariant confined quark model // AIP Conference Proceedings, 2019, 2163, 090006, <https://doi.org/10.1063/1.5130128> -**журнал на англ языке**

22. Soni N.R., Issadykov A., Gadaria A.N., Patel J.J., Pandya J.N., Rare $b \rightarrow d$ decays in covariant confined quark model // European Physical Journal A, 2022, 58(3), 39, <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00685-y> -**журнал на англ языке**

23. Faessler A. et al., The exclusive rare decays $B \rightarrow K^* \ell \ell$ and $B_c \rightarrow D(D^*) \ell \ell$ in a relativistic quark model // Eur. Phys. J. Direct.- Vol. 4(18), (2002), <https://doi.org/10.1007/s1010502c0018> -**журнал на англ языке**

24. R.L. Workman et al. (Particle Data Group), Review of Particle Physics // PTEP -Vol. 083C01, (2022), <https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097> -**журнал на англ языке**

25. Wirbel M. et al., Exclusive semileptonic decays of heavy mesons // Z. Phys. C, Vol. 29, (1985), 637, <https://doi.org/10.1007/BF01560299> -**журнал на англ языке**

26. Wu Y.L. et al., $B(s)$, $D(s) \rightarrow \pi, K, \eta, \rho, K^*, \omega, \phi$ transition form factors and decay rates with extraction of the ckm parameters $|V_{ub}|$, $|V_{cs}|$, $|V_{cd}|$ // Int. J. Mod. Phys. A.- Vol. 21, (2006), No. 30, pp. 6125-6172. <https://doi.org/10.1142/S0217751X06033209> -**журнал на англ языке**

27. Faustov R.N. and Galkin V.O., Rare B_s decays in the relativistic quark model // Eur. Phys. J. C.- Vol.73(10), (2013), 2593 <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-013-2593-5> -**журнал на англ языке**

М.Н. Ильясов^{1,2}, А.Н. Исадыков^{*1,3}

¹Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан,

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

³Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей

(E-mails: ¹vifi5960@gmail.com, ²a.issadykov@inp.kz)

Кварктардың ковариантты моделі негізінде $B \rightarrow \rho$ ыдырауының форм-факторы және жартылай лептондық брэнчингтерін есептеу

Андатпа. Бұл жұмыста $B \rightarrow \rho$ ауысуы шектелген кварктардың коварианттық моделі шеңберінде зерттелінді. Шектелген кварктардың коварианттық моделі адрондық әрекеттесулердің кванттық өріс негізіндегі тәсілі болып табылады, адрондардың құрамдас кварктарымен әрекеттесетін өзара әрекеттесуінің Лагранжианына негізделген. Модельдің басқа теориялық модельдерден маңызды айырмашылығы - сандық нәтижелер (форм факторлар, брэнчингтер, ен және бұрыштық бақыланатын мәндер) берілген q^2 импульстің барлық кинематикалық диапазонында есептелетіндігі. $B \rightarrow \rho$ ауысуы жоғары энергиялар физикасы саласы үшін қызығушылық тудыратын пән болып табылады. Форм факторлар мен брэнчингтер әртүрлі теориялық тәсілдерде есептелінген. ЛНСб коллаборациясы экспериментшілері бұл ыдырауды болашақта өлшеуді жоспарлап отыр, өйткені бұл ауысу бейтарап токтың өзгеретін дәмімен жүреді. Бұл жұмыста берілген q^2 импульстің барлық кинематикалық диапазонында $B \rightarrow \rho$ ауысуының форм факторларын есептедік. Моделіміздің сандық нәтижелерін басқа теориялық

тәсілдердегі болжамдармен салыстырдық. Басқа теориялық тәсілдермен салыстыру үшін біз форм факторларымызды Бауэр-Штех-Вирбель (BSW) форм факторлары ретінде көрсеттік. Теориялық болжамдар бір-бірімен қанағаттанарлық сәйкес келеді. Осы формфакторларын пайдалана отырып, $B^+ \rightarrow \rho^+ l^+ l^-$ жартылай лептоникалық ыдырауы үшін брэнчингтер есептелді, мұндағы l -лептондар. Біз берілген импульстің квадратына байланысты формфакторлар мен брэнчингтердің әрекетін көрсететін графиктерді құрдық. Бұл жұмыстан алынған нәтижелер жарық конусының қосындысы ережелері, тор кванттық хромодинамика және релятивистік кварк моделі сияқты басқа теориялық модельдердің болжамдарымен жоғары дәрежеде сәйкестігін көрсетті. Бұл ауыр кварктардың қатысуымен сирек кездесетін ыдырауларды зерттеуге арналған шектелген кварктардың коварианттық моделінің сенімділігі мен дәлдігін растайды.

Түйін сөздер: Стандартты модель, өрістің кванттық теориясы, B мезондар, форм- факторлар, брэнчинг.

^{1,2}M.N. Ilyassov, ^{1,3}A.N. Issadykov*

¹ Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan,

² al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³ Joint institute for nuclear research, Dubna, Russia

(E-mails: 1vifi5960@gmail.com, 2a.issadykov@inp.kz)

Calculation of form factors and semi-lepton branchings of the $B \rightarrow \rho$ transition in the covariant quark model

Abstract. This paper present a study of the $B \rightarrow \rho$ transition in the framework of the covariant confined quark model. The covariant confined quark model is a quantum field approach to hadron interactions based on the Lagrangian of the interaction of hadrons interacting with their constituent quarks. An important difference from other theoretical models is that the numerical results (form factors, branchings, widths and angular observables) are calculated over the entire kinematic range of the transferred momentum q^2 . The $B \rightarrow \rho$ transition is a subject of interest in high energy physics. Form factors and branchings have been obtained in different theoretical approaches. Experimentalists from the LHCb collaboration plan to measure this decay in the future, since this transition occurs with a changing flavor of neutral current. In this work we have calculated the form factors for the $B \rightarrow \rho$ transition over the entire kinematic range of the transferred momentum q^2 . We have compared the numerical results from our model with the predictions of other theoretical approaches. We have converted our form factors into the Bauer-Stech-Wirbel (BSW) form factors for comparison with other theoretical approaches. The theoretical predictions are in satisfactory agreement with each other. Using these form factors we have calculated the branchings for the semileptonic decay $B^+ \rightarrow \rho^+ l^+ l^-$, where l are leptons. We have plotted the behavior of the form factors and branchings as functions of the squared momentum transfer. The results obtained in this work have demonstrated a high degree of agreement with the predictions of other theoretical models such as the light-cone sum rules, lattice quantum chromodynamics, and the relativistic quark model. This confirms the reliability and accuracy of the covariant confined quark model for studying rare decays involving heavy quarks.

Keywords: standard model, quantum field theory, B mesons, form factors, branching.

References

1. Aaij R. et al. [LHCb], $B \rightarrow \pi l l$ Form Factors for New Physics Searches from Lattice QCD // JHEP 1212, 125 (2012), arXiv:1507.01618
2. Aaij R. et al. [LHCb], First measurement of the differential branching fraction and CP asymmetry of the $B_{\pm} \rightarrow \pi^{\pm} \mu^{+} \mu^{-}$ decay // JHEP 1510, 034 (2015), arXiv:1509.00414.
3. Aaij R. et al. [LHCb], JHEP 1807, 020 (2018)
4. Aaij R. et al. [LHCb], Measurement of Form-Factor-Independent Observables in the Decay $B^0 \rightarrow K^{*0} \mu^{+} \mu^{-}$ // Phys. Rev. Lett.- Vol. 111, (2013), 191801, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.191801>
5. Aaij R. et al. [LHCb], Test of lepton universality with $B^0 \rightarrow K^{*0} l^{+} l^{-}$ decays // JHEP 08, (2017), 055 [https://doi.org/10.1007/JHEP08\(2017\)055](https://doi.org/10.1007/JHEP08(2017)055)
6. Aaij R. et al. [LHCb], Test of Lepton Universality Using $B^{+} \rightarrow K^{+} \ell^{+} \ell^{-}$ Decays // Phys. Rev. Lett.- Vol. 113, (2014), 151601, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113>.
7. Aaij R. et al. [LHCb], Study of the rare B_{s0} and B^0 decays into the $\pi^{+} \pi^{-} \mu^{+} \mu^{-}$ final state // Phys. Lett. B, Vol. 743, (2015), 46, arXiv:1412.6433.
8. Ball P. and Zwicky R., $B, d, s \rightarrow \rho, \omega, K^{*}, \phi$ decay form factors from light-cone sum rules reexamined // Phys. Rev. D, Vol. 71, (2005), 014029, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.71.014029>
9. Bharucha A. et al., $B \rightarrow V \ell^{+} \ell^{-}$ in the Standard Model from light-cone sum rules // JHEP 1608, 098 (2016), [https://doi.org/10.1007/JHEP08\(2016\)098](https://doi.org/10.1007/JHEP08(2016)098)
10. Gubernari N. et al., $B \rightarrow P$ and $B \rightarrow V$ form factors from B-meson light-cone sum rules beyond leading twist // JHEP 01, 150 (2019), [https://doi.org/10.1007/JHEP01\(2019\)150](https://doi.org/10.1007/JHEP01(2019)150)
11. Lu C.D. et al., Heavy-to-light form factors on the light cone // Phys. Rev. D, Vol. 76, (2007), 014013, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.76.014013>
12. Faustov R.N. and Galkin V.O., Rare $B \rightarrow \pi \ell \ell^{-}$ and $B \rightarrow \rho \ell \ell^{-}$ decays in the relativistic quark model // Eur. Phys. J. C.- Vol. 74(6), (2014), 2911, <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-014-2911-6>
13. Melikhov D. and Stech B., Weak form factors for heavy meson decays: An update // Phys. Rev. D.- Vol. 62, (2000), 014006, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.014006>
14. Weinberg S., Elementary particle theory of composite particles // Phys. Rev. -Vol. 130, (1963), No 776.
15. Salam A., Lagrangian theory of composite particles // Nuovo Cimento -Vol. 25, (1962), No. 224.
16. Hayashi K. et al., Compositeness criteria of particles in quantum field theory and S-matrix theory // Fortsch. Phys. -Vol. 15, (1967), No. 625.
17. Buras A.J. and Munz M., Effective Hamiltonian for $B \rightarrow X s e^{+} e^{-}$ beyond leading logarithms in the naive dimensional regularization and 't Hooft-Veltman schemes // Phys. Rev. D.- Vol. 52, (1995), 186, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.52.186>
18. Kruger F. and Sehgal L., CP violation in the decay $B \rightarrow X d e^{+} e^{-}$ // Phys. Rev. D.- Vol. 55, (1997), 2799, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.55.2799>
19. Buchalla G. et al., Weak decays beyond leading logarithms // Rev. Mod. Phys.- Vol. 68, (1996), 1125, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.1125>
20. Issadykov A., Soni N.R., Gadaria A.N., Patel J.J., Pandya J.N., $B \rightarrow \pi$ Decay Form Factors from Covariant Confined Quark Model // Proceedings of Science, 2022, 380, 171
21. Issadykov A., $B \rightarrow \rho$ decay form factors from covariant confined quark model // AIP Conference Proceedings, 2019, 2163, 090006, <https://doi.org/10.1063/1.5130128>

22. Soni N.R., Issadykov A., Gadaria A.N., Patel J.J., Pandya J.N., Rare $b \rightarrow d$ decays in covariant confined quark model // European Physical Journal A, 2022, 58(3), 39, <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00685-y>
23. Faessler A. et al., The exclusive rare decays $B \rightarrow K^* \ell$ and $B_c \rightarrow D(D^*) \ell$ in a relativistic quark model // Eur. Phys. J. Direct.- Vol. 4(18), (2002), <https://doi.org/10.1007/s1010502c0018>
24. R.L. Workman et al. (Particle Data Group), Review of Particle Physics // PTEP -Vol. 083C01, (2022), <https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097>
25. Wirbel M. et al., Exclusive semileptonic decays of heavy mesons // Z. Phys. C, Vol. 29, (1985), 637, <https://doi.org/10.1007/BF01560299>
26. Wu Y.L. et al., $B(s)$, $D(s) \rightarrow \pi, K, \eta, \rho, K^*, \omega, \phi$ transition form factors and decay rates with extraction of the ckm parameters $|V_{ub}|$, $|V_{cs}|$, $|V_{cd}|$ // Int. J. Mod. Phys. A.- Vol. 21, (2006), No. 30, pp. 6125-6172. <https://doi.org/10.1142/S0217751X06033209>
27. Faustov R.N. and Galkin V.O., Rare B_s decays in the relativistic quark model // Eur. Phys. J. C.- Vol.73(10), (2013), 2593 <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-013-2593-5>

Сведения об авторах:

Исадыков А.Н. – автор для корреспонденции, PhD, заведующий лабораторией, Институт ядерной физики МЭ РК, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан.

Ильясов М.Н. – магистрант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, проспект аль-Фараби, 71, 050038, Алматы, Казахстан.

Issadykov A.N. – corresponding author, PhD, head of lab, Institute for Nuclear Physics ME RK, Ibragimov Street, 1, 050032, Almaty, Kazakhstan

Ilyassov M.N. – master student, Kazakh National University, Al-Farabi Avenue, 71, 050038, Almaty, Kazakhstan.

Исадыков А.Н. – хат-хабар авторы, PhD, зертхана меңгерушісі, Ядролық физика институты ЭМ ҚР, Ибрагимов көш., 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Ильясов М.Н. – магистрант, Қазақ Ұлттық университеті, әл-Фараби даңғылы, 71, 050038, Алматы, 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/>).



МРНТИ 29.19.01

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-100-114>

Научная статья

Катодолюминесцентные характеристики легированных висмутом ниобатов лантаноидов

А.Кисабекова*^{1,2}, А. Красников³, Р.Асылбаев¹, Г.Баубекова²

¹Павлодарский педагогический университет имени А. Маргулана, Павлодар, Казахстан

²Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

³Институт физики, Тартуский университет, Тарту, Эстония

(E-mail: ^{1,2}kissabekovaa@gmail.com, ³aleksei.krasnikov@ut.ee, ¹ruslanassylbay@yandex.kz, ²guldar_87@mail.ru)

Аннотация. Исследование посвящено изучению ниобатов лантаноидов, активированных висмутом, интересных в связи с применением данных материалов в производстве люминофоров, используемых в различных областях деятельности человека, медицине, промышленности, науке. Целью исследования является изучение люминесцентных характеристик фосфоров, подходящих для применения в твердотельных источниках света и полевых эмиссионных дисплеях. В настоящее время наиболее подробно изучены ниобаты лантаноидов лютеция, иттрия и гадолиния, активированные различными трехвалентными редкоземельными ионами (Eu^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+}). Значительно менее исследованы ниобаты, активированные только ионами Bi^{3+} , либо одновременно и ионами Bi^{3+} , и редкоземельными ионами. В представленном исследовании микрокристаллические порошки легированных трёхвалентным висмутом ниобатов иттрия, лютеция и гадолиния были изучены методом катодолюминесцентной спектроскопии в широком диапазоне температур. Исследование проводилось при возбуждении электронным пучком с энергией около 100 кэВ, имеющим глубину проникновения более 20 мкм для уменьшения влияния поверхностных эффектов на люминесценцию. Для образцов $(\text{Y, Lu, Gd})\text{NbO}_4:\text{Bi}$, а также номинально чистого LuNbO_4 , измерены спектры катодолюминесценции как интегральные, так и с временным разрешением. Проведено сравнение с характеристиками фотолюминесценции данных образцов. Сделано предположение, что интенсивные широкие полосы катодолюминесценции имеют комплексную структуру и являются суперпозицией нескольких полос экситонной природы. Отмечено наличие слабого сверхбыстрого излучения в ультрафиолетовой области спектра относящееся к так называемой внутризонной люминесценции. Полученные данные представляют как научный, так и практический интерес при дальнейшей разработке функциональных материалов.

Ключевые слова: катодолюминесценция, фотолюминесценция, внутризонная люминесценция, ниобаты, висмут.

Поступила 30.10.2024 После доработки 4.11.2024. Принята к печати 25.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹*автор для корреспонденции

Введение

Различные виды соединений, содержащих трехвалентные редкоземельные ионы, привлекают большое внимание благодаря уникальным свойствам и возможности их применения в различных областях техники. Оксидные люминофоры на основе фосфатов, алюминатов, силикатов и ниобатов являются более экологически чистыми и химически стабильными, чем сульфидные люминофоры, используемые для полевых эмиссионных дисплеев с высоким разрешением [1].

Полевые эмиссионные дисплеи (ПЭД) сопоставимы или превосходят по эффективности электронно-лучевые трубки (ЭЛТ). Однако полевые эмиссионные дисплеи должны работать при значительно более низких напряжениях (~ 5 кВ) и более высоких плотностях тока ($10-100$ мкА/см²), чем ЭЛТ. Поэтому люминофоры для полевых эмиссионных дисплеев должны иметь высокую эффективность при низких напряжениях, высокую электродинамическую стойкость, длительный срок службы и одинаковую или лучшую цветность, чем люминофоры с ЭЛТ. Для полноцветных плоских дисплеев трудно найти подходящий синий люминофор, т.к. требуются материалы с широкой запрещенной зоной, а чувствительность глаза довольно низка в синей области спектра [2]. Поэтому в последнее время большое внимание уделяется изготовлению синих люминофоров с различными химическими и физическими свойствами [3].

В работах [4-7] активированные висмутом ниобаты YNbO_4 и GdNbO_4 были предложены в качестве потенциальных синих люминофоров для полевых эмиссионных дисплеев. Люминофор $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ продемонстрировал приемлемую катодолюминесценцию при низком напряжении. В работе [4] было показано, что основные пики катодолюминесценции $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ наблюдаются в той же области энергии, что и основные пики фотолюминесценции. Однако интенсивность катодолюминесценции, активированного ионами Bi^{3+} ниобата YNbO_4 , ниже, чем у неактивированного YNbO_4 . В работе [8] при низковольтном электронном возбуждении (800 эВ, 10 мкА/см²) люминофоры YNbO_4 , легированные ионами Bi^{3+} , показали интенсивную и относительно узкую синюю полосу излучения в спектральной области $415-440$ нм. Было обнаружено, что оптимальная концентрация Bi_2O_3 в этих люминофорах составляет 0.2% . Уменьшение интенсивности излучения при высокой концентрации активатора связали с концентрационным тушением. Это явление было интерпретировано Лаверенцем [9] и Озавой [10] следующим образом: с увеличением концентрации ионов Bi^{3+} химическая сложность и структурная неоднородность образца $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, по-видимому, возрастают, что приводит к уменьшению интенсивности излучения. Зависимость интенсивности катодолюминесценции $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ и $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ от концентрации висмута рассматривалась также в работе [5]. В работе [3] показано, что ниобат $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ демонстрирует широкую интенсивную полосу излучения в синей области спектра при возбуждении катодными лучами низкого напряжения, а спектры катодолюминесценции практически идентичны спектрам фотолюминесценции. Интенсивность катодолюминесценции увеличивается с увеличением ускоряющего напряжения от 1 до 7 кВ. Катодолюминесценция возбуждается плазмонами, производимыми возбуждающими электронами. С

увеличением ускоряющего напряжения возбуждающие электроны генерируют больше плазмонов, что приводит к возбуждению большего количества центров свечения и, следовательно, к более высокой интенсивности катодолюминесценции. Благодаря высокой интенсивности низковольтной катодолюминесценции и хорошей чистоте цвета, люминофор $GdNbO_4:Bi$ подходит для использования в ПЭД.

Из анализа литературных данных видно, что до настоящего времени катодолюминесцентные характеристики ниобатов лантаноидов изучались только при комнатной температуре и при возбуждении низкоэнергетическими электронами 1-7 кэВ, когда глубина проникновения электронного пучка в люминофор не превышает 400 нм. В этих экспериментах оба люминофора, $YNbO_4:Bi$ и $GdNbO_4:Bi$ продемонстрировали интенсивные и относительно широкие полосы излучения с максимумом около ~ 2.8 эВ.

В связи с тем, что ниобаты лантаноидов представляют интерес как весьма эффективные фосфоры для использования в ПЭД, а катодолюминесценция ниобата $LuNbO_4$, активированного ионами Bi^{3+} , не исследовалась совсем, целью этого исследования было подробное и систематическое изучение характеристик катодолюминесценции ниобатов $YNbO_4:Bi$, $LuNbO_4:Bi$, $GdNbO_4:Bi$ и сравнение их с характеристиками фотолюминесценции, полученными авторами в работах [11,12].

Материалы и методы

Микросталлические порошки $YNbO_4:Bi$, $LuNbO_4:Bi$, $GdNbO_4:Bi$ с номинальным содержанием висмута 0.2 % (относительно Y, Lu, Gd, соответственно) были синтезированы стандартным методом твердофазных реакций. Исходные высокочистые материалы Nb_2O_5 (Aldrich, > 99,99%), Y_2O_3 (Aldrich, > 99,99%) и Bi_2O_3 (Aldrich, > 99,9%) смешивали в стехиометрических пропорциях. Для перемешивания исходных материалов использовали высокоэнергетический процесс измельчения в шарики с ацетоном в качестве среды и циркониевых шариков. После процесса измельчения в шарики оставшуюся среду выпаривали и затем полученные порошки сушили при $150^\circ C$ в течение 12 часов на воздухе. Наконец, все порошки измельчали в агатовой ступке и прокаливали на воздухе в течение 12 часов при $1250^\circ C$. Перед исследованиями синтезированные порошки еще раз измельчали в агатовой ступке. Для всех исследованных порошков $YNbO_4:Bi$, $LuNbO_4:Bi$, $GdNbO_4:Bi$ анализ рентгенограмм выявил структуру чистого моноклинного типа фергусонита [11,12].

Схема установки импульсной катодолюминесценции представлена на рисунке 1. Электронная пушка РАДАН-303А генерирует импульсы электронов с максимальной энергией 120 кэВ, пиковой плотностью тока 10 A/cm^2 и шириной на полувысоте 180 пс. Установка оснащена двумя системами обнаружения: спектральные диапазоны для ВУФ (VUV) и УФ-видимый-ближний ИК (UV-VIS-NIR). Для диапазона UV-VIS-NIR (0.77–5.7 эВ) свет собирается параболическим зеркалом в параллельный пучок, который выходит из вакуумной камеры через кварцевое окно. С воздушной стороны он фокусируется параболическим зеркалом на входную щель спектрографа AndorShamrock SR303i. Боковой выходной порт спектрографа оснащен детектором Hamamatsu R3809U-50 MCP-

PMT. CCD-камера iCCDiStar DH 720 дополнительно устанавливается на порт прямого выхода спектрографа. В спектрографе установлены три решетки 300 штр/мм, с углом блеска при 300, 500 и 1200 нм.

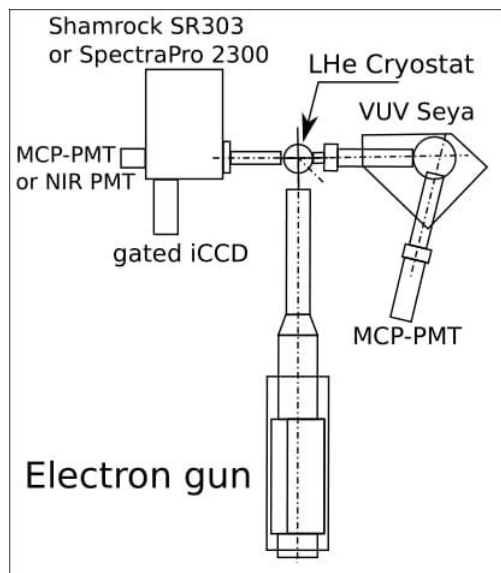


Рисунок 1. Схема экспериментальной установки импульсной катодолюминесценции

Примечание: составлено на основании данных [13].

Это позволяет охватить весь диапазон обнаружения UV-VIS-NIR. Камера iStar позволяет записывать спектры во временных окнах, задержанных относительно импульса возбуждения. В данной работе использовалось два временных окна (0–32 нс) и (0–2 мс). Спектры записывались в диапазоне 200–900 нм, фрагментами шириной 200 нм с шагом 100 нм (для осуществления перекрытия фрагментов) с соответствующими фильтрами, а затем сшивались с поправкой на спектральную чувствительность регистрирующего тракта

Результаты и обсуждение

Характеристики катодолюминесценции микрокристаллических порошков YNbO_4 , LuNbO_4 , GdNbO_4 , активированных ионами Bi^{3+} , а также чистого LuNbO_4 определялись при импульсном электронном возбуждении с энергией ~ 100 кэВ и с глубиной проникновения электронного пучка более 20 мкм, что снижает влияние поверхностных дефектов на люминесценцию [14]. Измерения с временным разрешением, включая спектры и кинетику затухания катодолюминесценции, проводились в широком диапазоне температур (5–297 К). Для детектирования быстрой и медленной люминесценции в широкой области энергий фотонов использовались стандартные для данной экспериментальной установки временные окна (0–32 нс) и (0–2 мс) Полученные

спектральные характеристики катодолюминесценции сравнивались с характеристиками люминесценции, полученными при фотовозбуждении тех же люминофоров [11, 12].

Как известно, неселективное электронное возбуждение вызывает появление свечения всего возможного набора присутствующих в образце центров свечения. В качестве источника возбуждения мы использовали импульсный электронный пучок с максимальной энергией 120 кэВ, спектр которого опубликован в работе [15]. В наших экспериментах возбуждение исследуемых образцов потоками электронов привело к появлению интенсивной люминесценции в УФ и видимой области спектра.

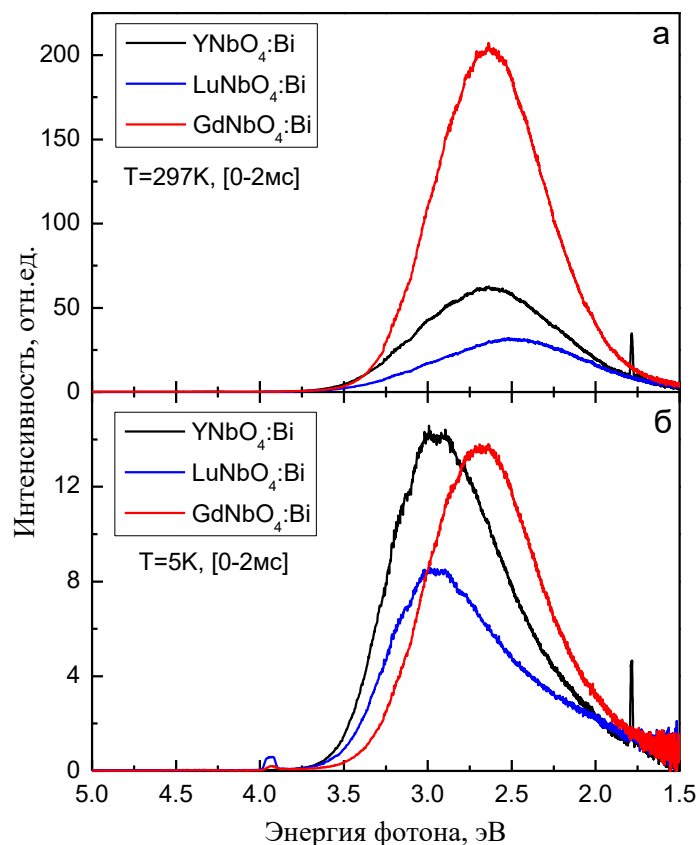


Рисунок 2. Спектры катодолюминесценции образцов $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ и $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$, измеренные во временном интервале (0-2 мс) при температурах (а) 297 К и (б) 5 К.

На рисунке 2 представлены спектры медленной катодолюминесценции, измеренные во временном окне (0-2 мс) при температурах 297 К и 5 К. Как видно из рисунка 2а, при комнатной температуре спектры представляют собой широкие полосы с максимумами при ~ 2.63 эВ, ~ 2.48 эВ и ~ 2.65 эВ для $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ и $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$, соответственно. Интенсивность люминесценции $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ в четыре раза превышает интенсивность люминесценции $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ и $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$. При низкой температуре (рисунок 2б) полосы смещаются в область высоких энергий и имеют максимумы при ~ 2.97 эВ, ~ 2.95 эВ и ~ 2.68 эВ, а интенсивности люминесценции всех образцов практически сравнимы.

На рисунке 3 представлены спектры быстрой катодолюминесценции, измеренные во временном окне (0-32 нс) при температурах 297 К и 5 К. Видно, что спектры представляют собой широкие полосы, а максимумы этих полос практически совпадают и находятся в области ~ 2.8 эВ как при комнатной (рисунок 3а), так и при низкой температуре (рисунок 3б). Интенсивность люминесценции всех образцов также практически не зависит от температуры.

Как видно из рисунков 2 и 3, с увеличением температуры от 5 К до 297 К происходит рост интенсивности как быстрой, так и медленной катодолюминесценции более, чем на порядок.

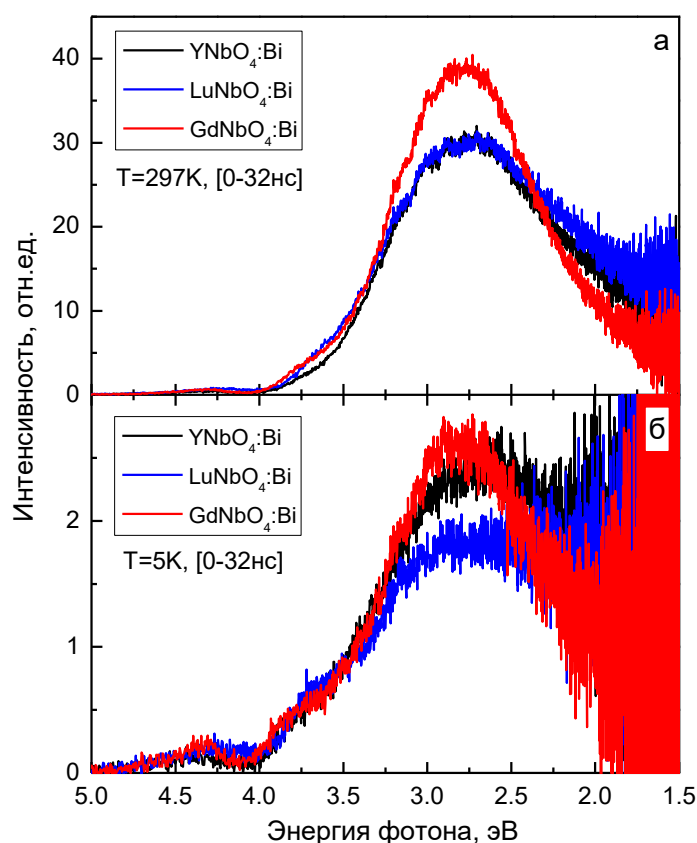


Рисунок 3. Спектры катодолюминесценции образцов $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$, измеренные во временном окне (0–32 нс) при температурах (а) 297 К и (б) 5 К

Поскольку измерение катодолюминесценции происходит при неселективном электронном возбуждении, то для разделения собственного свечения и люминесценции, связанной с ионами Bi^{3+} , необходимо сравнить неактивированные и активированные ионами Bi^{3+} образцы. Мы измерили спектры быстрой и медленной катодолюминесценции для образцов LuNbO_4 и $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ при комнатной температуре. Из рисунка 4а видно, что максимумы полос быстрой люминесценции (люминесценции, наблюдаемой во временном окне 0-32 нс) для образцов LuNbO_4 и $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ совпадают, т.е. наблюдается собственная люминесценция. Из рисунка 4б видно, что в случае медленной катодолюминесценции,

наблюдаемой во временном окне (0-2 мс), максимум полосы люминесценции LuNbO_4 совпадает с максимумом быстрой люминесценции, а для $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ наблюдается сдвиг спектра в сторону более низких энергий из-за появления полосы излучения, связанной с ионами Bi^{3+} .

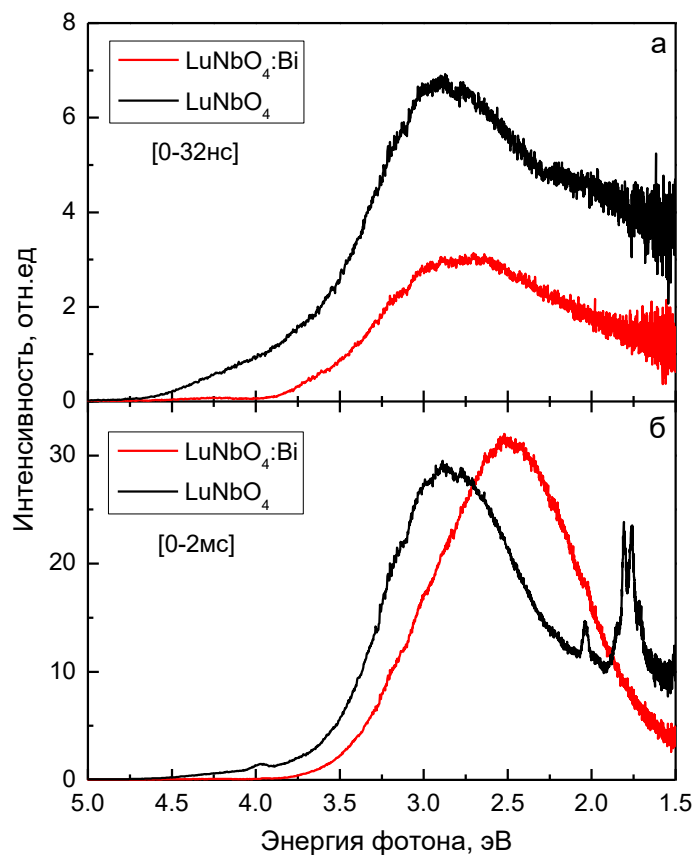


Рисунок 4. Спектры катодолюминесценции образцов LuNbO_4 и $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$, измеренные во временных окнах (а) 0-32 нс и (б) (0-2 мс) при температуре 297К

Сравнение полученных спектров катодолюминесценции во временном окне (0–2 мс) со спектрами фотолюминесценции показывает, что при низких температурах катодолюминесценция наблюдается в той же области спектра, что и фотолюминесценция. Для примера на рисунке 5 приведено сравнение спектров катодолюминесценции и фотолюминесценции образца $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$.

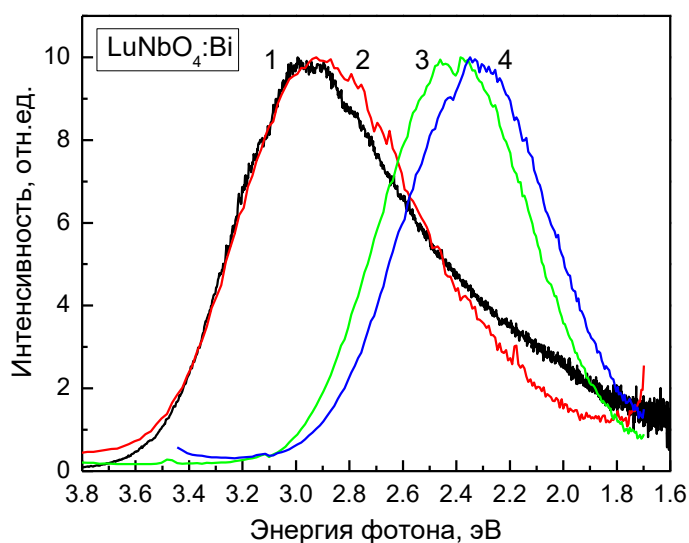


Рисунок 5. Спектр катодолюминесценции $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$, измеренный во временном окне (0-2 мс) при температуре 5 К (кривая 1); спектры фотолюминесценции этого же образца, измеренные при разных энергиях возбуждения (кривые 2, 3, 4)

Видно, что полоса катодолюминесценции является комплексной. Согласно выводам, сделанным в [11,12], можно предположить, что наблюдаемая у всех изученных образцов широкая полоса катодолюминесценции может являться суперпозицией полос излучения локализованных экситонов и экситонов, локализованных около одиночных и парных центров Bi^{3+} .

Во временном интервале (0-32 нс), кроме описанного выше интенсивного видимого излучения ниобатов $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$, в области спектра 3.2-5.0 эВ наблюдается также слабое сверхбыстрое свечение со временем затухания короче предела наших измерений, т.е. менее 100 пс. Это излучение охватывает всю область прозрачности ниобатов. Для выделения спектра этого свечения были записаны кривые затухания катодолюминесценции во всем исследованном спектральном диапазоне с шагом 3-5 нм и аппроксимированы моделью затухания люминесценции, учитывающей сверхбыстрое излучение [13]. Результат обработки экспериментальных результатов показан на рисунке 6, где представлены разрешенные во времени спектры люминесценции не только для $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ и нелегированного LuNbO_4 , но и для порошка PbF_2 используемого в качестве эталона (текст ниже). Подобно ранее полученным результатам по другим материалам, это излучение можно отнести к так называемой внутризонной люминесценции (ВЗЛ / IBL), возникающей из-за излучательной релаксации горячих зонных носителей заряда [16-18].

Отметим, что впервые обнаруженная Давидом Вайсбурдом в щелочногалогенидных кристаллах внутризонная люминесценция связана с излучательными переходами горячих электронов (e-IBL) или горячих дырок (h-IBL) между разными уровнями зоны проводимости или валентной зоны кристалла, соответственно [16]. При внутризонной

люминесценции свободные электроны (или дырки) испускают свет при переходах в пределах зоны проводимости (или валентной зоны) без участия центров свечения. Для внутризонной люминесценции характерен сплошной вид спектра, охватывающий всю область прозрачности материала, независимость от температуры в широком диапазоне, отсутствие спектральной зависимости интенсивности и низкий энергетический выход. Как выход, так и время затухания этой люминесценции во многом определяются конкуренцией излучательных и безызлучательных переходов, притом последние переходы гораздо более вероятны, чем излучательные [13].

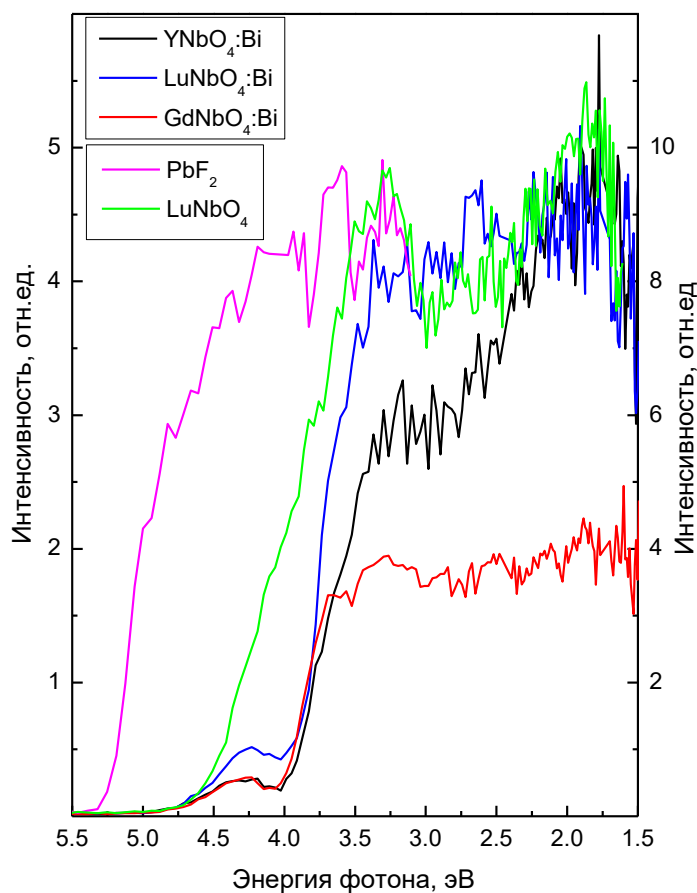


Рисунок 6. Спектры внутризонной люминесценции образцов PbF₂, LuNbO₄, YNbO₄:Bi, LuNbO₄:Bi, GdNbO₄:Bi, измеренные при температуре 297К

Порошок PbF₂, использованный в этом исследовании, не обладает какой-либо заметной внешней эмиссией, поэтому единственным излучением, которое он дает, является внутризонная люминесценция. Это делает этот материал идеальным эталоном.

В легированных образцах YNbO₄:Bi, LuNbO₄:Bi и GdNbO₄:Bi спектр внутризонной люминесценции искажен из-за наличия полосы поглощения Bi³⁺-центров с максимумом около 4.0 эВ [11, 12], реабсорбция в которой приводит к возникновению отдельно стоящей полосы 4.35 эВ.

Заключение

Исходя из сравнительного спектрального анализа катодолюминесценции и фотолюминесценции, а также на основании выводов, сделанных в [11,12], следует, что интенсивные широкие полосы катодолюминесценции всех исследованных ниобатов $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$, $\text{LuNbO}_4:\text{Bi}$ и $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ имеют комплексную структуру и являются суперпозицией полос свечения автолокализованных экситонов и экситонов, локализованных около одиночных и парных центров Bi^{3+} . При сравнении пиковой интенсивности катодолюминесценции при комнатной температуре оказалось, что ниобат $\text{GdNbO}_4:\text{Bi}$ показал наибольшую эффективность. Также было обнаружено наличие слабого сверхбыстрого излучения в УФ области спектра – так называемой внутризонной люминесценции (ВЗЛ/IBL). Таким образом, изученные ниобаты, в особенности нелегированный ниобат LuNbO_4 , в принципе, можно рассматривать также в качестве потенциальных сверхбыстрых сцинтилляторов.

Благодарность

Данное исследование публикуется в рамках реализации грантового финансирования научных проектов Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, Грант № АР 19177651. Авторы выражают благодарность М.Баран за синтез образцов.

Вклад авторов

Кисабекова А.А., Красников А.С. – проведение исследований, анализ и интерпретация полученных экспериментальных данных, формулировка ключевых целей и задач; составление черновика рукописи, чтение и редактирование рукописи, утверждение окончательного варианта;

Асылбаев Р.Н., Баубекова Г.М. – чтение и редактирование рукописи с внесением ценных критических замечаний.

Список литературы

1. Hirano M., Dozono H. Hydrothermal formation and characteristic of rare-earth niobate phosphors and solid solutions between YNbO_4 and TbNbO_4 // *Materials Chemistry and Physics*, 2014, 143, 860-866. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2013.10.025 – **журнал на англ языке**
2. Jing Y.D., Zhang F., Summers C.J., Wang Z.L. Synthesis and properties of Sr_2CeO_4 blue emission powder phosphor for field emission displays // *Applied Physics Letters*. 1999, 74(12), 1677-1679. DOI:10.1063/1.123652 – **журнал на англ языке**
3. Liu X., Lin J. Enhanced luminescence of gadolinium niobates by Bi^{3+} doping for field emission displays // *Journal of Luminescence*. 2007, 122, 700-703. DOI: 10.1016/j.jlumin.2006.01.264 – **журнал на англ языке**
4. Shin S.H., Jeon D.Y., Suh K.S. Charge-transfer nature in luminescence of $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ blue phosphor // *Journal of applied physics*. 2001, 90(12), 5986-5990. DOI: 10.1063/1.1413954 – **журнал на англ языке**

5. Jing X., Gibbons C., Nicholas D., Silver J., Vecht A., Frampton C.S. Blue luminescence in yttrium and gadolinium niobates caused by bismuth. The importance of non-bonding ns² valence orbital electrons // Journal of Materials Chemistry. 1999, 9, 2913-2918. DOI: 10.1039/A905724B – **журнал на англ языке**
6. Dwivedi A., Mishra K., Rai S.B. Multi-modal luminescence properties of RE³⁺ (Tm³⁺, Yb³⁺) and Bi³⁺ activated GdNbO₄ phosphors—upconversion, downshifting and quantum cutting for spectral conversion // Journal of Physics D: Applied Physics. 2015, 48, 435103(13pp). DOI:10.1088/0022-3727/48/43/435103 – **журнал на англ языке**
7. Lee S.K., Chang H., Han C.H., Kim H.J., Jang H.G., Park H.D. Electronic Structures and Luminescence Properties of YNbO₄ and YNbO₄:Bi // Journal of Solid State Chemistry. 2001, 156, 267-273. DOI: 10.1006/jssc.2000.8941 – **журнал на англ языке**
8. Chang H., Lee S. K., Park H. D., Han C.-H. Investigation of Luminescence in Bi-doped YNbO₄ Phosphor // SID Symposium Digest of Technical Papers. 2000, 31(1), 662-665. DOI: 10.1889/1.1833035– – **журнал на англ языке**
9. Leverenz, H. W. An Introduction to Luminescence of Solids // New York, Dover Publications. 1968, 569-601. – **книга**
10. Ozawa L.J. Determination of Self-Concentration Quenching Mechanisms of Rare Earth Luminescence from Intensity Measurements on Powdered Phosphor Screens // Journal of The Electrochemical Society. 1979, 126(1), 106-109. DOI 10.1149/1.2128962 – **журнал на англ языке**
11. Baran M., Belikov K., Kissabekova A., Krasnikov A., Lushchik A., Mihokova E., Tsiurma V., Vasylechko L., Zazubovich S., Zhydachevskyy Ya. Origin of luminescence in Bi³⁺-doped lanthanide niobates // Journal of Alloys and Compounds. 2021, 157800. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.157800 – **журнал на англ языке**
12. Baran M., Kissabekova A., Krasnikov A., Lushchik A., Suchocki A., Tsiurma V., Vasylechko L., Zazubovich S., Zhydachevskyy Ya., Exciton-like luminescence of Bi³⁺-doped yttrium niobate // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2020, 463, 7-15. DOI:10.1016/j.nimb.2019.11.023 – **журнал на англ языке**
13. Omelkov S. I., Nagirnyi V., Vasil'ev A. N., Kirm M. New features of hot intraband luminescence for fast timing // Journal of Luminescence. 2016, 176, 309-317. DOI:10.1016/j.jlumin.2016.03.039 – **журнал на англ языке**
14. Omelkov S., Nagirnyi V., Gundacker S., Spassky D., Auffray E., Lecoq P., Kirm M. Scintillation yield of hot intraband luminescence // Journal of Luminescence. 2018, 198, 260-271. DOI: 10.1016/j.jlumin.2018.02.027 – **журнал на англ языке**
15. Omelkov S. I., Nagirnyi V., Feldbach E., Turtos R., Auffray E., Kirm M., Lecoq P. Intraband luminescence excited in new ways: low-power x-ray and electron beams // Journal of Luminescence. 2017, 191, 61-67. DOI: 10.1016/j.jlumin.2017.02.001 – **журнал на англ языке**
16. Vaisburd D.I., Evdokimov K.E. Creation of excitations and defects in insulating materials by high-current-density electron beams of nanosecond pulse duration // Physica Status Solidi C. 2005, 2, 216-222. DOI: 10.1002/pssc.200460149 – **журнал на англ языке**
17. Lushchik A., Feldbach E., Frorip A., Ibragimov K., Savikhin F., Lushchik Ch. Radiative decay of intrinsic electronic excitations in a wide-gap CsCl crystal // Journal of Luminescence. 1995, 63, 273-278. DOI: 10.1016/0022-2313(94)00078-Q – **журнал на англ языке**
18. Savikhin F., Kerikmäe M., Feldbach E., Lushchik A., Onishchik D., Rakhimov D., Tokbergenov I. Fast intrinsic emission with participation of oxyanion and cation excitations in metal sulphates // Physica Status Solidi C. 2005, 2, 252-255. DOI: 10.1002/pssc.200460158 – **журнал на англ языке**

А. Кисабекова*^{1,2}, А. Красников³, Р. Асылбаев¹, Г. Баубекова²

¹Марғұлан университеті, Павлодар, Қазақстан

²Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

³Физика институты, Тарту университеті, Тарту, Эстония

Висмут қосылған лантанидті ниобаттардың катодолюминесценция сипаттамалары

Андатпа. Зерттеу висмутпен белсендірілген лантанид ниобаттарын зерттеуге арналған, олар осы материалдарды адам қызметінің әртүрлі салаларында, медицинада, өнеркәсіпте және ғылымда қолданылатын фосфор өндірісінде пайдалануына байланысты қызықты. Зерттеудің мақсаты – қатты күйдегі жарық көздерінде және далалық эмиссиялық дисплейлерде қолдануға жарамды люминесценттік сипаттамаларын зерттеу. Қазіргі уақытта әртүрлі үш валентті сирек жер иондарымен (Eu^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+}) белсендірілген лютеций, иттрий және гадолинийдің лантанидті ниобаттары барынша егжей-тегжейлі зерттелді. Тек Bi^{3+} иондарымен немесе бір уақытта Bi^{3+} иондарымен және сирек жер иондарымен белсендірілген ниобаттар әлдеқайда аз зерттелген. Ұсынылған зерттеуде үш валентті висмут қосылған иттрий, лютеций және гадолиний ниобаттарының микрокристалды ұнтақтары кең температура диапазонында катодолюминесценция спектроскопиясы арқылы зерттелді. Зерттеу люминесценцияға беттік әсерлердің ықпалын азайту үшін ену тереңдігі 20 мкм-ден астам, энергиясы шамамен 100 кВ болатын электронды сәуленің қозуымен жүргізілді. $(\text{Y, Lu, Gd})\text{NbO}_4:\text{Bi}$, сондай-ақ номиналды таза LuNbO_4 үлгілері үшін катодолюминесценция спектрлері интегралды және уақыт ажыратымдылығымен өлшенді. Осы үлгілердің фотолюминесценция сипаттамаларымен салыстыру жүргізілді. Қарқынды кең катодолюминесценция жолақтары күрделі құрылымға ие және экситоникалық сипаттағы бірнеше жолақтардың суперпозициясы болып табылады деп болжанады. Спектрдің ультракүлгін аймағында интра жолақтық люминесценция деп аталатын әлсіз ультракүлгін сәулеленудің болуы атап өтілді. Алынған деректер функционалдық материалдарды одан әрі дамыту үшін ғылыми және практикалық қызығушылық тудырады.

