

ҚАРАҒАНДЫ
УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ

ВЕСТНИК

КАРАГАНДИНСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА

ISSN 0142-0843

ФИЗИКА сериясы
№ 2(58)/2010
Серия ФИЗИКА

Сәуір–мамыр–маусым
1996 жылдан бастап шығады
Жылына 4 рет шығады

Апрель–май–июнь
Издается с 1996 года
Выходит 4 раза в год

Собственник РГКП **Карагандинский государственный университет
имени Е.А.Букетова**

Бас редакторы — Главный редактор

Е.К.КУБЕЕВ,

академик МАН ВШ, д-р юрид. наук, профессор

Зам. главного редактора М.Ж.Буркеев, д-р хим. наук
Ответственный секретарь Г.Ю.Аманбаева, д-р филол. наук

Серияның редакция алқасы — Редакционная коллегия серии

Т.А.Кукетаев,	редактор д-р физ.-мат. наук;
К.М.Арынгазин,	д-р пед. наук;
И.В.Брейдо,	д-р техн. наук;
Н.Х.Ибраев,	д-р физ.-мат. наук;
Л.М.Ким,	д-р физ.-мат. наук
К.К.Кусайынов,	д-р техн. наук;
С.Д.Джуманов,	д-р физ.-мат. наук (Узбекистан);
М.М.Кидибаев,	д-р физ.-мат. наук (Кыргызстан);
З.Ж.Жанабаев,	д-р физ.-мат. наук;
Г.В.Климушева,	д-р физ.-мат. наук (Украина);
С.А.Кумеков,	д-р физ.-мат. наук;
В.М.Лисицын,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
И.А.Огородников,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
Г.И.Пилипенко,	д-р физ.-мат. наук (Россия);
С.В.Плотников,	д-р физ.-мат. наук;
Л.А.Пунг,	д-р физ.-мат. наук (Эстония);
М.П.Тонконогов,	д-р техн. наук;
А.Ж.Турмухамбетов,	д-р физ.-мат. наук;
К.Ш.Шункеев,	д-р физ.-мат. наук;
Л.В.Чиркова,	ответственный секретарь канд. техн. наук

Адрес редакции: 100028, г. Караганда, ул. Университетская, 28
Тел.: (7212) 77-03-69 (внутр. 1026); факс: (7212) 77-03-84.

Редакторы *Ж.Т.Нұрмұханова*
Техн. редактор *В.В.Бутяйкин*

Издательство Карагандинского
государственного университета
им. Е.А.Букетова
100012, г. Караганда,
ул. Гоголя, 38,
тел., факс: (7212) 51-38-20
e-mail: izd_kargu@mail.ru

Басуға 28.06.2010 ж. қол қойылды.
Пішімі 60×84 1/8.
Офсеттік қағазы.
Көлемі 11,5 б.т.
Таралымы 300 дана.
Бағасы келісім бойынша.
Тапсырыс № 421.

Подписано в печать 28.06.2010 г.
Формат 60×84 1/8.
Бумага офсетная.
Объем 11,5 п.л. Тираж 300 экз.
Цена договорная. Заказ № 421.

Отпечатано в типографии
издательства КарГУ
им. Е.А.Букетова

© Карагандинский государственный университет, 2010

Зарегистрирован Министерством культуры, информации и общественного согласия Республики Казахстан.
Регистрационное свидетельство № 1131–Ж от 10.03.2000 г.

МАЗМҰНЫ

КОНДЕНСАЦИЯЛАНҒАН КҮЙДЕГІ ЗАТТАРДЫҢ ФИЗИКАСЫ

<i>Балтабеков А.С., Көкетаев Т.Ә., Тулегулов А.Д.</i> Әр түрлі модификациялы Курроль тұздарындағы рекомбинациялық процестер механизмдерінің ерекшеліктері	4
<i>Бижанова К.Б., Шункеев К.Ш.</i> КСl кристалдары торы түйіндері арасында орналасқан галоген атомдарының жеңіл катион-гомологтардың сапаларының өрісіндегі ассоциациясы	10
<i>Бижанова К.Б., Шункеев К.Ш.</i> Пластикалық және серпімді деформация әсерінен КСl, КВг, Кl кристалдарында радиациялық Х ₃ -орталықтарының пайда болу механизмі.....	18
<i>Жұмаділов Е.К., Мурашова З.Ф.</i> YbMFe ₂ O _{5,5} (M — Mg, Ca, Sr, Ba) ферриттерінің электрофизикалық қасиеттері.....	26
<i>Жарекешев И.Х.</i> Кванттық нанокластерлердегі электронның толқындық функцияларын итеративтік есептеп шығару	31
<i>Прмантаева Б.А.</i> Протондардың глаубердің теориясы аймағында ⁹ Li ядросынан шашыратылуы.....	36
<i>Смагулов Ж.К.</i> Кремнезем бетінде орналасқан триплет күйлеріндегі молекулалардың өзара әрекеттесуі.....	41
<i>Юров В.М., Гученко С.А., Ыбыраев Н.Х.</i> Құрғақ үйкеліс және қатты денелердің беттік энергиясы	47

ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ

<i>Құсайынов Қ.Қ., Смақова Н.С., Омаров Н.Н.</i> Екі жағы жартылай сфералармен аяқталатын айналмалы цилиндрдің аэродинамикасын зерттеу	55
--	----

ТЕХНИКАЛЫҚ ФИЗИКА

<i>Есіркеев Е.М.</i> MatLab + SIMULINK бағдарламасы бойынша жұмыс істейтін илек станының электр жабдықтарында жүретін физикалық үдерістердің үлгілерін жасау	61
<i>Ефименко С.А., Портнов В.С., Тұрсынбаева Ә.К., Маусымбаева А.Д.</i> Росс сүзгілері арқылы мыс кендерінің рентгенорадиометрикалық талдауы	69
<i>Тұрсынбаева Ә.К.</i> Үйінді сілтілеу кезіндегі бөліктердің тығыздалынуы.....	74

ФИЗИКАНЫҢ ӘДІСТЕМЕСІ

<i>Гладков В.Е., Ли Е.Л.</i> «Тұрақты электр тоғы» тақырыбының мысалында қазіргі білім беру технологиялар элементтерін қолдану негізінде физиканы оқыту нәтижелігін жоғарлату	80
---	----

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Балтабеков А.С., Кукетаев Т.А., Тулегулов А.Д.</i> Особенности механизмов рекомбинационных процессов в солях Курроля с различными модификациями	4
<i>Бижанова К.Б., Шункеев К.Ш.</i> Ассоциация междоузельных атомов галогена в кристаллах КСl в поле примеси легких катионгомологов	10
<i>Бижанова К.Б., Шункеев К.Ш.</i> Механизмы радиационного создания Х ₃ -центров в кристаллах КСl, КВг и Кl при пластической и упругой деформации	18
<i>Жумадиллов Е.К., Мурашова З.Ф.</i> Электрофизические свойства ферритов YbMFe ₂ O _{5,5} (M — Mg, Ca, Sr, Ba).....	26
<i>Zharekeshev I.Kh.</i> Iterative Calculation of Electron Wave Functions in Quantum Nanoclusters....	31
<i>Прмантаева Б.А.</i> Упругое рассеяние протонов на ⁹ Li в рамках глауберовской теории.....	36
<i>Смагулов Ж.К.</i> Бимолекулярные процессы взаимодействия триплетных молекул на поверхности кремнезема.....	41
<i>Юров В.М., Гученко С.А., Ибраев Н.Х.</i> Сухое трение и поверхностная энергия твердых тел ..	47

ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА

<i>Құсайынов Қ.Қ., Смақова Н.С., Омаров Н.Н.</i> Исследование аэродинамики вращающегося тела с округленными торцами.....	55
--	----

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

<i>Есіркеев Е.М.</i> Моделирование физических процессов электрооборудования прокатных станов в программе MatLab+SIMULINK	61
<i>Ефименко С.А., Портнов В.С., Турсунбаева А.К., Маусымбаева А.Д.</i> Рентгенорадиометрический анализ медных руд фильтрами Росса	69
<i>Турсунбаева А.К.</i> Уплотнение частиц при кучном выщелачивании.....	74

МЕТОДИКА ФИЗИКИ

<i>Гладков В.Е., Ли Е.Л.</i> Повышение эффективности обучения физике на основе использования элементов современных образовательных технологий на примере темы «Постоянный электрический ток»	80
--	----

<i>Гладков В.Е., Турбаева А.Е.</i> «Механикалық жұмыс. Энергияның сақталу заңы» тақырыбының мысалында кредиттік жүйенің оқыту элементтерін мектепте қолдану.....	85
АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР	92

<i>Гладков В.Е., Турбаева А.Е.</i> Использование элементов кредитной системы обучения в школе на примере темы «Механическая работа. Закон сохранения энергии».....	85
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ.....	92