Түйін сөздер: катодолюминесценция, фотолюминесценция, аймақшілік люминесценция, ниобаттар, висмут.

A. Kissabekova*^{1,2}, A. Krasnikov³, R. Assylbayev¹, G. Baubekova²

¹Margulan University, Pavlodar, Kazakhstan

²L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

³Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia

Cathodoluminescence characteristics of bismuth-doped lanthanide niobates

Abstract. The research is devoted to the study of lanthanide niobates activated by bismuth, which are of interest due to their potential applications in the production of phosphors, which are used in a variety of fields, including medicine, industry, and science. The purpose of this study is to examine the luminescent characteristics of phosphors suitable for use in solid-state light sources and field

emission displays. At present, the most thoroughly studied lanthanide niobates are lutetium, yttrium and gadolinium activated by various trivalent rare-earth ions (Eu^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+}). Much less studied are niobates activated only by Bi^{3+} ions or simultaneously by both Bi^{3+} ions and rare-earth ions. In the presented study, microcrystalline powders of yttrium, lutetium and gadolinium niobates doped with trivalent bismuth were studied by cathodoluminescence spectroscopy in a wide temperature range. The study was carried out under excitation by an electron beam with an energy of about 100 keV, having a penetration depth of more than 20 μm to reduce the influence of surface effects on luminescence. For the samples of $(\text{Y, Lu, Gd})\text{NbO}_4:\text{Bi}$, as well as nominally pure LuNbO_4 , the cathodoluminescence spectra were measured, both integral and with time resolution. A comparison with the photoluminescence characteristics of these samples was carried out. An assumption was made that intense wide bands of cathodoluminescence have a complex structure and are a superposition of several bands of exciton nature. The presence of weak ultrafast radiation in the ultraviolet region of the spectrum related to the so-called intraband luminescence was noted. The obtained data are of both scientific and practical interest in the further development of functional materials.

Keywords: cathodoluminescence, photoluminescence, intraband luminescence, niobates, bismuth.

References

1. Hirano M., Dozono H. Hydrothermal formation and characteristic of rare-earth niobate phosphors and solid solutions between YNbO_4 and TbNbO_4 // *Materials Chemistry and Physics*, 2014, 143, 860-866. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2013.10.025
2. Jing Y.D., Zhang F., Summers C.J., Wang Z.L. Synthesis and properties of Sr_2CeO_4 blue emission powder phosphor for field emission displays // *Applied Physics Letters*. 1999, 74(12), 1677-1679. DOI:10.1063/1.123652
3. Liu X., Lin J. Enhanced luminescence of gadolinium niobates by Bi^{3+} doping for field emission displays // *Journal of Luminescence*. 2007, 122, 700-703. DOI: 10.1016/j.jlumin.2006.01.264
4. Shin S.H., Jeon D.Y., Suh K.S. Charge-transfer nature in luminescence of $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ blue phosphor // *Journal of applied physics*. 2001, 90(12), 5986-5990. DOI: 10.1063/1.1413954
5. Jing X., Gibbons C., Nicholas D., Silver J., Vecht A., Frampton C.S. Blue luminescence in yttrium and gadolinium niobates caused by bismuth. The importance of non-bonding ns^2 valence orbital electrons // *Journal of Materials Chemistry*. 1999, 9, 2913-2918. DOI: 10.1039/A905724B
6. Dwivedi A., Mishra K., Rai S.B. Multi-modal luminescence properties of RE^{3+} (Tm^{3+} , Yb^{3+}) and Bi^{3+} activated GdNbO_4 phosphors—upconversion, downshifting and quantum cutting for spectral conversion // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015, 48, 435103(13pp). DOI:10.1088/0022-3727/48/43/435103
7. Lee S.K., Chang H., Han C.H., Kim H.J., Jang H.G., Park H.D. Electronic Structures and Luminescence Properties of YNbO_4 and $\text{YNbO}_4:\text{Bi}$ // *Journal of Solid State Chemistry*. 2001, 156, 267-273. DOI: 10.1006/jssc.2000.8941
8. Chang H., Lee S. K., Park H. D., Han C.-H. Investigation of Luminescence in Bi-doped YNbO_4 Phosphor // *SID Symposium Digest of Technical Papers*. 2000, 31(1), 662-665. DOI: 10.1889/1.1833035
9. Leverenz, H. W. *An Introduction to Luminescence of Solids* // New York, Dover Publications. 1968, 569-601.

10. Ozawa L. J. Determination of Self-Concentration Quenching Mechanisms of Rare Earth Luminescence from Intensity Measurements on Powdered Phosphor Screens // Journal of The Electrochemical Society. 1979, 126(1), 106-109. DOI 10.1149/1.2128962
11. Baran M., Belikov K., Kissabekova A., Krasnikov A., Lushchik A., Mihokova E., Tsiurma V., Vasylechko L., Zazubovich S., Zhydachevskyy Ya. Origin of luminescence in Bi³⁺-doped lanthanide niobates // Journal of Alloys and Compounds. 2021, 157800. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.157800
12. Baran M., Kissabekova A., Krasnikov A., Lushchik A., Suchocki A., Tsiurma V., Vasylechko L., Zazubovich S., Zhydachevskyy Ya., Exciton-like luminescence of Bi³⁺-doped yttrium niobate // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2020, 463, 7-15. DOI:10.1016/j.nimb.2019.11.023
13. Omelkov S. I., Nagirnyi V., Vasil'ev A. N., Kirm M. New features of hot intraband luminescence for fast timing // Journal of Luminescence. 2016, 176, 309-317. DOI:10.1016/j.jlumin.2016.03.039
14. Omelkov S., Nagirnyi V., Gundacker S., Spassky D., Auffray E., Lecoq P., Kirm M. Scintillation yield of hot intraband luminescence // Journal of Luminescence. 2018, 198, 260-271. DOI: 10.1016/j.jlumin.2018.02.027
15. Omelkov S. I., Nagirnyi V., Feldbach E., Turtos R., Auffray E., Kirm M., Lecoq P. Intraband luminescence excited in new ways: low-power x-ray and electron beams // Journal of Luminescence. 2017, 191, 61-67. DOI: 10.1016/j.jlumin.2017.02.001
16. Vaisburd D. I., Evdokimov K. E. Creation of excitations and defects in insulating materials by high-current-density electron beams of nanosecond pulse duration // Physica Status Solidi C. 2005, 2, 216-222. DOI: 10.1002/pssc.200460149
17. Lushchik A., Feldbach E., Frorip A., Ibragimov K., Savikhin F., Lushchik Ch. Radiative decay of intrinsic electronic excitations in a wide-gap CsCl crystal // Journal of Luminescence. 1995, 63, 273-278. DOI: 10.1016/0022-2313(94)00078-Q
18. Savikhin F., Kerikmäe M., Feldbach E., Lushchik A., Onishchik D., Rakhimov D., Tokbergenov I. Fast intrinsic emission with participation of oxyanion and cation excitations in metal sulphates // Physica Status Solidi C. 2005, 2, 252-255. DOI: 10.1002/pssc.200460158

Сведения об авторах:

Кисабекова А.А. – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, Павлодарский педагогический университет имени А. Маргулана, ул. Олжабай батыра, 60, 140000, Павлодар, Казахстан.

Красников А.С. – PhD, научный сотрудник, Институт физики, Тартуский университет, Оствалди, 1, 50411 Тарту, Эстония.

Асылбаев Р.Н. – PhD, доцент, Павлодарский педагогический университет имени А. Маргулана, ул. Олжабай батыра, 60, 140000, Павлодар, Казахстан.

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

Kissabekova A.A. – corresponding author, PhD, Associate Professor, Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Mira Street, 60, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

Krasnikov A.S. – PhD, researcher, Institute of Physics, University of Tartu, W. Ostwaldi 1, 50411 Tartu, Estonia

Assylbayev R.N. – PhD, Associate Professor, Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Olzhabai Batyr Street, 60, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

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

Кисабекова А.А. – хат-хабар авторы, PhD, Әлкей Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университетінің доценті, Олжабай батыр көш., 60, 140000, Павлодар, Қазақстан

Красников А.С. – PhD, ғылыми қызметкер, Физика институты, Тарту университеті, Оствалди 1, 50411 Тарту, Эстония

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

Баубекова Г.М. – PhD докторы, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің доцент м.а., 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/>).



IRSTI 29.03.45

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-115-127>

Article

Hybrid composite matrices to prevent radionuclides from spreading into the environment

G.K. Mamytbekov*¹, N.M. Shayakhmetov², M.B. Kurmanseit², N.B. Issabayev³

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Department of Mechanical Engineering, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

³Quantum STEM School, Astana, Kazakhstan

(E-mail: mamytbekov@mail.ru)

Abstract. This paper presents a discussion of the effective creation of hybrid composite materials (HCM) with significant sorption abilities for radionuclides in liquid radioactive waste. These hybrid composite materials are made up of two sorbents, which are derived from an organic source and a natural mineral containing intercalated ferrocyanide complexes of transition metal ions. A substantial degree of radionuclide uptake is noted during the initial phase of sorption, which is linked to the plentiful active sites on the surfaces of the hybrid composition. In contrast, the subsequent stage of sorption shows diminished and slower radionuclide uptake, likely due to the gradual saturation of the remaining active sites within the HCM. Therefore, the rapid sorption can be associated with adsorption taking place on the outer surfaces of the materials, in contrast to the extended adsorption process observed in the macropores of the composite materials.

A thorough hydrodynamic-geochemical mathematical model was developed to represent the fixation and concentration. This model provides a theoretical framework for understanding the movement of radionuclides through artificial geochemical barriers associated with liquid radioactive waste.

Key words: hybrid composite materials, sorbents, migration, radionuclide, liquid radioactive waste, mathematical modelling, swelling.

Introduction

Technological progress in operational methods within the nuclear sector is designed to improve environmental safety by optimizing waste management practices, including the recycling of radioactive materials. Upgrading infrastructure for environmental safeguarding, which includes wastewater treatment, air pollution regulation, and the storage of radioactive waste in different formats, typically requires significant financial, energy, and material investments. The objective is to reduce the ecological footprint of human actions in ways that are economically advantageous, particularly for businesses in the nuclear energy field [1, 2].

The creation and implementation of engineering and geochemical barriers (EGB) must consider

their functional conditions. This pertains to every facet associated with the assembly of IGGB devices, encompassing material choice, composition, design, as well as manufacturing and operational processes. Selecting appropriate materials is vital for the progression of nuclear energy and for executing preventative strategies to lessen the negative effects of NPP operations. This selection is directly influenced by the physico-chemical, physico-technical, and nuclear characteristics of radioactive waste. It is important to take into account various engineering parameters, such as electrical, magnetic, sorption, and physical-chemical properties of materials, to guarantee the effective and long-lasting operation of EGB [3, 4].

In the current functioning of nuclear power facilities, establishing migration geochemical barriers and enhancing them through technology has emerged as a primary focus. This is due to the fact that the advantages of affordable electricity and elevated energy levels across multiple scientific domains come with the negative repercussions associated with technology and healthcare, leading to the generation of substantial amounts of radioactive waste in numerous physical and chemical forms that are difficult to manage [5,6].

Choosing the appropriate matrix to immobilize radionuclides and the suitable technology to fix them are both very important parts of the branch of insulation for liquid radioactive waste (LRW). Development of matrices for curing LRW has been ongoing in many countries in the world and international scientific centers for about fifty years. Proposals have suggested a wide variety of matrices, such as glass, ceramics, glass-ceramic materials, crystalline substances, and mineral-like materials that mimic natural minerals, among others [7, 8].

The study of a targeted synthesis of new high-performance sorbents for fixation and concentration of easily migrating radionuclide forms is important as it allows for the modification of the composition of the samples obtained and facilitates "programmable" modification of their structure and texture, thus guaranteeing the necessary functional properties and sorption attributes.

The study has been carried out across several fields, concentrating mainly on their use as geochemical barriers in engineering infrastructures at storage and disposal locations for low and medium-level radioactive liquid waste. The aims were as follows:

Methodological justification for the principles and techniques of directed synthesis of hybrid compositions incorporating various fillers through the intensification of chemical, physical,

and radiation processes at the interface of mineral phases, specifically PVC ferrocyanide and polymer solutions (or monomers), with or without the presence of cross-linking agents;

Examination of the origin of phase and structural transformations in the mineral sorbent matrix upon the incorporation of transition metal ferrocyanide micro particles during various stages of in situ polymerization and their impact on the filtration-capacitance properties of hybrid composite materials;

Creation of a model for the hierarchical structure of hybrid composite materials synthesized using in-situ polymerization utilizing thermal or radiation initiation for polymer matrix bonding processes.

The selection of geochemical membrane constituents was based on multiple factors. Initially, all hydrogel materials serving as the primary matrix for the fixation of active radionuclide ions consist of carboxylic, carbonyl, and amide groups capable of forming electrostatic (Sr^{90} , Cs^{137}) and ion-coordinating (U, Np, rare earth metals (REM)) bonds with metal ions or their oxygen complexes in both acidic and alkaline environments. The hybrid composites vary in structural arrangement, texture, and composition, enabling the creation of multi-layered geochemical membranes, each capable of selectively capturing a certain type of radionuclides within its volume. So, the hybrid composite materials are applicable for the sorption of alkaline and alkaline earth metal ions and heavy transuranium and light radionuclides.

To address the issues, a mathematical model was created to analyze the swelling of hybrid composite hydrogels in water and their contraction due to the diffuse migration of radionuclides within the cylindrical coordinate system.

Results and discussion

Mathematical model of swelling of hybrid composite matrices and diffuse migration of radionuclides

Mathematical modeling of the swelling characteristics of hybrid composite matrices and the diffuse transport of radionuclides within the cylindrical coordinate framework relies on the diffusion principle [9], enabling a comprehensive account of the diffusion phenomenon with minimal data requirements [10, 11].

The change in water concentration in the area under consideration is described by the following differential equation in private derivatives:

The variation in water concentration within the specified area is represented by the following differential equation in partial derivatives:

$$\frac{\partial C_w}{\partial t} = D \Delta C_w \quad (1)$$

where C_w – mass fraction of water in the medium.

D – water diffusion coefficient.

The expansion of the calculated environment is assumed to occur isotropically. The equation must consider the mathematical representation of the diffusion coefficient and the variation in sample volume during swelling. In addition, due to the nature of diffusion and water penetration,

the boundary between the sample and the water into which it is immersed, the swelling front, moves. Therefore, the field of solution of the diffusion equation changes in time and a moving boundary condition must be included. Since there is no analytical solution to this problem, the authors applied computational hydrodynamics methods [9-11].

The subsequent process of radionuclide ions interacting with the components of a hybrid composite can be exemplified as follows: (a) the formation of complexes with the carboxyl groups in the polymer matrix, leading to the release of protons, which explains the noticeable decrease in the pH of the medium, especially during interactions with Sr^{2+} ; (b) ion exchange processes between sodium and calcium ions sourced from a natural mineral and cesium and strontium ions present in an external solution, respectively; (c) isomorphous substitution reactions involving potassium cations within the complex intercalated with Cs^+ and Sr^{2+} ions (ref. to Figure 1). Furthermore, there is an incorporation into the cubic structure of copper ferrocyanide particles intercalated in clay, particularly with cesium ions. This is associated with the compatibility of the dehydrated Cs^+ diameter to the size of the entrance windows of transition metal ferrocyanides and the comparatively low solubility of cesium and strontium forms of ferrocyanide complexes [12].

This study was performed as a model system for further mathematical modeling and discussion of the results of radionuclide sorption from real liquid radioactive waste produced by the research reactor WWR-K.

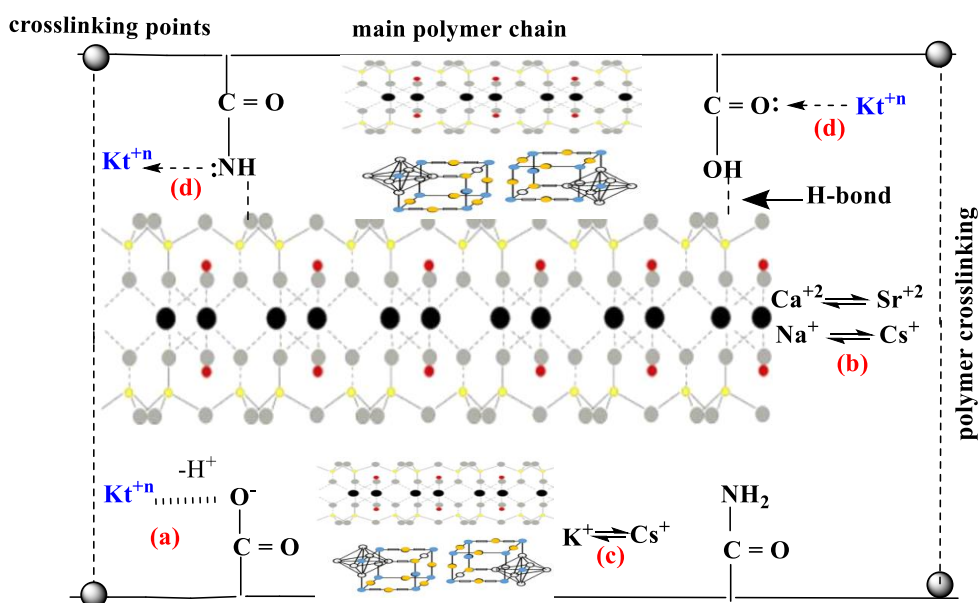


Figure 1. Schematic diagram of the sorption of cesium and strontium ions by percolated complexes $\text{P}[\text{AAm-AAc}]\{\text{BT:K}_{4-x}\text{Cux}[\text{Fe}(\text{CN})_6]\}$ [12]

The modeling of swelling caused by diffuse migration suggests that, under certain conditions, the sample undergoes a 400-fold increase in volume (see Fig. 2), which is consistent with experimental observations regarding the swelling kinetics of hybrid compositions [12]. The rate

of swelling is directly related to the amount of water present in the sample. The time needed to reach peak saturation is influenced by the size and shape of the sample, as well as the diffusion coefficient (D). The diffusion factor is established based on experimental findings.

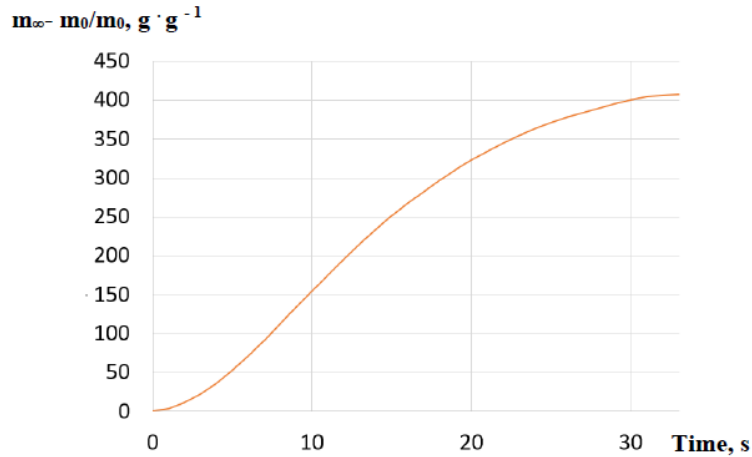


Figure 2. Change in mass of the sample of HCM over time due to swelling

Figures 3 shows that the change in sample volume is nonlinear. The lengthening of water migration time caused by a volume shift is due to the growth of the housing matrix and, in simulations, the computational grid. The behavior of this expansion depends on the current sample size.

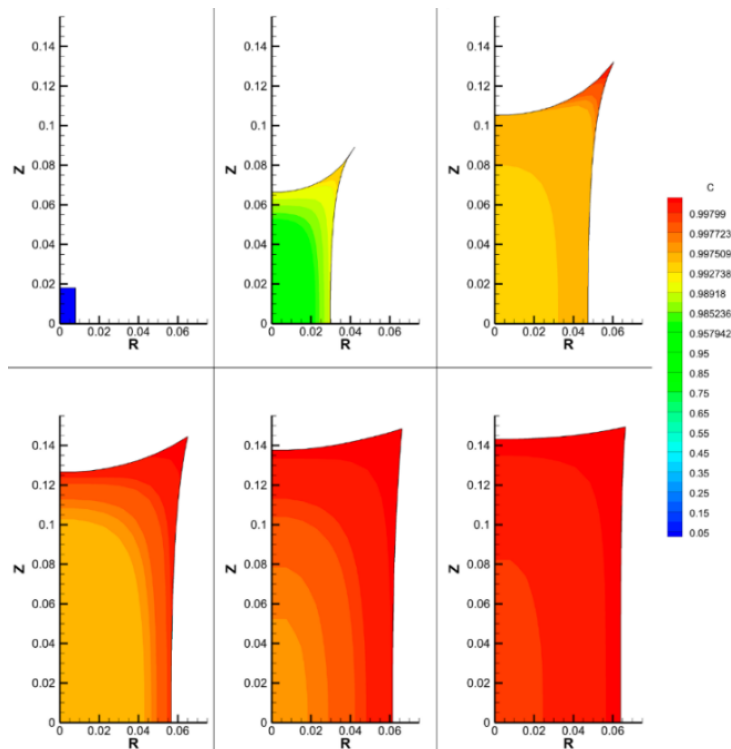


Figure 3. Deformation of the area and change in the concentration of water in the sample over time as a result of swelling

The top right corner (see Fig. 3) is extended due to heightened concentration of hydrated active reactive centers of HCM in this region resulting from an enlarged contact surface with water. Nonetheless, upon substantial water saturation of the sample, a partial restoration of the original shape occurs, as evidenced by the accompanying images.

The release of water takes place due to a chemical interaction between radionuclides and the active centers of polymer-mineral constituents of HCM. Utilizing the swellings model along with the law of active masses, we can outline the overall framework of the process as a set of differential equations with respect to partial derivatives, considering the kinetics of chemical reactions during the release of water and the capture of radionuclides:

– for components undergoing diffusion migration

$$\frac{\partial C_w}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C_w}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_w}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_w}{\partial z^2} \right) - H(C_{rl}) k C_{rl} C_w \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{rl}}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C_{rl}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{rl}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{rl}}{\partial z^2} \right) - H(C_{rl}) k C_{rl} C_w \quad (2)$$

– for solid component:

$$\frac{\partial C_{rs}}{\partial t} = H(C_{rl}) k C_{rl} C_w \quad (3)$$

where C_{rl} – concentration of migrating radionuclides;

C_{rs} – concentration of fixed radionuclides;

k – reaction rate constant,

$H(C_{rl})$ – The Heaviside step function defined as:

$$H(C_{rl}) = \begin{cases} 0, & C_{rl} < C_{rl}^* \\ 1, & C_{rl} \geq C_{rl}^* \end{cases} \quad (4)$$

where C_{rl}^* – the critical value of migrating radionuclides in the release process.

Figure 4 illustrates that the weight of a composite material sample is discharged on the "plateau" following its peak saturation with water. When the radionuclide solution is added to the system beyond its critical concentration, a change in the composite material is noticed, resulting in the expulsion of water molecules from the sample. The concentration of radionuclides introduced into the sample is denoted as C_{rlinj} . The critical concentration of radionuclide is defined by setting up a Donnan's equilibrium between the quantity of counter-ions within the composite volume and the concentration of radionuclides in the surrounding environment [13].

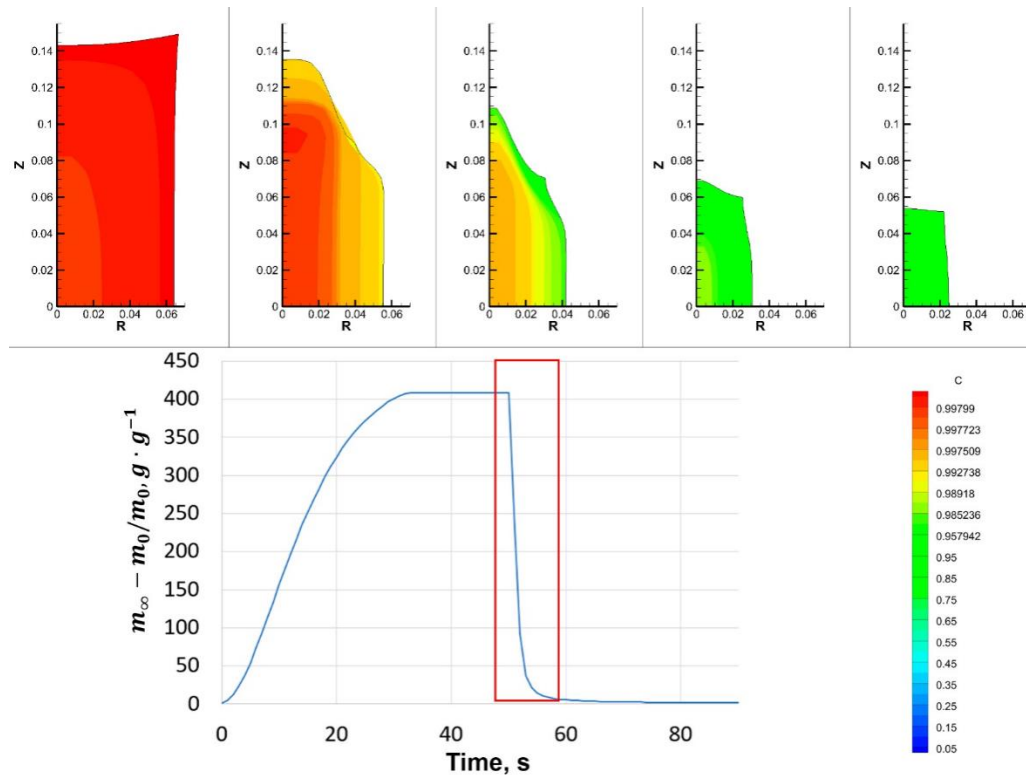


Figure 4. Change in mass of the sample over time due to swelling and release of water due to the diffusion of radionuclide molecules into the HCM

The water content in the sample subsequently decreases sharply, returning the sample to its initial value. The characteristics of the drop are directly influenced by the diffusion coefficient D , reaction rate constants k , and the concentration of C_{rl} radionuclides. The input and output data are derived from real experiments [12].

Besides, see fig. 4 also illustrates that the concentration of radionuclides remains at zero until maximum saturation with water molecules of HCM is achieved, then upon attaining the critical concentration of radionuclides in the mobile C_{rl} form, the sample volume diminishes as a result of their interactions with the functional groups of composite.

A mathematical model was developed to describe the migration and fixation processes of radionuclides in both natural and artificial geochemical barriers at radioactive waste burial sites. The model utilizes the diffusion equation, which is addressed on a time-deformed grid. The numerical model is addressed using the explicit Eulerian scheme through the finite difference method. The numerical results indicate that the model effectively captures variations in mass and volume of samples over time.

Geochemical barriers can be made up of multi-layered hydrogel membranes that are made on a base of polymer matrix (polyethylene, polypropylene, and polyvinyl chloride) so that they are easy to use in a range of conditions. They can be well placed in containers of different shapes (rectangular cassettes for use in storage tanks for HRC, cylindrical for creating

"traps" for radionuclides in wells), which can be extracted from the radiation environment by special discharge devices in automated software mode (ASM) as the maximum permissible concentration of LRW is reached in storage tanks and underground groundwater (see Fig. 5 and Fig. 6).

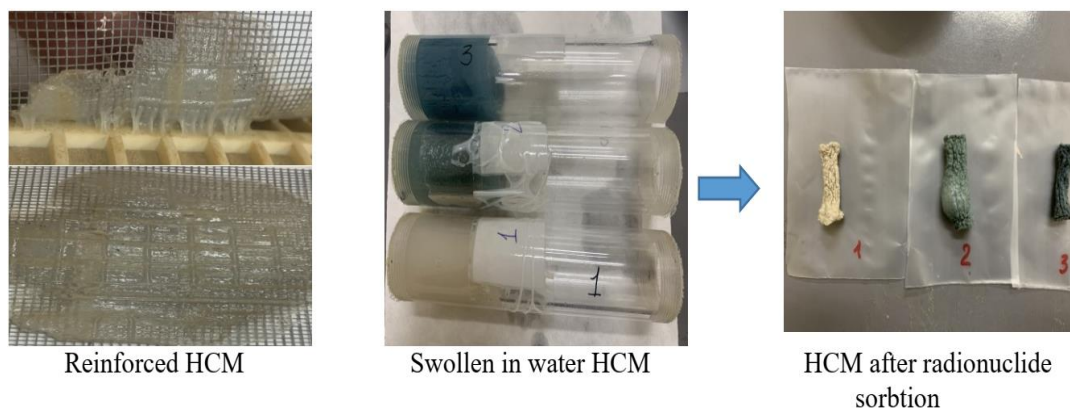


Figure 5. Design of hybrid composite materials in the creation of geochemical barriers

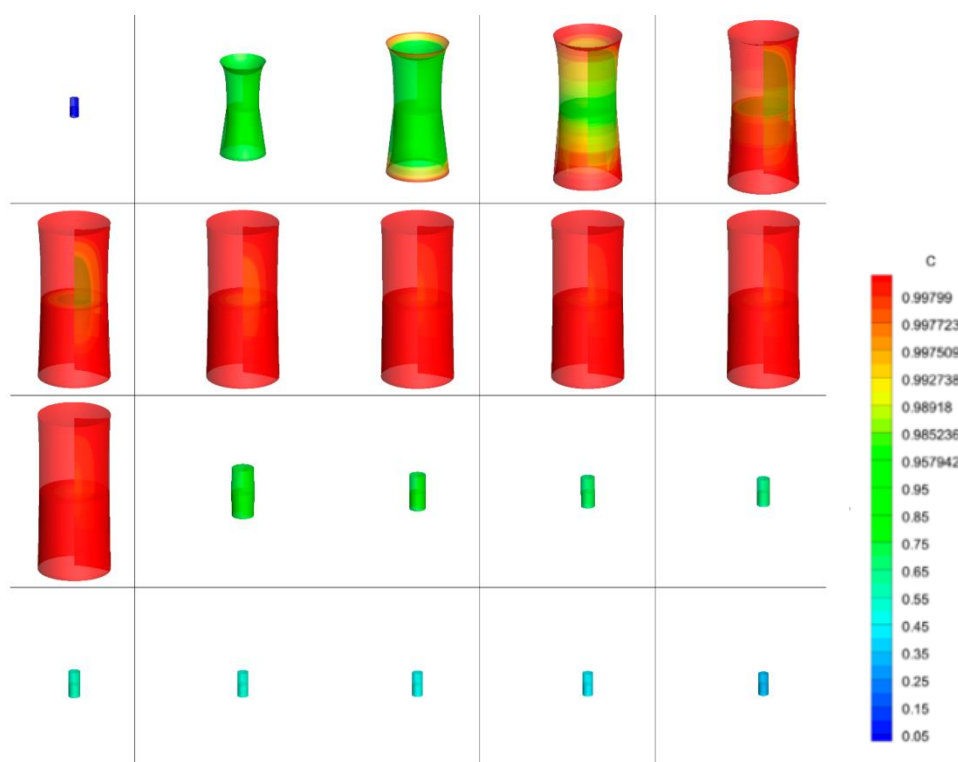


Figure 6. Three-dimensional deformation of the area and change in the concentration of water in the sample over time as a result of swelling and release under radionuclide sorption

Consequently, the following outcomes were achieved: simulation of sample swelling due to diffuse migration; formulation of equations governing the swelling state of samples during diffuse migration; creation of a mathematical model for diffusion migration in a cylindrical coordinate system; and development of a numerical model for diffusion migration. A model was constructed to represent the alteration of the computation grid due to diffuse migration in the transformation of the sample shape.

Thus, the hydrogel composite materials with intercalated mineral fillers for the development of a geochemical anti-migration barrier were discussed. Their effectiveness in tackling challenges associated with preventing LRW dispersion in soil and groundwater has been evaluated. This geochemical barrier will serve as a dependable safeguard against pollutants for extended durations, consequently lowering the expenses related to the remediation of nearby areas around industrial facilities.

Conclusion

The studies yield the following conclusions:

Synthesis and characterization of a novel class of hybrid composite materials consisting of intercalated complexes of natural minerals (bentonite, monthillonite, zeolite, and rutile) with ferrocyanide complexes of transition metals (FCTM) (phase I) and a volume-embedded polymer matrix (phase II) have demonstrated significant sorption efficiency for liquid radioactive waste.

The polymer matrix works well with different mineral fillers and their complexes that are intercalated with FCTM. This makes the hybrid composition more useful by working together better. This improves the efficiency of engineering structures during the design and construction of low- and medium-activity RN storage facilities.

A comprehensive hydrodynamic-geochemical mathematical model was formulated for the fixation and concentration processes, elucidating the migration of radionuclides via natural and manmade geochemical barriers at low-level and intermediate-level radioactive waste disposal sites. The model relies on solving the diffusion equation for water molecules and hydrated radionuclide ions in a time-deformed grid, which allows for the calculation of penetration depth through the HCM layer, the direction of radionuclide migration, and the prediction of the long-term performance of hybrid composite materials at liquid radioactive waste storage and disposal sites.

The contributions of authors

Mamytbekov G.M. – conceptualization, writing original draft preparation;

Shayakhmetov N.M. – methodology;

Kurmanseiit M.B. – software;

Issabayev N.B. – validation.

Funding

The project was undertaken by the writers independently without financial support.

References

1. Thibodeaux L.J., Mackay D. (Eds.), Handbook of Chemical Mass Transport in the Environment, CRC Press, 2011. Toxicological and Environmental Chemistry, 93(6). [DOI: 10.1080/02772248.2011.5857777] - **book**
2. Sharma L. K., Singh R., Ahmad A., Umrao R. K., Singh T. N., "Experimental Evaluation of Geomechanical Behaviour of Bentonite-Sand Mixture for Nuclear Waste Disposal," Procedia Engineering, 191, 386–393 (2017). DOI: 10.1016/j.proeng.2017.05.195 - **Journal Paper**
3. Komine H., Ogata N., "Experimental Study on Swelling Characteristics of Sand-Bentonite Mixture for Nuclear Waste Disposal," Soils and Foundations, 39(2), 83–97 (1999). DOI: 10.3208/sandf.39.2_83 - **Journal Paper**
4. Wang Q., Tang A.M., Cui Y.J., Delage P., Gatmiri B., "Experimental Study on the Swelling Behaviour of Bentonite/Claystone Mixture," Engineering Geology, 124, 59–66 (2012). DOI: 10.1016/j.engeo.2011.10.003 - **Journal Paper**
5. Shirokov S.S., Kuznetsov A. Y., Kholopova O. V., "Decontamination of Metal Items with Consideration of the Secondary Sorption of Radionuclides," Radiochemistry, 57, 178–181 (2015). DOI: 10.1134/S1066362215020101 - **Journal Paper**
6. Bayoumi T.A., Reda S.M., Saleh H.M., "Assessment Study for Multi-Barrier System Used in Radioactive Borate Waste Isolation Based on Monte Carlo Simulations," Applied Radiation and Isotopes, 70(1), 99–102 (2012). DOI: 10.1016/j.apradiso.2011.016 - **Journal Paper**
7. Samir B., Eskander H. M., Saleh., "Cement Mortar-Degraded Spinney Waste Composite as a Matrix for Immobilizing Some Low and Intermediate Level Radioactive Wastes: Consistency Under Frost Attack," Journal of Nuclear Materials, 420(1), 491–496 (2012). DOI: 10.1016/J.JNUCMAT.2011.10.041 - **Journal Paper**
8. Jedla M. R., Koneru B., Franco Jr. A., Rangappa D., Banerjee P., "Recent Developments in Nanomaterials Based Adsorbents for Water Purification Techniques," Bioresource Technology Reports, 12(5), 5821–5835 (2022). DOI: 10.33263/BRIAC125.58215835 - **Journal Paper**
9. Peppas N. A., Sahlin J. J., "A Simple Equation for the Description of Solute Release III. Coupling of Diffusion and Relaxation," International Journal of Pharmaceutics, 57(2), 169–172 (1989). DOI: 10.1016/0378-5173(89)90306-2 - **Journal Paper**
10. Rossi G., Mazich K. A., "Macroscopic Description of the Kinetics of Swelling for a Cross-Linked Elastomer or a Gel," Physical Review E, 48(2), 1182–1191 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevE.48.1182 - **Journal Paper**
11. Mazich K. A., Rossi G., Smith C. A., "Kinetics of Solvent Diffusion and Swelling in a Model Elastomeric System," Macromolecules, 25(25), 6929–6933 (1992). DOI: 10.1021/ma00051a032 - **Journal Paper**
12. Mamytbekov G. K., Zheltov D. A., Nurtazin Y. R., "Synthesis and Investigation of the Properties of Biphasic Hybrid Composites Based on Bentonite, Copper Hexacyanoferrate, Acrylamide and Acrylic Acid Hydrogel," Polymers, 15, 2586 (2023). DOI: 10.3390/polym15122586 - **Journal Paper**
13. Mamytbekov G. K., Bouchal K., Ilavský M., Bekturov E. A., "Phase Transition in Swollen Gels XXIII. Effect of the Positive Charge Concentration on the Collapse and Mechanical Behavior of Poly(1-vinyl-2-pyrrolidone) Gels," Polymer Journal, 30, 713–719 (1998). DOI: 10.1295/polymj.30.713 - **Journal Paper**

Г.К. Мамытбеков*¹, Н.М. Шаяхметов², М.Б. Курмансейіт², Н.Б. Исабаев³

¹Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

²Кафедра инженерной механики, КазНУ им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

³Quantum STEM School, Астана, Казахстан

Гибридные композитные матрицы для предотвращения распространения радионуклидов в окружающую среду

Аннотация. Обсуждается вопрос об эффективном создании гибридных композиционных материалов (ГКМ) с высокой сорбционной способностью по отношению к радионуклидам в жидких радиоактивных отходах. Эти гибридные композитные материалы состоят из двух сорбентов, которые готовятся из органического и природного минерального сырья, содержащего интеркалированные ферроцианидные комплексы переходных металлов. Высокая степень поглощения радионуклидов (РН) отмечается на начальной стадии сорбции, которая связана с наличием многочисленных активных участков на поверхности гибридного композиционного материала. Напротив, последующая стадия сорбции показывает снижение и замедление поглощения радионуклидов, вероятно, из-за постепенного насыщения оставшихся активных участков в НСМ.

Была разработана детальная гидродинамико-геохимическая математическая модель для представления механизмов фиксации и концентрирования радионуклидов, которая объясняет движение РН через искусственные геохимические барьеры в составе жидких радиоактивных отходов.

Ключевые слова: гибридные композитные материалы, сорбенты, миграция, радионуклиды, жидкие радиоактивные отходы, математическое моделирование, набухание.

Г.Қ. Мамытбеков*¹, Н.М. Шаяхметов², М.Б. Курмансейіт², Н.Б. Исабаев³

¹Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

²Инженерлік механика кафедрасы, Қ.И. Сәтбаев атындағы ҚазҒЗТУ, Алматы, Қазақстан

³Quantum STEM School, Астана, Қазақстан

Радионуклидтердің қоршаған ортаға таралуын тежейтін гибриді композиттік матрицалар

Андатпа. Сұйық радиоактивті қалдықтардағы радионуклидтерге сорбциялық қабілеті жоғары гибриді композиттік материалдарды (ГКМ) тиімді алу тәсілдері талқыланады. Бұл гибриді композиттік материалдар құрамында металдардың интеркаляцияланған ферроцианиді комплекстері бар органикалық және табиғи минералды шикізаттан дайындалатын екі сорбенттен тұрады. Сорбцияның бастапқы кезеңінде радионуклидтердің (РН) сіңірілуінің жоғары дәрежесі байқалады, бұл гибриді композиттік материалдың бетінде көптеген белсенді учаскелердің болуымен байланысты. Керісінше, кейінгі сорбция сатысы радионуклидтердің баяу сіңірілуін көрсетеді.

Сұйық радиоактивті қалдықтардың құрамындағы жасанды геохимиялық кедергілер арқылы РН қозғалысын түсіндіретін гидродинамикалық-геохимиялық математикалық модель әзірленді.

Түйін сөздер: гибриді композициялық материалдар, сорбенттер, миграция, радионуклидтер, сұйық радиоактивті қалдықтар, математикалық модельдеу, ісіну.

References

1. Thibodeaux L. J., Mackay D. (Eds.), Handbook of Chemical Mass Transport in the Environment, CRC Press, 2011. Toxicological and Environmental Chemistry, 93(6). DOI: 10.1080/02772248.2011.5857777
2. Sharma L. K., Singh R., Ahmad A., Umrao R. K., Singh T. N., "Experimental Evaluation of Geomechanical Behaviour of Bentonite-Sand Mixture for Nuclear Waste Disposal," Procedia Engineering, 191, 386–393 (2017). DOI: 10.1016/j.proeng.2017.05.195
3. Komine H., Ogata N., "Experimental Study on Swelling Characteristics of Sand-Bentonite Mixture for Nuclear Waste Disposal," Soils and Foundations, 39(2), 83–97 (1999). DOI: 10.3208/sandf.39.2_83
4. Wang Q., Tang A.M., Cui Y.J., Delage P., Gatmiri B., "Experimental Study on the Swelling Behaviour of Bentonite/Claystone Mixture," Engineering Geology, 124, 59–66 (2012). DOI: 10.1016/j.engeo.2011.10.003
5. Shirokov S.S., Kuznetsov A.Y., Kholopova O.V., "Decontamination of Metal Items with Consideration of the Secondary Sorption of Radionuclides," Radiochemistry, 57, 178–181 (2015). DOI: 10.1134/S1066362215020101
6. Bayoumi T.A., Reda S.M., Saleh H. M., "Assessment Study for Multi-Barrier System Used in Radioactive Borate Waste Isolation Based on Monte Carlo Simulations," Applied Radiation and Isotopes, 70(1), 99–102 (2012). DOI: 10.1016/j.apradiso.2011.016
7. Samir B., Eskander H.M., Saleh., "Cement Mortar-Degraded Spinney Waste Composite as a Matrix for Immobilizing Some Low and Intermediate Level Radioactive Wastes: Consistency Under Frost Attack," Journal of Nuclear Materials, 420(1), 491–496 (2012). DOI: 10.1016/J.JNUCMAT.2011.10.041
8. Jedla M.R., Koneru B., Franco Jr. A., Rangappa D., Banerjee P., "Recent Developments in Nanomaterials Based Adsorbents for Water Purification Techniques," Bioresource Technology Reports, 12(5), 5821–5835 (2022). DOI: 10.33263/BRIAC125.58215835
9. Peppas N. A., Sahlin J. J., "A Simple Equation for the Description of Solute Release III. Coupling of Diffusion and Relaxation," International Journal of Pharmaceutics, 57(2), 169–172 (1989). [DOI: 10.1016/0378-5173(89)90306-2]
10. Rossi G., Mazich K. A., "Macroscopic Description of the Kinetics of Swelling for a Cross-Linked Elastomer or a Gel," Physical Review E, 48(2), 1182–1191 (1993). DOI: 10.1103/PhysRevE.48.1182
11. Mazich K. A., Rossi G., Smith C. A., "Kinetics of Solvent Diffusion and Swelling in a Model Elastomeric System," Macromolecules, 25(25), 6929–6933 (1992). DOI: 10.1021/ma00051a032
12. Mamytbekov G. K., Zheltov D. A., Nurtazin Y. R., "Synthesis and Investigation of the Properties of Biphasic Hybrid Composites Based on Bentonite, Copper Hexacyanoferrate, Acrylamide and Acrylic Acid Hydrogel," Polymers, 15, 2586 (2023). DOI: 10.3390/polym15122586
13. Mamytbekov G. K., Bouchal K., Ilavský M., Bekturov E. A., "Phase Transition in Swollen Gels XXIII. Effect of the Positive Charge Concentration on the Collapse and Mechanical Behavior of Poly(1-vinyl-2-pyrrolidone) Gels," Polymer Journal, 30, 713–719 (1998). DOI: 10.1295/polymj.30.713

Сведения об авторах:

Мамытбеков Г.К. – автор для корреспонденции, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник РГП на ПХВ «Институт ядерной физики», ул. Ибрагимова, 1, 050000, Алматы, Казахстан.

Шаяхметов Н.М. – автор, PhD по специальности «Механика», научный сотрудник КазННТУ им. Сатпаева, ул. Сатпаева, 22, 050000, Алматы, Казахстан.

Курмансейит М.Б. – автор, PhD по специальности «Механика», ассоциированный профессор КазННТУ им. Сатпаева, ул. Сатпаева, 22, 050000, Алматы, Казахстан.

Исабаев Н.Б. – Senior student of Quantum STEM School, ул. Е-899, 2, Astana.

Mamytbekov G.K. – corresponding author, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Chief Researcher at "Institute of Nuclear Physics", 1 Ibragimov Street, 050000, Almaty, Kazakhstan.

Shayakhmetov N.M. – Author, PhD in "Mechanics", Researcher at Satbayev University, 22 Satpayev Street, 050000, Almaty.

Kurmanseiit M.B. – Author, PhD in "Mechanics", Associate Professor at Satbayev University, 22 Satpayev Street, 050000, Almaty.

Issabayev N.B. – Senior student at Quantum STEM School, 2 E-899 Street, Astana.

Мамытбеков Г.К. – хат-хабар авторы, химия ғылымдарының докторы, профессор, «Ядролық физика институты» бас ғылыми қызметкері, Ибрагимов көшесі 1, 050000, Алматы, Қазақстан.

Шаяхметов Н.М. – автор, «Механика» мамандығы бойынша PhD, Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ ғылыми қызметкері, Сәтбаев көшесі 22, 050000, Алматы.

Құрмансейіт М.Б. – автор, «Механика» мамандығы бойынша PhD, Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ қауымдастырылған профессоры, Сәтбаев көшесі 22, 050000, Алматы.

Исабаев Н.Б. – Quantum STEM School-дың жоғары сынып оқушысы, Е-899 көшесі, 2, Астана.



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/>).



МРНТИ 29.15.19

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-128-141>

Научная статья

Изучение резонансных реакций на циклотроне ДЦ-60 с использованием методов ТМОК и времени пролета

Д.К. Наурузбаев*¹, А.Тихонов², Г.Е. Серикбаева^{1,2}, А.К. Нурмуханбетова¹

¹Система исследований и инноваций Назарбаев Университета, Астана, Казахстан

²Школа естественных и гуманитарных наук, Назарбаев Университет, Астана, Казахстан

(E-mail: ¹dosbol.nauruzbayev@nu.edu.kz)

Аннотация. Статья посвящена обзору проделанной работы по первой успешной реализации метода толстой мишени в обратной кинематике (ТМОК) на базе циклотрона ДЦ-60. Применение методики ТМОК совместно с время-пролетной системой диагностики пучка тяжелых ионов и идентификации продуктов реакции позволило исследовать резонансные ядерные реакции в области малых энергий взаимодействия, которые имеют также астрофизический интерес. Методика основана на измерении функций возбуждения рассеяния легких частиц в условиях обратной кинематики, где в качестве мишени используется толстая и протяженная газовая мишень (гелий или водород), а пучком служат тяжелые ускоренные ядра. Кроме этого, в ней детально приводится реализованная схема эксперимента и системы сбора и обработки данных. В результате достигли общего разрешения эксперимента порядка 35 кэВ и 2 нс под углом 180° в системе центра масс (сцм). Более того применение ТМОК методики позволило свести на нет фоновые реакции, благодаря использованию в качестве мишени сверхчистых легких газов гелия и водорода, а в качестве пучка изотопов тяжелых частиц. Все это вкупе позволило успешно провести ряд экспериментов по изучению резонансной структуры ядер ²⁰Ne, ²¹Ne, ¹⁹F, ²²Ne в реакциях ¹⁶O+α, ¹⁷O+α, ¹⁵N+α и ²²Ne+α соответственно.

Ключевые слова: резонансы, толстая мишень, обратная кинематика, время пролета, циклотрон, кластерные состояния.

Поступила 4.11.2024. После доработки 27.11.2024. Принята к печати 28.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024.

¹*автор для корреспонденции

Введение

Интерес к резонансным реакциям при низких энергиях с участием водорода или гелия обусловлен задачами ядерной астрофизики [1-3]. Гелий и водород являются самыми распространенными элементами во Вселенной (~21% и ~77% соответственно) [4,5]. Кроме всего прочего, реакции с гелием и водородом играют весомую роль в процессах, идущих на звездах. Процессы в звездах идут при энергии альфа-частиц ниже кулоновского барьера, но широкие альфа кластерные резонансы, расположенные выше, влияют на область окна Гамова [6] путем интерференции хвоста резонанса альфа кластерного состояния с чувствительной областью окна Гамова. Также низко лежащие резонансы, представляющие астрофизический интерес, возможно изучить через теоретические модели [7], в частности, кластерные. Известно, что для этого нужно знать спектр состояний, которые влияют на ширину исследуемых резонансов за счет смешивания конфигураций. Природа альфа-кластерной структуры довольно известна у легких ядрах $4N$ (^8Be , ^{12}C , ^{16}O ...) [8]. Они характеризуются в виде схожих по свойствам квазиротационными полосами состояний с отрицательной и положительной четностью, а также с значительной приведенной α -частичной шириной. При экспериментальном изучении α -кластерных состояний в ядрах с $N \neq Z$ возможно извлечь информацию о взаимосвязи одночастичной и кластерной степеней свободы. В подобных ядрах энергия связи нуклона как правило ниже в отличие от α -частицы (кроме ядер с $4N$ -структурой). И данные о природе распада α -кластерных состояний в ядрах с $N \neq Z$ могут предоставить ясность о взаимосвязи кластерной структуры и оболочечной модели. Более того, изучение α -кластерных состояний в ядерных системах с превышением числа протонов или нейтронов дают возможность сопоставить, применяя закон сохранения изоспина, свойства состояний зеркальных ядер. Такого рода исследования набирают популярность [9].

Методология ТМОК

Большая часть экспериментов выполнена на циклотроне ДЦ-60 (г. Астана, Казахстан). На циклотроне ДЦ-60 [10] имеется возможность получать частицы от Li до Xe в диапазоне энергией 0,3-1,75 МэВ/нуклон. Интенсивность пучка достигает порядка 10^{12} - 10^{13} частиц в секунду. Если говорить о дисперсии пучка по энергии, то она соответствует 2-3%, что касается временной ширины циклотронного сгустка (банча), то она порядка 5-7 нс. Чтобы улучшить временное разрешение и добиться 2, необходимо уменьшать интенсивность пучка, подстраивая при этом параметры ускорения и магнитной системы проводки пучка так, чтобы добиться вывода с одной орбиты ускорения.

На первый взгляд исследование резонансных ядерных реакций с помощью пучков циклотрона может выглядеть легко реализуемым, но в отличие от электростатических ускорителей они менее приспособлены для этого. Выигрыш электростатических ускорителей заключается в том, что можно получить высокоинтенсивный монохроматический настраиваемый по энергии пучок [11], столь необходимый для исследования

функций возбуждения с высоким разрешением. Циклотроны, в свою очередь, обладая более худшим энергетическим разрешением пучка и ввиду сложности, а также временем затратности, связанными с перестройками по энергии ускоряемых частиц, обычно не применяются для классического резонансного рассеяния. Нами используется метод толстой мишени в обратной кинематике (ТМОК) [12], который был разработан для изучения функций возбуждения с использованием циклотронного пучка [13]. В данной методике используется обратная кинематика. Ускоряется тяжелая частица (рисунок 1) [14], а в качестве мишени выступает легкая частица в виде газа (водород или гелий), заполняющего камеру рассеяния, отделяемого от ионопровода входным окном, выполненным из тонкой металлической пленки. Давление газа-мишени подбирается таким образом, чтобы пучок тяжелых частиц остановился в непосредственной близости от детекторов, расположенных в противоположной стороне от входного окна. В ходе замедления пучка возникают легкие ядра отдачи (протоны в случае водорода или α -частицы в случае гелия) из взаимодействия с ионами пучка и регистрируются кремниевыми детекторами, расположенными под прямыми углами, поскольку ядра отдачи p и α имеют меньшие потери энергии, чем рассеянные ионы. Подход ТМОК обеспечивает непрерывную функцию возбуждения в результате замедления пучка. Из-за эффектов разброса энергия и угловой разброс входящего пучка увеличиваются по мере того, как ион проходит через рассеивающую камеру. Метод ТМОК был разработан В.З. Гольдбергом в 90-х годах и реализован им совместно с коллегами и сотрудниками Курчатовского Института [13] и, к сожалению, не может конкурировать с классическим подходом в энергетическом разрешении функций возбуждения. Но несмотря на это, метод ТМОК имеет ряд других преимуществ.

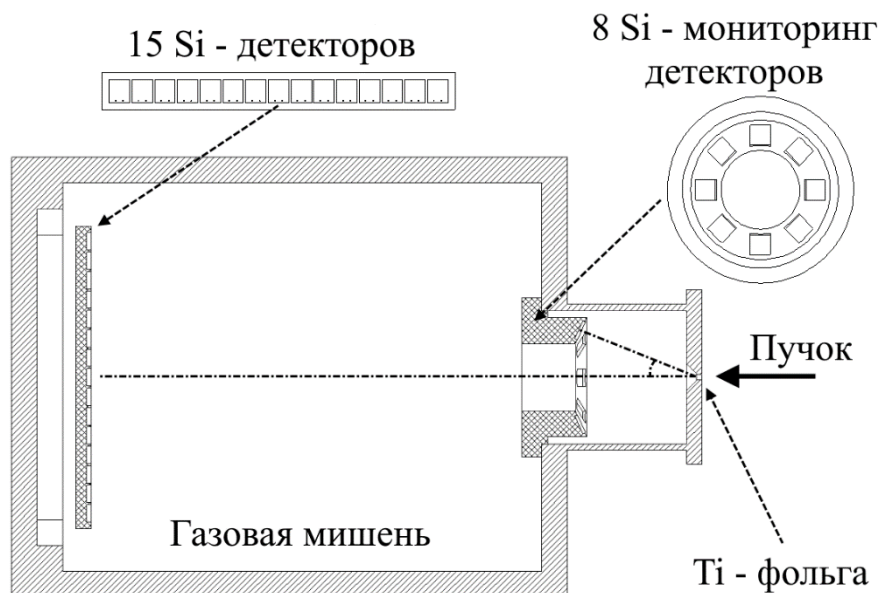


Рисунок 1. Схема эксперимента.

Во-первых, ТМОК позволяет проводить измерения под 180° , который не достижим при классическом подходе. Важность измерений под данным углом и вблизи него заключается в том, что потенциальное рассеяние минимально и тем самым становится возможным измерить резонансы в области кулоновского барьера. Также есть другие сложности с измерениями при низких энергиях в классическом подходе. К примеру, трудности связаны с уменьшением энергии частицы, рассеянной в обратном направлении и влиянием потери энергии в мишени. Измерения методом ТМОК просты при 180° (0° в лабораторной системе), поскольку пучок останавливается внутри мишени перед детекторами, а регистрируемая энергия частиц отдачи относительно высока из-за высокой энергии центра масс.

Во-вторых, в экспериментах, поставленных классическим способом есть трудности изготовления мишени с низким содержанием примесей, особенно сложно и дорогостояще получить изотопно чистые мишени. А в случае использования ТМОК методики таких сложностей не возникает, так как циклотрон ускоряет заданные ионы и в качестве легкой мишени используются газы водорода и гелия высокой чистоты (99,99%).

В-третьих, стоит отметить высокую эффективность метода ТМОК. Функция возбуждения промеряется с использованием одной энергии циклотрона от момента вхождения пучка в камеру рассеяния и до места полной остановки. И поэтому нет необходимости перестраивать пучок для каждого резонанса, что ведет к сокращению затрачиваемого экспериментального времени в десятки раз. Отсюда следует, что это благоприятный подход для изучения резонансных реакций с низкоинтенсивными радиоактивными пучками [15].

Рассмотрим детали проведения эксперимента. В нашем случае ионопровод циклотрона ДЦ-60 ограничивается от камеры рассеяния титановой пленкой толщиной 2 микрон. Так как нет возможности использовать цилиндр Фарадея для измерения интенсивности пучка внутри камеры, то нам пришлось изготовить мониторинг-систему на основе измерения Резерфордского рассеяния со входного окна. Данная система представляет из себя восемь кремниевых детекторов, расположенных по кругу под углом 21° и на удалении 84 мм от титановой пленки. А на удалении 450 мм от входного окна ставится основная система детектирования продуктов ядерной реакции при углах от 0° и до 14° относительно оси пучка. Основная детектирующая система реализована на планке из 15 кремниевых р-и-п диоды полного поглощения с площадью 10 на 10 мм при толщине чувствительного слоя 300 микрон. Для борьбы с краевым вкладом использовались диафрагмы из пластика (диаметр 8 мм и толщиной 1 мм) на основные детекторы. А для мониторинга детекторов использовались диафрагмы с меньшим отверстием (1 мм) с целью убавления загрузки на них.

Электроника (Рисунок 2) базируется на двух крейтах CAENnim ивме стандарта. В качестве предусилителя используется Mesytec MPR-16, после чего ставится усилитель Mesytec STM-16. Запитывались детекторы через предусилитель MPR-16 посредством блока питания Mesytec MHV-4 и им же контролируется значение обратного тока для своевременного выявления выходящих из строя детекторов. Для оцифровки информация об амплитуде и измерения по методике времени пролета использовали модули ADC

(Mesytec MADC-32) и TDC (CAEN V775), соответственно, а считывание с них производилось через контроллер шины VME W-IE-NE-R VM-USB. Программное обеспечение системы сбора и обработки данных реализована на NSCL DAQ [16] с открытым исходным кодом, а программа NSCL SpecTcl [17] применяется для онлайн-мониторинга спектров. Полный анализ данных выполняется в автономном режиме.

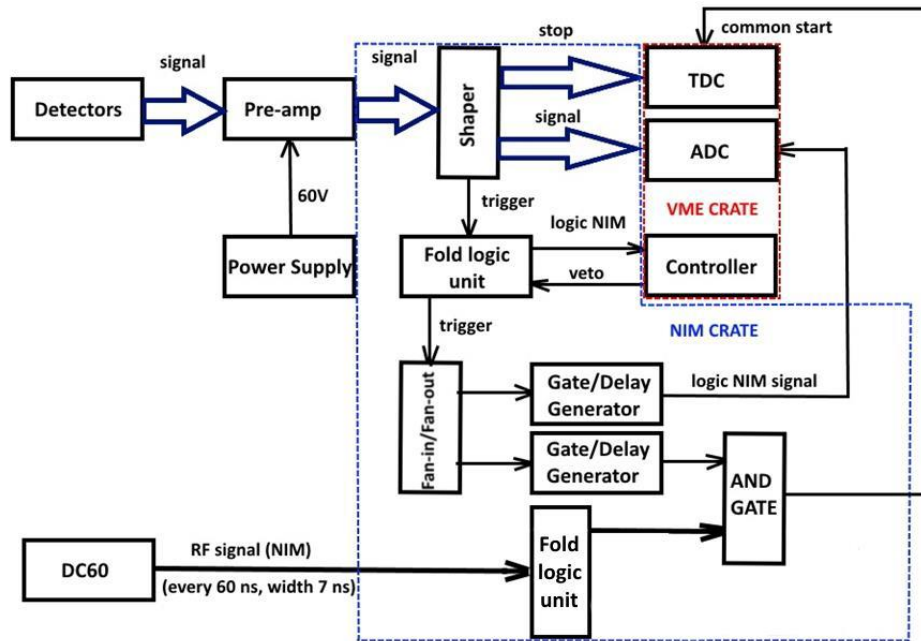


Рисунок 2. Принципиальная электронная схема.

Одна из немаловажных экспериментальных задач, решаемых в ходе исследовательских работ, - это извлечение необходимого эффекта из фона разной природы происхождения [18]. Временами удается на стадии планирования теоретически рассчитать и так выполнить эксперимент, чтобы остальные каналы ядерных реакций были закрыты. Но такой благополучный исход редкость. Существуют разные методики по идентификации разных каналов реакций. В частности, методика регистрации удельных потерь и полной энергии ($dE/dx-E$), а также техника времени пролета. Применение дополнительного пролетного детектора приводит к дополнительным потерям в энергетическом разрешении.

В нашем случае для отделения разных каналов реакций применяется время-пролетная методика (Рисунок 3). Данный подход дал возможность различить различные каналы распада (упругий, не упругий, распад с возбужденных состояний) без критического ухудшения энергетического разрешения. В поставленных экспериментах на ДЦ-60 с импульсной структурой пучка в качестве стартового сигнала был задействован сигнал генератора высокой частоты [10]. При этом важно добиться минимального значения ширины циклотронного банча (жертвуя интенсивностью в разумных пределах). Данная процедура нова для операторов циклотрона ДЦ-60. Для этих работ

использовался спектр упругого рассеяния со входного окна, который также служил и в качестве контроля стабильности параметров циклотрона со временем. На рисунке 3 показано время пролетного спектра для случая $^{18}\text{O}+p$. В том эксперименте пучок ионов ^{18}O с максимально возможной энергией 31,5 МэВ входит в камеру рассеяния через окно (титан 2 мкм) и при этом теряет 4,49 МэВ, дальше взаимодействует с газом-мишенью (водородом) при давлении 459 тор. Для этого случая, кроме упругого канала, открыт неупругий (p,α) канал реакции. Время-пролетная методика позволяет отделить каналы $^{18}\text{O}+p=^{19}\text{F}=\rightarrow^{15}\text{N}+\alpha$ (Рисунок 3), которые идут через основное состояние $^{15}\text{N}+\alpha_0$.

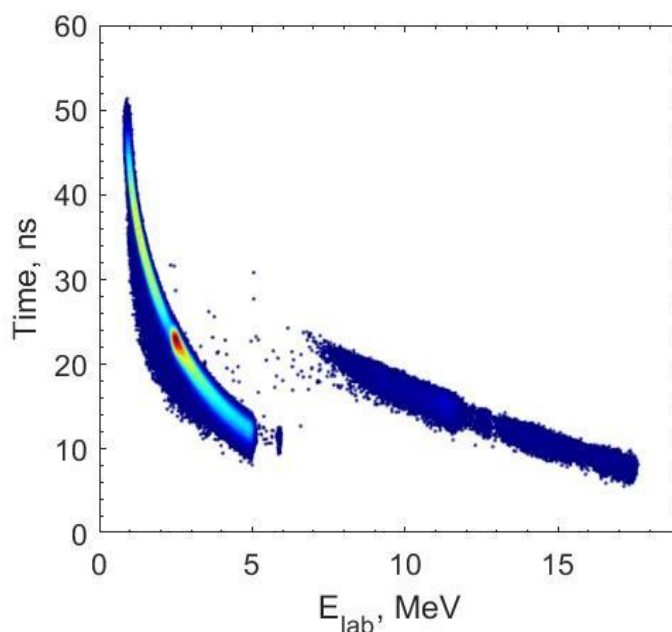


Рисунок 3. E-T спектр продуктов взаимодействия $^{18}\text{O}+p$.

Результаты и обсуждение

Был успешно проведен ряд экспериментов по изучению резонансной структуры ядер ^{20}Ne , ^{21}Ne , ^{19}F , ^{22}Ne в реакциях $^{16}\text{O}+\alpha$, $^{17}\text{O}+\alpha$, $^{15}\text{N}+\alpha$ и $^{22}\text{Ne}+\alpha$ соответственно [19-22].

При изучении ^{20}Ne посредством реакции $^{16}\text{O}+\alpha$ были получены следующие основные результаты. Во-первых, определены параметры широких резонансов в ^{20}Ne (Рисунок 4): уровень $0+$ при $8,77 \pm 0,150$ МэВ с шириной $750^{+500}-220$ кэВ; уровень $2+$ при $8,75 \pm 0,100$ МэВ с шириной 695 ± 120 кэВ; ширина уровня $9,48$ МэВ 65 ± 20 кэВ; и также показали, что уровень $9,19$ МэВ, $2+$ (если он существует) должен иметь ширину ≤ 10 кэВ. Во-вторых, было проведено детальное сравнение теоретических предсказаний CNCIM с экспериментальными данными по кластерным состояниям. Более точные и подробные результаты исследований приведены в [19].

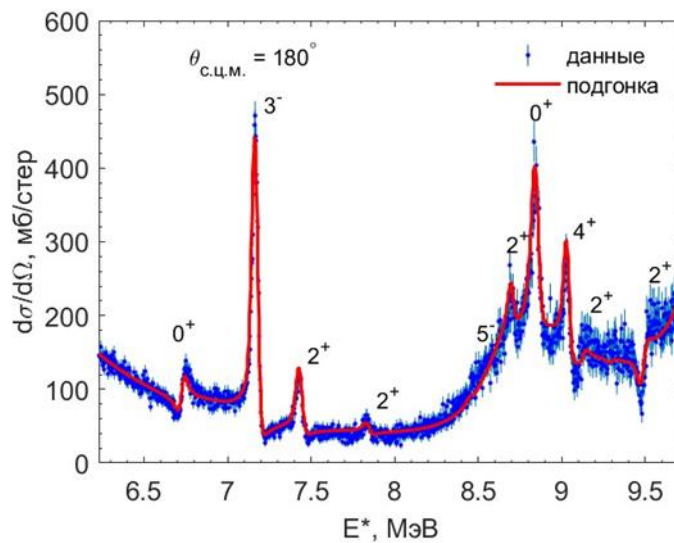


Рисунок 4. Функция возбуждения упругого рассеяния $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}$.

В случае эксперимента $^{17}\text{O} + \alpha$, который впервые проведен и проанализирован нами, было обнаружено множество состояний α -кластера в области возбуждения ^{21}Ne с энергией возбуждения 9-13 МэВ. Также включая первое наблюдение широкого состояния $\ell=0$ в нечетно-четном ядре, которое, вероятно, является аналогом широкого 0^+ при 8 МэВ в ^{20}Ne . Кроме этого, наблюдаемая структура в ^{21}Ne оказалась поразительно похожей на ту, которая заселялась в резонансном рассеянии $^{16}\text{O} + \alpha$ в ^{20}Ne . Более того, результаты также полезны для уточнения данных о реакции $^{17}\text{O}(\alpha, n)$, представляющей важность для астрофизики. Более точные и подробные результаты исследований приведены в [20].

Что касается ^{19}F , то существует также глубокий астрофизический интерес к структуре его состояний вблизи порога α -распада. Ядерная структура этих состояний важна для понимания развития α -кластеризации в области ^{20}Ne . Возникновение кластеризованных состояний и, как правило, состояний, которым благоприятствуют связи с каналами реакции вблизи соответствующих порогов распада, в настоящее время представляет особый интерес в теоретической физике. Были установлены параметры широких низкоспиновых состояний в ^{19}F вблизи порога α -распада и выполнено теоретическое исследование этих состояний. Исследование ограничено $\ell=0$ и 1 относительными парциальными волновыми резонансами во взаимодействии $\alpha + ^{15}\text{N}$ вблизи порога α -распада в ^{19}F . Ядерная структура ^{19}F была рассчитана с использованием методов взаимодействия конфигураций с недавно разработанным эффективным гамильтонианом взаимодействия. В результате в этой работе мы идентифицируем ряд α -кластерных резонансов в ^{19}F и оцениваем распределение кластерной силы, что имеет важное значение для вопросов астрофизики и для теоретического понимания физики многих тел и возникновения кластеризации в слабосвязанных или нестабильных ядрах. Был достигнут прогресс в теоретическом понимании происхождения кластеризации и определены вопросы для будущих

теоретических и экспериментальных исследований. Более точные и подробные результаты исследований приведены в [21].

Если говорить о свойствах резонансов во взаимодействии $18\text{O}+\alpha$, то они важны для анализа астрофизических процессов и для понимания развития структуры α -кластера при добавлении нейтронов к ядрам ${}^4\text{N}$. Предыдущие измерения с высоким энергетическим разрешением не обрабатывались с использованием современного подхода R-матрицы. Нами был проведен анализ резонансных данных с помощью R-матрицы и получили новые данные по 15 уровням в области возбуждения 11,7–12,5 МэВ ${}^{22}\text{Ne}$. Похоже, что модельные расчеты не предсказали наблюдаемую тенденцию в кластеризации α ${}^{20-22}\text{Ne}$. Более точные и подробные результаты исследований приведены в [22].

Заключение

В данной работе представлены результаты применения методики толстой мишени в обратной кинематике (ТМОК) для изучения резонансных реакций при взаимодействии ${}^{16}\text{O}+\alpha$, ${}^{17}\text{O}+\alpha$, ${}^{15}\text{N}+\alpha$ и ${}^{22}\text{Ne}+\alpha$ на ускорителе тяжелых ионов ДЦ-60. Метод ТМОК был усовершенствован путем его комбинации с методом времени пролета, что позволило интенсифицировать легкие частицы (протоны и α -частицы) в протяженной газовой мишени. Получено хорошее согласие между экспериментальными данными и теоретическими. Определено более 20 резонансных уровней в структуре ядра ${}^{20}\text{Ne}$. Описаны уровни основного состояния и уровня первого возбужденного состояния $0+$, а также уровни состояний $1-$, $3-$ и $2+$. Параметры этих уровней характеризуются как α -кластерные.

Также были выполнены первые измерения упругого рассеяния ${}^{17}\text{O}+\alpha$. В области возбуждения ядра ${}^{21}\text{Ne}$ от 9 до 13 МэВ было обнаружено много α -кластерных состояний, включая широкое состояние с $\ell=0$ в нечетно-четном ядре, которое, вероятно, является аналогом широкого состояния $0+$ на 8 МэВ в ${}^{20}\text{Ne}$.

Кроме того, в работе представлены результаты анализа данных упругого рассеяния $\alpha+{}^{15}\text{N}$ до энергии возбуждения 8,2 МэВ в ядре ${}^{19}\text{F}$. Мы обнаружили новые спины нескольких резонансов и уточнили спектрометрические параметры нескольких уровней. В отличие от ранее сделанных работ, наш теоретический анализ показал, что сильный пик при энергии возбуждения 8,15 МэВ в ядре ${}^{19}\text{F}$ при углах, близких к 180° , является результатом интерференции нескольких резонансов с различными спинами.

Теоретический анализ данных резонансного рассеяния $\alpha+{}^{18}\text{O}$ позволил уточнить параметры 15 уровней в ${}^{22}\text{Ne}$. В отличие от ядер ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{21}\text{Ne}$ и ${}^{19}\text{F}$, нами не были обнаружены низкоспиновые резонансы с большой приведенной α -шириной в исследуемой области возбуждения.

Проведенные исследования указывают на необходимость дальнейшего изучения данных структур при более высоких энергиях возбуждения, что позволит улучшить понимание развития альфа кластеризации (альфа кластерной структуры) в ядрах с $N \neq Z$.

Благодарность

Исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP14869719).

Вклад авторов

Наурузбаев Д.К. – проведение эксперимента, подготовка экспериментального оборудования и запуск системы сбора данных, организация и контроль сбора данных во время эксперимента в течение двух недель, обработка и углубленный анализ полученных данных, выполнение необходимых расчетов, интерпретация результатов, подготовка иллюстраций, а также написание основного текста научной статьи.

Нурмуханбетова А.К. – формулировка и постановка научной задачи для экспериментов, участие в сборе данных во время эксперимента в течение двух недель, обработка и анализа данных, выполнение расчетов, интерпретация результатов, а также написание отдельных разделов текста статьи.

Серикбаева Г.Е. – участие в эксперименте, выполнение задач по сбору данных, их предварительная обработка и анализ, а также корректировка отдельных разделов текста статьи.

Тихонов А. – участие в эксперименте, выполнение задач по сбору данных, редактирование и доработка материалов научной статьи, включая уточнение формулировок и проверку структуры текста.

Список литературы

1. Epelbaum, H. Krebs, T.A. Lahde, D. Lee, U.G. Meiner, Structure and rotations of the hoyle state. // Phys. Rev. Lett. – 2012 – V. 109.DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.252501>- **журнал на англ языке**
2. M.L. Avila, G.V. Rogachev, V.Z. Goldberg, E.D. Johnson, et al., α -cluster structure of ^{18}O . // Phys. Rev. C. – 2014 – V. 90 – P. 24327.DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.024327>- **журнал на англ языке**
3. E. Uberseder, G.V. Rogachev, V.Z. Goldberg, E. Koshchiy, et al., Nuclear structure beyond the neutron drip line: the lowest energy states in ^9He via their $T=5/2$ isobaric analogs in ^9Li . // Phys. Lett. Sect. B Nucl. Elem. Part. High.-Energy Phys. – 2016 – V. 754 – P. 323–327.DOI:<https://doi.org/10.1016/j.physletb.2016.01.014> - **журнал на англ языке**
4. Сюняев Р. А. Физика космоса: Маленькая энциклопедия. //2-е изд., перераб. и доп. – М.: Сов. энциклопедия, 1986. – 783 с. -**книга**
5. Iliadis C. Nuclear Physics of Stars. 2nd ed. // Chapel Hill. Wiley-VCH, 2015. – 672 p. -**книга**
6. M.Wiescher. Cosmic alchemy in the laboratory. // Physics 2. – 2009. –V. 69.- **книга**
7. Mukhamedzhanov A. M., Timofeyuk N. K. Astrophysical S-factor for the reaction $^7\text{Be}+p\rightarrow^8\text{B}+\gamma$. // JETP Lett. – 1990. – V. 51. – No. 5. – P. 282 – 284.DOI:http://jetpletters.ru/ps/0/article_17241.shtml - **журнал на англ языке**

8. Freer M. The clustered nucleus – cluster structures in stable and unstable nuclei. // Rep. Prog. Phys. – 2007. – V. 70. – P. 2149-2210. DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/70/12/R03> - **журнал на англ языке**
9. Goldberg V. Z., Rogachev G. V. New Era of Resonance Reaction Studies. // Physics of Atomic Nuclei. – 2020. – V. 83. – P. 513–519. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063778820040110> - **журнал на англ языке**
10. Gikal B. et al. DC-60 heavy ion cyclotron complex: the first beams and project parameters // Phys. Part. Nucl. Lett. – 2008. – V. 5. – P. 642–644. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477108070248> - **журнал на англ языке**
11. Thompson W. J., Wilkerson J. F., Clegg T. B., Feagin J. M. et al. Atomic-Excitation Effects on Nuclear Reactions. // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45. – P 703. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.703> - **журнал на англ языке**
12. Nurmukhanbetova A. K., Goldberg V. Z., Nauruzbayev D. K., Rogachev G. V. et al. Implementation of TTIK method and time of flight for resonance reaction studies at heavy ion accelerator DC-60. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. – 2017. – V. 847. – P. 125-129. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.11.053> - **журнал на англ языке**
13. Artemov K., Belyanin O. P., Vetoshkin A. L., Wolski R. et al. Effective Method of Study of α -Cluster States. // Yad. Fiz. – 1990. – V. 52. – P. 634. - **журнал на англ языке**
14. Nauruzbayev D.K. Investigation of $^{20,21}\text{Ne}$ states in $\alpha+^{16,17}\text{O}$ resonant elastic scattering. 2021. – P. 70. - **журнал на англ языке**
15. Almaraz-Calderon S., W.P. Tan, A. Aprahamian, B. Bucher, et al. Level structure of ^{18}Ne and its importance in the $^{14}\text{O}(\alpha, p)^{17}\text{F}$ reaction rate. // Phys. Rev. C. – 2012. – V. 86. – P. 25801. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.029901> - **журнал на англ языке**
16. NSCL DAQ. URL: <https://sourceforge.net/projects/nscldaq/> - **интернет источник**
17. NSCL Spectcl. URL: <https://sourceforge.net/projects/nsclspectcl/> - **интернет источник**
18. Мухин К. Н. Экспериментальная ядерная физика. Т.1-3. Изд. 5 перераб. и доп. М.: Атомиздат, 1993. - 1096 с.- **книга**
19. Nauruzbayev D. K., Goldberg V. Z., Nurmukhanbetova A. K., Golovkov M. S. et al. Structure of ^{20}Ne states in resonance $^{16}\text{O}+\alpha$ elastic scattering // Phys. Rev. C. – 2017. – V. 96. – P. 014322. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.96.014322> - **журнал на англ языке**
20. Nurmukhanbetova A.K., Goldberg V. Z., Nauruzbayev D. K., Golovkov M. S. et al. Evidence for α -cluster structure in ^{21}Ne in the first measurement of resonant $^{17}\text{O}+\alpha$ elastic scattering. // Phys. Rev. C. – 2019. – V. 100. – P. 062802(R). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.062802> - **журнал на англ языке**
21. Goldberg V.Z., Nurmukhanbetova A.K., Volya A., Nauruzbayev D.K. et al. α -cluster structure in ^{19}F and ^{19}Ne in resonant scattering. // Phys. Rev. C. – 2022. – V. 105. – P. 014615. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.014615> - **журнал на англ языке**
22. Nurmukhanbetova A.K., Goldberg V.Z., Volya A., Nauruzbayev D.K. et al. R-matrix analysis of ^{22}Ne states populated in $^{18}\text{O}(\alpha, \alpha)$ resonant elastic scattering. // Phys. Rev. C. – 2024. – V. 109. – P. 024607. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.109.024607> - **журнал на англ языке.**

Д.К. Наурузбаев*¹, А. Тихонов², Г.Е. Серикбаева^{1,2}, А.К. Нурмуханбетова¹

¹Назарбаев Университетінің Ғылыми-Инновациялық Жүйесі, Астана, Қазақстан

²Ғылым және Гуманитарлық Ғылымдар Мектебі, Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан

ДЦ-60 циклотронындағы резонанстық реакцияларды ККҚН және ұшу уақыты әдістерін қолдану арқылы зерттеу

Аңдатпа. Мақала ДЦ-60 циклотронына негізделген кері кинематикада қалың нысана (ККҚН) әдісін бірінші сәтті енгізу бойынша атқарылған жұмыстарды шолуға арналған. Ауыр иондық шоғырын диагностикалауға және реакция өнімдерін анықтауға арналған ұшу уақыты жүйесімен бірге ККҚН техникасын қолдану арқылы астрофизикалық қызығушылық тудыратын төмен әсерлесу энергиялары аймағындағы резонанстық ядролық реакцияларды зерттеуге мүмкіндік алдық. Әдістеме кері кинематика жағдайында жеңіл бөлшектердің шашырауының қоздыру функцияларын өлшеуге негізделген, мұнда қалың және ұзартылған газ нысанасы (гелий немесе сутегі) нысана ретінде пайдаланылады, ал ауыр жеделдетілген ядролар шоғыр ретінде қызмет етеді. Сонымен қатар, ол енгізілген эксперименттік жобаны және деректерді жинау және өңдеу жүйесін егжей-тегжейлі көрсетеді. Нәтижесінде біз салмақ орталығы жүйесінде (сож) 180° бұрышта 35 кВ және 2 нс-ге жуық жалпы тәжірибелік рұқсатқа қол жеткіздік. Сонымен қатар, ККҚН техникасын қолдануда гелиймен сутектің ультра таза жеңіл газдарын пайдаланып, ал ауыр бөлшектердің изотоптарының шоғыры ретінде қолданудың арқасында фондық реакцияларды жоққа шығаруға мүмкіндік алдық. Осының бәрі бірігіп біздің топқа сәйкесінше $^{16}\text{O}+\alpha$, $^{17}\text{O}+\alpha$, $^{15}\text{N}+\alpha$ және $^{22}\text{Ne}+\alpha$ реакцияларындағы ^{20}Ne , ^{21}Ne , ^{19}F , ^{22}Ne ядроларының резонанстық құрылымын зерттеу бойынша тәжірибелер сериясын сәтті жүргізуге мүмкіндік берді.

Түйін сөздер: резонанстар, қалың нысана, кері кинематика, ұшу уақыты, циклотрон, кластерлік күйлер.

D.K. Nauruzbayev*¹, A. Tikhonov², G.E. Serikbayeva^{1,2}, A.K. Nurmukhanbetova¹

¹Nazarbayev University Research and Innovation System, Astana, Kazakhstan

²School of Science and Humanities, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

Study of resonance reactions at the DC-60 cyclotron using the TTIK and time-of-flight techniques

Abstract. The article is devoted to the review of the work done on the first successful implementation of the thick target method in inverse kinematics (TTIK) based on the DC-60 cyclotron. The use of the TTIK technique together with the time-of-flight system for heavy ion beam diagnostics and the identification of reaction products made it possible to study resonance nuclear reactions in the region of low interaction energies, which are also of astrophysical interest. The technique is based on measuring the excitation functions of light particle scattering under inverse kinematics conditions, where a thick

and extended gas target (helium or hydrogen) is used as a target, and heavy accelerated nuclei serve as a beam. In addition, it provides a detailed description of the implemented experimental scheme and the data acquisition and processing systems. As a result, the overall experimental resolution of about 35 keV and 2 ns at an angle of 180° in the center of mass system (cms) was achieved. Moreover, the use of the TTIK method allowed us to eliminate background reactions by using ultra-pure light gases helium and hydrogen as a target and heavy particle isotope beams. This approach enabled us to successfully conduct a series of experiments to study the resonance structure of ^{20}Ne , ^{21}Ne , ^{19}F , ^{22}Ne nuclei in the reactions $^{16}\text{O}+\alpha$, $^{17}\text{O}+\alpha$, $^{15}\text{N}+\alpha$ and $^{22}\text{Ne}+\alpha$, respectively.

Keywords: resonances, thick target, inverse kinematics, time of flight, cyclotron, cluster states.

References

1. Epelbaum, H. Krebs, T.A. Lahde, D. Lee, U.G. Meiner, Structure and rotations of the hoyle state. // Phys. Rev. Lett. – 2012 – V. 109. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.252501>
2. M.L. Avila, G.V. Rogachev, V.Z. Goldberg, E.D. Johnson, et al., α -cluster structure of ^{18}O . // Phys. Rev. C. – 2014 – V. 90 – P. 24327. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.90.024327>
3. E. Uberseder, G.V. Rogachev, V.Z. Goldberg, E. Koshchiy, et al., Nuclear structure beyond the neutron drip line: the lowest energy states in ^9He via their $T=5/2$ isobaric analogs in ^9Li . // Phys. Lett. Sect. B Nucl. Elem. Part. High.-Energy Phys. – 2016 – V. 754 – P. 323–327. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2016.01.014>
4. Sunyaev R.A. Fizika kosmosa: Malen'kaya entsiklopediya [Physics of Space: A Little Encyclopedia. // 2nd ed., revised and expanded] – Moscow: Soviet Encyclopedia. – 1986. – p. 783. [In Russian]
5. Iliadis C. Nuclear Physics of Stars. 2nd ed. // Chapel Hill. Wiley-VCH, 2015. – 672 p.
6. M. Wiescher. Cosmic alchemy in the laboratory. // Physics 2. – 2009. – V. 69.
7. Mukhamedzhanov A. M., Timofeyuk N. K. Astrophysical S-factor for the reaction $^7\text{Be}+p\rightarrow^8\text{B}+\gamma$. // JETP Lett. – 1990. – V. 51. – No. 5. – P. 282 – 284. DOI: http://jetpletters.ru/ps/0/article_17241.shtml
8. Freer M. The clustered nucleus – cluster structures in stable and unstable nuclei. // Rep. Prog. Phys. – 2007. – V. 70. – P. 2149-2210. DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/70/12/R03>
9. Goldberg V. Z., Rogachev G. V. New Era of Resonance Reaction Studies. // Physics of Atomic Nuclei. – 2020. – V. 83. – P. 513–519. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063778820040110>
10. Gikal B. et al. DC-60 heavy ion cyclotron complex: the first beams and project parameters // Phys. Part. Nucl. Lett. – 2008. – V. 5. – P. 642–644. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477108070248>
11. Thompson W. J., Wilkerson J. F., Clegg T. B., Feagin J. M. et al. Atomic-Excitation Effects on Nuclear Reactions. // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45. – P. 703. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.703>
12. Nurmukhanbetova A. K., Goldberg V. Z., Nauruzbayev D. K., Rogachev G. V. et al. Implementation of TTIK method and time of flight for resonance reaction studies at heavy ion accelerator DC-60. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. – 2017. – V. 847. – P. 125-129. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.11.053>
13. Artemov K., Belyanin O. P., Vetoshkin A. L., Wolski R. et al. Effective Method of Study of α -Cluster States. // Yad. Fiz. – 1990. – V. 52. – P. 634

14. Nauruzbayev D.K. . Investigation of 20,21Ne states in $\alpha+16,17O$ resonant elastic scattering. 2021. – P. 70.
15. Almaraz-Calderon S., W.P. Tan, A. Aprahamian, B. Bucher, et al. Level structure of 18Ne and its importance in the 14O(α , p)17F reaction rate. // Phys. Rev. C. – 2012. – V. 86. – P. 25801. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.86.029901>
16. NSCL DAQ. URL: <https://sourceforge.net/projects/nscldaq/>
17. NSCL SpectCl. URL: <https://sourceforge.net/projects/nsclspectcl/>
18. Mukhin K.N. Eksperimental'naya yadernaya fizika [Experimental Nuclear Physics. Vol. 1-3. 5th ed., revised and expanded] Moscow: Atomizdat.- 1993. – p.1096. [In Russian]
19. Nauruzbayev D. K., Goldberg V. Z., Nurmukhanbetova A. K., Golovkov M. S. et al. Structure of 20Ne states in resonance 16O+ α elastic scattering // Phys. Rev. C. – 2017. – V. 96. – P. 014322. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.96.014322>
20. Nurmukhanbetova A.K., Goldberg V. Z., Nauruzbayev D. K., Golovkov M. S. et al. Evidence for α -cluster structure in 21Ne in the first measurement of resonant 17O+ α elastic scattering. // Phys. Rev. C. – 2019. – V. 100. – P. 062802(R). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.062802>
21. Goldberg V.Z., Nurmukhanbetova A.K., Volya A., Nauruzbayev D.K. et al. α -cluster structure in 19F and 19Ne in resonant scattering. // Phys. Rev. C. – 2022. – V. 105. – P. 014615. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.014615>
22. Nurmukhanbetova A.K., Goldberg V.Z., Volya A., Nauruzbayev D.K. et al. R-matrix analysis of 22Ne states populated in 18O(α , α) resonant elastic scattering. // Phys. Rev. C. – 2024. – V. 109. – P. 024607. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.109.024607>

Сведения об авторах:

Наурузбаев Д.К. – автор для корреспонденции, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник в частном учреждении Nazarbayev University Research and Innovation System, проспект Кабанбай батыра, 53, 010000, Астана, Казахстан.

Тихонов А. – PhD, ассоциированный профессор School of Science and Humanities, Nazarbayev University, проспект Кабанбай батыра, 53, 010000, Астана, Казахстан.

Серикбаева Г.Е. – PhD студент School of Science and Humanities, Nazarbayev University, член исследовательской группы частного учреждения Nazarbayev University Research and Innovation System, проспект Кабанбай батыра, 53, 010000, Астана, Казахстан.

Нурмуханбетова А.К. – PhD, руководитель проекта, Nazarbayev University Research and Innovation System, проспект Кабанбай батыра, 53, 010000, Астана, Казахстан.

Nauruzbayev D.K. – corresponding author, PhD in Physics and Mathematics, research fellow at the private institution Nazarbayev University Research and Innovation System, Kabanbay Batyr Avenue 53, 010000, Astana, Kazakhstan.

Tikhonov A. – PhD, Associate Professor, School of Science and Humanities, Nazarbayev University, Kabanbay Batyr Avenue 53, 010000, Astana, Kazakhstan.

Serikbayeva G.E. – PhD student at the School of Science and Humanities, Nazarbayev University, member of the research group of the private institution Nazarbayev University Research and Innovation System, Kabanbay Batyr Avenue 53, 010000, Astana, Kazakhstan.

Nurmukhanbetova A.K. – PhD, Project Manager, Nazarbayev University Research and Innovation System, Kabanbay Batyr Avenue 53, 010000, Astana, Kazakhstan.

Наурузбаев Д.К. – хат-хабар авторы, физика-математика ғылымдарының кандидаты, Nazarbayev University Research and Innovation System жеке мекемесінің ғылыми қызметкері, Қабанбай батыр даңғылы 53, 010000, Астана, Қазақстан.

Тихонов А. – PhD, School of Science and Humanities, Nazarbayev University қауымдастырылған профессоры, Қабанбай батыр даңғылы 53, 010000, Астана, Қазақстан.

Серикбаева Г.Е. – School of Science and Humanities, Nazarbayev University PhD докторанты және Nazarbayev University Research and Innovation System жеке мекемесінің зерттеу тобының мүшесі, Қабанбай батыр даңғылы 53, 010000, Астана, Қазақстан.

Нурмуханбетова А.К. – PhD, жоба жетекшісі, Nazarbayev University Research and Innovation System, Қабанбай батыр даңғылы 53, 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/>).



МРНТИ 29.15.53

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-142-152>

Научная статья

Влияние материального состава фильтров на пространственно-энергетическое распределение нейтронов на выходе горизонтального экспериментального канала исследовательского реактора ВВР-К

А.Ж. Несипбай*

Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

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

Аннотация. Данная статья исследует воздействие фильтров на пространственно-энергетическое распределение нейтронов в горизонтальных экспериментальных каналах исследовательского реактора ВВР-К. Во введении представлен обзор и роль реактора, особенностей горизонтальных каналов и их значения для научных исследований. Описаны основные типы фильтров, их назначение и ключевая роль в регулировании нейтронного спектра. Методология работы включает описание использованного метода, включая описание математической модели. Приведено описание материального состава и свойств рассмотренных фильтров. В разделе «Результаты и обсуждения» представлены результаты расчетов по пространственно-энергетическому распределению нейтронов на выходе горизонтального экспериментального канала реактора ВВР-К без фильтра и с различным составом фильтров. Анализируется влияние каждого типа фильтра на спектральные характеристики нейтронного потока, приводятся особенности каждого фильтра и практические аспекты его применения. Подчеркивается значимость полученных результатов для дальнейшей оптимизации радиационных условий нейтронного пучка реактора ВВР-К. В заключение дается краткое подведение итогов и планы на будущее по продолжению исследований, направленных на формирование терапевтического пучка нейтронов на реакторе ВВР-К.