КОНДЕНСАЦИЯ ЛАНҒАН КҮЙДЕГІ ЗАТТАРДЫҢ ФИЗИКАСЫ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 535.37:535.34:539.19

А.С.Балтабеков, Т.А.Кукетаев, А.Д.Тулегулов

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

Особенности механизмов рекомбинационных процессов в солях Курроля с различными модификациями

Проведено исследование рекомбинационной люминесценции в чистых и активированных ионами Tl^+ , Mn^{2+} или NO_3^- в KPO_3 . Показано, что в кристалле и стекле рекомбинационные процессы активируются при разных температурах. Установлено, что пик ТСЛ при 100 К в кристаллическом метафосфате калия обусловлен дырочным механизмом рекомбинации. В стеклообразном KPO_3 пик ТСЛ при 260 К связан с электронным механизмом рекомбинации.

Ключевые слова: рекомбинационная люминесценция, кристалл, стекло, дырочный механизм, электронный механизм.

Метафосфат калия KPO_3 (соль Курроля) относится к группе соединений, обладающих в одном и том же температурном диапазоне двумя различными устойчивыми структурными модификациями — кристаллической и стеклообразной [1]. В кристаллической структуре каждый фосфатный анион связан с двумя другими, и они образуют полимероподобные цепи. В стеклообразном состоянии анионы ориентированы случайным образом и не связаны друг с другом, т.е. полимероподобные цепи разрушены. Это позволяет ставить задачи по изучению влияния типа структурной модификации на протекание радиационно-стимулированных процессов.

В настоящее время в кристаллическом и стеклообразном KPO_3 методом ЭПР установлен один тип радиационных дефектов — PO_3^0 , представляющий собой автолокализованную дырку [2, 3]. Анализ литературных данных показал, что рекомбинационные процессы в этом соединении не изучены.

Целью данной работы является установление механизмов рекомбинации радиационных дефектов в метафосфате калия в различных структурных модификациях.

Порошкообразные образцы были получены термической дегидратацией монокристаллов KDP. Известно [4], что при температуре 350 °С дигидрофосфат калия полностью теряет кристаллическую воду. Согласно литературным данным [2], после дегидратации монокристаллов KDP получается кристаллическая соль Курроля. При нагревании выше 600 °С и быстром охлаждении соль Курроля переходит в стеклообразное состояние [3]. Тип полученного образца контролировался нами рентгеновскими методами. Образцы, активированные различными ионами, были получены дегидратацией монокристаллов KDP, содержащих соответствующие примесные ионы.

Облучение изучаемых образцов проводилось рентгеновскими лучами. Использован аппарат УРС-55а с молибденовой трубкой. Напряжение на рентгеновской трубке было 30 кВ, ток — 0,1÷10 мА. Дозы облучения определялись с помощью ферросульфатного дозиметра Фрике [5].

На рисунке 1 приведена характерная кривая термостимулированной люминесценции (ТСЛ) для чистого кристаллического метафосфата калия. Из рисунка видно, что, после облучения образца рентгеновскими лучами при 80 К, кривая ТСЛ имеет доминирующий пик рекомбинационной люминесценции с максимумом при 100 К. В области 200–240 К наблюдается слабое свечение. Спектральный состав основного пика ТСЛ состоит из одиночной полосы излучения с максимумом 3,1 эВ. Мы выполнили изотермический отжиг предварительно облученного кристаллического KPO_3 при 90 К. В

дальнейшем измерения кривых ТСЛ при различных дозах облучения показали, что пик ТСЛ при 100 К является элементарным.