Ключевые слова: борнейтронно-захватная терапия, исследовательский реактор, узел формирования пучка, эпитепловой спектр, тепловой спектр.

Введение

Борнейтронно-захватная терапия (БНЗТ) – это метод лучевой терапии, который использует бор и тепловые нейтроны для лечения определенных типов рака, таких, как опухоли головного и шейного отделов. Во время процедуры пациенту вводятся стабильные соединения 10-бора, которые скапливаются в раковых клетках. Затем опухоль облучается тепловыми нейтронами, что приводит к делению бора и выбросу заряженных частиц, наносящих повреждения раковым клеткам [1,2].

Для БНЗТ необходимы пучки нейтронов подходящей энергии и интенсивности, а также низкий гамма-фон. При использовании ядерного реактора в качестве источника нейтронов для БНЗТ необходимо решить ряд проблем, и одной из них является формирование пучка нейтронов с заданными характеристиками. С целью получения оптимального пучка нейтронов требуется разработать и установить между источником нейтронов и пациентом узел формирования пучка (УФП) нейтронов. УФП предназначено для формирования требуемых радиационных характеристик пучка нейтронов в зоне облучения объекта. Обычно УФП содержит такие элементы, как: отражатель и замедлитель нейтронов, гамма-фильтр, фильтр тепловых нейтронов и коллиматор. Размеры и формаэлементов УФП зависят от технических и габаритных характеристик источника нейтронов [3,4].

Замедлитель должен иметь высокое сечение рассеяния быстрых нейтронов и низкие сечения рассеяния и поглощения тепловых нейтронов, также замедлитель не должен становиться источником сильного поля фотонов, даже если так, то их энергии должны быть низкими. Нейтроны, которые первоначально рассеиваются в замедлителе, могут просочиться наружу, не достигнув необходимых энергий. Эта потеря может быть существенно уменьшена, если окружить замедлитель отражателем [7].

Отражатель возвращает нейтроны, которые сначала сталкиваются в замедлителе, но утекают, не успев замедлиться, а также отражает нейтроны, которые не попадают в замедлитель, вылетая из источника. Кроме того, реакция $(n,2n)$ в отражателе вносит значительный вклад в общее производство нейтронов. В качестве материалов отражателя могут быть рассмотрены графит, свинец, ВеО и вольфрам/молибден. Свинец с низким производством фотонов и низкой стоимостью является предпочтительным отражателем [3].

Для получения теплового нейтронного пучка с высоким качеством необходимо использовать фильтры эпитепловых и быстрых нейтронов. Поток быстрых нейтронов может быть наиболее эффективно уменьшен и преобразован в эпитепловой поток с помощью Al или его фтористых соединений. Кадмий, гадолиний и материалы, обогащенные В-10 или Li-6, имеют высокие тепловые сечения, но следует позаботиться о дополнительной генерации гамма-излучения (В, Gd, Cd) и быстрых нейтронов (Li). В дополнение к эпитепловым и быстрым нейтронам необходимо подавлять гамма-излучение. Pb и Bi являются обычными гамма-фильтрами, широко используемыми в пучковых каналах БНЗТ.

Коллиматоры внутри защитного экрана должны отражать нейтроны обратно в пучок. Поэтому используются материалы нейтроноотражающего типа. Коллиматоры, используемые вблизи выхода пучка, являются разделителями пучка и должны поглощать, а не отражать нейтроны. Сменные выходные коллиматоры с различными диаметрами внутренних отверстий могут использоваться для ограничения окончательного размера и расходимости пучка, подаваемого на место лечения пациента. Эти коллиматоры изготавливаются с использованием В4С или 6Li2CO3, диспергированных в полиэтилене [7].

Методы исследования

В качестве источника нейтронов рассматривался исследовательский реактор ВВР-К, снабженный десятью горизонтальными экспериментальными каналами (ГЭК) для вывода пучков нейтронов [5,6].

Горизонтальный экспериментальный канал представляет собой трубу с внутренним диаметром 100 мм и длиной 3300 мм. Часть канала длиной 753 мм открытым концом сварена во внешнюю обечайку. Остальная часть этих каналов находится в чугунной и бетонной защите. Ось канала лежит в центральной (по высоте) плоскости активной зоны. Канал снабжен защитной заслонкой (шибер), который представляет собой диски, заполненные бетоном с добавками карбида бора. Диски поочередно сдвигаются в массив защиты реактора, открывая доступ в горизонтальный канал.

УФП представляет собой отдельный или комбинацию фильтров, установленных внутри ГЭК, вплотную к активной зоне (Рисунок 1). Диаметр фильтра составляет 100 мм, а его толщина варьируется в зависимости от материала. Описание рассмотренных вариантов фильтров приведено в таблице 1.

Таблица 1. Свойства материалов фильтров

Материал	Размеры, мм	Плотность, г/см ³	Агрегатное состояние
Al ₂ O ₃	100, 150, 200, 500	3,98	твердое
Al	200	2,70	твердое
Cd	1	8,65	твердое
C ₂ F ₄	200	2,20	твердое
Li ₂ CO ₃	30	2,11	твердое

В расчетах были рассмотрены различные варианты фильтров, менялся материальный состав, размеры и расположение фильтров в горизонтальном канале.

Моделирование УФП с разным материальным составом, установленным в горизонтальном канале реактора ВВР-К, проводилось с помощью транспортного кода MCNP6 [9,10]. В расчетах использовалась библиотека ядерных данных ENDF/B-VIII.0 [11]. Транспортный код MCNP (Monte Carlo N-Particle transport code), разработанный в Лос-Аламосской национальной лаборатории США, широко используется для решения задач,

связанных с моделированием переноса частиц в сложной среде, в таких областях, как ядерная энергетика, ядерная медицина, радиационная защита, ядерная безопасность и др. Точность расчетов Монте-Карло зависит как от точности описания компьютерной модели (геометрии и материалов), так и от количества смоделированных нейтронных историй. Статистическая погрешность метода Монте-Карло пропорциональна $1/\sqrt{N}$, где N – число смоделированных нейтронных историй. MCNP6 позволяет моделировать транспорт нейтронов ("N"), фотонов ("P"), электронов ("E"), протонов ("H") как отдельно, так и в комбинации (типа "N, P"), в средах, описываемых полномасштабной 3D-геометрией, заданной в виде операторов пересечения, объединения и дополнения различных заданных пользователем поверхностей (описываемых уравнениями порядка до 4-го). MCNP6 позволяет проводить различные расчеты, которые могут представлять вычисленную величину, интегрированную по энергетическому спектру нейтронов. Все расчеты являются функциями времени и энергии, нормированными на одну сгенерированную частицу.

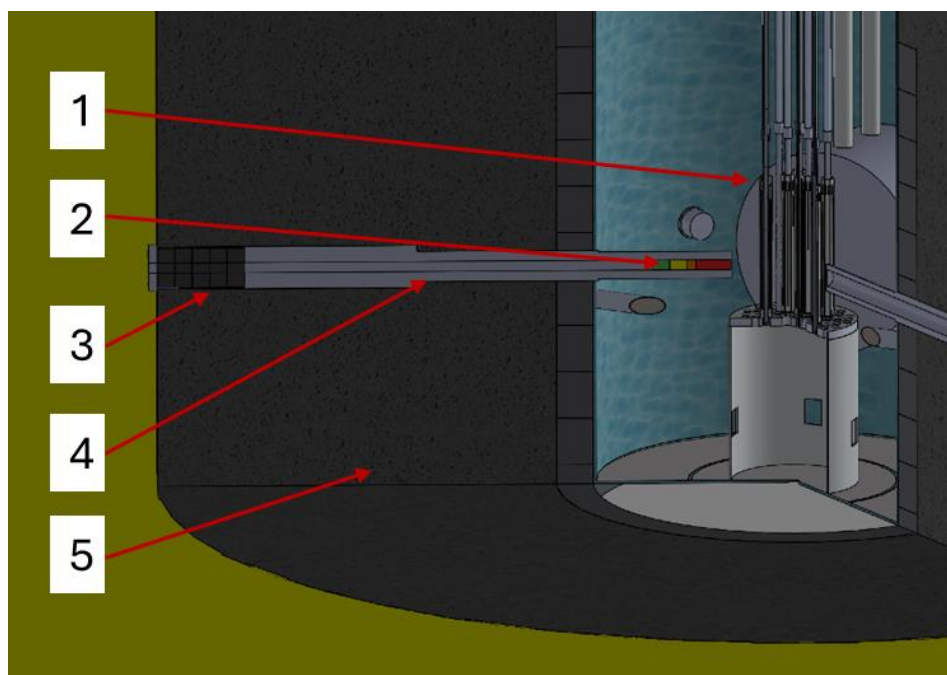


Рисунок 1. Трехмерная модель реактора ВВР-К с горизонтальным экспериментальным каналом: 1 – активная зона реактора; 2 – фильтры; 3 – диски защитной заслонки; 4 – ГЭК; 5 – бетонная защита.

Каждый входной файл включал 500 циклов, составленных из 50 неактивных и 450 активных циклов с 100 000 историй на цикл. При моделировании учитывались реальный состав активной зоны реактора, выгорание топлива в ТВС и отравление бериллиевого отражателя нейтронов. Кроме этого, расчетная модель была составлена гетерогенной, что позволяет получить более точные результаты.

Результаты и обсуждения

Согласно рекомендации МАГАТЭ [7], терапевтические пучки нейтронов должны удовлетворять требованиям, приведенным в таблице 2. Причем рассматриваются два типа пучка: с тепловым и эпитепловым спектром нейтронов. Основное внимание уделяется двум основным критериям пучка нейтронов – это интенсивность и качество. Интенсивность пучка будет основным фактором, определяющим время лечения пациентов. Качество пучка связано с типами, энергиями и относительными интенсивностями всех присутствующих излучений. Принято следующее разбиение нейтронов по энергиям: быстрые нейтроны $E > 10$ кэВ, эпитепловые нейтроны $0,5$ эВ $< E < 10$ кэВ, тепловые нейтроны $E < 0,5$ эВ.

Таблица 2. Рекомендации параметров МАГАТЭ для нейтронного пучка БНЗТ [7].

Тепловой спектр для БНЗТ		Эпитепловой спектр для БНЗТ	
Параметр	Рекомендованное значение	Параметр	Рекомендованное значение
$\Phi_{\text{тепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	$> 10^9$	$\Phi_{\text{эпитепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	$> 10^9$
$\Phi_{\text{тепл/общ}}$	$> 0,9$	$\Phi_{\text{эпитепл/тепл}}$	> 20
$D_{\text{(эпитепл+быстр)}/\Phi_{\text{тепл}}}$ ($\text{Гр}*\text{см}^2$)	$< 2*10^{-13}$	$D_{\text{быстр}/\Phi_{\text{эпитепл}}}$ ($\text{Гр}*\text{см}^2$)	$< 2*10^{-13}$
$D_{\text{гамма}/\Phi_{\text{тепл}}}$ ($\text{Гр}*\text{см}^2$)	$< 2*10^{-13}$	$D_{\text{гамма}/\Phi_{\text{эпитепл}}}$ ($\text{Гр}*\text{см}^2$)	$< 2*10^{-13}$

Для БНЗТ необходимо создать достаточное поле тепловых нейтронов в меченных бором опухолевых клетках в заданном объеме мишени. Это означает, что для целевых объемов, расположенных далеко под поверхностью, как правило, лучше всего подходят эпитепловые пучки нейтронов, а для целевых объемов, расположенных вблизи поверхности, достаточно тепловых пучков нейтронов. Связано это с тем, что эпитепловой пучок нейтронов, проникая в ткань, создает поле излучения с максимальным тепловым потоком на глубине 2-3 см, который затем экспоненциально уменьшается. Проникновение пучка можно увеличить за счет повышения средней энергии эпитепловых нейтронов и направления пучка вперед, особенно при малых размерах пучка [8,12].

Исходный энергетический спектр нейтронов за защитной заслонкой ГЭК показан на рисунке 2. Доля тепловых нейтронов в интегральном спектре нейтронов составляет 0.57%, доля эпитепловых нейтронов – 0.16%, доля быстрых нейтронов – 0.27%.

Рассмотрены разные варианты материалов фильтров УФП для улучшения нейтронных характеристик ГЭК реактора ВВР-К. Отдельно была рассмотрена возможность создания пучка тепловых (Рисунок 3, варианты 1-3) и эпитепловых нейтронов (Рисунок 3, варианты 4-6), с характеристиками, близкими к рекомендациям МАГАТЭ (таблица 2), в части энергетического спектра нейтронов. Наиболее приемлемые полученные результаты расчетов приведены в таблице 3.

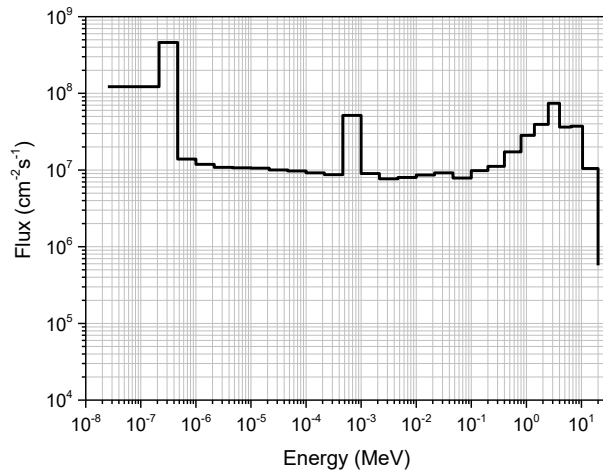
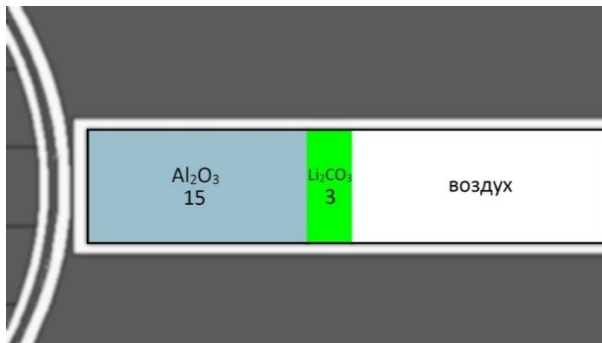
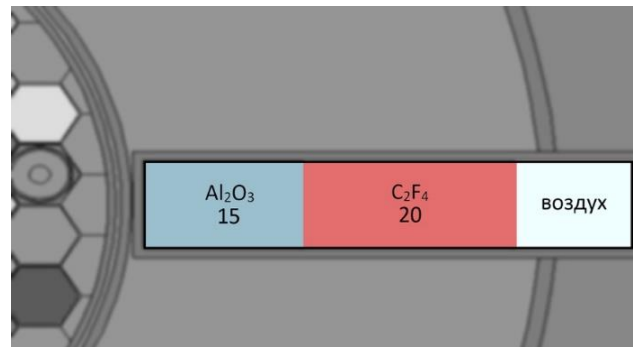


Рисунок 2. Энергетический спектр нейтронов на выходе из ГЭК реактора ВВР-К.

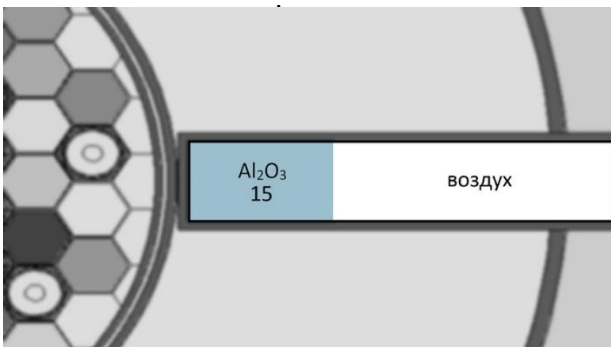
На рисунке 3 показаны варианты рассмотренных фильтров, их свойства и размеры указаны в таблице 1.



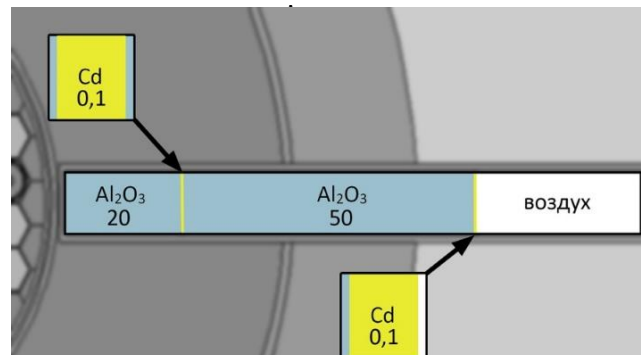
Вариант 1



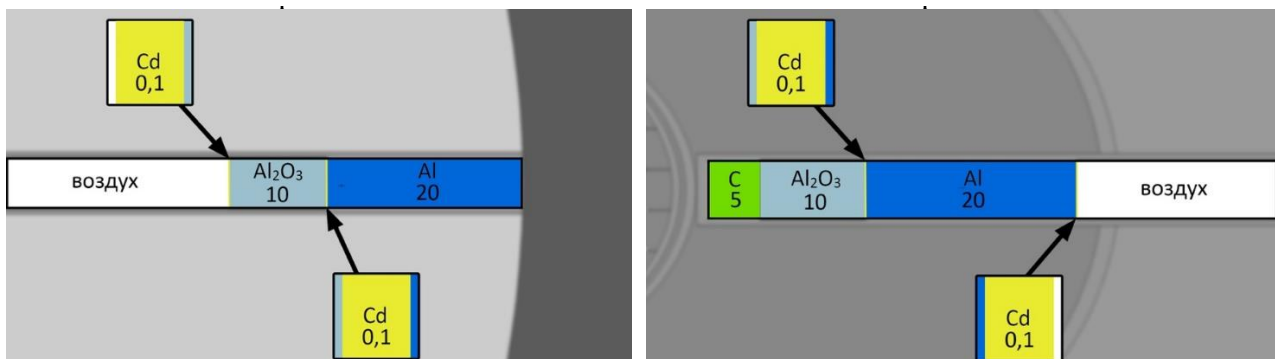
Вариант 2



Вариант 3



Вариант 4



Вариант 5

Вариант 6

Рисунок 3. Дизайны рассмотренных фильтров.

Таблица 3. Энергетическое распределение нейтронов на выходе из ГЭК с разными комбинациями фильтров.

Тепловой спектр				$\Phi_{\text{тепл/общ}}$
Вариант №	Тепловые	Эпитепловые	Быстрые	
1	$12,0 \cdot 10^7$	$1,4 \cdot 10^7$	$2,3 \cdot 10^7$	0,77
2	$1,4 \cdot 10^7$	$0,1 \cdot 10^7$	$0,2 \cdot 10^7$	0,79
3	$17,0 \cdot 10^7$	$2,2 \cdot 10^7$	$3,3 \cdot 10^7$	0,76
Эпитепловой спектр				$\Phi_{\text{эпитепл/тепл}}$
Вариант №	Тепловые	Эпитепловые	Быстрые	
4	$8,15 \cdot 10^4$	$4,52 \cdot 10^4$	$4,28 \cdot 10^4$	0,77
5	$3,12 \cdot 10^5$	$3,19 \cdot 10^6$	$3,34 \cdot 10^6$	0,79
6	$3,21 \cdot 10^6$	$4,97 \cdot 10^6$	$5,15 \cdot 10^6$	0,76

Таблица 4. Полученные и рекомендованные МАГАТЭ характеристики УФПН.

Тепловой БНЗТ				
Вариант №	$\Phi_{\text{тепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	Рек-ные значения $\Phi_{\text{тепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	$\Phi_{\text{тепл/общ}}$	Рек-ные значения $\Phi_{\text{тепл/общ}}$
1	$12,0 \cdot 10^7$	$>10^9$	0,77	$>0,9$
2	$1,4 \cdot 10^7$		0,79	
3	$17,0 \cdot 10^7$		0,76	
Эпитепловой БНЗТ				
Вариант №	$\Phi_{\text{тепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	Рек-ные значения $\Phi_{\text{тепл}}$ ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$)	$\Phi_{\text{эпитепл/тепл}}$	Рек-ные значения $\Phi_{\text{эпитепл/тепл}}$
4	$8,15 \cdot 10^4$	$>10^9$	1,3	>20
5	$3,12 \cdot 10^5$		10,2	
6	$3,21 \cdot 10^6$		1,6	

Из таблиц 3 и 4 видно, что первые три варианта позволяют сформировать пучок нейтронов с достаточно близкими характеристиками к рекомендуемому для теплового пучка нейтронов. Доля тепловых нейтронов составляет около 80%. Однако интенсивность нейтронов на порядок ниже.

Формирование эпитеплового пучка нейтронов оказалось затруднительным, так как применение комбинации фильтров приводит к значительному снижению интенсивности нейтронов (на несколько порядков ниже, чем рекомендуется) и поэтому применение такого пучка в дальнейшем является нецелесообразным.

Заключение

Результаты расчетов показали, что на ГЭК реактора ВВР-К возможно создать пучок нейтронов с тепловым спектром, имеющий близкие нейтронные характеристики к рекомендуемому МАГАТЭ. Однако требуется дальнейшая модификация УФП, которая позволит улучшить нейтронные характеристики на выходе из ГЭК. Рассмотренные несколько десятков вариантов дизайна УФП с целью создания пучка нейтронов с эпитепловым спектром не дали результата.

В дальнейшем будут продолжены работы по поиску наиболее оптимального варианта дизайна УФП.

Благодарность

Настоящая работа была выполнена при финансовой поддержке МЭ РК в рамках НТП «Развитие новых научных исследований в области радиационного материаловедения, конструкционных материалов, наноматериалов на исследовательском реакторе ВВР-К» (ИРН №BR20081011).

Список литературы

1. W.A. Sauerwein et al., Neutron capture therapy: principles and applications, Springer Science Business & Media (2012). - **книга**
2. R.F. Barth et al., Boron neutron capture therapy of cancer: current status and future prospects, Clin. Canc. Res. 11 (2005) 3987. <https://doi.org/10.1158/1078-0432.CCR-05-0035> - **журнал на англ.языке**
3. [E. Bavarnegin, Y. Kasesaz; and F.M. Wagner Neutron beams implemented at nuclear research reactors for BNCT. Journal of Instrumentation Volume 12, May 2017 P05005 <https://doi:10.1088/1748-0221/12/05/P05005> - **журнал на англ.языке**
4. Moss, R.L., Stecher-Rasmussen, F., Ravensberg, K., Constantine, G., Watkins, P. (1992). Design, Construction and Installation of an Epithermal Neutron Beam for BNCT at the High Flux Reactor Petten. In: Allen, B.J., Moore, D.E., Harrington, B.V. (eds) Progress in Neutron Capture Therapy for Cancer. Springer, Boston, MA. https://doi.org/10.1007/978-1-4615-3384-9_11. - **книга**
5. [Bauyrzhan A.B., Koltochnik S.N., Aitkulov M.T., Dyussambayev D. S., Shaimerdenov A.A., Mukhametuly B., Burtebaev N.T. Neutron-physical parameters at the outlet of the WWR-K reactor beam tube // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2019, 3(3), 219-22. DOI: 10.29317/ejpfm.2019030303 - **журнал на англ.языке**
6. D. Sairanbaev, S. Koltochnik, A. Shaimerdenov, M. Tulegenov, Y. Kenzhin, K. Tsuchiya Time History of Performance Parameters of WWR-K Reactor during Gradual Replacement of the Water Reflector by a Beryllium One // Russian Physics Journal. – Vol. 63, Issue 12. – 2021. – p. 2165-2177. DOI: 10.1007/s11182-021-02286-6]. - **журнал на рус.языке**

7. Advances in boron neutron capture therapy / International Atomic Energy Agency, 2023, 433 p.

8. Koivunoro, H.; Kankaanranta, L.; Seppälä, T.; Haapaniemi, A.; Mäkitie, A.; Joensuu, H. Boron neutron capture therapy for locally recurrent head and neck squamous cell carcinoma: An analysis of dose response and survival. *Radiother. Oncol.* 2019, 137, 153–158. DOI: 10.1016/j.ijrobp.2010.09.057-

журнал на англ.языке

9. MCNP6 User's Manual - Los Alamos National Laboratory, LA-CP-13-00634, 2013

10. M. B. Chadwick, M. Herman, P.Obložinský, M.E. Dunn, Y. Danon et al. "ENDF/B-VII.1: Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariance's, Fission Product Yields and Decay Data Library for Nuclear Science and Technology", *Nucl. Data Sheets, Volume 110*, (2011). - **журнал на англ.языке**

11. Brown D. A., Chadwick M. B., Capote R., Kahler A. C., Trkov A., Herman M.W. end et. al. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections. New Standards and Thermal Scattering Data. *Nuclear Data Sheets* 2018; (148): 1–142. DOI: 10.1016/j.nds.2018.02.001 - **журнал на англ.языке**

12. Lan, T.L.; Chou, F.I.; Lin, K.H.; Pan, P.S.; Lee, J.C.; Huang,W.S.; Liu, Y.M.; Chao, Y.; Chen, Y.W. Using salvage Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) for recurrent malignant brain tumors in Taiwan. *Appl. Radiat. Isot.* 2020, 160, 109105. DOI: 10.1016/j.apradiso.2020.109105 - **журнал на англ.языке**

13. Menéndez, P.; Pereira, M.; Casal, M.; González, S.; Feld, D.; Santa Cruz, G.; Kessler, J.; Longhino, J.; Blaumann, H.; Rebagliati, R.J.; et al. BNCT for skin melanoma in extremities: Updated Argentine clinical results. *Appl. Radiat. Isot.* 2009, 67, S50–S53. DOI: 10.1016/j.apradiso.2009.03.020 - **журнал на англ.языке**

A.Zh. Nessipbay

The Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

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

Influence of Material Composition of Filters on Spatial-Energy Distribution of Neutrons at the Outlet of the Horizontal Experimental Channel of WWR-K Research Reactor

Abstract. This paper investigates the effect of filters on the spatial-energy distribution of neutrons in the horizontal experimental channels of the WWR-K research reactor. The introduction presents an overview and the role of the reactor, the features of the horizontal channels and their importance for scientific research. The main types of filters, their purpose and key role in neutron spectrum control are described. The methodology of the work includes a description of the method used, including a description of the mathematical model. The material composition and properties of the considered filters are described. In the section 'Results and Discussion', the results of the calculations on the spatial-energy distribution of neutrons at the outlet of the horizontal experimental channel of the WWR-K reactor without a filter and with different composition of filters are presented. The influence of each type of filter on the spectral characteristics of the neutron flux is analysed, the peculiarities of each filter and practical aspects of its application are given. The significance of the results obtained for further optimisation of radiation conditions of the WWR-K neutron beam is emphasised. In conclusion, a brief summary of the results and future plans for the continuation of research aimed at the formation of a therapeutic neutron beam at the WWR-K reactor are given.

Keywords: boron neutron capture therapy, research reactor, beam forming unit, epithermal spectrum, thermal spectrum.

А.Ж.Несіпбай

Ядролық Физика Институты, Алматы, Қазақстан

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

ССР-Қ зерттеу реакторының көлденең тәжірибелік арнасының шығысындағы нейтрондардың кеңістіктік-энергетикалық таралуына сүзгілердің материалдық құрамының әсері

Аңдатпа. Бұл мақалада ССР-Қ зерттеу реакторының көлденең тәжірибелік арналарындағы нейтрондардың кеңістіктік-энергетикалық таралуына сүзгілердің әсері қарастырылады. Кіріспе бөлімінде реактордың жалпы көрінісі мен рөлін, көлденең арналардың ерекшеліктерін және олардың ғылыми зерттеулерге әсері туралы шолу жасалынды. Сүзгілердің негізгі түрлері, олардың тағайындалуы және нейтрондық спектрді реттеудегі шешуші рөлі сипатталған. Жұмыстың әдістемесі математикалық модельдің сипаттамасын қоса алғанда, қолданылатын әдістің ерекшелігін қамтиды. Қарастырылып отырған сүзгілердің материал құрамы мен қасиеттерінің сипаттамасы берілген. «Нәтижелер мен талқылаулар» бөлімінде сүзгілерсіз және сүзгілердің әртүрлі құрамы бар ССР-Қ реакторының көлденең тәжірибелік арнасының шығысындағы нейтрондардың кеңістіктік-энергетикалық таралуы бойынша есептеулердің нәтижелері берілген. Әрбір сүзгі түрінің нейтрон ағынының спектрлік сипаттамаларына әсері талданады, әрбір сүзгінің ерекшеліктері және оны қолданудың практикалық аспектілері келтірілген. Алынған нәтижелердің ССР-Қ реакторының нейтрондық сәулесінің сәулелену жағдайларын одан әрі оңтайландыру үшін маңыздылығы атап өтілді. Қорытындылай келе, ССР-Қ реакторында емдік нейтрондық сәулені құруға бағытталған зерттеулерді жалғастыру бойынша қысқаша қорытынды және болашаққа жоспарлар берілген.

Түйінді сөздер: бор нейтрондарын басып алу терапиясы, зерттеу реакторы, сәуле түзу қондырғысы, эпитемиялық спектр, жылу спектрі.

References

1. W.A. Sauerwein et al., Neutron capture therapy: principles and applications, Springer Science Business & Media (2012)
2. R.F. Barth et al., Boron neutron capture therapy of cancer: current status and future prospects, Clin. Canc. Res. 11 (2005) 3987. <https://doi.org/10.1158/1078-0432.CCR-05-0035>
3. [E. Bavarnegin, Y. Kasesaz; and F.M. Wagner Neutron beams implemented at nuclear research reactors for BNCT. Journal of Instrumentation Volume 12, May 2017 P05005 <https://doi:10.1088/1748-0221/12/05/P05005>
4. Moss, R.L., Stecher-Rasmussen, F., Ravensberg, K., Constantine, G., Watkins, P. (1992). Design, Construction and Installation of an Epithermal Neutron Beam for BNCT at the High Flux Reactor Petten. In: Allen, B.J., Moore, D.E., Harrington, B.V. (eds) Progress in Neutron Capture Therapy for Cancer. Springer, Boston, MA. https://doi.org/10.1007/978-1-4615-3384-9_11
5. [Bauyrzhan A.B., Koltochnik S.N., Aitkulov M.T., Dyussambayev D. S., Shaimerdenov A.A., Mukhametuly B., Burtbaev N.T. Neutron-physical parameters at the outlet of the WWR-K reactor beam tube // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2019, 3(3), 219-22. DOI: 10.29317/ejpfm.2019030303

6. D. Sairanbaev, S. Koltochnik, A. Shaimerdenov, M. Tulegenov, Y. Kenzhin, K. Tsuchiya Time History of Performance Parameters of WWR-K Reactor during Gradual Replacement of the Water Reflector by a Beryllium One // Russian Physics Journal. – Vol. 63, Issue 12. – 2021. – p. 2165-2177. DOI: 10.1007/s11182-021-02286-6]

7. Advances in boron neutron capture therapy / International Atomic Energy Agency, 2023, 433 p.

8. Koivunoro, H.; Kankaanranta, L.; Seppälä, T.; Haapaniemi, A.; Mäkitie, A.; Joensuu, H. Boron neutron capture therapy for locally recurrent head and neck squamous cell carcinoma: An analysis of dose response and survival. *Radiother. Oncol.* 2019, 137, 153–158. DOI: 10.1016/j.ijrobp.2010.09.057

9. MCNP6 User's Manual - Los Alamos National Laboratory, LA-CP-13-00634, 2013

10. M. B. Chadwick, M. Herman, P. Obložinský, M.E. Dunn, Y. Danon et al. "ENDF/B-VII.1: Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariance's, Fission Product Yields and Decay Data Library for Nuclear Science and Technology", *Nucl. Data Sheets*, Volume 110, (2011)

11. Brown D. A., Chadwick M. B., Capote R., Kahler A. C., Trkov A., Herman M.W. end et. al. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections. New Standards and Thermal Scattering Data. *Nuclear Data Sheets* 2018; (148): 1–142. DOI: 10.1016/j.nds.2018.02.001

12. Lan, T.L.; Chou, F.I.; Lin, K.H.; Pan, P.S.; Lee, J.C.; Huang, W.S.; Liu, Y.M.; Chao, Y.; Chen, Y.W. Using salvage Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) for recurrent malignant brain tumors in Taiwan. *Appl. Radiat. Isot.* 2020, 160, 109105. DOI: 10.1016/j.apradiso.2020.109105

13. Menéndez, P.; Pereira, M.; Casal, M.; González, S.; Feld, D.; Santa Cruz, G.; Kessler, J.; Longhino, J.; Blaumann, H.; Rebagliati, R.J.; et al. BNCT for skin melanoma in extremities: Updated Argentine clinical results. *Appl. Radiat. Isot.* 2009, 67, S50–S53. DOI: 10.1016/j.apradiso.2009.03.020

Сведения об авторах:

Несипбай А.Ж. – хат-хабар авторы, Атом энергиясының қауіпсіздік мәселелері зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Ядролық Физика Институты, Ибрагимова көш., 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Nessipbay A.Zh. – corresponding author, Junior Researcher at the Laboratory of Atomic Energy Safety Problems, The Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str, 050032, Almaty, Kazakhstan

Несипбай А.Ж. – автор для корреспонденции, младший научный сотрудник лаборатории проблем безопасности атомной энергии, Институт ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан.



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/>).



МРНТИ 29.15.53

Научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-153-161>

Анализ ширин полуплептонных распадов $\eta(1295, 1475)$ мезонов

К. Нурлан* 

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований,
Дубна, Россия

(E-mail: nurlan.qanat@gmail.com)

Аннотация. Исследованы распады возбужденных мезонов $\eta(1295)$ и $\eta(1475)$ с рождением векторных мезонов ρ , ω , φ и лептонной пары $e^+ e^-$ и $\mu^+ \mu^-$. Показано, что эти распады описываются контактной диаграммой с прямым рождением лептонной пары фотонным полем и диаграммой с промежуточными векторными полями ρ , ω и φ . Получены теоретические оценки для интегральных ширин распадов. Исследованы относительные роли каналов в определении ширин распадов. Показано, что распады с рождением электрон-позитронной пары главным образом определяются вкладом диаграммы с контактным взаимодействием. Каналы с векторными мезонами играют более важную роль в распадах мезонов $\eta(1295, 1475)$ с рождением мюонной пары. Вычислены матричные элементы, соответствующие кварковым петлям с вершинами $\eta V \gamma$ и $\eta V V$. Мезоны $\eta(1295)$ и $\eta(1475)$ рассмотрены как первые радиально-возбужденные состояния мезонов η и η' . Расчеты выполнены в одно петлевом кварковом приближении в ведущем порядке разложения $1/N_c$. Сделаны предсказания для ряда процессов, планируемых в будущих адронных фабриках. Результаты теоретических расчетов важны для понимания структуры мезонов и их взаимодействия полями адронов и лептонов. Полученные данные для распадов могут быть использованы в будущих высокопроизводительных η/η' мезонных фабриках. Реализация такой адронной фабрики планируется на протонном пучке в Фермилабе, где число событий ожидается на уровне 10^{14} для η - мезона, что на несколько порядков больше текущих экспериментов. Другая мезонная фабрика будет построена на выведенном канале ускорителя тяжелых ионов HIAF в Китае.

Ключевые слова: структура адронов, физика легких мезонов, мюонная пара, кварк, распад.

Поступила 04.10.2024 После доработки 24.10.2024. Принята к печати 25.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹*автор для корреспонденции

Введение

В последнее время в физическом обществе обсуждаются адронные фабрики для исследования физики за пределами Стандартной модели (СМ) и темной материи. До настоящего времени физики не наблюдают проявление новой физики на экспериментах на большом адронном коллайдере при энергиях нескольких ТэВ. Это может означать, что она слабо связана с материей СМ для обнаружения на коллайдерах и необходимо поднимать интегральные светимости установок. Коллаборация REDTOP (Rare Eta Decays To Observe Physics beyond the Standard Model) представила программу высокопроизводительной η/η' фабрики с фиксированной мишенью со светимостью $10^{34} \text{ см}^{-2} \text{ сек}^{-1}$ [1,2]. Данный эксперимент также направлен на высокоточные измерения ширины распадов мезонов η и η' . Конструкция и физическая программа будущей η -мезонной фабрики REDTOP представлена в работе [2]. Эксперимент REDTOP предлагается запустить либо в Фермилабе, либо в ЦЕРНе. Аналогичная супер η -фабрика планируется в Китае на выведенном канале ускорителя тяжелых ионов высокой интенсивности HIAF в Институте современной физики [4].

Исследование распадов η/η' мезонов имеет важное значение для проверки законов сохранения C , P , T , CP симметрии, а также позволяет изучить структуры η -мезонов и разницу масс легких u -, d - и s -кварков. Кроме того, точные измерения редких распадов η -мезонов обеспечат проверку низкоэнергетических феноменологических теорий квантовой хромодинамики [5-7]. В прошлом физика η -мезонов активно изучалась в эксперименте COSY [8]. В эксперименте CrystalBallat MAMI внутренние свойства η -мезонов определялись путем измерения реакции $\gamma p \rightarrow \eta p$ [9].

Вышеуказанные проведенные и планируемые эксперименты показывают важность теоретического изучения распадов η -мезонов. В настоящей работе мы представляем результаты для распадов η/η' -мезонов в основном и первом радиально-возбужденном состоянии с рождением пар $e^+ e^-$ и $\mu^+ \mu^-$. Вычислены матричные элементы распадов с учетом каналов прямого рождения лепенных пар и каналов с промежуточными векторными мезонами.

Методы

Анализ ширины распадов мезонов основывается на использовании эффективного Лагранжиана для взаимодействующих мезонных полей. Ниже приведен Лагранжиан взаимодействия η -мезонов с полями кварков [10]

$$L_{int} = \bar{q} i \gamma_5 [\lambda_u (A_\eta^u \eta + A_{\eta'}^u \eta' + A_{\hat{\eta}}^u \hat{\eta} + A_{\hat{\eta}'}^u \hat{\eta}') + \lambda_s (A_\eta^s \eta + A_{\eta'}^s \eta' + A_{\hat{\eta}}^s \hat{\eta} + A_{\hat{\eta}'}^s \hat{\eta}')] q, \quad (1)$$

где \bar{q} и q – поля кварковых дублетов, η и η' обозначены физические состояния мезонов в основном состоянии η и η' (958); $\hat{\eta}$ и $\hat{\eta}'$ соответствуют первым радиально-возбужденным состояниям η (1295) и η (1475)[11],

$$\begin{aligned}
 A_M^u &= g_{\eta_u} a_{1M}^u + g'_{\eta_u} a_{2M}^u f_{uu}(k^2), \\
 A_M^s &= g_{\eta_s} a_{1M}^s + g'_{\eta_s} a_{2M}^s f_{ss}(k^2).
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Значения констант связи кварковых полей с мезонами g_M взяты из работы [10]. $f_{qq}(k^2)$ – форм-фактор, введенный для описания возбужденных состояний мезонов, γ_5 – матрица Дирака.

Таблица 1 – Коэффициенты смешивания четырех состояний η -мезонов $a_{1,2M}^q$.

	η	η'	$\eta(1295)$	$\eta(1475)$
a_u^1	0.71	0.62	-0.32	0.56
a_u^2	0.11	-0.87	-0.48	-0.54
a_s^1	0.62	0.19	0.56	-0.67
a_s^2	-0.06	-0.66	0.30	0.82

При рассмотрении η -мезонов возникает известная $U_A(1)$ проблема. Она заключается в том, что в случае странных мезонов получается идеальное октет-синглетное смешивание, содержащие только легкие u -, d - кварки и чисто тяжелый s -кварк. Данная картина противоречит эксперименту. Поэтому необходимо рассмотреть смешивание η и η' -мезонов, что приводит к определению параметра угла смешиваний и правильному описанию спектра масс. В настоящей работе рассматриваются 4 состояния η , η' , $\eta(1295)$ и $\eta(1475)$, поэтому смешивание описывается матрицей, приведенный в таблице 1.

Для того, чтобы рассчитать основные распады возбужденных мезонов $\eta(1295)$ и $\eta(1475)$ в векторный мезон и лептонную пару, необходимо рассмотреть вершины $\eta\rho\gamma$, $\eta\omega\gamma$, $\eta\phi\gamma$ и электромагнитные переходы $\rho, \omega, \phi \rightarrow \gamma$.

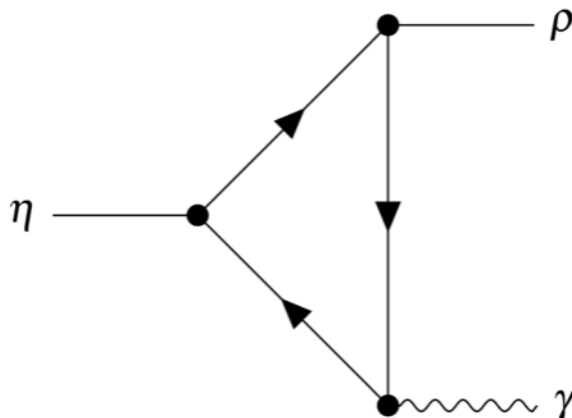


Рисунок 1. Аномальная кварковая диаграмма вершины $\eta\rho\gamma$.

Вершина $\eta\rho\gamma$ описывается петлей, изображенной на рисунке 1. Внутренние линии петли соответствуют кварковым полям. Кварковая диаграмма является аномального типа и не содержит расходимостей. Данная диаграмма описывается амплитудой

$$M(\eta\rho\gamma) = -i 4m_u I_{03}^{\eta\rho\gamma}(m_u) \varepsilon_{\mu\nu\tau\sigma} \varepsilon_\mu(\rho) \varepsilon_\nu(\gamma) p^\tau q^\sigma, \quad (3)$$

$$M(\eta\omega\gamma) = \frac{1}{3} M(\eta\rho\gamma).$$

где $I_{03}^{\eta\rho\gamma}(m_u)$ – интеграл, соответствующий вершине $\eta\rho\gamma$, имеет вид

$$I_{03}^{\eta\rho\gamma}(m_u) = -i N_c \int \frac{A_M^u(k^2) A_\rho(k^2) e}{[k^2 - m_u^2]^3} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4}, \quad (4)$$

где p – импульс ρ - или ω -мезона, q – импульс фотона, $\varepsilon_{\mu\nu\tau\sigma}$ – антисимметричный тензор, $\varepsilon_\mu(\rho)$ - и $\varepsilon_\nu(\gamma)$ - поляризации векторных частиц.

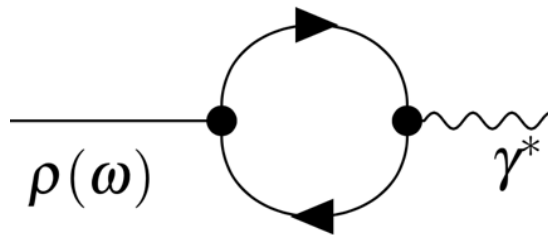


Рисунок 2. Двухвершинная кварковая диаграмма перехода $\rho \rightarrow \gamma$.

Переход векторного ρ -мезона в электромагнитное поле имеет вид (Рисунок 2)

$$\frac{e}{g_\rho} (g_{\mu\nu} q^2 - q_\mu q_\nu), \quad (5)$$

$\omega \rightarrow \gamma$ переход отличается от на фактор $1/3$.

Распад $\gamma \rightarrow e^+ e^-$ ($\mu^+ \mu^-$) описывается стандартным Лагранжианом квантовой электродинамики

$$ie\bar{\psi}\gamma_\mu\psi A_\mu \quad (6)$$

где e – заряд электрона, ψ – спиноры, A_μ – поле фотона.

Результаты и обсуждение

Распады $\eta(1295,1475) \rightarrow \rho(\omega) l^+ l^-$

Теперь у нас имеются все компоненты для описания полуплептонных распадов. Такие распады описываются вкладками диаграмм Фейнмана, изображенных на рисунках 3 и 4. В первой диаграмме аномальная вершина η рсвязывается с изолированным фотоном, переходящим в лептонную пару. Используя матричные элементы (3) и (6) для диаграммы на рис. 3, получим следующую амплитуду

$$M(\eta(1295) \rightarrow \rho\gamma \rightarrow \rho e^+ e^-) = \frac{4\pi\alpha}{s} 4m_u I_{03}^{\eta\rho} (m_u) \varepsilon_{\mu\nu\tau\sigma} \varepsilon_\mu(\rho) L_\nu p_\eta^\tau p_\rho^\sigma, \quad (7)$$

где $\alpha=1/137$ – константа тонкой структуры, $s=(p_+ + p_-)^2$, $L_\nu = e^- \gamma_\nu e^-$ – лептонный ток.

Диаграмма, изображенная на рисунке 4, имеет векторный мезон в промежуточном состоянии. Кроме того, в амплитуде (3) вместо фотона имеем вершину с двумя векторными мезонами $\eta\rho\rho$. В эту вершину, включив переход $\rho \rightarrow \gamma$, получим амплитуду

$$M(\eta(1295) \rightarrow \rho\rho \rightarrow e^+ e^-) = \frac{4\pi\alpha}{g_\rho} 4m_u I_{03}^{\eta\rho\rho} (m_u) \frac{C_\rho}{M_\rho^2 - s - iM_\rho\Gamma_\rho} \varepsilon_{\mu\nu\tau\sigma} \varepsilon_\mu(\rho) L_\nu p_\eta^\tau p_\rho^\sigma, \quad (8)$$

где $C_\rho \approx 0.93$ – константа, описывающая переход $\rho \rightarrow \gamma$.

Полный матричный элемент рассматриваемого распада записывается в виде суммы амплитуд (7) и (8). Матричные элементы для распадов $\eta(1295) \rightarrow \omega e^+ e^-$ [$\mu^+ \mu^-$] и $\eta(1475) \rightarrow \rho(\omega) e^+ e^-$ [$\mu^+ \mu^-$] получаются заменой вершин в Лагранжиане (1) и амплитуды с мезоном ω имеют фактор 1/3. Амплитуды с странным ϕ -мезоном отличаются от (7) и (8) на множитель $2m_s/3m_u$. Распады с рождением мюонной пары получаются заменой масс $M_e \rightarrow M_\mu$.

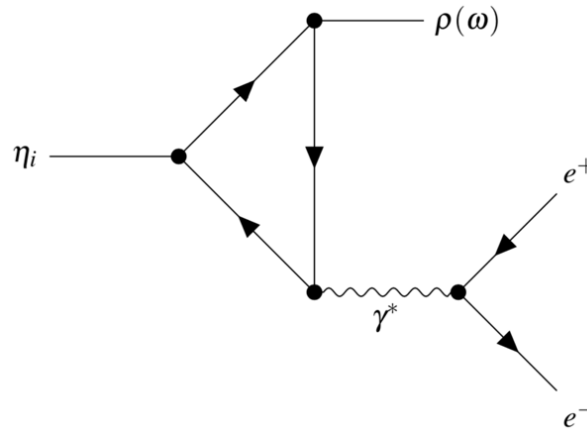


Рисунок 3. Кварковая диаграмма распада $\eta_i \rightarrow \rho e^+ e^-$, где $\eta_i = \eta(1295), \eta(1475)$.

Ширины трехчастичных распадов вычисляются по формуле

$$\Gamma(\eta_i \rightarrow \rho e^+ e^-) = \frac{1}{2} \frac{1}{256 \pi^3 M_\eta^3} \int_{s_-}^{s_+} ds \int_{t_-}^{t_+} dt |M(\eta_i \rightarrow \rho e^+ e^-)|^2, \quad (9)$$

где переменные Мандельштама определены в виде $s = (p_\eta - p_\rho)^2 = (p_e + p_{e^-})^2$, $t = (p_\eta - p_{e^+})^2 = (p_\rho + p_{e^-})^2$.

Пределы интегрирования принимают вид

$$s_+ = (M_\eta - M_\rho)^2, \quad s_- = 4 M_e^2 \quad 10)$$

$$t_{\pm}(s) = 1/2[M_\eta^2 + M_\rho^2 + 2M_e^2 - s \pm s^{-1} \sqrt{\lambda(s, M_e^2, M_e^2)\lambda(s, M_\rho^2, M_\eta^2)}],$$

где $\lambda(a, b, c) = (a - b - c)^2 - 4bc$.

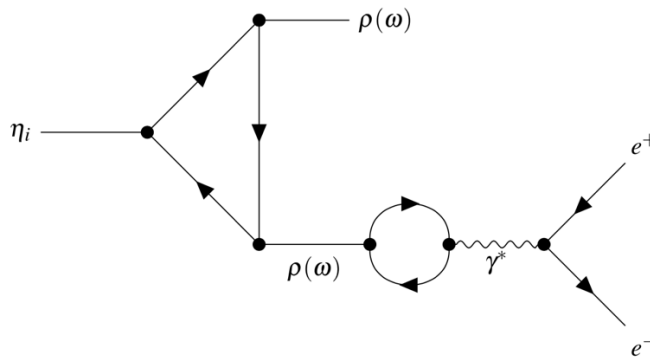


Рисунок 4. Кварковая диаграмма распада $\eta_i \rightarrow \rho^0 e^+ e^-$ с промежуточным векторным мезоном.

Вычисленные ширины распадов $\eta(1295) \rightarrow \rho(\omega) e^+ e^- [\mu^+ \mu^-]$ и $\eta(1475) \rightarrow \rho(\omega) e^+ e^- [\mu^+ \mu^-]$ приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Теоретические оценки для ширин распадов η -мезонов.

Распад	$\Gamma_{e^+e^-}$, кэВ	$\Gamma_{\mu^+\mu^-}$, кэВ
$\eta(1295) \rightarrow \rho^0 l^+ l^-$	19.02	1.07
$\eta(1295) \rightarrow \omega l^+ l^-$	2.03	0.10
$\eta(1295) \rightarrow \phi l^+ l^-$	1.33	2.73×10^{-3}
$\eta(1475) \rightarrow \rho^0 l^+ l^-$	0.015	0.548×10^{-3}
$\eta(1475) \rightarrow \omega l^+ l^-$	1.66×10^{-3}	5.73×10^{-5}
$\eta(1475) \rightarrow \phi l^+ l^-$	0.11	3.31×10^{-3}

Заключение

В настоящей работе исследованы распады возбужденных $\eta(1295)$ и $\eta(1475)$ мезонов с рождением векторного мезона и лептонную пару. Анализ полученных данных показывает, что в процессах с рождением электрон-позитронной пары ширина главным образом определяется вкладом контактной диаграммы (рис. 3). Диаграмма с промежуточным векторным мезоном играет важную роль в распадах с рождением $\mu^+ \mu^-$.

В настоящее время для рассмотренных распадов экспериментально измеренных ширин не имеются. Однако в планируемых экспериментах на будущих η -мезонных фабриках указанные распады будут измерены с высокой статистикой. Полученные в настоящей работе теоретические результаты следует рассматривать как предсказания

для планируемых экспериментов на мезонных фабриках в Фермилабе, ЦЕРНе и в Институте современной физики Китайской Академии наук.

Благодарность

Автор благодарит профессора **М.К. Волкова** за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, грант № BR20280986.

Список литературы

1. Aghasyan M. et al. [COMPASS], "Light isovector resonances in $\pi^- p \rightarrow \pi^- \pi^- \pi^+ p$ at 190 GeV/c," *Physical Review D*, 98, 092003 (2018). - **Journal Paper**
2. Gatto C. et al. [REDTOP], "The REDTOP project: Rare Eta Decays with a TPC for Optical Photons," *PoS ICHEP2016*, 812, 1–11 (2016). - **Conference Proceedings**
3. Gatto C. [REDTOP], "The REDTOP experiment: a low-energy meson factory to explore dark matter and physics beyond the Standard Model," *PoS CD2021*, 043, 1–11 (2024). - **Conference Proceedings**
4. Chen X. R., He X. H., Hu O. et al. "A plan for a super η factory at Huizhou accelerator complex," *arXiv:2407.00874*, 1–19 (2024). - **Preprint**
5. Gasser J., Leutwyler H. "Chiral Perturbation Theory to One Loop," *Annals of Physics*, 158, 142–210 (1984). - **Journal Paper**
6. Klevansky S. P. "The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics," *Rev. Mod. Phys.*, 64, 649–708 (1992). - **Journal Paper**
7. Ebert D., Reinhardt H., Volkov M. K. "Effective hadron theory of QCD," *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 33, 1–120 (1994). - **Journal Paper**
8. Smyrski J., Adam H.H., Budzanowski A. et al. "Measurement of the $dp \rightarrow He_3 \eta$ reaction near threshold," *Physics Letters B*, 649, 258–262 (2007). - **Journal Paper**
9. Unverzagt M. [Crystal Ball at MAMI], "Eta and eta-prime Physics at MAMI," *Nuclear Physics B Proceedings Supplements*, 198, 173–181 (2010). - **Conference Proceedings**
10. Volkov M.K., Yudichev V.L. "Radially excited scalar, pseudoscalar, and vector meson nonets in a chiral quark model," *Physics of Particles and Nuclei*, 31, 282–311 (2000). - **Journal Paper**
11. Navas S. et al. [Particle Data Group], "Review of particle physics," *Physical Review D*, 110, 030001 (2024). - **Journal Paper**

Қ. Нурлан*

Н.Н. Боголюбов атындағы теориялық физика лабораториясы,
Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей
(E-mail: nurlan.qanat@gmail.com)

$\eta(1295,1475)$ мезондарының жартылай лептонды ыдырау ендерін талдау

Аңдатпа. $\eta(1295)$ және $\eta(1475)$ қозған күйдегі мезондардың ρ , ω , ϕ векторлы мезон және $e^+ e^-$ немесе $\mu^+ \mu^-$ лептонды жұптары тууы арқылы жүзеге асатын ыдыраулары зерттелген. Аталған ыдыраулар фотон өрісі арқылы лептондық жұпты тікелей өндірумен байланысты диаграмма

және ρ, ω, φ аралық векторлық өрістері бар диаграммамен сипатталатыны көрсетілген. Ыдыраулардың интегралдық ендері үшін теориялық бағалаулар алынады. Ыдырау енін анықтаудағы арналардың салыстырмалы үлестері зерттелді. Электрондық-позитрондық жұптың түзілуімен өтетін ыдыраулар негізінен контактілі әрекеттесу бар диаграммамен анықталатыны көрсетілген. Мюон жұбының түзілуімен өтетін $\eta(1295, 1475)$ мезондардың ыдырауында векторлық мезондар бар арналар маңыздырақ рөл атқарады. $\eta V\gamma$ және ηVV шыңдары бар кварк диаграммаларына сәйкес келетін матрицалық элементтер есептелді. $\eta(1295)$ және $\eta(1475)$ мезондар η және η' мезондарының бірінші радиалды қозған күйлері ретінде қарастырылған. Есептеулер $1/N_c$ кеңеюінің жетекші ретті бір ілмекті кваркты жуықтауында орындалды. Болашақ адрон физикасы зерттелу жоспарланған бірқатар тәжірибиелерге болжамдар жасалған. Теориялық есептеулердің нәтижелері мезондардың құрылымын және олардың адрондар мен лептондар өрістерімен әрекеттесуін түсіну үшін маңызды. Ыдыраулар үшін алынған мәліметтер болашақта жоғары өнімді η/η' мезондар фабрикаларында қолданылуы мүмкін. Мұндай адрон фабрикасын іске асыру Фермилабтағы протон шоғында жоспарлануда және η - мезон тіркелу саны 10^{14} деңгейінде болады деп күтілуде. Бұл ағымдағы тәжірибиелермен салыстырғанда бірнеше деңгейге жоғары. Тағы бір мезондар фабрикасы Қытайдағы HIAF ауыр ионды үдеткішінде салынатын болады.

Түйін сөздер: адрондардың құрылымы, жеңіл мезон физикасы, мюон жұбы, кварк, ыдырау.

К. Нурлан*

Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics,

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow region, Russia

(E-mail: nurlan.qanat@gmail.com)

Analysis of semileptonic decay widths of $\eta(1295, 1475)$ mesons

Abstract. The decays of excited $\eta(1295)$ and $\eta(1475)$ mesons with the production of vector mesons ρ, ω, φ and a lepton pair $e^+ e^-$ and $\mu^+ \mu^-$ are investigated. It is shown that these decays are described by a contact diagram with direct production of a lepton pair by a photon field and a diagram with intermediate vector fields ρ, ω and φ . Theoretical estimates for the integral decay widths are obtained. The relative roles of the channels in determining the decay widths are investigated. It is shown that decays with the production of an electron-positron pair are mainly determined by the contribution of the diagram with contact interaction. Channels with vector mesons play a more important role in the decays of mesons $\eta(1295, 1475)$ with the production of a muon pair. The matrix elements corresponding to the quark loops with vertices $\eta V\gamma$ and ηVV are calculated. Mesons $\eta(1295)$ and $\eta(1475)$ are considered as the first radially excited states of mesons η and η' . The calculations are performed in the one-loop quark approximation in the leading order of the $1/N_c$ expansion. Predictions are made for a number of processes that are planned to be carried out in the future at hadron factories. The results of theoretical calculations are important for understanding the structure of mesons and their interaction with hadron and lepton fields. The obtained decay data can be used in future η/η' meson factories. The implementation of such a hadron factory is planned at the Fermilab proton beam where the number of events is expected to be at the level of 10^{14} for the η - meson which is several orders of magnitude higher than current experiments. Another meson factory will be built at the HIAF heavy ion accelerator in China.

Keywords: structure of hadrons, physics of light mesons, muon pair, quark, decay.

References

1. Aghasyan M. et al. [COMPASS], "Light isovector resonances in $\pi^- p \rightarrow \pi^- \pi^- \pi^+ p$ at 190 GeV/c," *Physical Review D*, 98, 092003 (2018).
2. Gatto C. et al. [REDTOP], "The REDTOP project: Rare Eta Decays with a TPC for Optical Photons," *PoS ICHEP2016*, 812, 1–11 (2016).
3. Gatto C. [REDTOP], "The REDTOP experiment: a low-energy meson factory to explore dark matter and physics beyond the Standard Model," *PoS CD2021*, 043, 1–11 (2024).
4. Chen X.R., He X.H., Hu O. et al. "A plan for a super η factory at Huizhou accelerator complex," *arXiv:2407.00874*, 1–19 (2024).
5. Gasser J., Leutwyler H. "Chiral Perturbation Theory to One Loop," *Annals of Physics*, 158, 142–210 (1984).
6. Klevansky S. P. "The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics," *Rev. Mod. Phys.*, 64, 649–708 (1992).
7. Ebert D., Reinhardt H., Volkov M. K. "Effective hadron theory of QCD," *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 33, 1–120 (1994).
8. Smyrski J., Adam H. H., Budzanowski A. et al. "Measurement of the $dp \rightarrow He_3 \eta$ reaction near threshold," *Physics Letters B*, 649, 258–262 (2007).
9. Unverzagt M. [Crystal Ball at MAMI], "Eta and eta-prime Physics at MAMI," *Nuclear Physics B Proceedings Supplements*, 198, 173–181 (2010).
10. Volkov M. K., Yudichev V. L. "Radially excited scalar, pseudoscalar, and vector meson nonets in a chiral quark model," *Physics of Particles and Nuclei*, 31, 282–311 (2000).
11. Navas S. et al. [Particle Data Group], "Review of particle physics," *Physical Review D*, 110, 030001 (2024).

Information about the authors:

Нурлан К. – автор для корреспонденции, PhD, научный сотрудник Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980, Россия.

Nurlan K. – corresponding author, PhD, researcher at Bogoliubov laboratory of theoretical physics, Joint institute for nuclear research, 141980 Dubna, Russia

Нурлан К. – хат-хабар авторы, PhD, Н.Н. Боголюбов атындағы теориялық физика лабораториясы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, 141980, Ресей.



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 29.19.22

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-162-177>

Ғылыми мақала

Жоғары энтропиялы $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu \text{ немесе } Ce)_xAl_5O_{12}$ қосылыстарының синтезі мен оптикалық қасиеті

С.А.Пазылбек*¹, А.Карейва², О. Шалхар², Б.Е. Жакипбаев³, Д.К. Ескермесов⁴,
Б.З. Әбдіқадыр⁵, М.Т. Катбаева¹, К.Ж. Мүтәлі¹

¹Ж.А. Тәшенев атындағы Университет, Шымкент, Қазақстан

²Вильнюс университеті, Вильнюс, Литва

³Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті, Шымкент, Қазақстан

⁴Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Өскемен, Қазақстан

⁵Ө. Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан

(E-mail: ¹sapargali.pa@gmail.com)

Аңдатпа. Золь-гель әдісімен синтезделген жаңа жоғары энтропиялы ($Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu \text{ немесе } Ce)_xAl_5O_{12}$; $x=0.06, 0.09, 0.12$) гранат кристалдық құрылымы бар қосылыстардың ұнтақты рентгендік дифракциялық талдау (XRD) нәтижелері бір фазалы кубтық құрылым екенін көрсетті. Гранаттық құрылымның монокристалдық қосылыстарының XRD талдау нәтижелеріне сәйкес Ca^{2+} , Li^+ және Eu^{3+} , Ce^{3+} иондары мөлшерінің артуымен гранаттық фазасы негізгі кристалдық фаза ретінде анықталады. Синтезделген үлгілердің рентгендік дифракциялық талдауларының нәтижелерін инфрақызыл (FT-IR)-спектроскопиялық деректері толықтай растайды. FT-IR спектрлерінің $1000-400 \text{ см}^{-1}$ аймағында гранаттарға тән қарқынды шыңдар барлық үлгілер үшін бірдей көрінді. Гранаттардың $1000-400 \text{ см}^{-1}$ аймағында бөлінген бірнеше қарқынды шыңдар тетраэдрлік бірліктердің созылу режимін сипаттайды. Жоғары энтропиялы гранаттардың сканерлік электрондық микроскоп (СЭМ) көмегімен алынған беттік морфологиясы барлық үлгілер үшін өте ұқсас болып және көлемді дәндер сфералық бөлшектерден тұрып, олардың орташа өлшемі шамамен $50-120 \text{ нм}$ болды. Есептелген ұяшық параметрлері алмастыру деңгейінде ешқандай үдеріссіз $12.316-12.322 \text{ нм}$ аралығында болды, яғни жоғары энтропиялы гранат материалдарының түзілгендігін нақтылай түседі. Әр түрлі қоспалары бар гранат құрылым қосылыстарының нақты химиялық құрамы ICP-OES әдісі бойынша анықталды. Қозу және жарық шығару спектрлері бойынша золь-гель әдісі жоғары энтропиялы гранат кристалдық құрылымы бар қосылыстарды дайындауға тиімді және олар жаңа фосфорларды жасау үшін матрица ретінде қолдануға болады.

Түйін сөздер: Золь-гель, гранат, XRD, жоғары энтропия, рентген, дифракция.

Жіберілді 16.10.2024. Өзгертілді 24.10.2024. Қабылданды 19.11.2024. Онлайн қол жетімді 25.12.2024

¹* хат-хабар авторы

Кіріспе

Қатты күйдегі лазерлер мен талшықты-оптикалық телекоммуникациялық жүйелерде белсенді орта ретінде қызмет ететін маңызды материалдың бірі ретінде құрамында өтпелі металл немесе лантаноид элементі (Ln) бар иттрий алюминий гранаты ($Y_3Al_5O_{12}$, YAG) болып табылады. Сиреккездесетін жер иондарымен белсендірілген YAG оксидтері катодты-сәулелік түтікшелерде (проекциялық теледидарда), өріс эмиссиясында, вакуумдық флуоресцентті және электролюминесцентті дисплейлерде фосфор ретінде және Рентген мен позитронды-эмиссиялық томографияда сцинтиллятор ретінде кеңінен қолданылады [1,2].

Цериймен белсендірілген YAG-ақ жарық диодтарындағы (жарық шығаратын диодтар) «сары» фосфор ретінде айтарлықтай назар аударуда [3]. Сондықтан қазіргі кезеңде YAG:Ce коммерциялық ақ жарық шығаратын диодты шамдардағы таңдаулы фосфор болып саналады. Негізінде фосфор классикалық оксидті балқыту процесі арқылы алынады [4]. YAG:Ce төменгі температурада алу арзан әдіс болып саналғандықтан аса қатты қызығушылық туғызды [5-8]. Лантаноидтармен белсендірілген YAG-тың люминесценциялық қасиеттері белсендіргіштің құрамы мен концентрациясына да өте сезімтал екенін көрсетті [9-12]. Сонымен қатар гранаттардың физикалық қасиеттері белсендіргіштің табиғаты мен концентрациясына ғана емес, олардың фазалық тазалығына да байланысты екені белгілі [13,14]. Мәселен, әртүрлі әдістермен синтезделген YAG:Ce үлгілері үшін әртүрлі морфология байқалды [6]. Атап айтқанда, Ce^{3+} -көбірек қосылғанда YAG кристаллдарының қарқынды люминесценциясы байқалады. Сонымен қатар, кішігірім мөлшері бар үлгілердің жарық шығару спектрлері Ce^{3+} зонасының қызыл ығысуын көрсетті. Керісінше, [15,16] авторлары әр түрлі әдістермен синтезделген лантаноидтармен белсендірілген YAG үлгілерінің морфологиясы ұқсас екенін көрсетті.

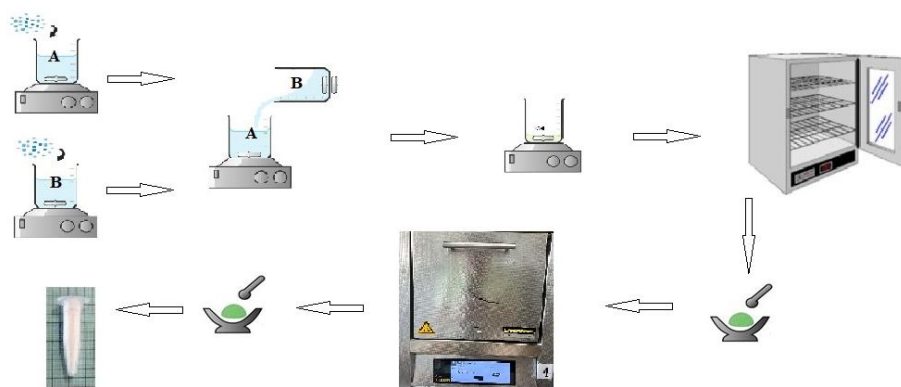
Алайда, люминесценцияның өзгеруі YAG:Tb қоспағанда әртүрлі алынған үлгілердегі қарқындылық анықталды. Морфологиялық тұрғыдан алғанда, тек YAG кристалды және аморфты күйлері шығару спектрлерінде айырмашылықтарды көрсетті, ал үлгілерде Ln^{3+} жарық шығаруының спектрлік ығысуы байқалмады. [6] сілтемеден айырмашылығы күшті фотолюминесценция (PL) кішігірім мөлшерде Eu^{3+} - белсендірілген YAG кристалдарында байқалды [17,18].

YAG мен YGG ($Y_3Ga_5O_{12}$, YGG) текше гранат құрылымында кристалданады, оның жалпы формуласы $A_3B_2C_3O_{12}$: A, B және C катиондары сәйкесінше оттегімен 8-, 6-және 4 есе үйлестірілген [19]. B және C учаскелерін алып жатқан Ga^{3+} иондары Al^{3+} иондарынан үлкен болғандықтан (Al^{3+} : 0,535 және 0,39 Å, Ga^{3+} : 0,620 және 0,47 Å, сәйкесінше 6 және 4 есе үйлестіру үшін [20]), RE3Ga5O12 гранаталары RE3Al5O12-дегі RE = Gd-Лумен салыстырғанда RE = Nd-Lu кең аймағында тұрақты болады [19].

Әдіснама

$Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ және $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ ($x=0.06,0.09,0.12$) гранат үлгілері золь-гель әдісімен синтезделді. Бастапқы гельдер аналитикалық сортты реагенттердің

стехиометриялық мөлшерін қолдану арқылы дайындалды, атап айтқанда: иттрий нитратының гидраты $Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, кальций нитратының гидраты $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$, литий нитраты $LiNO_3$ және церий нитратының гидраты $Ce(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, еуропий оксиді Eu_2O_3 , сонымен қатаргаллий оксиді Ga_2O_3 немесе алюминий нитратының наногидраты $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$. Лимон қышқылы $C_6H_8O_7 \cdot H_2O$ комплексті құрушы ретінде таңдалды, ал азот қышқылы NO_3 еріткіш ретінде пайдаланылды. Бірінші галлий оксиді 3 мл концентрацияланған азот қышқылы HNO_3 бар 100 мл дисстиляцияланған суда ерітілді. Әрі қарай, кальций, литий және церий мен еуропий нитраттары оксиді бар ерітіндіге біртіндеп ерітілді. Лайланған ерітіндіні 5 сағат бойы $200^\circ C$ температурада көрінетін шыны қақпақпен жабылған стаканға араластырып қыздырылды. Бұл ерітіндіге үздіксіз араластыра отырып, лимон қышқылы (молярлық қатынасы 1:1) қосылды. Ерітінділерді баяу булану арқылы (~ 10 сағ) $140^\circ C$ температурада стаканды ашып араластырғаннан кейін мөлдір $Y-Ca-Ce/Eu-Li-Al-O$ ерітінділері мөлдір гельдерге айналды. Пеште кептірілген ($150^\circ C$) гель ұнтақтары ағаттан жасалған ұнтақтағышта ұнтақталып, сазбалшықтан (топырақта болатын алюминий тотығы) жасалған тигельдеріне салынып, ауада $1000^\circ C$ температурада 5 сағат қыздырылды (қыздыру жылдамдығы $5^\circ C/мин$). Әр түрлі химиялық құрамы бар гранаттардың золь-гель синтезі бойынша жасалған сызбасы 1-суретте келтірілген.



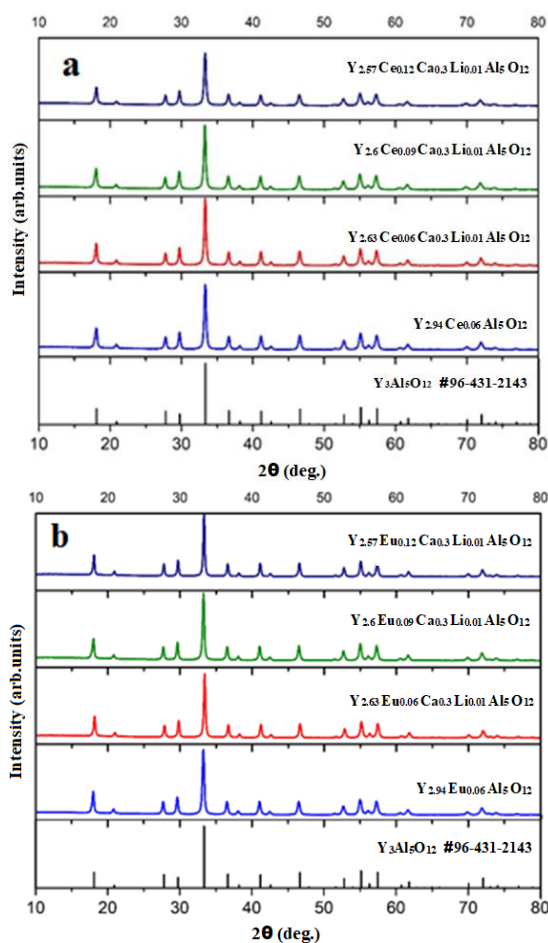
Сурет 1. Әр түрлі химиялық құрамы бар гранаттардың золь-гель синтезінің сызбасы

Рентгендік дифракцияны (XRD) зерттеу $Cu\ K\alpha$ ($\lambda = 1,5408 \text{ \AA}$) сәулеленуін қолдана отырып, Rigaku D/max-2000 Рентгендік дифрактометрінде жүргізілді. Инфрақызыл спектрлері ATR аксессуары бар Perkin Elmer Spectrum TWO FTIR спектрофотометрі көмегімен алынды. Синтездеп алынған үлгілердің морфологиясы Hitachi SU-70 сканерлеуші электрондық микроскоп (FE-SEM) арқылы алынып, талдау жасалды. VUV (Edinburgh Instruments FS920) спектрометрі фосфордың люминесценциясын алу үшін қолданылды. Спектрометрдің қозу көзі ретінде Acton Research Corporation (ARC) компаниясының VUV монохроматоры VM504 және дейтерий шамы жабдықталған. VUV су мен оттегінің жұтылуына жол бермеу үшін сынама камерасы кептірілген азотпен шайылды. Қозу (қозу саңылауы 1 мм, жарық шығару саңылауы 2 нм) және жарық шығару (қозу саңылауы 2 мм, жарық шығару саңылауы 1 нм) спектрлері сәйкесінше

150-375 нм және 200-800 нм аралығында тіркелді. Жарық шығару спектрлері ҰФЗ (Ұлттық Физикалық Зертхана, Ұлыбритания) сертификаты бар вольфрам қыздыру шамынан алынған түзету файлы арқылы түзетілді. Үлгілердің салыстырмалы VUV қозу қарқындылығы үлгілердің өлшенген қозу спектрлерін натрий салицилатының ($o\text{-C}_6\text{H}_4\text{ONCOONa}$) қозу спектрімен бөлу арқылы түзетілді.

Нәтижелер және талқылау

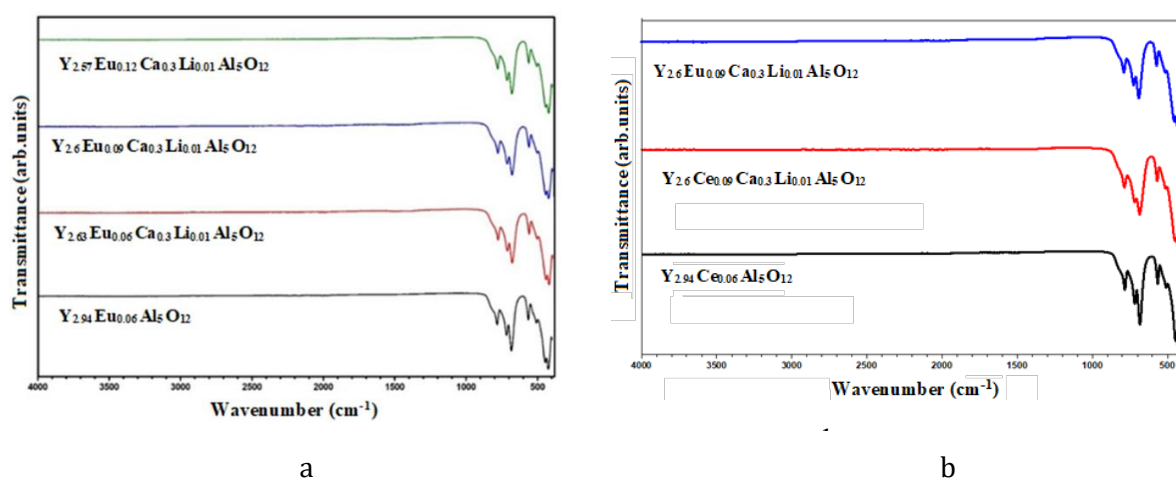
$Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (а) және $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ (б) ($x=0.06, 0.09, 0.12$) үлгі ұнтақтарынан алынған рентгендік XRD дифрактограммасы 2-суретте келтірілген. Алынған үлгілер салыстыру үшін берілген анықтамалық үлгілермен үйлесімді жақсы сәйкес келеді. Барлық синтезделген материалдар бір фазалы болып табылады, бұл YAG жүйелерінде толық қатты ерітінділер алынатынын көрсетеді. Біз ойлағандай октаэдрлік және тетраэдрлік тор бөліктерінде орналасқан Al әртүрлі иондық радиустарына байланысты шың күйінде кейбір өзгерістер бар. Al рентгендік шашырау қуатының әртүрлі болуына байланысты XRD үлгілеріндегі ең жоғары қарқындылықтар да аздап өзгереді [21].



Сурет 2. Ауада 5 сағат бойы 1000 ° C температурада синтезделген

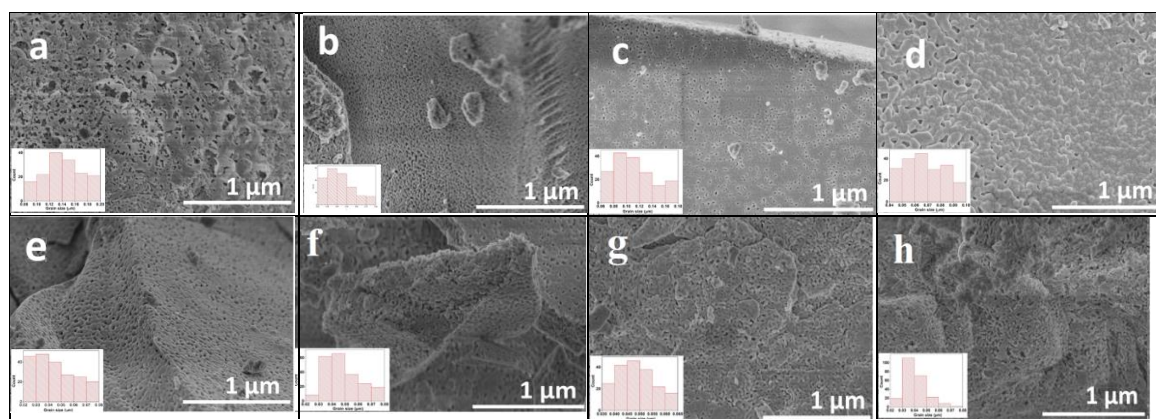
$Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (а) және $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ (б) ($x=0.06,0.09,0.12$) үлгілерінің рентгендік дифрактограммасы

1000 С температурада 5 сағат күйдіргеннен кейін алынған $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (а) және $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ (б) ($x=0.06,0.09,0.12$) үлгілерінің ИҚ спектрлері 3-суретте келтірілген. Барлық IR спектрлерінде 500-900 cm^{-1} аймағында бірнеше қарқынды жұтылу жолақтарын көруге болады. Негізгі ерекшелікті болатын гранат құрылымындағы оқшауланған $[AlO_4]$ тетраэдрдің және $[AlO_6]$ октаэдрлік бірліктердің созылу режимдеріне жатқызуға болады [14, 22, 23], яғни бұл жолақтар кристалды YAG түзілуіне сәйкес келеді. Әдебиеттерге сәйкес, бұл шыңдар гранат құрылымының додекаэдрлік бірліктеріндегі металл оттегінің қозуына да сәйкес келуі мүмкін [24,25].



Сурет 3 $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (а) және $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ (б) ($x=0.06,0.09,0.12$) үлгілерінің ИҚ спектрлері

Золь-гель әдісінің көмегімен 1000°C температурада синтезделген $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}Ce_x$ мен $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}Eu_x$ ($x=0.06,0.09,0.12$) гранаттарының морфологиялық ерекшеліктері 4-суретте көрсетілген. СЭМ деректерін талдау беттік морфологияны, сондай-ақ бөлшектердің орташа өлшемін бағалауға мүмкіндік берді. Синтезделген көп компонентті гранаттардың беттік-микроқұрылымдық ерекшеліктері химиялық құрамының өзгеруінен тәуелсіз екендігі бір-бірімен тығыз орналасқан бөлшектер арасындағы байланыс арқылы өте жақсы көрінеді. Сонымен қатар СЭМ кескіндерінен жеке сфералық бөлшектердің бір-бірімен байланысып, нано түйіршікті желіні құрайтынын көруге болады. Бөлшектердің өлшемі ImageJ бағдарламалық жасақтаманың көмегімен бағаланды және синтезделген гранаттардың химиялық құрамына байланысты өлшемі шамамен 50-120 нм болатын сфералық бөлшектерден тұратындығы анықталды. Осы жаңа қосылыстардың құрылымына басқа лантаноид элементтерін енгізу арқылы беттік морфология өзгеріссіз қалатындығын көруге болады.



Сурет 4. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$ (a):Ce_x-a)x=0.12; b) x=0.09; c) x=0.06; d) $Y_{2,94}Al_5O_{12}Ce_{0,06}$; $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12};Eu_x$ -e)x=0.12; f) x=0.09; g) x=0.06; h) $Y_{2,94}Al_5O_{12}Eu_{0,06}$ үлгілернің СЭМ суреттері

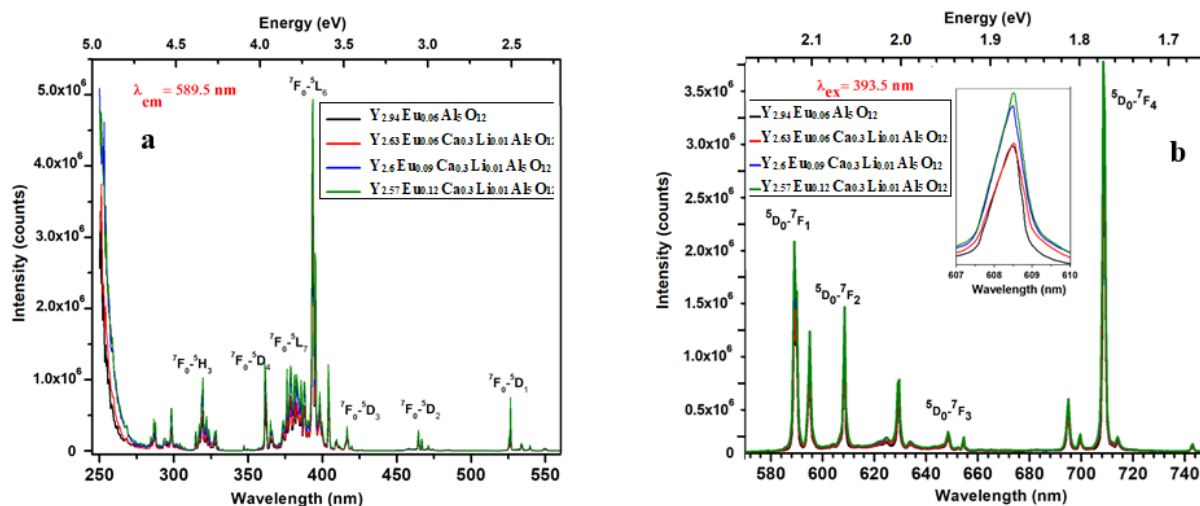
Есептелген ұяшық параметрлері алмастыру деңгейінде ешқандай үдеріссіз 12.316–12.322 нм аралығында болды, яғни жоғары энтропиялы гранат материалдарының түзілгендігін нақтылай түседі. Әр түрлі қоспалары бар гранат құрылым қосылыстарының нақты химиялық құрамы ICP-OES әдісі бойынша анықталды. Алынған нәтижелер синтезделген үлгілердің номиналды құрамымен жақсы үйлесімде болды. Барлық қосылыстардың ұяшық параметрлері, бөлшектер мен кристаллит өлшемдері 1-кестесінде көрсетілген. Алмастыру кезінде ұяшық параметрлері және бөлшектер мен кристаллит өлшемдерінің өзгеруінің айқын көрінетін үдерісі байқалмады.

Кесте 1. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ пен $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (x=0.06,0.09,0.12) қосылыстарының ұяшық параметрлері, бөлшектер мен кристаллит өлшемдері

№	Үлгі	Ұяшық параметрі(Å)	Бөлшектердің өлшемі (нм)	Кристаллит өлшемі (нм)
1.	$Y_{2,94}Eu_{0,06}Al_5O_{12}$	12.316	41	34.7
2.	$Y_{2,63}Eu_{0,06}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.315	45	34.2
3.	$Y_{2,6}Eu_{0,09}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.322	44	33.7
4.	$Y_{2,57}Eu_{0,12}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.318	45	34.5
5.	$Y_{2,94}Ce_{0,06}Al_5O_{12}$	12.321	42	33.4
6.	$Y_{2,63}Ce_{0,06}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.317	55	33.4
7.	$Y_{2,6}Ce_{0,09}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.317	61	32.9
8.	$Y_{2,57}Ce_{0,12}Ca_{0,3}Li_{0,01}Al_5O_{12}$	12.318	48	31.3

5-суретте $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ (x=0.06,0.09,0.12) үлгілерінің қозу мен жарық шығару спектрлері бейнеленген. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ үлгілерінің қозуы 589,5 нм бөлме температурасында бақыланды. Қозу спектрлерінде Eu^{3+} иондарының 4f-4f электронды

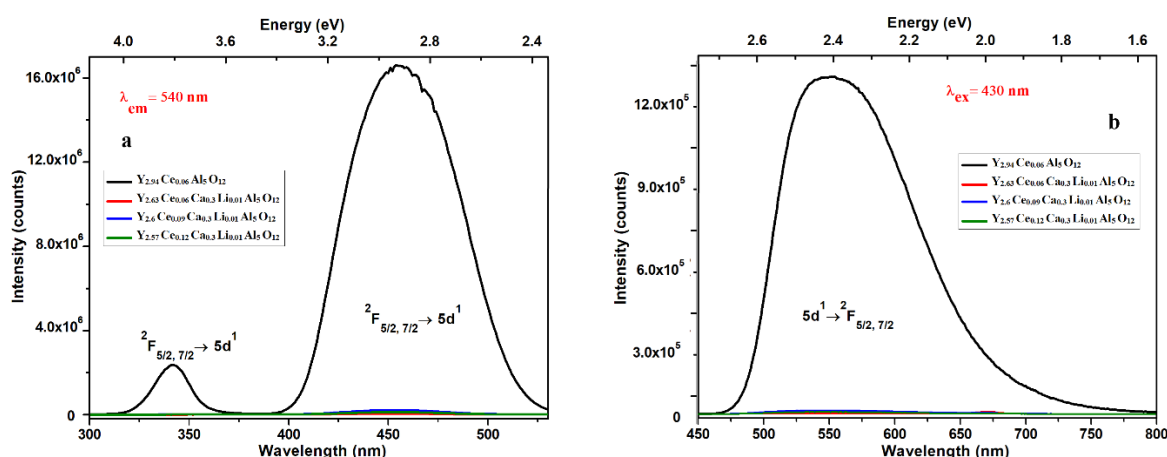
ауысуларымен байланысты бірнеше қарқынды өткір сызықтар бар, олардың максимумы 393,5 нм (7F0/5L6 ауысулары), бұл бұрын жарияланған нәтижелермен жақсы сәйкес келеді [26].



Сурет 5. Y_{2.69-x}Ca_{0.3}Li_{0.01}Eu_xAl₅O₁₂ (x=0.06,0.09,0.12) үлгілерінің қозу мен жарық шығару спектрлері

Эмиссия спектрлері 5D0/7F4 ауысуларына байланысты қарқындылығы 708 нм болатын Eu³⁺ иондарының шыңдарының сипаттамасынан тұрады. Көріп отырғанымыздай, кальций мен литиймен алмастырылған Y_{2.57}Ca_{0.3}Li_{0.01}Eu_{0.12}Al₅O₁₂ үлгісінің жарық шығару қарқындылығы еуропий мөлшерін 4%-тен 12%-ға дейін артырған сайын монотонды түрде артып, ең қарқынды жарық шығару Y_{2.57}Ca_{0.3}Li_{0.01}Eu_{0.12}Al₅O₁₂ үшін байқалады. Алайда Eu³⁺ пен белсендірілген YAG құрылымына Ca²⁺ мен Li⁺ ды енгізу арқылы жарық шығарулардың ығысуы байқалмады, өйткені зерттелген аралас металл алюминий гранаттарында қоспалардың фазалары болмаған [27].

Y_{3-x-y-z}Ca_xLi_{0.01}Ce_zAl₅O₁₂ үлгілернің қозу мен жарық шығару спектрлері 6-суретте келтірілген. Барлық үлгілер 470-750 нм аймағында жалпақ жасыл-сары жарық шығару жолағын көрсетті, шыңның максимумы шамамен ~555 нм толқын ұзындығында орналасқан, яғни ол қозған 5d күйінен Ce³⁺-дің екі негізгі ²F_{7/2} және ²F_{5/2} күй конфигурациясына ауысқанда пайда болады [28]. Атап айтқанда, Y_{3-x-y-z}Ca_xLi_{0.01}Ce_zAl₅O₁₂ құрамындағы екі валентті кальций мен бір валентті литий иондары иттрийді алмастырғанда жарық шығарудың қарқындылығы күрт төмендейтінін көруге болады. YAG-дағы кристалдық өріс кубтық Y₃Al₅O₁₂ торының жоғары симметриясына байланысты күшті болады. Ұнтақ түріндегі YAG:Ce фосфорларындағы жолақтардың ерекше орындары және екі компоненттің салыстырмалы қарқындылығы үлгіні алудың технологиясы [15] мен температурасына [29] байланысты болады.



Сурет 6. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ ($x=0.06, 0.09, 0.12$) үлгілерінің қозу мен жарық шығару спектрлері

Қорытынды

Біз зерттеуімізде золь-гель әдісімен синтезделген $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ пен $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ ($x=0.06, 0.09, 0.12$) жаңа химиялық құрамы бар поликристалды жоғары энтропиялы гранат кристалдарының құрылымдық қосылыстарын көрсеттік. Қажетті біртекті гельдерді металл иондарын лимон қышқылымен комплекстеу арқылы алынды. Гранаттық құрылымның монокристалдық қосылыстарының XRD талдау нәтижелеріне сәйкес Ca^{2+} , Li^+ және Eu^{3+} , Ce^{3+} иондарының мөлшерінің ұлғаюы мен гранаттық фазасы негізгі кристалдық фаза ретінде анықталды. Рентгендік дифракцияның талдауларының нәтижелерін FTIR-спектроскопиялық деректері толықтай растады. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ пен $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ ($x=0.06, 0.09, 0.12$) үлгілері үшін FTIR спектрлерінің 1000-400 см⁻¹ аймағында гранаттарға тән қарқынды шыңдары болып, барлығында бірдей дерлік болды. Гранаттардың 1000–400 см⁻¹ аймағында бөлінген бірнеше қарқынды шыңдар тетраэдрлік бірліктердің созылу режимін сипаттайды. Синтезделген гранаттарының беттік морфологиясы барлық үлгілер үшін өте ұқсас болды және көлемді дәндер сфералық бөлшектерден тұрып, олардың орташа өлшемі шамамен 50-120 нм болды. $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Eu_xAl_5O_{12}$ пен $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}Ce_xAl_5O_{12}$ (2 ($x=0.06, 0.09, 0.12$)) гранаттарының қозу және жарық шығару спектрлері бойынша золь-гель әдісі жоғары энтропиялы гранат кристалдық құрылымы бар қосылыстарды дайындауға жарамды, яғни олар жаңа фосфорларды жасау үшін матрица ретінде пайдаланылады деген қорытынды жасауға болады.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Авторлар Вильнюс университеті, Химия және геоғылымдар факультеті ұжымына (Вильнюс, Литва) ғылыми-зерттеу жұмыстарын жүргізуге көмек бергені үшін алғыс білдіреді. Авторлар олардың мүдделер қақтығысы жоқ екенін баяндайды.

Авторлардың қосқан үлесі

Пазылбек С.А. – түпнұсқа мәтінді жазу, авторлық қадағалау, зерттеу;

Карейва А. – тұжырымдамалау, ресурстар, зерттеу;

Шалхар О., Жакипбаев Б.Е., Ескермесов Д.К., Әбдіқадыр Б.З. – зерттеу, әдістеме, тұжырым-дамалау;

Катбаева М.Т., Мүтәлі К.Ж. – зерттеу, визуализация, редакциялау.