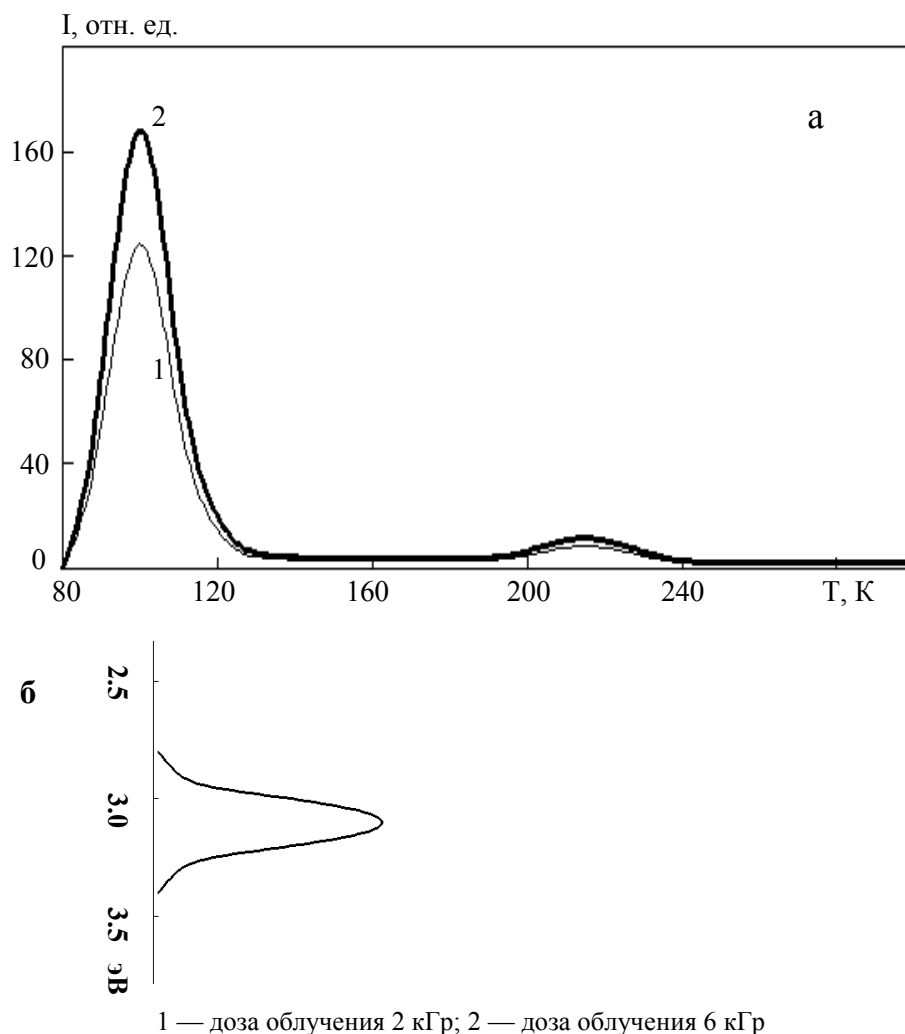


Рисунок 1. Кривые ТСЛ метафосфата калия в кристаллическом состоянии (а) и спектральный состав пика ТСЛ (б)

При измерении температурной зависимости рекомбинационной люминесценции стеклообразного метафосфата калия получен результат, приведенный на рисунке 2. Сравнение кривых ТСЛ на рисунках 1 и 2 показывает, что в стеклообразном образце одиночный пик ТСЛ смещается в сторону высоких температур. Его максимум приходится на 260 К. Спектральный состав пика рекомбинационного свечения с максимумом при 260 К такой же, как у пика ТСЛ при 100 К в кристаллическом метафосфате калия.

Выше уже упоминалось, что в метафосфате калия установлен дырочный центр типа PO_3^0 . При облучении рентгеновскими квантами их возникновение, очевидно, связано с ионизацией анионов. Следовательно, в данном соединении должны быть ловушки для свободных электронов. В кристаллах KDP, по литературным данным, установлены дефекты PO_3^{2-} [6]. Предполагается, что они возникают в результате захвата в кристалле KDP электронов дорациационными ионами PO_3^- . Это позволяет предполагать, что рекомбинационные процессы в метафосфате калия связаны с взаимодействием дырочных центров PO_3^0 с электронными PO_3^{2-} .

Таким образом, мы связываем возникновение рекомбинационной люминесценции в метафосфате калия с термической активацией электронов или дырок. Порошкообразные образцы характеризуются высокой степенью дорациационной дефектности. Обрывы полимероподобных цепей, очевидно, препятствуют миграции по ним электронов и дырок. Следовательно, появление слабого свечения в области 200–240 К в кристаллическом образце можно связать с дорациационной дефектностью, приводящей к частичной разупорядоченности анионной подрешетки.