Әдебиеттер тізімі

1. William M. Yen, Shionoya Sh. Phosphor Handbook, CRC Press, Boca Raton, Boston, London, New York, Washington, DC (1999) – **кітап**
2. Carel W.E. "Inorganic-scintillator development," *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 2001, 460(1), 1-14. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(00\)01088-3](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(00)01088-3). - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
3. Shur M.S., Žukauska A. "Solid-State Lighting: Toward Superior Illumination," *Proc. IEEE*, 2005, 93(10), 1691-1703. DOI: <https://doi.org/10.1109/JPROC.2005.853537>.
4. Bogner G., Debray A., Heidel G., Hoehn K., Muller U., Schlotter P. "Structural and Optical Design," *Proc. SPIE. Int. Soc. Opt. Eng.*, 1999, 3621, 143.
5. Veith M., Mathur S., Kareiva, A., Jilavi M., Zimmer M., Huch V. "Low temperature synthesis of nanocrystalline Y3Al5O12 (YAG) and Ce-doped Y3Al5O12 via different sol-gel methods," *J. Mater. Chem.*, 1999, 9, 3069-3079. DOI: <https://doi.org/10.1039/A903664D>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
6. Pan Y., Wu M., Su Q. "Structural and Luminescence Properties," *Mater. Sci. Eng. B.*, 2004, 106, 251-256. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2003.09.031>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
7. Xia G., Zhou S., Zhang J., Xu J. "Structural and Optical Properties of YAG:Ce3+ Phosphors by Sol-Gel Combustion Method," *J. Crystal Growth.*, 2005, 279, 357-362. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2005.01.072>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
8. Jia D., Wang Y., Guo X., Li K., Zou Y.K., Jia W. "Synthesis and Characterization of YAG:Ce3+ LED Nanophosphors," *J. Electrochem. Soc.*, 2007, 154, J1. DOI: <https://doi.org/10.1149/1.2372589>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
9. Gupta C.S. "Effect of copper doping on phosphorescence of CaS:Er phosphors," *Ind. J. Phys.*, 2001, 75A, 135-141. DOI: <https://www.iacs.res.in/ijp/preva.html>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
10. Leleckaite A., Kareiva A., Bettentrup H., Jüstel T., Meyer H.-J. "Sol-Gel Preparation and Characterization of Codoped Yttrium Aluminium Garnet Powders," *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 2005, 631, 2987. DOI: <http://www3.interscience.wiley.com>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
11. Kasuya R., Isobe T., Kuma H., Katano J. "Photoluminescence enhancement of PEG-modified YAG:Ce3+ nanocrystal phosphor prepared by glycol thermal method," *J. Phys. Chem. B.*, 2005, 109, 22126-22130. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp052753j>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
12. Kasuya R., Isobe T., Kuma H. "Glycothermal synthesis and photoluminescence of YAG:Ce3+ nanophosphors," *J. Alloys Compds.*, 2006, 408, 820-823. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.01.066>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
13. Hreniak D., Streck W. "Synthesis and Optical Properties of Nd3+-Doped Y3Al5O12 Nanoceramics," *J. All. Comp.*, 2002, 341, 183-186. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388\(02\)00067-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388(02)00067-1). - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
14. Leleckaite A., Kareiva A. "Synthesis of garnet structure compounds using aqueous sol-gel processing," *Opt. Mater.*, 2004, 26, 123. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2003.11.009>. - **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

15. Zhou Y., Lin J., Yu M., Wang S., Zhang H. "Synthesis-dependent luminescence properties of $Y_3Al_5O_{12}:Re^{3+}$ (Re=Ce, Sm, Tb) phosphors," *Mater. Lett.*, 2002, 56, 628-636. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-577X\(02\)00567-0](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(02)00567-0). – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
16. Zhou Y., Lin J., Yu M., Wang S. "Comparative study on the luminescent properties of $Y_3Al_5O_{12}:RE^{3+}$ (RE: Eu, Dy) phosphors synthesized by three methods," *J. Alloys Compds.*, 2004, 375, 93-97. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2003.10.057>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
17. Hsu W.T., Wu W.H., Lu C.H. "Structural and Luminescent Properties," *Mater. Sci. Eng. B.*, 2003, 104, 40. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
18. Lu C.H., Hsu W.T., Dhanaraj J., Jagannathan R. "Sol-Gel Pyrolysis and Photoluminescent Characteristics of Europium-Ion Doped Yttrium Aluminum Garnet Nanophosphors," *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2004, 24, 3723. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2003.12.009>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
19. Geller S. "Crystal Chemistry of the Garnets," *Z. Kristallogr.*, 1967, 125, 1-47. DOI: https://rruff.info/uploads/ZK125_1.pdf. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
20. Shannon R.D. "Revised Effective Ionic Radii and Systematic Studies of Interatomic Distances in Halides and Chalcogenides," *Acta Cryst.*, 1976, 3266, 751-767. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0567739476001551>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
21. West A.R. *Solid State Chemistry and its Applications*, John Wiley & Sons, Chichester, 1984. – кітап
22. Li H.L., Liu X.J., Huang L.P. "Luminescent Properties of LuAG:Ce Phosphors with Different Ce Contents Prepared by a Sol-Gel Combustion Method," *Opt. Mater.*, 2007, 29(9), 1138. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2006.05.002>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
23. Saxena S., Asokkumar A.K., Lal B. "Citrate-Nitrate Route for the Synthesis and Characterization of TAG Using Sol-Gel Techniques," *J. Sol.-Gel Sci. Technol.*, 2007, 41, 245. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10971-006-1503-9>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
24. Garskaite E., Sakirzanovas S., Kareiva A., Glaser J., Meyer H.-J. "Synthesis and Structure of Europium Aluminium Garnet (EAG)," *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 2007, 633, 990. DOI: <https://doi.org/10.1002/zaac.200700027>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
25. Chen Y., Wang J., Gong M., Su Q. "Ce³⁺ Phosphors Prepared by a Novel Sol-Combustion Method for Application in InGaN-Based White LEDs," *J. Shi. Chem. Lett.*, 2007, 36, 760. DOI: <http://dx.doi.org/10.1246/cl.2007.760>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
26. Skaudzius R., Enseling D., Skapas M., Selskis A., Pomjakushina E., et al. "Europium-Enabled Luminescent Single Crystal and Bulk YAG and YGG for Optical Imaging," *Opt. Mater.*, 2016, 60, 467-473. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2016.08.032>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
27. Skruodiene M., Juodvalkyte R., Kemere M., Ramanauskas R., et al. "Enhanced Optical Properties of Yttrium Aluminum Garnet with the Yttrium Vanadate Impurity Phase," *Heliyon.*, 2022, 8, e11386. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2022.e11386>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
28. Hassan Z., Abd H.R., Ahmed N.M. "Enhanced White Light Luminescence of Ce³⁺-Activated $Y_3Al_5O_{12}$ Phosphors Powder Synthesized via Continuous Wave (CW) CO₂ Laser-Assisted Combustion," *International Energy and Sustainability Conference (IESC)*, Farmingdale, NY, USA, 2019, 1-7. DOI: <https://doi.org/10.1109/IESC47067.2019.8976584>.
29. Li X., Liu H., Wang J., Cui H., Han F. "YAG:Ce Nano-Sized Phosphor Particles Prepared by a Solvothermal Method," *Mater. Res. Bull.*, 2004, 39, 1923. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2004.05.013>. – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

С.А.Пазылбек*¹, А. Карейва², О. Шалхар², Б.Е. Жакипбаев³, Д.К. Ескермесов⁴,
Б.З. Абдикадыр⁵, М.Т. Катбаева¹, К.Ж. Мұтәлі¹

¹Университет имени Ж.А. Ташенева, Шымкент, Казахстан

²Вильнюсский университет, Вильнюс, Литва

³Университет дружбы народов имени академика А.Куатбекова, Шымкент, Казахстан

⁴Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева,
Усть-Каменогорск, Казахстан

⁵Южно-Казахстанский педагогический университет им. О. Жанибекова, Шымкент, Казахстан

Синтез и оптические свойства соединений $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu \text{ или } Ce)_xAl_5O_{12}$ с высокой энтропией

Аннотация. Результаты рентгеновского дифракционного анализа (XRD) новых соединений с гранатной кристаллической структурой высокого энтропийного состава $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu \text{ или } Ce)_xAl_5O_{12}$, синтезированных методом золь-гель, показали наличие однофазной кубической структуры. Согласно результатам XRD-анализа монокристаллических соединений с гранатной структурой, фаза граната определяется как основная кристаллическая фаза с увеличением количества ионов Ca^{2+} , Li^+ и Eu^{3+} , Ce^{3+} . Результаты рентгеновского дифракционного анализа синтезированных образцов полностью подтверждаются данными инфракрасной (FT-IR) спектроскопии. В спектрах FT-IR в области $1000-400 \text{ см}^{-1}$ для всех образцов видны характерные для гранатов интенсивные пики. Несколько интенсивных пиков в области $1000-400 \text{ см}^{-1}$ для гранатов описывают режимы растяжения тетраэдрических единиц. Морфология поверхности, полученная с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) для высокоэнтропийных гранатов, очень схожа для всех образцов, объёмные зерна состоят из сферических частиц среднего размера около $50-120 \text{ нм}$. Рассчитанные параметры ячейки составляют $12,316-12,322 \text{ нм}$ без каких-либо изменений на уровне замещения, что подтверждает формирование высокоэнтропийных гранатных материалов. Точный химический состав соединений с гранатной структурой и различными примесями был определен методом ICP-OES. По данным спектров возбуждения и эмиссии, метод золь-гель эффективен для синтеза соединений с высокоэнтропийной гранатной кристаллической структурой, которые могут быть использованы в качестве матрицы для создания новых фосфоров.

Ключевые слова: золь-гель, гранат, XRD, высокая энтропия, рентген, дифракция.

S. Pazyzbek*¹, A. Kareiva², O. Shalkhar², B. Zhakipbayev³, D. Yeskermessov⁴, B. Abdikadyr⁵,
M. Katbaeva¹, K. Mutali¹

¹Zhumabek Tashenev University, Shymkent, Kazakhstan

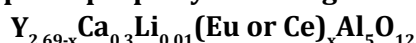
²Vilnius University, Vilnius, Lithuania

³Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov,
Shymkent, Kazakhstan

⁴D. Serikbayev East Kazakhstan technical university, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

⁵South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov,
Shymkent, Kazakhstan

Synthesis and optical property of the high entropy compounds



Abstract. The results of powder X-ray diffraction analysis (XRD) of compounds with a new high entropy $Y_{2,69-x}Ca_{0,3}Li_{0,01}(Eu \text{ or } Ce)_xAl_5O_{12}$ garnet crystal structure synthesized by the sol-gel method showed that it is a single-phase cubic structure. According to the results of the XRD analysis of monocrystalline compounds of the garnet structure, the garnet phase is defined as the main crystalline phase with an increase in the amount of Ca^{2+} , Li^+ and Eu^{3+} , Ce^{3+} ions. The results of the X-ray diffraction analyzes of the synthesized samples are fully confirmed by the infrared (FT-IR) spectroscopic data. In the region of 1000-400 cm^{-1} of the FT-IR spectra, the intense peaks characteristic of garnets appeared the same for all samples. Several intense peaks distributed in the region of 1000–400 cm^{-1} of garnets describe the mode of stretching of tetrahedral units. The surface morphology of high-entropy garnets obtained by scanning electron microscopy (SEM) was very similar for all samples, and the bulk grains consisted of spherical particles with an average size of about 50–120 nm. The calculated cell parameters were in the range of 12.316–12.322 nm without any process at the substitution level, which confirms the formation of high-entropy garnet materials. The exact chemical composition of garnet structural compounds with various additives was determined by the ICP-OES method. According to the excitation and emission spectra, the sol-gel method is an effective approach for the preparation of compounds with a high-entropy garnet crystal structure, and they can be used as a matrix for creating new phosphors.

Keywords: sol-gel, garnet, XRD, high entropy, X-ray, diffraction.

References

1. William M. Yen, Shionoya Sh. Phosphor Handbook, CRC Press, Boca Raton, Boston, London, New York, Washington, DC (1999)
2. Carel W.E. "Inorganic-scintillator development," *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, 2001, 460(1), 1-14. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(00\)01088-3](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(00)01088-3).
3. Shur M.S., Žukauska A. "Solid-State Lighting: Toward Superior Illumination," *Proc. IEEE*, 2005, 93(10), 1691-1703. DOI: <https://doi.org/10.1109/JPROC.2005.853537>.
4. Bogner G., Debray A., Heidel G., Hoehn K., Muller U., Schlotter P. "Structural and Optical Design," *Proc. SPIE. Int. Soc. Opt. Eng.*, 1999, 3621, 143.
5. Veith M., Mathur S., Kareiva, A., Jilavi M., Zimmer M., Huch V. "Low temperature synthesis of nanocrystalline $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG) and Ce-doped $Y_3Al_5O_{12}$ via different sol-gel methods," *J. Mater. Chem.*, 1999, 9, 3069-3079. DOI: <https://doi.org/10.1039/A903664D>.

6. Pan Y., Wu M., Su Q. "Structural and Luminescence Properties," *Mater. Sci. Eng. B.*, 2004, 106, 251-256. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2003.09.031>.
7. Xia G., Zhou S., Zhang J., Xu J. "Structural and Optical Properties of YAG:Ce³⁺ Phosphors by Sol-Gel Combustion Method," *J. Crystal Growth.*, 2005, 279, 357-362. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2005.01.072>.
8. Jia D., Wang Y., Guo X., Li K., Zou Y.K., Jia W. "Synthesis and Characterization of YAG:Ce³⁺ LED Nanophosphors," *J. Electrochem. Soc.*, 2007, 154, J1. DOI: <https://doi.org/10.1149/1.2372589>.
9. Gupta C.S. "Effect of copper doping on phosphorescence of CaS:Er phosphors," *Ind. J. Phys.*, 2001, 75A, 135-141. DOI: <https://www.iacs.res.in/ijp/preva.html>.
10. Leleckaite A., Kareiva A., Bettentrup H., Jüstel T., Meyer H.-J. "Sol-Gel Preparation and Characterization of Codoped Yttrium Aluminium Garnet Powders," *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 2005, 631, 2987. DOI: <http://www3.interscience.wiley.com>.
11. Kasuya R., Isobe T., Kuma H., Katano J. "Photoluminescence enhancement of PEG-modified YAG:Ce³⁺ nanocrystal phosphor prepared by glycol thermal method," *J. Phys. Chem. B.*, 2005, 109, 22126-22130. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp052753j>.
12. Kasuya R., Isobe T., Kuma H. "Glycothermal synthesis and photoluminescence of YAG:Ce³⁺ nanophosphors," *J. Alloys Compds.*, 2006, 408, 820-823. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.01.066>.
13. Hreniak D., Streck W. "Synthesis and Optical Properties of Nd³⁺-Doped Y₃Al₅O₁₂ Nanoceramics," *J. All. Comp.*, 2002, 341, 183-186. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388\(02\)00067-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0925-8388(02)00067-1).
14. Leleckaite A., Kareiva A. "Synthesis of garnet structure compounds using aqueous sol-gel processing," *Opt. Mater.*, 2004, 26, 123. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2003.11.009>.
15. Zhou Y., Lin J., Yu M., Wang S., Zhang H. "Synthesis-dependent luminescence properties of Y₃Al₅O₁₂:Re³⁺ (Re=Ce, Sm, Tb) phosphors," *Mater. Lett.*, 2002, 56, 628-636. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-577X\(02\)00567-0](https://doi.org/10.1016/S0167-577X(02)00567-0).
16. Zhou Y., Lin J., Yu M., Wang S. "Comparative study on the luminescent properties of Y₃Al₅O₁₂:RE³⁺ (RE: Eu, Dy) phosphors synthesized by three methods," *J. Alloys Compds.*, 2004, 375, 93-97. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2003.10.057>.
17. Hsu W.T., Wu W.H., Lu C.H. "Structural and Luminescent Properties," *Mater. Sci. Eng. B.*, 2003, 104, 40.
18. Lu C.H., Hsu W.T., Dhanaraj J., Jagannathan R. "Sol-Gel Pyrolysis and Photoluminescent Characteristics of Europium-Ion Doped Yttrium Aluminum Garnet Nanophosphors," *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2004, 24, 3723. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2003.12.009>.
19. Geller S. "Crystal Chemistry of the Garnets," *Z. Kristallogr.*, 1967, 125, 1-47. DOI: https://rruff.info/uploads/ZK125_1.pdf.
20. Shannon R.D. "Revised Effective Ionic Radii and Systematic Studies of Interatomic Distances in Halides and Chalcogenides," *Acta Cryst.*, 1976, 3266, 751-767. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0567739476001551>.
21. West A.R. *Solid State Chemistry and its Applications*, John Wiley & Sons, Chichester, 1984.
22. Li H.L., Liu X.J., Huang L.P. "Luminescent Properties of LuAG:Ce Phosphors with Different Ce Contents Prepared by a Sol-Gel Combustion Method," *Opt. Mater.*, 2007, 29(9), 1138. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2006.05.002>.

23. Saxena S., Asokkumar A.K., Lal B. "Citrate-Nitrate Route for the Synthesis and Characterization of TAG Using Sol-Gel Techniques," *J. Sol.-Gel Sci. Technol.*, 2007, 41, 245. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10971-006-1503-9>.

24. Garskaite E., Sakirzanovas S., Kareiva A., Glaser J., Meyer H.-J. "Synthesis and Structure of Europium Aluminium Garnet (EAG)," *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 2007, 633, 990. DOI: <https://doi.org/10.1002/zaac.200700027>

25. Chen Y., Wang J., Gong M., Su Q. "Ce³⁺ Phosphors Prepared by a Novel Sol-Combustion Method for Application in InGaN-Based White LEDs," *J. Shi, Chem. Lett.*, 2007, 36, 760. DOI: <http://dx.doi.org/10.1246/cl.2007.760>.

26. Skaudzius R., Enseling D., Skapas M., Selskis A., Pomjakushina E., et al. "Europium-Enabled Luminescent Single Crystal and Bulk YAG and YGG for Optical Imaging," *Opt. Mater.*, 2016, 60, 467–473. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2016.08.032>.

27. Skruodiene M., Juodvalkyte R., Kemere M., Ramanauskas R., et al. "Enhanced Optical Properties of Yttrium Aluminum Garnet with the Yttrium Vanadate Impurity Phase," *Heliyon.*, 2022, 8, e11386. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2022.e11386>.

28. Hassan Z., Abd H.R., Ahmed N.M. "Enhanced White Light Luminescence of Ce³⁺-Activated Y₃Al₅O₁₂ Phosphors Powder Synthesized via Continuous Wave (CW) CO₂ Laser-Assisted Combustion," *International Energy and Sustainability Conference (IESC)*, Farmingdale, NY, USA, 2019, 1–7. DOI: <https://doi.org/10.1109/IESC47067.2019.8976584>.

29. Li X., Liu H., Wang J., Cui H., Han F. "YAG:Ce Nano-Sized Phosphor Particles Prepared by a Solvothermal Method," *Mater. Res. Bull.*, 2004, 39, 1923. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2004.05.013>.

Авторлар туралы мәлімет:

Пазылбек С.А. – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, «математика және информатика» кафедрасының меңгерушісі, Жұмабек Ахметұлы Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

Карейва А. – академик, профессор, Химия және геоғылым факультетінің деканы, Вильнюс университеті, Наугардуко көшесі 24, LT-03225, Вильнюс, Литва

Шалқар О. – PhD докторант, Химия және геоғылым факультеті, Вильнюс университеті, Наугардуко көшесі 24, LT-03225, Вильнюс, Литва

Жақипбаев Б.Е. – PhD, қауымдастырылған профессор, Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университетінің Инженерлік-технологиялық хабтың бас ғылыми қызметкері, «мұнай және құрылыс өндірісі» кафедрасының профессоры, Төле би көшесі 32, 160000, Шымкент, Қазақстан

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

Әбдіқадыр Б.З. – PhD, физика кафедрасының аға оқытушысы, Ө. Жәнібеков ат. Оңтүстік Қазақстан Педагогикалық Университеті, Байтұрсынов көшесі 13, 160012, Шымкент, Қазақстан

Катбаева М.Т. – физика магистрі, «математика және информатика» кафедрасының аға оқытушысы, Ж.А. Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

Мүтәлі К.Ж. – техника ғылымдарының магистрі, «Физика» зертханасының меңгерушісі, Ж.А. Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

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

Kareiva A. – Academician, Professor, Dean of the Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko Str. 24, LT-03225, Vilnius, Lithuania

Shalkar O. – PhD student, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko Str. 24, LT-03225, Vilnius, Lithuania

Zhakupbayev B. – PhD, Associate Professor, Chief Researcher of the Engineering and Technology Hub, Professor of the Department "Oil and Construction Production" of the Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov, Tole bi Str. 32, 160000, Shymkent, Kazakhstan

Yeskermessov D. – 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

Abdikadyr B. – PhD, Senior lecturer of Department of Physics, South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov, Baitursynov str. 13, 160012, Shymkent city, Kazakhstan.

Katbaeva M. – Master of physics, Senior Lecturer of the Department of "Mathematics and Informatics", Tashenev University, Kunaev Avenue 21, 160012, Shymkent, Kazakhstan

Mutali K. – Master of Technical Sciences, Head of the Physics Laboratory, Tashenev University, Kunaev Avenue 21, 160012, Shymkent, Kazakhstan

Пазылбек С. – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, заведующий кафедрой "Математика и информатика", Университет имени Жумабека Ахметулы Ташенева, проспект Кунаева, 21, 160012, Шымкент, Казахстан.

Карейва А. – академик, профессор, декан факультета химии и геонаук, Вильнюсский университет, ул. Наугардуко, 24, LT-03225, Вильнюс, Литва.

Шалкар О. – PhD докторант, факультет химии и геонаук, Вильнюсский университет, ул. Наугардуко, 24, LT-03225, Вильнюс, Литва.

Жакупбаев Б.Е. – PhD, ассоциированный профессор, главный научный сотрудник инженерно-технологического хаба, профессор кафедры «Нефтяное и строительное производство» Университета дружбы народов имени академика А.Куатбекова, улица Толе би, 32, 160000, Шымкент, Казахстан.

Ескермесов Д.К. – 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.

Абдиқадыр Б.З. – PhD, старший преподаватель кафедры физики, Южно-Казахстанский педагогический университет им. О. Жанибекова, ул. Байтурсынова, 13, 160012, Шымкент, Казахстан.

Катбаева М.Т. – магистр физики, старший преподаватель кафедры “Математика и информатика”, Университет имени Ж.А. Ташенева, проспект Кунаева, 21, 160012, Шымкент, Казахстан.

Мутали К.Ж. – магистр технических наук, заведующий лабораторией физики, Университет имени Ж.А. Ташенева, проспект Кунаева, 21, 160012, Шымкент, Казахстан.



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 29.19.22

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-178-198>

Ғылыми мақала

Исследование упругих свойств кристалла Na_2SO_4 -V методом DFT

Ж.М. Салиходжа¹, Т.Н. Нурахметов¹, А.Ж. Кайнарбай¹, Ф.У. Абуова*¹,
А.С. Ахмедов¹, Р.Н. Сулеймен¹, Г.Б. Байрбаева¹

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

(*e-mail: Fatika_82@mail.ru)

Аннотация. В данной статье исследуются упругие свойства кристалла Na_2SO_4 (тенардит, орторомбическая фаза V, группа симметрии FDDD) с примесями методом функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала HSE06. Основная цель работы – изучение механических характеристик Na_2SO_4 под воздействием различных давлений с акцентом на разработку более эффективных термолюминесцентных дозиметров (ТЛД). Проведённое моделирование позволяет лучше понять, как структурные изменения в кристалле под давлением влияют на его упругость и пластичность. Важным достижением является выявление критических точек при давлении около 12 ГПа, где происходит переход материала из пластичного состояния в хрупкое. Рассмотрены основные механизмы, управляющие деформацией кристалла, а также возможность фазовых переходов, влияющих на электронные и упругие свойства. Проведено детальное сравнение полученных данных с экспериментальными значениями ширины запрещённой зоны и упругих модулей, что подтвердило адекватность расчётной модели. Эти выводы имеют важное значение для дальнейшего использования Na_2SO_4 в условиях экстремальных механических воздействий, что делает его перспективным для применения в дозиметрии радиационного излучения и других областях, где необходима высокая устойчивость материала к внешним нагрузкам.

Ключевые слова: сульфат натрия, Crystals, термолюминесценция, квантово-химическое моделирование, теория функционала плотности.

Поступила 05.11.2024 После доработки 25.11.2024. Принята к печати 26.11.2024. Доступно онлайн 25.12.2024

¹* автор для корреспонденции

Введение

Сульфат натрия (Na_2SO_4) – это кристалл с широкой областью применения, особенно в исследованиях, связанных с детектированием ионизирующим излучением. Одним из ключевых его применений является использование в качестве термолюминесцентного дозиметра (ТЛД). ТЛД имеют способность накапливать энергию и высвободить её в виде света при нагревании, что делает Na_2SO_4 перспективным материалом для измерения ионизирующего излучения в различных областях, таких, как медицинская диагностика и радиационная безопасность [1].

Фазовые переходы в кристаллах играют важную роль в изменении их физических и механических свойств. Эти переходы могут существенно изменить структурные параметры кристаллов и их отклик на внешние воздействия, такие, как давление и температура [2-5]. В случае Na_2SO_4 фазовые переходы между различными модификациями кристаллической решётки оказывают значительное влияние на его термолюминесцентные и упругие свойства, что важно для его применения в качестве дозиметра.

Кристаллическая структура Na_2SO_4 (фаза V, орторомбическая группа симметрии FDDD) оказывает существенное влияние на его термолюминесцентные и механические свойства. Исследования показывают, что примеси в кристалле могут значительно влиять на его поведение как дозиметра, улучшая его чувствительность и стабильность сигнала [6-10]. Помимо термолюминесцентных характеристик, важными являются и упругие свойства Na_2SO_4 , которые оказывают критическое влияние на устойчивость материала к механическим деформациям в условиях высоких температур и давления [11].

Данная работа направлена на исследование упругих свойств Na_2SO_4 методом функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала HSE06, что позволяет учитывать тонкие электронные эффекты и межатомные взаимодействия. Важное внимание уделено влиянию гидростатического давления на структуру кристалла и его упругие модули, а также фазовым переходам при давлении до 15 ГПа. Проведены расчёты для определения критических точек, при которых материал изменяет своё поведение от пластичного до хрупкого состояния, что важно для приложений, требующих высокой механической устойчивости материала, таких, как термолюминесцентная дозиметрия.

Методы исследования

В данном исследовании для моделирования и анализа физических свойств кристалла Na_2SO_4 использовались методы функционала плотности (DFT), реализованные в программе CRYSTAL23. Расчёты проводились с использованием гибридного функционала HSE06 [12], который обеспечивает точное описание электронных и энергетических свойств материалов благодаря улучшенной обработке обменно-корреляционных взаимодействий.

DFT является мощным инструментом в области квантовой химии и физики твёрдого тела, используемым для вычисления электронных свойств многокомпонентных систем.

Основная идея DFT заключается в том, что свойства многоэлектронной системы могут быть описаны в терминах плотности электронов, а не волновых функций, что значительно упрощает вычисления.

HSE06 (Heyd-Scuseria-Ernzerhof 06) является гибридным функционалом, который сочетает в себе элементы DFT с коррекцией за счет обмена и корреляции. HSE06 улучшает предсказания свойств материалов, особенно в тех случаях, когда требуется учесть эффект экранирования и дальнедействующей взаимосвязи.

Расчеты проводились с использованием разбиения Бриллюэновой зоны на $6 \times 6 \times 6$ k-точек, что гарантировало точность вычислений для орторомбической симметрии. Оптимизация геометрии кристалла была выполнена до сходимости сил менее $0,001 \text{ эВ}/\text{Å}$, а энергия расчёта достигалась с точностью 10^{-6} эВ . Это позволило адекватно описать структурные изменения кристалла под воздействием гидростатического давления.

Для расчёта упругих свойств кристалла была использована методология, основанная на вычислении упругих тензоров второго ранга. Это позволило определить такие важные характеристики, как модуль сдвига, объёмный модуль, модуль Юнга и Пуассонов коэффициент, которые описывают механическую устойчивость и пластичность материала. Эти параметры важны для описания механической стабильности материала и его поведения под воздействием внешних механических нагрузок. Для подтверждения точности расчётов упругих свойств использовался критерий Пью, который позволил предсказать хрупкость или пластичность материала при различных внешних давлениях.

Результаты и обсуждения

Для проведения расчетов были использованы следующие начальные параметры для кристалла сульфата натрия [13]: постоянные решетки: $a=5,85 \text{ Å}$, $b=12,29 \text{ Å}$, $c=9,75 \text{ Å}$, угол: $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, объем: $V=700,99 \text{ Å}^3$, плотность: $\rho=2,69 \text{ г/см}^3$, количество атомов: 56. В результате оптимизации объем кристалла был увеличен до $V=740,63 \text{ Å}^3$, и, соответственно, постоянные решетки были увеличены до $a=5,95, b=12,49, c=9,96$. Это повлияло на плотность кристалла, которая была уменьшена до $\rho=2,546 \text{ г/см}^3$. Такие значения немного отличаются от экспериментальных данных [2], где $a=5,8582, b=12,299, c=9,8138$, при $T=293 \text{ К}$.

Что касается электронных свойств, то до оптимизации ширина запрещенной зоны составляла $7,29 \text{ эВ}$, что свидетельствует о значительном энергетическом разрыве между валентной зоной и зоной проводимости. Это типично для изоляторов и материалов, которые не проводят электрический ток при комнатной температуре. Полученное значение ширины запрещенной зоны отличаются от данных, полученных в работе [9], в которой значение ширины запрещенной зоны варьируется в пределах $4,9-5,1 \text{ эВ}$. Плотность состояний и зонную структуру до оптимизации можно увидеть на рисунке 1.

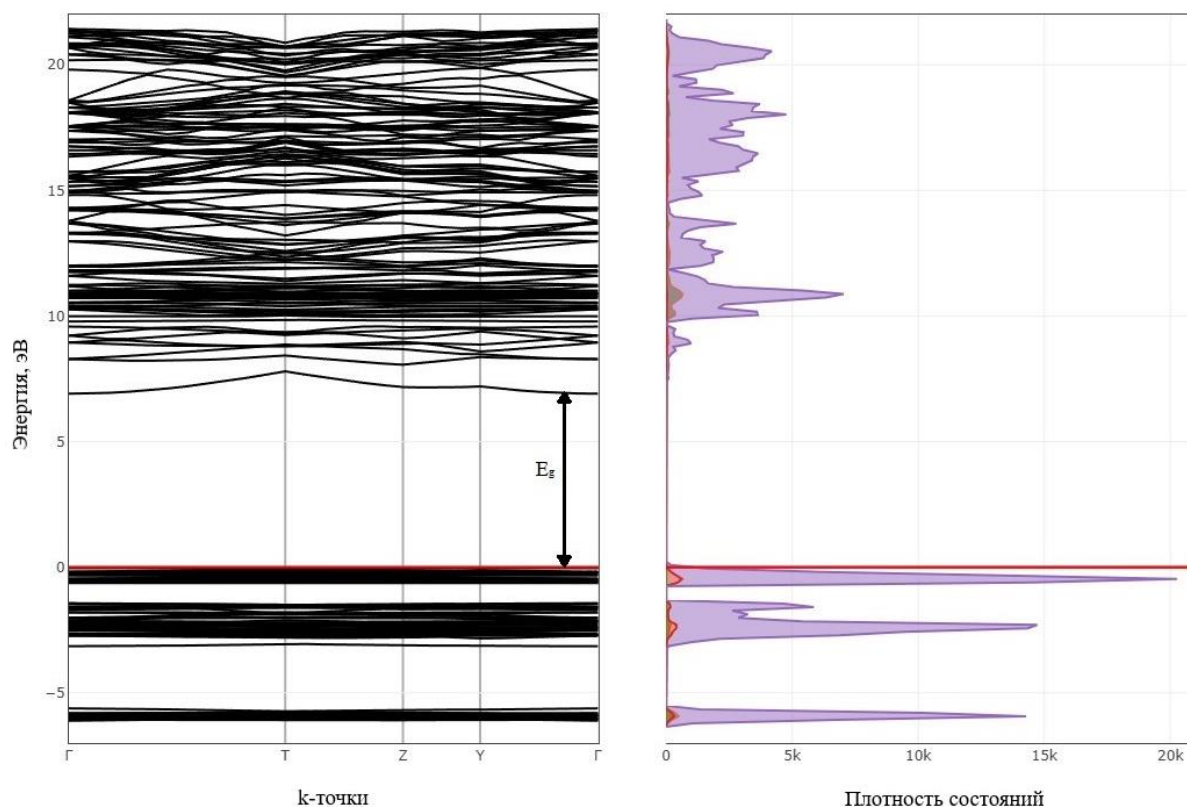


Рисунок 1. Плотность состояний и зонная структура до оптимизации.

Однако после геометрической оптимизации, когда структура кристалла адаптировалась к новым параметрам, ширина запрещенной зоны снизилась до 6,91 эВ, что тоже больше, чем значения в работе [9], но ближе на 0,38 эВ. Это уменьшение можно объяснить тем, что увеличившиеся межатомные расстояния и возросший объем кристалла привели к изменениям в энергетическом распределении валентных и проводящих электронов. Такие изменения ширины запрещенной зоны могут быть интерпретированы как результат перераспределения электронной плотности и перестройки энергетических зон вследствие давления или оптимизации геометрии. Увеличение объема (с 700,99 Å до 740,63 Å) и уменьшение плотности материала свидетельствуют о том, что межатомные взаимодействия стали слабее, что в свою очередь влияет на электронные переходы в кристалле. Меньшая ширина запрещенной зоны делает материал чуть более "податливым" для возбуждения электронов из валентной зоны в зону проводимости. Плотность состояний и зонную структуру после оптимизации можно увидеть на рисунке 2.

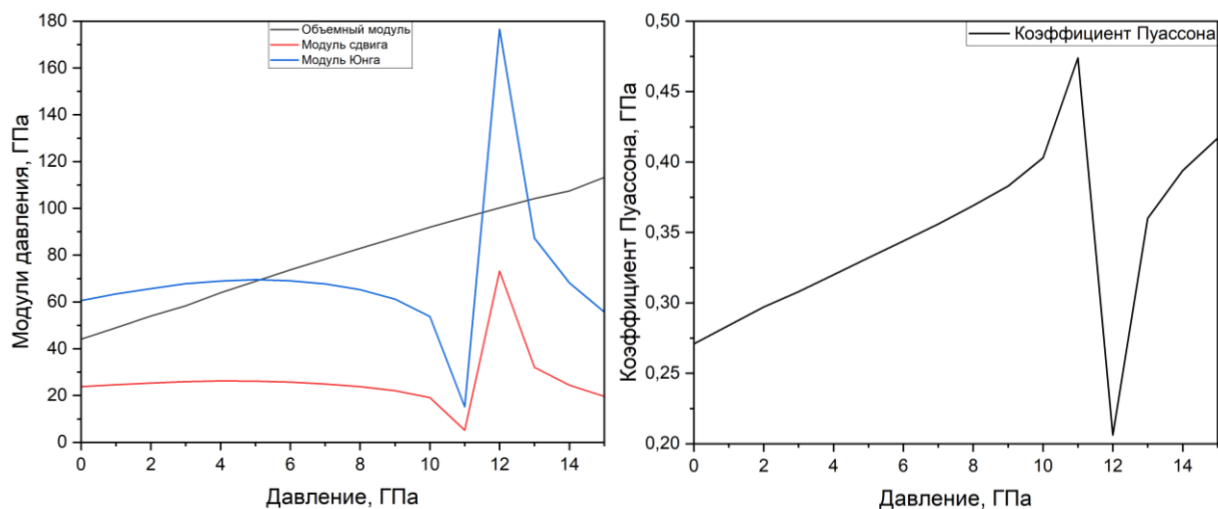


Рисунок 2. Плотность состояний и зонная структура после оптимизации.

1) Влияние гидростатического давления на упругие свойства до 15 ГПа.

Были проведены исследования упругих свойств кристалла Na_2SO_4 . Вычисления модулей упругости, результаты которых показаны на графиках ниже, проводились при давлении от 0 до 15 ГПа.

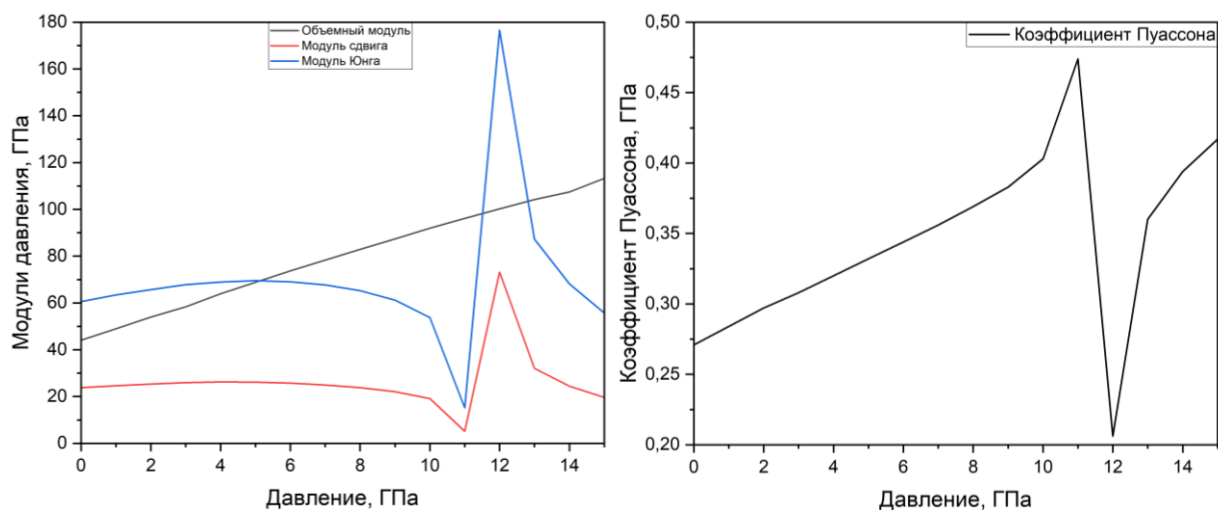


Рисунок 3. Зависимость модулей упругости от приложенного гидростатического давления.

Из рис.3 видно, что коэффициент Пуассона и все модули, кроме Объемного модуля упругости (модуль сдвига и модуль Юнга), с повышением давления доходят до критической точки при давлении 11 ГПа для коэффициента Пуассона, 4 ГПа для модуля сдвига и 5 ГПа для модуля Юнга.

Достижение критической точки может свидетельствовать о переходе в новый режим деформации. Это может быть связано с тем, что атомы в кристалле начинают перестраиваться или взаимодействовать по-другому при высоком давлении, что приводит к изменениям в упругих свойствах. Резкий спад коэффициента Пуассона при давлении 12 ГПа сопровождается изменением модулей Юнга и сдвига, что подтверждает начало фазового перехода. Это связано с перестройкой кристаллической решетки, при которой ослабевают связи между атомами, а материал утрачивает пластичность, переходя в хрупкое состояние.

Модуль сдвига отражает способность материала сопротивляться деформации при сдвиге. Его критическая точка при 4 ГПа указывает на то, что при этом давлении сдвиговые напряжения начинают вызывать значительные изменения в структуре кристалла. Модуль Юнга показывает жесткость материала. Критическая точка при 5 ГПа свидетельствует о том, что дальнейшее увеличение давления может привести к снижению жесткости.

Структура кристалла может становиться менее стабильной под действием повышенного давления, что может привести к смещению атомов и образованию дефектов в решетке. Понижение значений может сигнализировать о том, что кристалл переходит в другую фазу (например, аморфное состояние или другую кристаллическую решетку), где упругие свойства отличаются от начального состояния.

Видно, что после достижения определенной точки (второй критической точки) наблюдается резкий рост модулей. Это может указывать на то, что кристалл проходит через фазу, где его структура становится более упругой и жесткой. Кристаллические решетки могут упорядочиваться, что приводит к увеличению модуля сдвига и модуля Юнга. Увеличение упругих модулей после второй критической точки может указывать на повышение устойчивости к механическим деформациям. Из графика видно, что кристалл становится более прочным под высоким давлением, что может быть связано с образованием новых связей или изменением межатомных взаимодействий.

На рис.3 справа показано, как коэффициент Пуассона изменяется с увеличением давления. Его постепенный рост от 0,271 до 0,403 указывает на увеличение способности материала к боковому расширению при сжатии. Это явление характерно для материалов, демонстрирующих пластичное поведение на низких и средних давлениях. Однако резкий скачок коэффициента Пуассона до 0,474 при 11 ГПа может быть связан с критическим изменением структуры, после чего наблюдается резкое падение до 0,206 при 12 ГПа. Снижение коэффициента Пуассона, ниже значения 0,26[14], указывает на то, что ионные связи в кристалле ослабевают. Таким образом, данные коэффициента Пуассона отражают постепенное увеличение пластичности до 11 ГПа и её утрату при давлении выше 12 ГПа. Уже после 12 ГПа наблюдается восстановление пластичности материала, что совпадает с изменением коэффициента Пуассона и стабилизацией его значений на уровне 0,206. Эти изменения могут быть связаны с переходом кристалла в новое фазовое состояние, что подтверждается резкими изменениями упругих модулей, модификацией структуры кристаллической решетки и ослаблением межатомных взаимодействий.

Из полученных значений модулей упругости были получены данные, которые могут дать более углубленное понимание упругих свойств кристалла сульфата натрия. На рис.4 мы можем увидеть изменения твердости (Н) и критерия Пью (V/G) относительно приложенного давления.

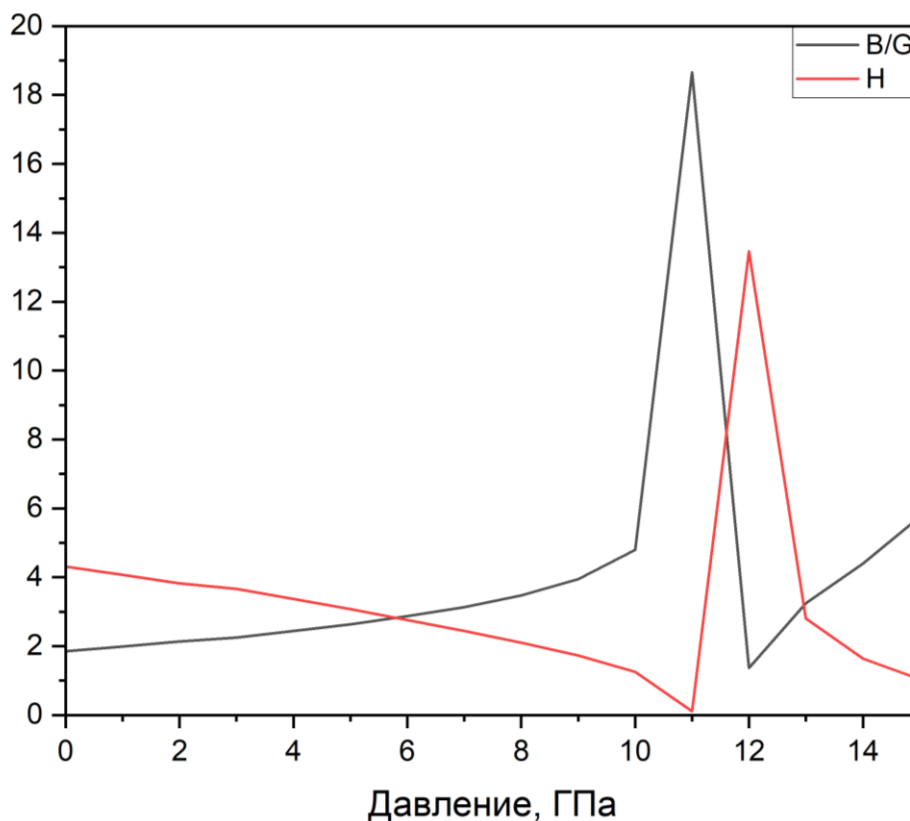


Рисунок 4. Влияние приложенного гидростатического давления на критерий Пью и твердость.

Нетрудно заметить, что при достижении 11 ГПа твердость материала очень близка к нулю, а именно 0,1053. После чего уже при значении в 12 ГПа видно резкое увеличение этого значения. Также из рис.4 видно, что отношение V/G, что описывает критерий Пью, для кристалла Na_2SO_4 имеет значение 1,85 при 0 ГПа и 18,66 при 11 ГПа (самое высокое значение). При давлении 12 ГПа критерий Пью упал ниже 1,75, что сигнализирует о начале хрупкости материала [15]. Это указывает на то, что до 11 ГПа кристалл ведет себя как пластичный материал, но после достижения этого давления происходит существенное изменение его механических свойств, и материал становится хрупким. Дальнейшее повышение давления вызывает сложные структурные перестройки. Это подтверждается резкими изменениями в модуле сдвига и Юнга, а также критическим падением критерия Пью ниже 1,75.

Падение коэффициента Пуассона до 0,206 сопровождается резкими изменениями модулей Юнга и сдвига, а также критерием Пью (V/G), который падает ниже 1,75. Эти изменения подтверждают перестройку кристаллической структуры, приводящую к утрате пластичности и переходу материала в хрупкое состояние.

Было исследовано напряжение кристалла сульфата натрия и то, как значение напряжения реагирует на внешнее давление. Результаты вычисления можно видеть на рис.5. Из него видно, что напряжение постепенно растет до 2,38 при 9 ГПа, а это указывает на упругую деформацию материала – область, в которой кристалл подчиняется закону Гука (напряжение пропорционально деформации). Этот линейный рост продолжает до достижения пика, что может указывать на предел текучести, когда материал начинает переходить от упругой деформации к пластической.

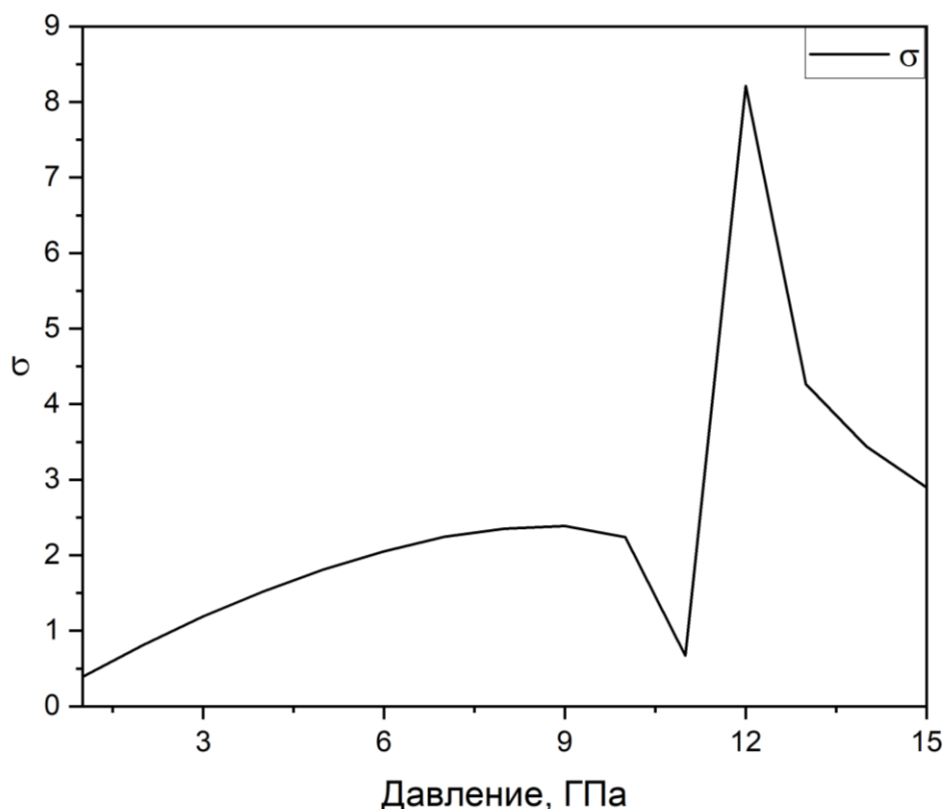


Рисунок 5. Зависимость напряжения кристалла сульфата натрия от приложенного гидростатического давления.

Резкое снижение до 0,67, при 11 ГПа, может свидетельствовать о структурном изменении материала, например, фазовом переходе или перестройке кристаллической решетки. Это может указывать на то, что после достижения критической точки кристалл больше не способен эффективно сопротивляться нагрузкам, и происходит временное ослабление напряжений. Далее нетрудно заметить, что сильный скачок до 8,214, при 12 ГПа, после падения может указывать на активизацию нового механизма деформации или на перестройку структуры. Это может свидетельствовать о начале новой фазы материала или усилении связей в кристалле под давлением, что позволяет ему снова выдерживать высокие напряжения. Дальнейшее постепенное снижение указывает на разрушение структуры или её неспособность сопротивляться дальнейшим нагрузкам. Это может быть связано с началом разрушения или дислокаций в материале.

Полученные в результате вычислений константы упругости представлены на графике ниже (рис. 6). На низких давлениях наблюдается рост констант упругости, что свидетельствует о высокой пластичности материала и его способности эффективно сопротивляться деформациям. Однако с увеличением давления и изменением значений упругих констант, особенно после достижения критического давления, можно ожидать снижение пластичности материала, сопровождающееся переходом в более хрупкое состояние.

Высокие значения нормальных модулей, таких как c_{11} и c_{22} , превышающие 100 ГПа, указывают на сильные ионные связи в кристалле, которые обеспечивают его устойчивость к нормальным нагрузкам [16]. В то же время значения сдвиговых модулей (c_{44} , c_{55} , c_{66}) остаются на значительно более низком уровне. Это свидетельствует о том, что материал демонстрирует меньшую устойчивость к сдвиговым деформациям по сравнению с нормальными, что важно учитывать при прогнозировании механических свойств материала под различными нагрузками.

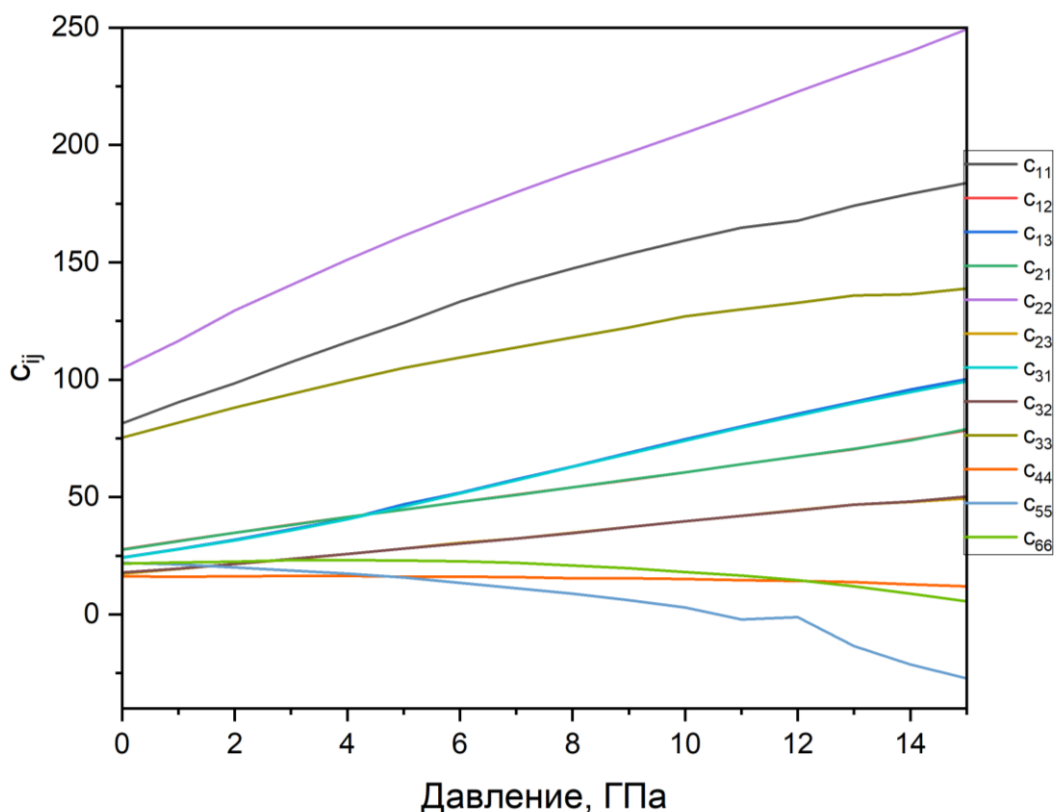


Рисунок 6. Зависимость констант упругости от приложенного гидростатического давления.

Из полученных данных о константах упругости были вычислены пьезоэластичные коэффициенты. Результаты вычислений предоставлены на таблице 1. Справа в таблице, для сравнения, указаны результаты работы [17].

Таблица 1. Пьезоэластичный коэффициент

p_{ij}	Полученные результаты	Результаты работы [17]	
		DFT	Experimental $T=298\text{K}$
p_{11}	7,0478	$8,5\pm 0,3$	$14,8\pm 1,6$
p_{12}	3,3911	$3,3\pm 0,1$	$2,1\pm 2,3$
p_{13}	4,8434	$4,7\pm 0,3$	$3,5\pm 1,6$
p_{22}	10,4703	$10,7\pm 0,2$	$14,6\pm 2,4$
p_{23}	2,1638	$1,8\pm 0,1$	$2,1\pm 1,7$
p_{33}	5,3277	$6\pm 0,1$	$9,3\pm 1,5$
p_{44}	-0,0929	$-0,3\pm 0,2$	$1\pm 0,3$
p_{55}	-1,6478	$-0,4\pm 0,3$	$0\pm 0,3$
p_{66}	-0,0834	$0,3\pm 0,1$	$1,9\pm 0,4$

Положительные значения основных пьезоэластичных коэффициентов (p_{11} , p_{22} , p_{33}) указывают на наличие пьезоэлектрических свойств у кристалла Na_2SO_4 . Отрицательные значения сдвиговых коэффициентов (p_{44} , p_{55} , p_{66}) могут свидетельствовать о том, что материал более уязвим к сдвиговым деформациям и, возможно, не будет эффективно использоваться в приложениях, требующих устойчивости к сдвигам.

С повышением приложенного давления было обнаружено, что ширина запрещенной зоны начала расширяться до 7,65 эВ при 15 ГПа. Увеличение ширины запрещенной зоны, E_g , с повышением давления может указывать на более сильное связывание электронов в кристаллической решетке под давлением. Это может быть связано с повышением плотности атомов и изменением структуры кристалла, что делает электроны более "связанными" и, следовательно, требует большей энергии для перехода из валентной зоны в проводящую. Увеличение ширины запрещенной зоны с повышением прикладываемого давления можно увидеть на графике ниже (рис.7), а также справа график, на котором можно увидеть постепенное уменьшение объема кристалла.

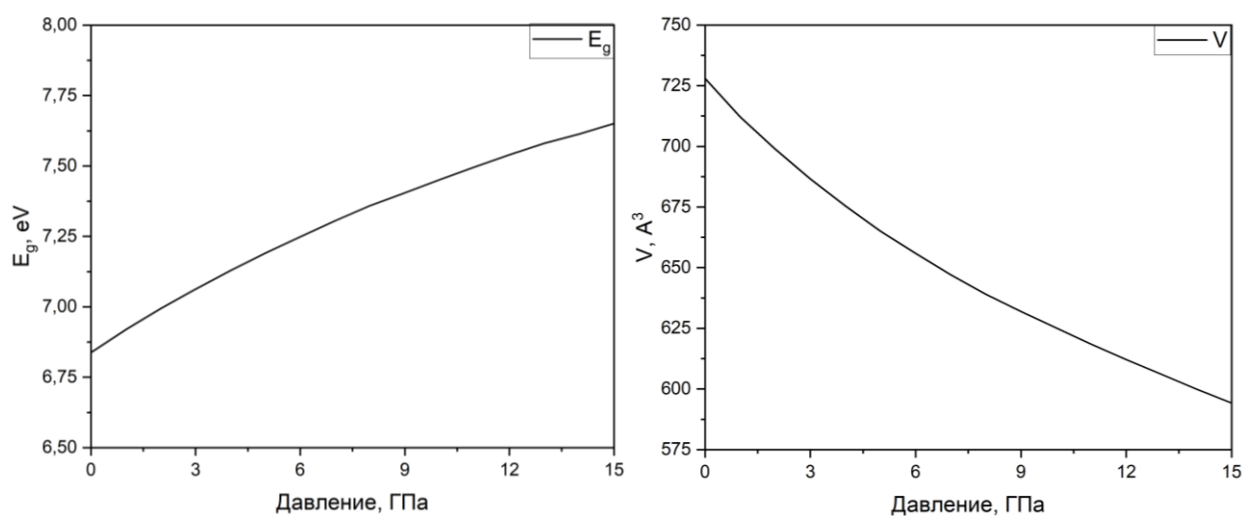


Рисунок 7. Зависимость E_g и объема от приложенного гидростатического давления.

2) Влияние прилагаемого давления, до 1 ГПа, на упругие свойства.

Также были проведены расчеты при приложенном давлении до 1 ГПа. На графике ниже (рис.8) представлены изменения значений модулей упругости и коэффициента Пуассона при давлениях от 0 до 1 ГПа.

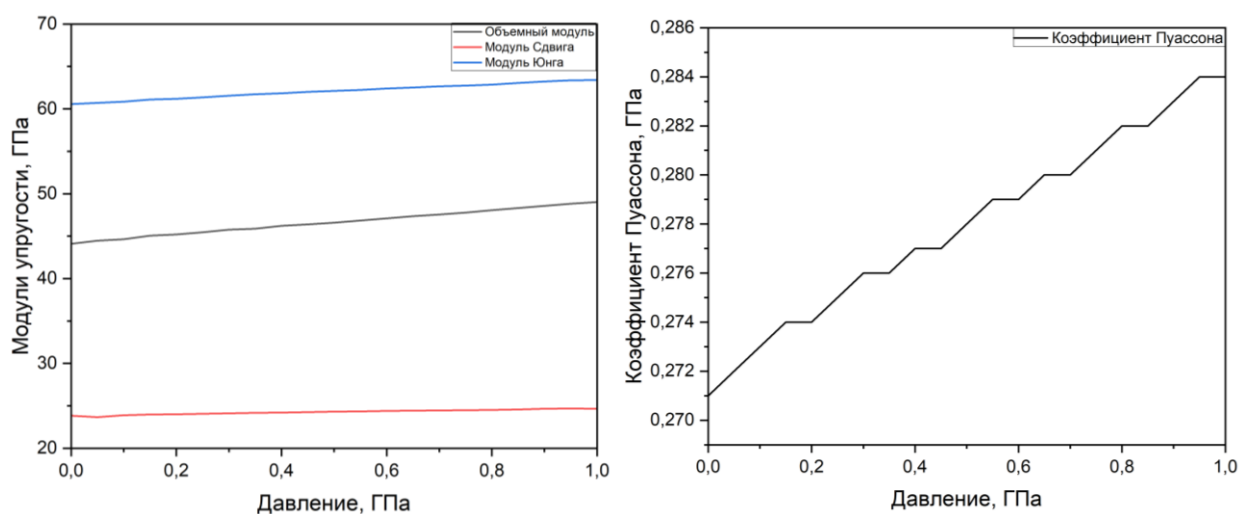


Рисунок 8. Изменение модулей упругости и коэффициента Пуассона относительно приложенного гидростатического давления.

Из рис.8 видно, что по мере увеличения прилагаемого давления значения модулей упругости и коэффициента Пуассона постепенно растут. Рост значений объемного модуля, модуля сдвига и Юнга указывают на устойчивость кристалла к деформациям при малых давлениях до 1 ГПа. Значение коэффициента Пуассона варьируется от 0,271 до 0,282, что указывает на его пластичность [14].

На основе полученных значений модулей упругости были сделаны выводы, которые помогают глубже понять механическое поведение кристалла сульфата натрия под воздействием давления. Представленные данные позволяют отследить изменения твердости (H) и критерия Пью (B/G) в зависимости от приложенного давления, что дает возможность оценить переходные процессы в кристалле при изменении условий. На графике ниже (рис.9) можно увидеть, как меняются вышеуказанные значения по мере увеличения давления.

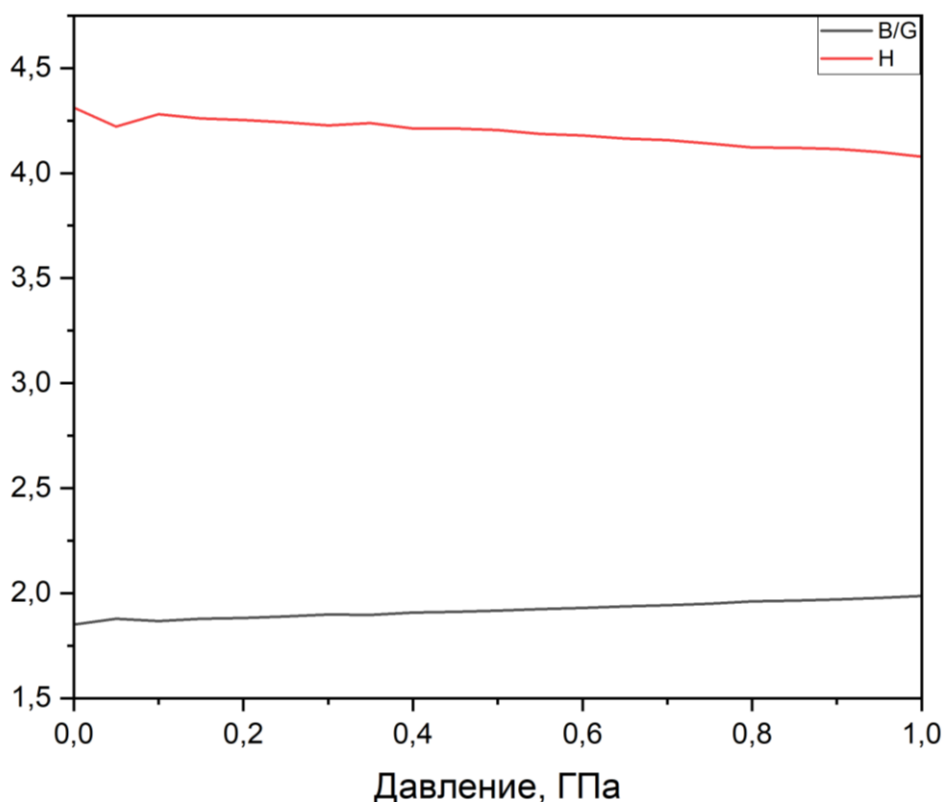


Рисунок 9. Изменение твердости и критерия Пью относительно приложенного гидростатического давления.

Из рис.9 видно, что соотношение B/G постепенно увеличивается с повышением давления от 0 ГПа до 1 ГПа, начиная с 1,85 и достигая значения 1,987 при 1 ГПа. Это указывает на постепенное увеличение пластичности кристалла с ростом давления. Значения $B/G > 1,75$ во всём диапазоне показывают, что материал остаётся пластичным, но с повышением давления его пластичность возрастает, что может свидетельствовать о снижении хрупкости и большей устойчивости материала к деформациям. Также из графика выше видно, как значение твердости (H) кристалла постепенно уменьшается с повышением давления, что указывает на пластичность материала. Однако при давлениях от 0 до 0,1 ГПа можно заметить колебания твердости: с 4,31264 до 4,22239, при 0 и 0,05 ГПа, соответственно, и дальнейшим повышением до 4,27977 при 1 ГПа. Это может указывать на временное изменение механического поведения кристалла, возможно,

связанное с перестройкой кристаллической решётки или незначительной локальной нестабильностью. Такие колебания могут быть результатом малых структурных изменений под воздействием давления, что иногда приводит к кратковременной потере пластичности, прежде чем материал снова стабилизируется и становится более пластичным.

Так же, как и при давлениях от 0 до 15 ГПа, было исследовано напряжение при давлениях от 0 до 1 ГПа. Результаты вычислений представлены на графике ниже (рис.10). Из него можно видеть, как до прилагаемого давления в 0,75 ГПа напряжение кристалла постепенно растет до 0,32526, что указывает на подчинение закону Гука. При 0,8 ГПа напряжение падает до 0,30359, после чего снова растет при 0,85 ГПа до 0,32586 и продолжает расти с повышением прилагаемого давления.

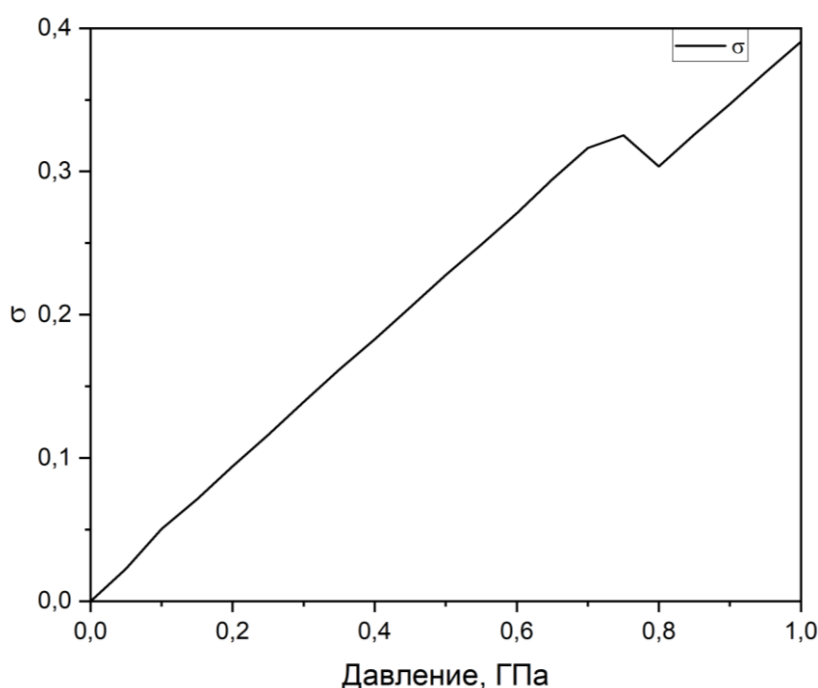


Рисунок 10. Зависимость напряжения кристалла сульфата натрия от приложенного гидростатического давления.

Такое поведение напряжения кристалла при давлениях от 0,75 до 0,85 ГПа может указывать на то, что кристаллу при достижении прилагаемого давления в 0,8 ГПа становится трудно эффективно сопротивляться нагрузкам, и происходит временное ослабление напряжения, после которого продолжается рост напряжения до 9 ГПа, что можно было видеть на рис.5.

При давлениях до 1 ГПа ширина запрещенной зоны и объем кристалла ведут себя так же, как и при давлениях до 15 ГПа, рис.7. Эту зависимость можно видеть на рис.11.

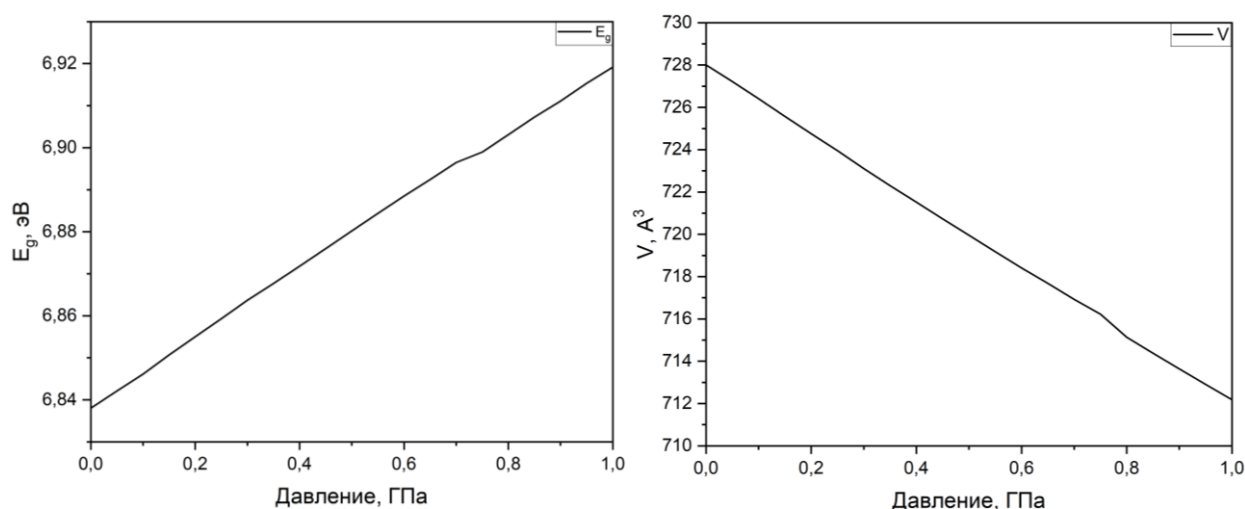


Рисунок 11. Изменение ширины запрещенной зоны (слева) и объема (справа) от приложенного гидростатического давления.

Как видно из рис.11, ширина запрещенной зоны постепенно растет по мере повышения прикладываемого давления с 6,838 до 6,9192 эВ, при 0 и 1 ГПа, соответственно. В то время как объем кристалла линейно уменьшается с 728,0051 до 712,1782Å³, при 0 и 1 ГПа, соответственно.

Ширина запрещенной зоны и её изменение под давлением (рис.7, рис.11) являются важными характеристиками, связанными с межатомными взаимодействиями в кристалле. Увеличение ширины запрещенной зоны с ростом давления отражает усиление связей между атомами, что сопровождается уменьшением объема кристалла. Эти изменения коррелируют с возрастанием модулей упругости, наблюдаемым на низких давлениях. Однако на более высоких давлениях резкие изменения ширины запрещенной зоны могут быть связаны с фазовыми переходами, что подтверждается снижением пластичности и изменением упругих констант. Таким образом, расчёт зонной структуры позволяет не только глубже понять механизмы структурной перестройки, но и связать их с изменениями механических свойств материала

Были вычислены константы упругости. Из полученных данных (рис.12) можно наблюдать некоторые важные изменения в зависимости от давления. При повышении давления от 0 до 1 ГПа значения модулей c_{11} , c_{22} и c_{33} (главные компоненты тензора) увеличиваются, что свидетельствует о возрастании сопротивления деформации в кристалле. Это говорит о том, что при повышении давления кристалл Na_2SO_4 становится более жестким, что типично для большинства кристаллов при сжатии.

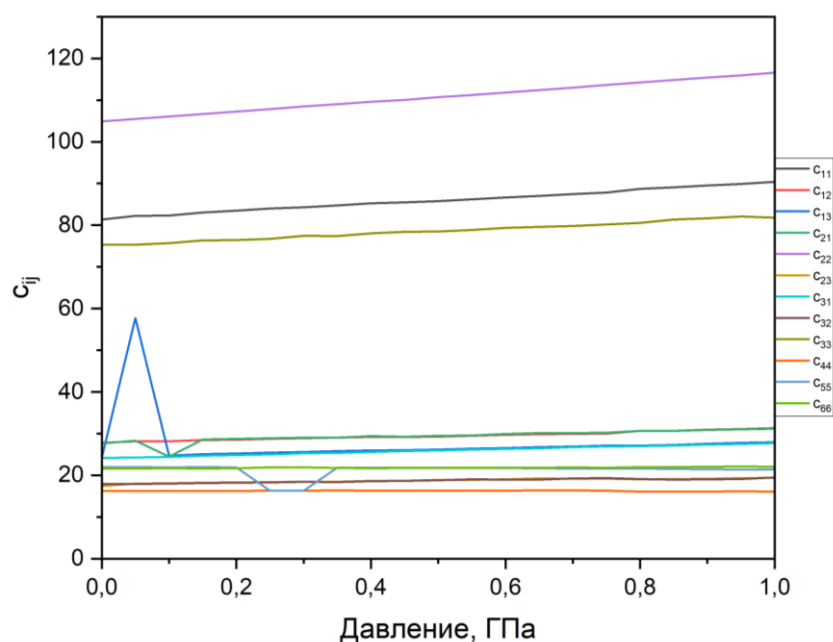


Рисунок 12. Зависимость констант упругости от приложенного гидростатического давления.

Однако были обнаружены некоторые аномалии, такие, как изменения в c_{12} , c_{13} и c_{23} , которые могут указывать на неравномерные изменения в межатомных связях или фазовые переходы. В статье [18] детально рассматриваются структуры и фазовые переходы Na_2SO_4 и было обнаружено, что фаза V стабильна при комнатной температуре и давлении ниже 0,07 ГПа.

В нашем исследовании у значений c_{12} и c_{13} наблюдаются резкие изменения (особенно скачки между значениями давления 0,05 ГПа и 0,15 ГПа). Это может указывать на локальные перестройки кристаллической структуры или аномальные изменения во взаимодействиях между атомами вдоль различных осей кристалла. Неравномерность в c_{23} может быть связана с различной реакцией кристалла на давление вдоль осей. Такое поведение может указывать на слабые межатомные силы в некоторых направлениях.

В работе [17] при повышении давления выше 0,07 ГПа (0,07-0,1 ГПа) был обнаружен фазовый переход V→III. Согласно данным из статьи, V проявляет исключительную медлительность переходов, что подтверждает сложность её трансформации.

Заключение

В данном исследовании методом функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала HSE06 были проведены расчеты упругих свойств кристалла сульфата натрия (Na_2SO_4) при давлении от 0 до 15 ГПа. Были выявлены важные закономерности и аномалии в поведении упругих модулей и критериев пластичности.

Низкие давления (до 1 ГПа): Значения упругих констант постепенно возрастают, что свидетельствует об усилении межатомных взаимодействий с увеличением

давления. Заметны скачки в значениях констант c_{12} , c_{13} , c_{23} , что указывает на локальные перестройки в структуре вдоль осей. Несмотря на то, что значения большинства модулей изменяются относительно плавно, между 0,05 и 0,15 ГПа наблюдается уменьшение критерия Пью (B/G), что может сигнализировать о локальной пластичности в кристалле при определенных давлениях.

Средние и высокие давления (до 15 ГПа): Модули упругости увеличиваются, но на высоких давлениях начинается постепенный переход к более хрупкому поведению кристалла. Это можно видеть в снижении значений критерия Пью (B/G), который падает ниже 1,75 на давлениях около 12 ГПа, что свидетельствует о начале разрушения кристалла и его переходе к хрупкому состоянию.

Диаграммы упругости на рисунках 5 и 10 позволяют раскрыть физическую суть данного исследования. Наблюдаемая динамика изменения напряжения в зависимости от гидростатического давления соответствует известной диаграмме упругости. Таким образом, можно определить значения пределов пропорциональности, упругости, текучести и прочности.

Анализ показывает, что давление оказывает комплексное влияние на структуру кристалла: сначала упругость возрастает с некоторыми локальными аномалиями, но затем кристалл становится все более подвержен разрушению на высоких давлениях.

Благодарность

Это исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19680240).

Вклад авторов

Салиходжа Ж.М. – проведение основных экспериментов, написание текста статьи, интерпретация результатов исследования, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Нурахметов Т.Н. – анализ результатов экспериментов, критический пересмотр его содержания, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Кайнарбай А.Ж. – анализ результатов экспериментов, критический пересмотр содержания статьи, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Абуова Ф.У. – проведение расчетов, анализ экспериментальных данных, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Ахмедов А.С. – проведение основных квантово-химических расчетов, написание текста статьи, интерпретация результатов исследования.

Сулеймен Р.Н. – анализ результатов экспериментов, критический пересмотр содержания статьи, согласие нести ответственность за все аспекты работы.

Байрбаева Г.Б. – анализ полученных результатов в ходе проведения квантово-химического моделирования.

Литература

1. Omer F, Abdulla Y, Noh A. M. Preparation and Thermoluminescence Properties of Polycrystalline $\text{Na}_2\text{SO}_4/\text{SiO}_2$ composite//Brazilian Journal of Radiation Sciences, 2024, 12(1), e2322-e2322. DOI: <https://doi.org/10.15392/2319-0612.2024.2322>. – журнал на англ языке
2. Rasmussen S. E., Jørgensen J. E., Lundtoft B. Structures and phase transitions of Na_2SO_4 //Journal of Applied Crystallography, 1996, 29(1), 42–47. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889895008818>. – журнал на англ языке
3. Choi B. K., Lockwood D. J. "Peculiarities of the structural phase transitions in Na_2SO_4 (V): A Raman scattering study//Journal of Physics: Condensed Matter, 2005, 17(38), 6095. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/38/013>. – журнал на англ языке
4. Correcher V., et al. Luminescence emission spectra in the temperature range of the structural phase transitions of Na_2SO_4 //Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2004, 60(7), 1431–1438. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2003.08.008>. – журнал на англ языке
5. Proydakova V. Y., et al. Sodium sulfate polymorphism// Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2022, 67(7), 970–977. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036023622070208>. – Журнал на англ языке
6. Abul-Hail R. C., Abdallah M. K. Characterization of TL-D200 and TL-D100 for Thermoluminescent Radiation Dosimetry// International Journal of Engineering and Technical Research, 2018, 8(5), 264817. – журнал на англ языке
7. Pandey A., Sahare P. D. Thermoluminescence characteristics of LiNaSO_4 doped with rare earths Eu and Dy//physica status solidi (a), 2003, 199(3), 533–540. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssa.200306655>. – журнал на англ языке
8. Нурахметов Т.Н., Бахтизин Р.З., Салиходжа Ж.М., Жунусбеков А.М., Кайнарбай А.Ж., Дауренбеков Д.Х., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н. Зонная структура сульфатов щелочных металлов//Вестник ЕНУ им. Л. Н. Гумилева. Сер.: Физика. Астрономия. 2019. 1(126). С. 56–66. – журнал на англ языке
9. Nurakhmetov T.N., Salikhodzha Zh.M., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A.Zh., Daurenbekov D.H., Alibay T.T., Sadykova B.M., Zhangylyssov K.B., Yussupbekova B.N., Tolekov D.A. Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in irradiated Na_2SO_4 //Optik, 2021, 242, 167081. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081>. – журнал на англ языке
10. Nurakhmetov T.N., Alibay T.T., Zhangylyssov K.B., Daurenbekov D.H., Salikhodzha Zh.M., Shamiyeva R.K., Sadykova B.M., Yussupbekova B.N., Tolekov D.A. Energy Transfer in the CaSO_4 -Dy Thermoluminescent Dosimeter from the Excited State of the SO_4^{2-} Anionic Complex to the Impurities//Crystals, 2023, 13, 1596. DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst13111596>. – журнал на англ языке
11. Secco R.A., Secco E. A. Effect of pressure on the electrical conductivity, Na^+ -ion transport, in Na_2SO_4 //Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1992, 53(6), 749–753. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(92\)90184-F](https://doi.org/10.1016/0022-3697(92)90184-F). – журнал на англ языке
12. Krukau A.V., et al. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals//The Journal of Chemical Physics, 2006, 125(22). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2404663>. – журнал на англ языке
13. Zachariasen W.H., Ziegler G. E.//The crystal structure of anhydrous sodium sulfate Na_2SO_4 ," Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1932, 81(1–6), 92–101. DOI: <https://doi.org/10.1524/zkri.1932.81.1.92>. – журнал на англ языке
14. Kishore N., Nagarajan V., Chandiramouli R. Mechanical and electronic properties under high pressure on ternary AlGaIn and InGaIn compounds – a first-principles perspective//Materials Research Express, 2018, 6(1), 015052. – журнал на англ языке

15. Pugh S. F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals//The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367), 823-843. – журнал на англ языке

16. Katsnelson M. I., et al. Structure, elastic moduli, and thermodynamics of sodium and potassium at ultrahigh pressures//Physical Review B, 2000, 61(21), 14420. – журнал на англ языке

17. Arbeck D., et al. Elastic stiffness coefficients of thenardite and their pressure and temperature dependence//Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2012, 227(8), 503-513. – журнал на англ языке

18. Pistorius C. W. F. T. Phase diagrams of sodium sulfate and sodium chromate to 45 kbar//The Journal of Chemical Physics, 1965, 43(8), 2895-2898. – журнал на англ языке

Дж.М. Салиходжа¹, Т.Н.Нұрахметов¹, А.Ж.Қайнарбай¹, Ф.У.Абуова*¹, А.С. Ахмедов¹,
Р.Н. Сүлеймен¹, Г.Б. Байырбаева¹

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

Na_2SO_4 -V кристалының серпімділік қасиеттерін DFT әдісімен зерттеу

Аңдатпа. Бұл мақала гибридті функционалды HSE06 көмегімен тығыздық функционалдық теориясы (DFT) бойынша легирленген Na_2SO_4 кристалының серпімділік қасиеттерін зерттейді. Жұмыс тиімдірек термолюминесцентті дозиметрлерді (ТЛД) жасау мақсатында әртүрлі қысымдардағы Na_2SO_4 механикалық сипаттамаларын түсінуге бағытталған. Нәтижелер 15 ГПа дейінгі қысымда материалдың икемділігі мен серпімділігіне әсер ететін бірқатар құрылымдық өзгерістер орын алатынын көрсетеді. Кристалдың мінез-құлқын өзгертетін сыни нүктелерді анықтау маңызды жетістік болды: пластиктен сынғыш күйге өту шамамен 12 ГПа қысымда жүреді. Мақалада қысым астында кристалдық деформацияны басқаратын механизмдер егжей-тегжейлі сипатталған және фазалық ауысу мүмкіндігі қарастырылған. Бұл нәтижелер Na_2SO_4 -ды радиациялық дозиметрияда және материалдың механикалық кедергісі маңызды болып табылатын басқа қолданбаларда болашақта пайдалану үшін маңызды әсер етеді.

Түйін сөздер: Натрий сульфаты, кристаллдар, термолюминесценция, кванттық химиялық модельдеу, тығыздықтың функционалдық теориясы.

Zh.M. Salikhodja¹, T.N. Nurakhmetov¹, A.Zh. Kainarbay¹, F.U. Abuova*¹,
A.S. Akhmedov¹, R.N. Suleimen¹, G.B. Bairbayeva¹

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

Study of elastic properties of Na_2SO_4 -V crystal by DFT method

Abstract. This paper studies the elastic properties of Na_2SO_4 crystal using the density functional theory (DFT) method with the HSE06 hybrid functional. The work aims to understand the mechanical characteristics of Na_2SO_4 at different pressures in order to develop more efficient thermoluminescent dosimeters (TLDs). The results show that at pressures up to 15 GPa, a number of structural changes occur that affect the plasticity and elasticity of the material. An important achievement was the identification

of critical points at which the crystal changes its behavior: the transition from a plastic to a brittle state occurs at a pressure of about 12 GPa. The paper details the mechanisms governing the deformation of the crystal under pressure and discusses the possibility of phase transitions. These findings have important implications for the future use of Na_2SO_4 in radiation dosimetry and other applications where the material's resistance to mechanical stress is critical.

Keywords: Sodium sulfate, crystals, thermoluminescence, quantum chemical modeling, density functional theory.

References

1. Omer F., Abdulla Y., Noh A. M. Preparation and Thermoluminescence Properties of Polycrystalline $\text{Na}_2\text{SO}_4/\text{SiO}_2$ composite//Brazilian Journal of Radiation Sciences, 2024, 12(1), e2322-e2322. DOI: <https://doi.org/10.15392/2319-0612.2024.2322>.
2. Rasmussen S. E., Jørgensen J. E., Lundtoft B. Structures and phase transitions of Na_2SO_4 //Journal of Applied Crystallography, 1996, 29(1), 42–47. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889895008818>.
3. Choi B. K., Lockwood D. J. "Peculiarities of the structural phase transitions in Na_2SO_4 (V): A Raman scattering study//Journal of Physics: Condensed Matter, 2005, 17(38), 6095. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/38/013>.
4. Correcher V., et al. Luminescence emission spectra in the temperature range of the structural phase transitions of Na_2SO_4 //Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2004, 60(7), 1431–1438. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2003.08.008>.
5. Proydakova V. Y., et al. Sodium sulfate polymorphism// Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2022, 67(7), 970–977. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036023622070208>.
6. Abul-Hail R. C., Abdallah M. K. Characterization of TL-D200 and TL-D100 for Thermoluminescent Radiation Dosimetry// International Journal of Engineering and Technical Research, 2018, 8(5), 264817.
7. Pandey A., Sahare P. D. Thermoluminescence characteristics of LiNaSO_4 doped with rare earths Eu and Dy//physica status solidi (a), 2003, 199(3), 533–540. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssa.200306655>.
8. Nurakhmetov T.N., Bakhtizin R.Z., Salikhoja Zh.M., Zhunusbekov A.M., Kainarbai A.Zh., Daurenbekov D.Kh., Sadykova B.M., Zhanalysov K.B., Yusupbekova B.N. "Zonnaya struktura sul'fatov shchelochnykh metallov," [Band Structure of Alkali Metal Sulfates] Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series- 2019- №1(126)- p. 56–66. [In Russian]
9. Nurakhmetov T.N., Salikhodzha Zh.M., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A.Zh., Daurenbekov D.H., Alibay T.T., Sadykova B.M., Zhangylyssov K.B., Yussupbekova B.N., Tolekov D.A. Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in irradiated Na_2SO_4 //Optik, 2021, 242, 167081. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081>.
10. Nurakhmetov T.N., Alibay T.T., Zhangylyssov K.B., Daurenbekov D.H., Salikhodzha Zh.M., Shamiyeva R.K., Sadykova B.M., Yussupbekova B.N., Tolekov D.A. Energy Transfer in the CaSO_4 -Dy Thermoluminescent Dosimeter from the Excited State of the SO_4^{2-} Anionic Complex to the Impurities//Crystals, 2023, 13, 1596. DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst13111596>.
11. Secco R. A., Secco E. A. Effect of pressure on the electrical conductivity, Na^+ -ion transport, in Na_2SO_4 // Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1992, 53(6), 749–753. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(92\)90184-F](https://doi.org/10.1016/0022-3697(92)90184-F).

12. Krukau A. V., et al. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals//The Journal of Chemical Physics, 2006, 125(22). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2404663>.
13. Zachariassen W. H., Ziegler G. E.//The crystal structure of anhydrous sodium sulfate Na_2SO_4 ," Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1932, 81(1–6), 92–101. DOI: <https://doi.org/10.1524/zkri.1932.81.1.92>.
14. Kishore N., Nagarajan V., Chandiramouli R. Mechanical and electronic properties under high pressure on ternary AlGaN and InGaN compounds—a first-principles perspective//Materials Research Express, 2018, 6(1), 015052.
15. Pugh S. F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals//The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367), 823–843.
16. Katsnelson M. I., et al. Structure, elastic moduli, and thermodynamics of sodium and potassium at ultrahigh pressures//Physical Review B, 2000, 61(21), 14420.
17. Arbeck D., et al. Elastic stiffness coefficients of thenardite and their pressure and temperature dependence//Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2012, 227(8), 503–513.
18. Pistorius C. W. F. T. Phase diagrams of sodium sulfate and sodium chromate to 45 kbar//The Journal of Chemical Physics, 1965, 43(8), 2895–2898.

Сведения об авторах:

Салиходжа Ж.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Нурахметов Т.Н. – д.ф.-м.н., профессор кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Кайнарбай А.Ж. – к.ф.-м.н., заведующий кафедрой технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Абуова Ф.У. – автор для корреспонденции, PhD, доцент кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Ахмедов А.С. – магистрант 2 курса, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Сулеймен Р.Н. – PhD, доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

Байрбаева Г.Б. – преподаватель кафедры теплоэнергетики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан.

About the authors:

Salikhodzha Zh.M. – PhD, Associate Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Nurakhmetov T.N. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Kainarbay A.Zh. – PhD, Associate Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Abuova F.U. – corresponding author, PhD, Associate Professor, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Akhmedov A.S. – 2nd year Master's student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Suleimen R.N. – PhD, Associate Professor, Department of Technical Physics L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Bayirbaeva G.B. – Lecturer, Department of Thermal Power Engineering, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Салиходжа Ж.М. – ф.-м.ғ.к., техникалық физика кафедрасының доценті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Нұрахметов Т.Н. – физика-математика ғылымдарының докторы, техникалық физика кафедрасының профессоры, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Қайнарбай А.Ж. – ф.-м.ғ.к., техникалық физика кафедрасының меңгерушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің техникалық физика кафедрасының доценті, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – хат-хабар авторы, PhD, «ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының доценті, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Ахмедов А.С. – 2 курс магистранты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Сүлеймен Р.Н. – PhD, техникалық физика кафедрасының доценті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Байырбаева Г.Б. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің «жылу энергетикасы» кафедрасының оқытушысы, 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/>).



IRSTI 29.19.03

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2024-149-4-199-215>

Научная статья

Recombination emission in the phosphor $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}^{2+}$

Shamiyeva R.K.^{*1}, Balapanov M.H.², Salikhodzha Zh.M.¹, Kainarbay A.Zh.¹,
Sadykova B.M.¹, Zhangylssov K.B.¹, Nurpeissov A.S.¹, Karibay B.A.¹, Batisheva A.T.¹

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

²Ufa University of Science and Technology, Ufa, Bashkortostan, Russia

(E-mail: ¹rasha_arman@bk.ru)

Abstract. Optical methods were used to investigate the formation of combined or induced electronic emissive states in irradiated $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}^{2+}$ phosphor at 2.9 eV and 3.1 eV. The combined electronic emissive state consists of electronic states of impurity $\text{Pb}^+ - \text{SO}_4^-$ and intrinsic $\text{SO}_4^{3-} - \text{SO}_4^-$ trapping centers. The impurity electronic states are formed by capturing free electrons of conduction band by Pb^{2+} impurities and localizing electrons resulting from charge transfer from the excited anion complex $\text{SO}_4^{2-}(\text{O}^{2-} - \text{Pb}^{2+})$ impurities by reaction $\text{Pb}^{2+} + (\text{e}^- + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{Pb}^+ - \text{SO}_4^-$. The intrinsic electronic states are formed by capturing free electrons of conduction band by anion complexes or by localizing electrons resulting from charge transfer from the excited anion complex $\text{SO}_4^{2-}(\text{O}^{2-} - \text{SO}_4^-)$ to neighboring anion complexes by reaction $\text{SO}_4^{2-} + (\text{e}^- + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{SO}_4^{3-} - \text{SO}_4^-$. The combined electronic emissive states at 2.9 eV and 3.1 eV are excited by photons of 3.9-4.0 eV and 4.5 eV. It was also experimentally shown that in the phosphor with induced trapping centers, recombination emissions at 2.9 eV and 3.1 eV are regenerated upon excitation by photons of 3.9-4.0 eV and 4.5 eV. Thus, energies of 3.9-4.0 eV and 4.5 eV are the excitation and absorption energies between the electronic and hole trapping centers located in the transparency region of $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}^{2+}$ phosphor.

Keywords: sulfate; electron; recombination emission; intrinsic emission; hole; excitation.

Introduction

CaSO₄ compounds, whether in the form of crystals or pressed powders, activated by rare earth and transition metals, are widely used in dosimeters and as emission sources in phosphors. It is well-known that phosphors activated by rare earth ions are significantly more expensive than those activated by transition metals or other non-rare earth ions.

In the work by the authors [1], ZnB₂O₄ – Pb²⁺ powdered phosphors emitting ultraviolet radiation were studied. It was shown that these phosphors emit blue light at 3.1 эВ (388 nm) when excited by photons with an energy of 4.08 эВ (304 nm). ZnB₂O₄ – Pb²⁺ phosphors are good candidates for wavelength converters used in various UV radiation applications.

In phosphors [2,3] based on SrB₂O₄ – Pb²⁺ and MAI₂B₂O₇ – Pb²⁺, intra-center emissions of Pb²⁺ impurities were observed at room temperature at 3.4 эВ (363 nm) and 2.9 эВ (420 nm) when excited by photons with energies of 4.5 эВ (270 nm) and 4.4 эВ (277 nm), respectively.

In the work by [4] on Pb²⁺ activated aluminates and gallates, two types of intra-center luminescence of impurities were discovered. The first type of emission is associated with intra-center transitions ³P₁ – ¹S₀ in the Pb²⁺ ion. The second type of emission is linked to the so-called C-D level transition of Pb²⁺ impurities in the matrix, associated with the transition of an electron to an activator disturbed by the excitonic state of the matrix.

In the phosphor [5] SrMgBO₃Pb²⁺ – Gd³⁺, under the influence of mercury radiation at 4.8 эВ (254 nm), two emission spectra were observed: one line at 3.9 эВ (313 nm) and another emission band at 3.7 эВ (330 nm). It is suggested that this phosphor can be used as a phototherapeutic material for UVB therapy.

In the work [6] have shown that the position of intra-center Pb⁺ emission in ZnTiO₃ nanocrystals is strongly influenced by its interaction with the lattice. An increase in Pb²⁺ concentration significantly affects the maximum emission band. Red emission at 2 эВ (620 nm) observed by the authors is associated with charge transfer between Pb²⁺ ions and the ZnTiO₃ matrix.

In the CaAlBO₄ phosphor [7] doped with Pb²⁺, Dy³⁺, and Sm³⁺, photoluminescent properties at 300 K were studied. It was shown that CaAlBO₄ – Pb²⁺ phosphor emits a broad band at 339 nm when excited by photons with an energy of 4.5 эВ (272 nm). CaAlBO₄ – Pb²⁺ Dy³⁺, Sm³⁺ phosphors are optical materials for developing new optical display systems and sensitizers for recombination emissions in the red spectral region.

In the work by the authors [8], the optical properties of the Ca₂La₈SiO₄6O₂ – Pb²⁺ phosphor were studied. The luminescence of Pb²⁺ ions in apatites, which can be used in X-ray imaging devices, low-pressure lamps, and high-energy physics, was shown.

In the SrZnO₂- Pb phosphor obtained by the sol-gel method, broadband emissions with a maximum at 2.7 эВ (451 nm) were discovered, excited by photons with energies of 4.3 эВ (283 nm) and 3.9 эВ (317 nm). The matrix band gap is 3.4 eV. Emissions are associated with combined impurity-excitonic states [9].

Recombination emissions related to the creation of electron-hole trapping centers were previously studied [10-13] in CaSO₄ and CaSO₄-Mn. It was shown that in CaSO₄ and CaSO₄-Mn, intrinsic and impurity electron-hole trapping centers created during recombination decay emit intrinsic recombination or tunneling emissions, as well as impurity emissions of Mn⁽²⁺⁾ ions.

By analyzing the works of the authors [5-6,9] as well as [10-14], the following conclusion can be drawn: in irradiated phosphors with photons whose energy exceeds the band gap [11], intrinsic and impurity trapping centers are formed. As a result of their recombination decay, intrinsic recombination emissions, as well as intra-center impurity emissions, occur.

This work examines the nature of recombination emissions in $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}^{2+}$ phosphor arising when irradiated with photons whose energy exceeds the band gap of the matrix.

Experimental part

For the experiments, highly pure calcium sulfate (99.99% purity, Sigma Aldrich) and lead sulfate powders (Sigma Aldrich) were used. $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}^{2+}$ samples were obtained by the slow evaporation method. A stoichiometrically calculated amount of CaSO_4 was mixed with a pre-calculated amount of PbSO_4 impurity. Concentrated sulfuric acid was used to dissolve the mixture. After complete dissolution, the solution was washed several times with distilled water and dried at 70°C . The samples were then sintered at 400°C for 5 hours in an argon atmosphere. The annealed powder was slowly cooled over several hours. The final samples were pressed at 0.05 MPa.

The samples were analyzed using fundamental and thermally stimulated spectroscopy methods. The structure and purity were analyzed using microscopic and energy-dispersive elemental analysis. Primary photoluminescent measurements were conducted with a Solar SM2203 spectrofluorimeter (Belarus). Corrections to the Solar SM2203 spectrofluorimeter graphs are included in the software.

Studies at low temperatures down to 77 K and temperature dependence measurements were performed in a thermally activated complex consisting of a cryostat with three quartz windows and one beryllium oxide window, excitation and registration monochromators (OKB "Spektr MDR-41" and MDR-23U, respectively), and a photomultiplier (Hamamatsu 1P28). The system was vacuumed to a pressure of 10^{-2} Pa and cooled with liquid nitrogen.

For the study of thermally stimulated luminescence (TSL), the samples were irradiated with X-rays. After irradiation, the samples were heated at a constant rate of 0.1-0.2 degrees per second, and the integral TSL was recorded by a photomultiplier.

An energy-dispersive X-ray spectrometer (EDS) and a scanning electron microscope (SEM) were used for analysis. SEM: Hitachi TM4000Plus II EDS: BRUKER. SEM working condition: EHT 10 kV. X-ray structural analysis was performed on a D6 PHASER diffractometer from BRUKER.

Results

In previous studies of authors [15] on $\text{Na}_2\text{SO}_4 - \text{Pb}$ and $\text{K}_2\text{SO}_4 - \text{Pb}$ phosphors, the mechanisms creation and their recombination decay of trapping centers over a wide temperature range were investigated.

In order to determine the purity of the samples, the microstructure and elemental analysis of the obtained samples were performed. The microstructure of pure $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}$ powder samples was examined using a scanning electron microscope (SEM) (Fig. 1 a) and energy-dispersive

X-ray spectroscopy (EDS) (Fig. 1 b). The SEM image shows that the micro-powder sizes range from 0.5 to 15 μm , with particles predominantly measuring 2-8 μm .

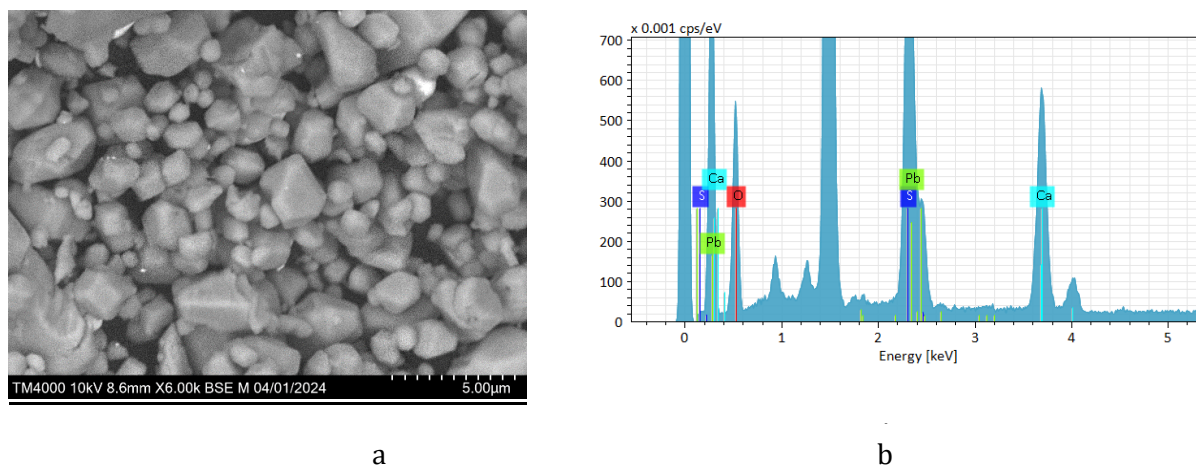


Figure 1. (a) SEM image, (b) EDS elemental analysis of irradiated CaSO_4 -Pb phosphor

The elemental analysis (EDS) indicated that the sample consists of the main matrix of CaSO_4 and lead impurities, with no other specific impurities present.

Next step is investigating the optical properties of irradiated CaSO_4 -Pb phosphor.

In Fig. 2 (curve 1 and curve 2), the emission spectra of irradiated CaSO_4 -Pb phosphor at 300 K (curve 1) and 77 K (curve 2) excited by photons with an energy of 6.2 eV are shown. The same figure (curve 3 and curve 4) presents the emission spectra of irradiated CaSO_4 -Pb phosphor at 300 K (curve 3) and 77 K (curve 4) excited by photons with an energy of 5.64 eV.

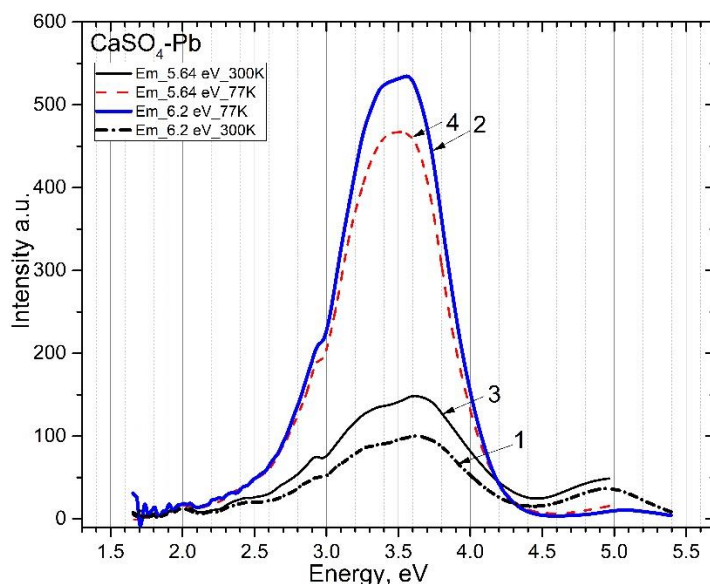


Figure 2. Emission spectra of CaSO_4 -Pb excited by photons with energy: 6.2 eV at 300 K (curve 1); 6.2 eV at 77 K (curve 2); 5.64 eV at 300 K (curve 3); 5.64 eV at 77 K (curve 4)

From Fig. 2 (curves 1 and 3), it is evident that at 300 K, a broad emission with a maximum at 3.65 eV corresponding to Pb^{2+} impurities is more effectively created [15]. At low temperatures of 77 K, due to the appearance of new emission centers, the overall broad emission band shifts (Fig. 2 curves 2 and 4) to the longer wavelength region with a maximum at 3.4 eV.

Similar to other pure sulfates and those with impurities [16-22], after irradiation at 77 K, induced emission bands appear at 2.9 eV and 3.1 eV.

In Fig. 3, the excitation spectra of the 3.1 eV emission band (curve 1) and the 2.9 eV band (curve 3) at 300 K, as well as the 3.1 eV emission band (curve 2) and the 2.9 eV band (curve 4) at 77 K, are presented.

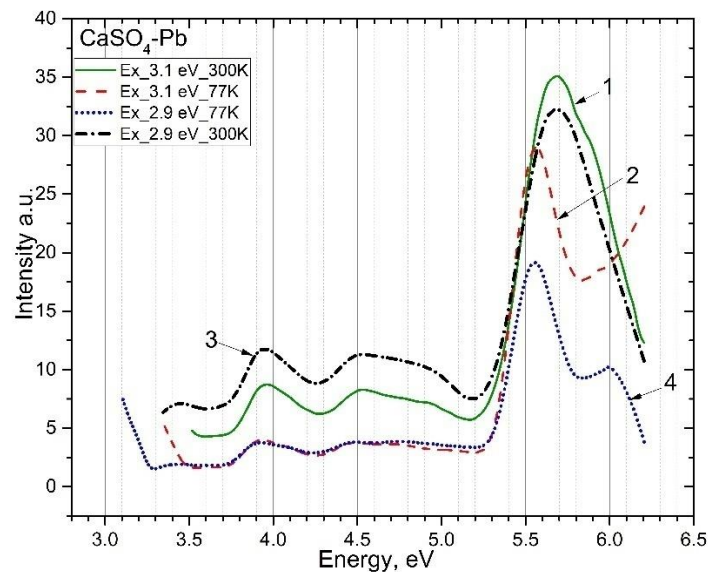


Figure 3. Excitation spectra of $\text{CaSO}_4 - \text{Pb}$ for emission bands: 3.1 eV at 300 K (curve 1); 3.1 eV at 77 K (curve 2); 2.9 eV at 300 K (curve 3); 2.9 eV at 77 K (curve 4)

From Fig. 3 (curves 1 and 3), it is evident that recombination emissions are excited at 300 K (curves 1 and 3) and 77 K (curves 2 and 4) at 5.6 eV, 5.9 eV, 4.5 eV, and 3.9 eV. Thus, these recombination emission bands are excited or created in the fundamental region of the matrix at 5.5-6.2 eV and in the transparency region of the CaSO_4 matrix at 4.5 eV and 3.9 eV.

In Fig. 4 (curves 1-3), the excitation spectra of the main intra-center emission of Pb^{2+} impurities at 3.65 eV and 3.4 eV at 300 K and 77 K are presented.

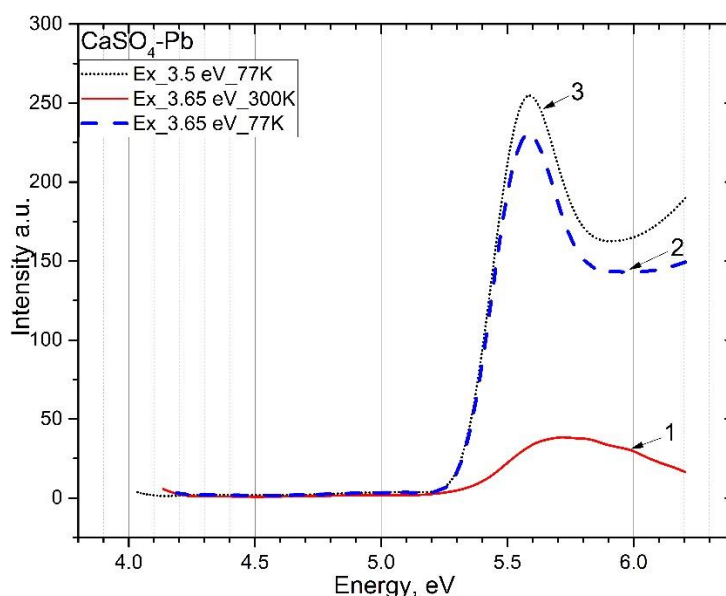


Figure 4. Excitation spectra of Pb^{2+} impurity emission bands at: 3.65 eV at 300 K (curve 1); 3.4 eV at 77 K (curve 2); 3.4 eV at 77 K (curve 3)

From Fig. 4 (curves 2 and 3), it can be seen that the 3.4 eV emission is excited by photons with an energy of 5.57 eV. At 300 K (Fig. 4 curve 1), the 3.65 eV emission is excited over a broad spectral range from 5.5 eV to 5.9 eV, meaning that the Pb^{2+} impurity at 300 K is excited by intra-center absorption of Pb^{2+} at 5.5 eV [23], as well as in the fundamental region of the matrix.

Thus, intra-center emission is excited in the spectral region corresponding to Pb^{2+} ion absorption in the matrix.

New recombination emission at 3.1 eV and 2.9 eV is excited in the fundamental absorption edges at photon energies of 4.5 eV and 3.9 eV.

In Fig. 5, the emission spectra of recombination emission upon excitation by 4.5 eV photons at 300 K (curve 1) and 77 K (curve 2) are presented. The same figure (curves 3 and 4) presents the recombination emissions upon excitation by 3.9 eV photons.

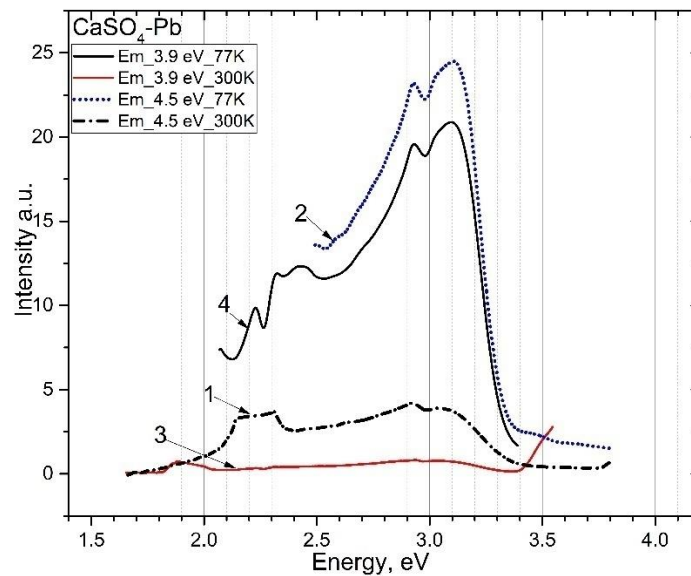


Figure 5. Emission spectra of $\text{CaSO}_4\text{-Pb}$ excited by photons with energy: 4.5 eV at 300 K (curve 1); 4.5 eV at 77 K (curve 2); 3.9 eV at 300 K (curve 3); 3.9 eV at 77 K (curve 4)

It can be seen that in both cases, recombination emissions of 3.1 eV and 2.9 eV appear (intensity upon excitation at 77 K is much higher than at 300 K). The experimental [13] result shows that photons with energies of 3.9 eV and 4.5 eV are the excitation spectra of the new recombination emission.

To determine the nature of the recombination and intra-center emissions arising from the corresponding excitations, the changes in their emission intensity depending on temperature from 77 K to 450 K were measured. In Fig. 6 (curves 1-4), the changes in the intensity of intra-center emissions at 3.4 eV (curve 1) and 3.65 eV (curve 2), and the new induced emission at 3.1 eV (curve 3) and 2.9 eV (curve 4), are presented.

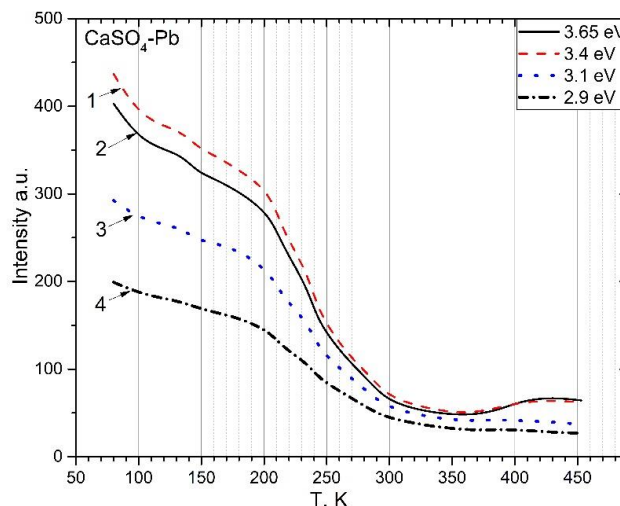


Figure 6. Temperature dependence of intra-center emission of $\text{CaSO}_4\text{-Pb}$ at: curve 1 – 3.4 eV; curve 2 – 3.65 eV; curve 3 – 3.1 eV; curve 4 – 2.9 eV

From Fig. 6, it can be seen that the intensity of the induced emission at 3.1 eV (curve 3) and 2.9 eV (curve 4) gradually decreases to a minimum value from 200 K to 300 K, then slowly decreases. The intensity of intra-center emission at 3.65 eV and 3.4 eV, overlapping with the new induced emissions, also decreases from 200 K to 350 K, then gradually increases to 450 K.

In Fig. 7, the thermally stimulated luminescence (TSL) glow curve of irradiated $\text{CaSO}_4\text{-Pb}$ at liquid nitrogen temperature is presented.

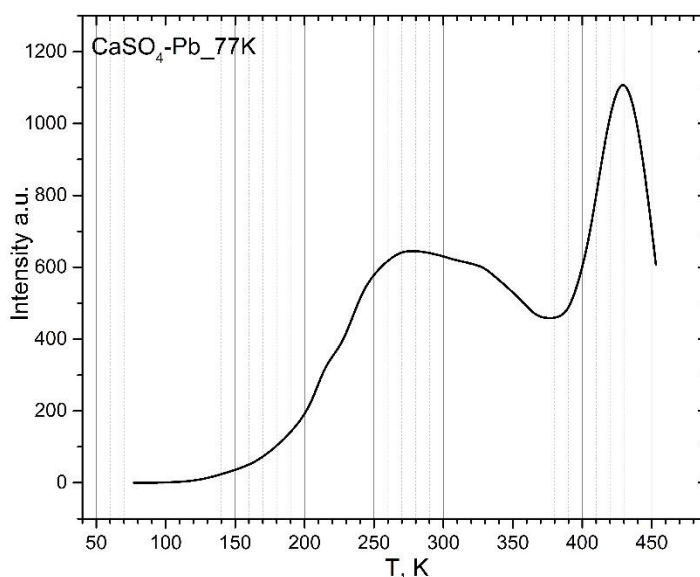


Figure 7. Thermally stimulated luminescence glow curve of $\text{CaSO}_4\text{-Pb}$ irradiated by X-rays for 1 minute at 77 K

It can be seen that the TSL maxima fall in the temperature range of 200-350 K, where the decay of the combined emissive state at 2.9-3.1 eV occurs. The high-temperature TSL at 430 K corresponds to the increase in Pb^{2+} emission intensity.

Discussion

The main research question of this study is the formation of a new combined emissive electronic state and to show that as a result of the recombination decay of the electronic state, the energy of electronic excitations of the matrix is transferred to the emitters, i.e., impurities.

In this work, when irradiated with photons whose energy exceeds the band gap or due to charge transfer from the excited SO_4^{2-} anion complex to Pb^{2+} impurities or neighboring SO_4^{2-} ions, free electrons are formed, which are captured by impurities or neighboring SO_4^{2-} ions of the matrix. Electron trapping centers are created according to the reactions $e^- + \text{Pb}^{2+} \rightarrow \text{Pb}^+$ and $e^- + \text{SO}_4^{2-} \rightarrow \text{SO}_4^{3-}$, and hole centers in the form of $\text{SO}_4^{\cdot-}$.

It is assumed, as shown in the band diagram (Figure 8), that the SO_4^{3-} and Pb^+ trapping centers below the conduction band should correspond to local states, and their complementary $\text{SO}_4^{\cdot-}$ hole component is located above the valence band. Thus, these complementary trapping centers in

the fundamental absorption edges correspond to local states. During the recombination decay of these intrinsic and impurity trapping centers, recombination and tunneling emissions at 2.9 eV and 3.1 eV are observed. Measurements have shown that these recombination emissions at 2.9 eV and 3.1 eV correspond to the excitation spectrum at 3.9 eV and 4.5 eV. Experimentally, it has been shown that the CaSO_4 -Pb phosphor with induced trapping centers, when excited by photons of 4.5 eV and 3.9 eV, re-emits recombination emission at 2.9 eV and 3.1 eV.

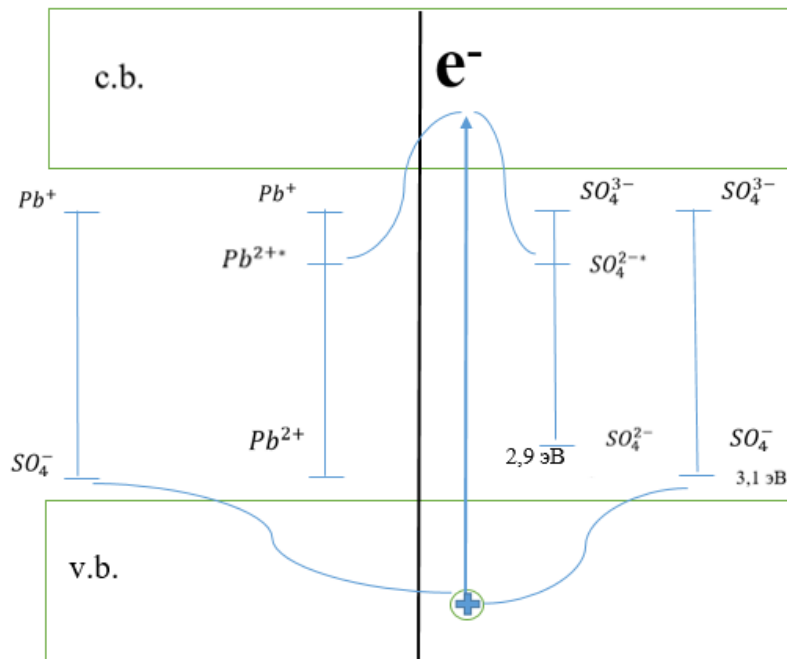


Figure 8. Band diagram of calcium sulfate with lead impurity. Pb^{2+*} -excited state of impurity; SO_4^{2-*} - excited state of the anion

Regarding the presence of Pb^+ ions in the composition of $\text{Pb}^+ - \text{SO}_4^-$ -trapping centers, it can be observed when measuring the temperature dependence of combined and impurity emission. From Fig. 5, it can be seen that the intensity of combined emission (curves 3 and 4) in the temperature range of 200-350 K monotonically decreases, i.e., decays during the ionization of Pb^+ to $\text{Pb}^{2+} + e^-$. Above 350 K, the intensity of intra-center Pb^{2+} emission in the temperature range of 350-450 K increases, i.e., the electronic states of Pb^{2+} are restored due to the ionization of the Pb^+ center. The increase in Pb^{2+} emission can be explained by the following processes: during the ionization of Pb^+ , an electron is released. This electron recombines with a hole in SO_4^- located near the Pb^{2+} ion. The energy released during this recombination is transferred to the Pb^{2+} impurity ions, leading to their excitation. This process can be interpreted as a reabsorption mechanism, where the transferred energy excites the Pb^{2+} centers. After relaxation from the excited state, Pb^{2+} emits light, resulting in the observed increase in emission intensity. In this process, during the recombination of electron-hole pairs of the matrix, energy is transferred from the matrix to the impurities. This demonstrates an elementary mechanism of energy

transfer from the matrix to the impurities. In this experiment, due to the overlap of impurity emission and induced emission bands, the energy transfer process is not clearly identified.

The second question regarding the appearance of two intra-center emission bands at 3.65 eV and 3.4 eV, as well as the appearance of two combined emission bands, is associated with the anisotropic properties of alkali and alkaline earth metal sulfates.

In the works [24], it has been shown that two types of SO_4^- holes (A and B) are formed in $CaSO_4$ crystals after irradiation due to the anisotropic properties of the crystal. Theoretical studies by the authors [25] have shown that the ground state of an unpaired electron in SO_4^- in different crystallographic directions has different energies relative to the top of the valence band. Therefore, during the recombination decay of the induced electronic state at 2.9 eV and 3.1 eV, an electron arising after ionization recombines with holes located at different distances from the top of the valence band, resulting in different energies of recombination emission.

Now regarding the two intra-center emissions at 3.4 eV and 3.65 eV. The formation of two types of SO_4^- radicals in the lattice is associated with Ca cations in the matrix in different ways. During the substitution of such cations by Pb^{2+} impurities, different binding energies of Pb^{2+} with SO_4^{2-} anion complexes are formed. It is assumed that the appearance of two emission bands of impurities is due to the anisotropic properties of the matrix.

Conclusion

In $CaSO_4$ - Pb^{2+} phosphors, as in other matrices activated by Pb^{2+} ions, intracenter emissions occur in the energy ranges of 3.4 eV and 3.65 eV. The novelty of this work lies in the appearance of new electronic emissive states that emit recombination emission at 2.9 eV and 3.1 eV. These new emissive states arise from the capture of impurities and anions of the matrix by free zonal electrons formed during excitation by photons with energy exceeding the bandgap of the $CaSO_4$ matrix through the reactions $Pb^{2+} + (e^- + SO_4^-) \rightarrow Pb^+ - SO_4^-$ and $SO_4^{2-} + (e^- + SO_4^-) \rightarrow SO_4^{3-} - SO_4^-$. The new electronic emissive states consist of the electronic states of the trapping centers $Pb^+ - SO_4^-$ and $SO_4^{3-} - SO_4^-$ in the $CaSO_4$ - Pb^{2+} matrix. During the recombination decay of these combined electronic states (Pb^+ and SO_4^{3-}), recombination emission occurs at 2.9 eV and 3.1 eV, along with emissions from the restored Pb^{3+} . At the moment of recombination decay of the combined emissive state, the energy of the intrinsic electronic excitations ($e^- + SO_4^-$) is transferred to the emitters or impurities in the luminescent lamps used, as well as in modern phosphors with semiconductor chips.

The formation of two intracenter emission bands at 3.4 eV and 3.65 eV is associated with the substitution of Pb^{2+} impurities for the Ca^{2+} cations in the base, with different binding energies to the anionic complex.

Funding

This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No: AP23488657).

The author's contribution

Shamiyeva R.K. – results calculation, writing the text and critically revising its content, approval of the final version of the article for publication

Balapanov M.H. – approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Salikhodzha Zh.M. – writing the text and critically revising its content, approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Kainarbay A.Zh. – approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Sadykova B.M. – approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Zhangylyssov K.B. – approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Nurpeissov A.S. – approval of the final version of the article for publication, agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Karibay B.A. – agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

Batisheva A.T. – agreement to be responsible for all aspects of the work, proper examination and resolution of issues related to the reliability of the data

References

1. Yilmaz M., Erdoğan E., Luminescence properties of ZnB_2O_4 : Pb^{2+} phosphors: Suppression of concentration quenching, *Journal of Luminescence*, 2020, Vol. 218, p. 116868. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.116868> – **Journal paper**

2. Taşcıoğlu S., Pekgözlü İ., Mergen A., Synthesis and photoluminescence properties of Pb^{2+} doped $\text{SrAl}_2\text{B}_2\text{O}_7$, *Materials Chemistry and Physics*, 2008, Vol. 112, No. 1, pp. 78-82. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2008.05.031> – **Journal paper**

3. Pekgözlü İ., Taşcıoğlu S., & Mergen A., Luminescence of Pb^{2+} in $\text{MAl}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (M = Ca, Sr), *Inorganic Materials*, 2008, Vol. 44, No. 10, pp. 1151-1154. <https://doi.org/10.1134/S0020168508100221> – **Journal paper**

4. Folkerts H. F., Ghianni F., Blasse G., Search for D-level emission of Pb^{2+} in alkaline-earth aluminates and gallates, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1996, Vol. 57, No. 11, pp. 1659-1665. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(96\)00041-8](https://doi.org/10.1016/0022-3697(96)00041-8) – **Journal paper**

5. Bhagat S. P., Gawande A. B., Omanwar S. K., Photoluminescence study of a novel UV emitting phosphor $\text{Sr}_2\text{Mg}(\text{BO}_3)_2$: Pb^{2+} , Gd^{3+} , *Optical Materials*, 2015, Vol. 40, pp. 36-40. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2014.11.043> – **Journal paper**

6. Wang S. F., et al., Photoluminescence characteristics of Pb²⁺ ion in sol-gel derived ZnTiO₃ nanocrystals, *Inorganic Chemistry Communications*, 2003, Vol. 6, No. 2, pp. 185-188.[https://doi.org/10.1016/S1387-7003\(02\)00711-6](https://doi.org/10.1016/S1387-7003(02)00711-6) – **Journal paper**

7. Erdoğan E., Pekgözlü İ., Photoluminescence properties of CaAlBO₄: M (M: Pb²⁺, Dy³⁺, and Sm³⁺), *Journal of Applied Spectroscopy*, 2014, Vol. 81, pp. 394-398.<https://dx.doi.org/10.1007/s10812-014-9943-4> – **Journal paper**

8. Singh V., Tiwari M. K., UV emitting Pb²⁺ doped Ca₂La₈(SiO₄)₆O₂ phosphors prepared by sol-gel procedure, *Optik*, 2020, Vol. 206, p. 163600.<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163600> – **Journal paper**

9. Manavbasi A., LaCombe J. C., A new blue-emitting phosphor SrZnO₂: Pb²⁺ synthesized by the adipic acid templated sol-gel route, *Journal of Luminescence*, 2008, Vol. 128, No. 1, pp. 129-134.<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2007.06.002> – **Journal paper**

10. Nurakhmetov T. N., et al., Specific Features of Formation of Electron and Hole Trapping Centers in Irradiated CaSO₄-Mn and BaSO₄-Mn, *Crystals*, 2023, Vol. 13, No. 7, p. 1054.<https://doi.org/10.3390/cryst13071054> – **Journal paper**

11. Nurakhmetov T. N., et al., Energy Transfer in the CaSO₄- Dy Thermoluminescent Dosimeter from the Excited State of the SO₄²⁻ Anionic Complex to the Impurities, *Crystals*, 2023, Vol. 13, No. 11, p. 1596.<https://doi.org/10.3390/cryst13111596> – **Journal paper**

12. Salikhodzha Z.M., et al., Recombination luminescence in CaSO₄, *Radiation Measurements*, 2019, Vol. 125, pp. 19-24.<https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2019.04.010> – **Journal paper**

13. Nurakhmetov T.N., et al., Energy transfer of intrinsic electronic excitation to impurities in the CaSO₄-Mn, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2021, Vol. 5, No. 1, pp. 31-38.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2021050104> – **Journal paper**

14. Nurakhmetov T.N., et al., Electron-hole trapping centers in Na₂SO₄ with a transition metal impurity Mn, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2023, Vol. 7, No. 1, pp. 38-44.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2023070102> – **Journal paper**

15. Nurakhmetov T. N., et al., Luminescence and creation of electron-hole trapping centers in alkali metal sulfates activated by Pb²⁺ impurity, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2024, Vol. 8, No. 1, pp. 33-44. DOI: 10.32523/ejpfm.2024080104 – **Journal paper**

16. Nurakhmetov T. N., et al., Electron-hole trapping centers in alkali metal sulfates with Dy³⁺ impurities, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2023, Vol. 7, No. 2, pp. 115-122.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2023070204> – **Journal paper**

17. Nurakhmetov T. N., et al., Photoluminescence and thermoluminescence in a Li₂SO₄ crystal, 2022. <http://rep.enu.kz/handle/enu/13157> – **Journal paper**

18. Nurakhmetov T. N., et al., Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in irradiated Na₂SO₄, *Optik*, 2021, Vol. 242, p. 167081.<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081> – **Journal paper**

19. Yussupbekova B. N., et al., Intrinsic and impurity emission and formation mechanism of trapping centers in LiKSO₄-Cu crystals, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2020, Vol. 481, pp. 19-23.<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.07.027> – **Journal paper**

20. Nurakhmetov T. N., et al., Mechanisms of formation of electron-hole trap centers in LiKSO₄ crystals, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2021, Vol. 5, No. 1, pp. 24-30.<http://rep.enu.kz/handle/enu/13195> – Internet resource

21. Nurakhmetov T. N., et al., Influence of Cu^+ impurity on the efficiency of creation of electron-hole trapping centers in irradiated $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-Cu}$ crystals, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, Vol. 5, No. 3, pp. 200-208. <http://rep.enu.kz/handle/enu/13238> – **Journal paper**

22. Nurakhmetov T. N., et al., Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{-Cu}$ crystals, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, Vol. 5, No. 2, pp. 140-147. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081> – **Journal paper**

23. Nicoara I. et al. Growth and spectroscopic characterization of Pb^{2+} : CaF_2 crystals //The European Physical Journal B. – 2012. Vol. 85, pp. 1-7. – **Journal paper**

24. Danby R. J., et al., ESR of thermoluminescent centres in CaSO_4 single crystals, Journal of Physics C: Solid State Physics, 1982, Vol. 15, No. 11, pp. 2483. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/15/11/025> – **Journal paper**

25. Nair S.R., et al., Redox reactions, radio-photoluminescence, and thermoluminescence in Journal of Physics: Condensed Matter, 1997, Vol. 9, No. 39, pp. 8307. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/9/39/015> – **Journal paper**

Шамиева Р. К.*¹, Балапанов М.Х.², Салиходжа Ж.М.¹,

Садыкова Б.М.¹, Нурпеисов А.С.¹, Юсупбекова Б.Н.¹, Кәрібай Б.А.¹, Батишева А.Т.¹

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

²Уфа Ғылым және технология университеті, Уфа, Башқұртстан, Ресей

(E-mail: ¹rasha_arman@bk.ru)

$\text{CaSO}_4\text{-Pb}_{2+}$ люминофорындағы рекомбинациялық сәулелену

Андатпа. Оптикалық әдістермен $\text{CaSO}_4\text{-Pb}^{2+}$ люминофорында пайда болған комбинирленген немесе индуцирленген электрондық сәулелену 2,9 эВ және 3,1 эВ тең күйінің түзілуі зерттелді. Комбинирленген электрондық сәулелену күйі $\text{Pb}^+\text{-SO}_4^-$ қоспа орталықтарының электрондық күйлерінен және матрицаның $\text{SO}_4^{3-}\text{-SO}_4^-$ меншікті қармау орталықтарының электрондық күйлерінен тұрады. Қоспа қармау орталықтарының электрондық күйлері еркін зоналық электрондардың Pb^{2+} қоспасымен қармалуы кезінде немесе қоздырылған аниондық комплекстен $\text{SO}_4^{2-}\text{-O}^{2-}\text{-Pb}^{2+}$ қоспаға заряд тасымалдау нәтижесінде түзілген электрондардың локализациялануы кезінде $\text{Pb}^{2+} + (\text{e} + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{Pb}^+\text{-SO}_4^-$ реакциясы бойынша түзіледі. Меншікті қармау орталықтарының электрондық күйлері еркін зоналық электрондардың аниондық комплекстермен қармалуы немесе қоздырылған аниондық комплекстен $\text{SO}_4^-(\text{O}^{2-}\text{-SO}_4^{2-})$ көрші аниондық комплекстерге заряд тасымалдау нәтижесінде түзілген электрондардың локализациялануы кезінде $\text{SO}_4^{2-} + (\text{e} + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{SO}_4^{3-}\text{-SO}_4^-$ реакциясы бойынша түзіледі.

Өлшеулер көрсеткендей, 2,9 эВ және 3,1 эВ кезіндегі комбинирленген электрондық сәулелену күйлері 3,9-4,0 эВ және 4,5 эВ фотон энергияларымен қоздырылады. Сондай-ақ эксперименталды түрде көрсетілгендей, қармау орталықтары индуцирленген люминофорларда 3,9-4,0 эВ және 4,5 эВ фотондармен қоздырылған кезде 3,1 эВ және 2,9 эВ рекомбинациялық сәулеленулер қайта түзіледі. Осылайша, 3,9-4,0 эВ және 4,5 эВ фотон энергиялары $\text{CaSO}_4\text{-Pb}^{2+}$ люминофор матрицасының мөлдірлік аймағында орналасқан электрондық және кемтіктік қармау орталықтары арасындағы қоздыру және сіңіру энергиялары болып табылады.

Түйін сөздер: сульфат, электрон, рекомбинациялық сәулелену, меншікті радиация, кемтік, қозу.

Шамиева Р.К.*¹, Балапанов М.Х.², Салиходжа Ж. М.¹,
Садыкова Б.М.¹, Нурпеисов А.С.¹, Юсупбекова Б.Н.¹, Карибай Б.А.¹, Батишева А.Т.¹

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Башкортостан, Россия

Рекомбинационное излучение в люминофоре $\text{CaSO}_4\text{-Pb}^{2+}$

Аннотация. Оптическими методами исследовано образование комбинированного или индуцированного электронного излучательного состояния в облученном люминофоре $\text{CaSO}_4\text{-Pb}^{2+}$ при 2,9 эВ и 3,1 эВ. Комбинированное электронное излучательное состояние состоит из электронных состояний примесных центров $\text{Pb}^+\text{-SO}_4^-$ и электронных состояний $\text{SO}_4^{3-}\text{-SO}_4^-$ собственных центров захвата матрицы. Примесные электронные состояния центров захвата образуются при захвате свободных зонных электронов примеся Pb^{2+} или при локализации электронов созданного в результате переноса заряда от возбужденного анионного комплекса $\text{SO}_4^{2-}\text{-O}^{2-}\text{-Pb}^{2+}$ к примесям Pb^{2+} по реакции $\text{Pb}^{2+} + (e^- + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{Pb}^+ \text{-SO}_4^-$. Собственные электронные состояния центров захвата образуются при захвате свободных зонных электронов анионными комплексами или локализации электронов созданного в результате переноса заряда от возбужденного анионного комплекса $\text{SO}_4^{2-}(\text{O}^{2-}\text{-SO}_4^{2-})$ к соседним анионным комплексам по реакции $\text{SO}_4^{2-} + (e^- + \text{SO}_4^-) \rightarrow \text{SO}_4^{3-}\text{-SO}_4^-$.

Измерением показано, что комбинированные электронно-излучательные состояния при 2,9 эВ и 3,1 эВ возбуждаются при энергиях фотона 3,9-4,0 эВ и 4,5 эВ. Также экспериментально показано, что в люминофоре с наведенными центрами захвата при возбуждении фотонами 3,9-4,0 эВ и 4,5 эВ обратно образуются рекомбинационные излучения при 3,1 эВ и 2,9 эВ. Таким образом, энергия фотона при 3,9 -4,0 эВ и 4,5 эВ является энергией возбуждения и поглощения между электронными и дырочными центрами захвата расположенного в области прозрачности матрицы люминофора $\text{CaSO}_4\text{-Pb}^{2+}$.

Ключевые слова: сульфат; электрон; рекомбинационное излучение; собственное излучение; дырка; возбуждение.

References

1. Yilmaz M., Erdoğan E., Luminescence properties of ZnB_2O_4 : Pb^{2+} phosphors: Suppression of concentration quenching, Journal of Luminescence, 2020, Vol. 218, p. 116868. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.116868>
2. Taşcıoğlu S., Pekgözlü İ., Mergen A., Synthesis and photoluminescence properties of Pb^{2+} doped $\text{SrAl}_2\text{B}_2\text{O}_7$, Materials Chemistry and Physics, 2008, Vol. 112, No. 1, pp. 78-82. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2008.05.031>
3. Pekgözlü İ., Taşcıoğlu S., & Menger A., Luminescence of Pb^{2+} in $\text{MAl}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (M = Ca, Sr), Inorganic Materials, 2008, Vol. 44, No. 10, pp. 1151-1154. <https://doi.org/10.1134/S0020168508100221>
4. Folkerts H. F., Ghianni F., Blasse G., Search for D-level emission of Pb^{2+} in alkaline-earth aluminates and gallates, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1996, Vol. 57, No. 11, pp. 1659-1665. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(96\)00041-8](https://doi.org/10.1016/0022-3697(96)00041-8)

5. Bhagat S. P., Gawande A. B., Omanwar S. K., Photoluminescence study of a novel UV emitting phosphor $\text{Sr}_2\text{Mg}(\text{BO}_3)_2: \text{Pb}^{2+}, \text{Gd}^{3+}$, *Optical Materials*, 2015, Vol. 40, pp. 36-40.<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2014.11.043>
6. Wang S. F., et al., Photoluminescence characteristics of Pb^{2+} ion in sol-gel derived ZnTiO_3 nanocrystals, *Inorganic Chemistry Communications*, 2003, Vol. 6, No. 2, pp. 185-188.[https://doi.org/10.1016/S1387-7003\(02\)00711-6](https://doi.org/10.1016/S1387-7003(02)00711-6)
7. Erdoğan E., Pekgözlü İ., Photoluminescence properties of $\text{CaAlBO}_4: \text{M}$ (M: $\text{Pb}^{2+}, \text{Dy}^{3+}$, and Sm^{3+}), *Journal of Applied Spectroscopy*, 2014, Vol. 81, pp. 394-398.<https://dx.doi.org/10.1007/s10812-014-9943-4>
8. Singh V., Tiwari M. K., UV emitting Pb^{2+} doped $\text{Ca}_2\text{La}_8(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$ phosphors prepared by sol-gel procedure, *Optik*, 2020, Vol. 206, p. 163600.<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163600>
9. Manavbasi A., LaCombe J. C., A new blue-emitting phosphor $\text{SrZnO}_2: \text{Pb}^{2+}$ synthesized by the adipic acid templated sol-gel route, *Journal of Luminescence*, 2008, Vol. 128, No. 1, pp. 129-134.<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2007.06.002>
10. Nurakhmetov T. N., et al., Specific Features of Formation of Electron and Hole Trapping Centers in Irradiated $\text{CaSO}_4\text{-Mn}$ and $\text{BaSO}_4\text{-Mn}$, *Crystals*, 2023, Vol. 13, No. 7, p. 1054.<https://doi.org/10.3390/cryst13071054>
11. Nurakhmetov T. N., et al., Energy Transfer in the $\text{CaSO}_4\text{-Dy}$ Thermoluminescent Dosimeter from the Excited State of the SO_4^{2-} Anionic Complex to the Impurities, *Crystals*, 2023, Vol. 13, No. 11, p. 1596.<https://doi.org/10.3390/cryst13111596>
12. Salikhodzha Z. M., et al., Recombination luminescence in CaSO_4 , *Radiation Measurements*, 2019, Vol. 125, pp. 19-24.<https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2019.04.010>
13. Nurakhmetov T. N., et al., Energy transfer of intrinsic electronic excitation to impurities in the $\text{CaSO}_4\text{-Mn}$, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2021, Vol. 5, No. 1, pp. 31-38.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2021050104>
14. Nurakhmetov T. N., et al., Electron-hole trapping centers in Na_2SO_4 with a transition metal impurity Mn, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2023, Vol. 7, No. 1, pp. 38-44.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2023070102>
15. Nurakhmetov T. N., et al., Luminescence and creation of electron-hole trapping centers in alkali metal sulfates activated by Pb^{2+} impurity, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2024, Vol. 8, No. 1, pp. 33-44. DOI: 10.32523/ejpfm.2024080104
16. Nurakhmetov T. N., et al., Electron-hole trapping centers in alkali metal sulfates with Dy^{3+} impurities, *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 2023, Vol. 7, No. 2, pp. 115-122.<https://doi.org/10.32523/ejpfm.2023070204>
17. Nurakhmetov T. N., et al., Photoluminescence and thermoluminescence in a Li_2SO_4 crystal, 2022. <http://rep.enu.kz/handle/enu/13157>
18. Nurakhmetov T. N., et al., Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in irradiated Na_2SO_4 , *Optik*, 2021, Vol. 242, p. 167081.<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081>
19. Yussupbekova B. N., et al., Intrinsic and impurity emission and formation mechanism of trapping centers in $\text{LiKSO}_4\text{-Cu}$ crystals, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2020, Vol. 481, pp. 19-23.<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.07.027>

20. Nurakhmetov T. N., et al., Mechanisms of formation of electron-hole trap centers in LiKS₀₄ crystals, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, Vol. 5, No. 1, pp. 24-30.<http://rep.enu.kz/handle/enu/13195>

21. Nurakhmetov T. N., et al., Influence of Cu⁺ impurity on the efficiency of creation of electron-hole trapping centers in irradiated Na₂SO₄-Cu crystals, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, Vol. 5, No. 3, pp. 200-208.<http://rep.enu.kz/handle/enu/13238>

22. Nurakhmetov T. N., et al., Intrinsic emission and electron-hole trapping centers in Li₂SO₄-Cu crystals, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, Vol. 5, No. 2, pp. 140-147.<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167081>

23. Nicoara I. et al. Growth and spectroscopic characterization of Pb²⁺: CaF₂ crystals //The European Physical Journal B. – 2012. Vol. 85, pp. 1-7.

24. Danby R. J., et al., ESR of thermoluminescent centres in CaSO₄ single crystals, Journal of Physics C: Solid State Physics, 1982, Vol. 15, No. 11, pp. 2483.<https://doi.org/10.1088/0022-3719/15/11/025>

25. Nair S. R., et al., Redox reactions, radio-photoluminescence, and thermoluminescence in Journal of Physics: Condensed Matter, 1997, Vol. 9, No. 39, pp. 8307.<https://doi.org/10.1088/0953-8984/9/39/015>

Information about the authors:

Shamiyeva R.K. – corresponding author, Senior Lecturer; L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Balapanov M.H. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Bashkir State University, Ufa, Republic of Bashkortostan.

Salikhodzha Zh.M. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Kainarbay A.Zh. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Sadykova B.M. – PhD, Acting Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Zhangylyssov K.B. – PhD, Acting Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Nurpeissov A.S. – PhD Student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Karibay B.A. – Student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Batisheva A.T. – Student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Шамиева Р.К. – автор-корреспондент, старший преподаватель; Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Балапанов М.Х. – доктор физико-математических наук, профессор, Уфимский университет науки и технологий: Уфа, Республика Башкортостан.

Салиходжа Ж.М. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Қайнарбай А.Ж. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Садыкова Б.М. – PhD, и.о. доцента, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Жанғылысов К.Б. – PhD, и.о. доцента, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Нурпеисов А.С. – докторант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Қарибай Б.А. – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Батишева А.Т. – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Шамиева Р.Қ. – хат-хабар авторы, аға оқытушы, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Балапанов М.Х. – физика-математика ғылымдарының докторы, Уфа ғылым және технология университетінің профессоры, Уфа, Башқұртстан Республикасы, РФ.

Салиходжа Ж.М. – PhD, доцент, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Қайнарбай А.Ж. – PhD, доцент, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Садыкова Б.М. – PhD, доцент м.а., Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Жаңғылысов Қ.Б. – PhD, доцент м.а., Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Нурпеисов А.С. – докторант, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Қарибай Б.А. – магистрант, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Батишева А.Т. – магистрант, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 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/>).

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.
№4(149)/2024 – Астана: ЕҰУ. – 216 б.
Шартты б.т. – 27. Таралымы – сұраныс бойынша
Басуға қол қойылды: 30.12.2024 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.