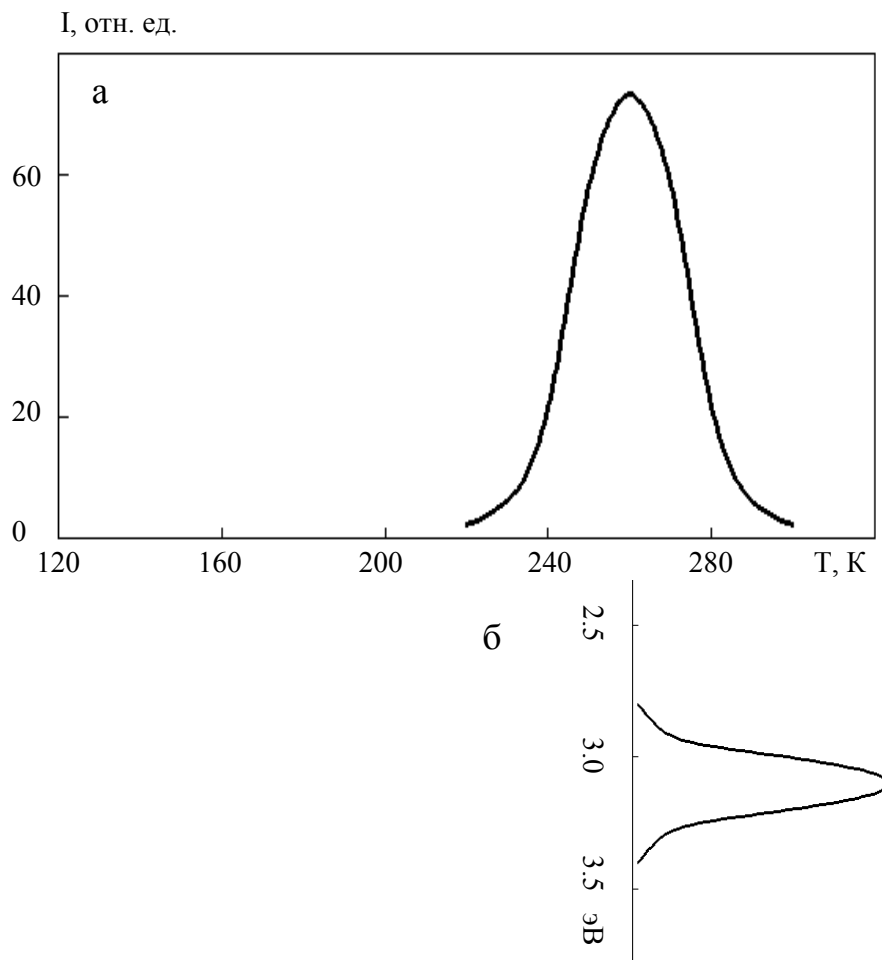
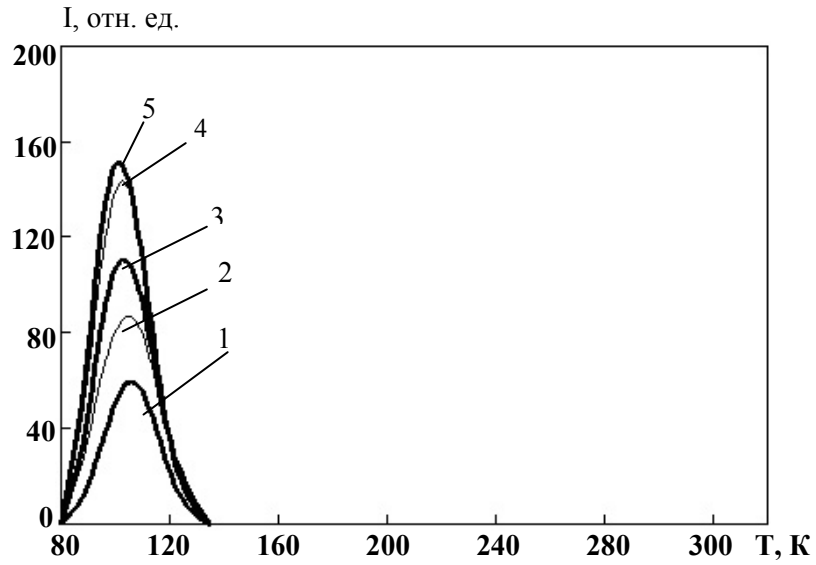


Рисунок 2. Кривая ТСЛ (а) и спектральный состав (б) пика ТСЛ для стеклообразного KPO_3 . Доза облучения — 4 кГр

При образовании электронных и дырочных центров часть из них, близко расположенных, сразу же рекомбинирует. Поскольку миграция радиационно-наведенных центров в стекле затруднена, следует ожидать, что в стекле скорость накопления светосуммы в пиках ТСЛ должна быть выше, чем в кристалле. Экспериментально нами установлено, что накопление светосуммы в пике ТСЛ при 260 К в стеклообразном образце больше, чем в кристаллическом в пике свечения при 100 К.

Для установления знака рекомбинационного процесса были изучено влияние на рекомбинационные процессы примесных ионов. Кристаллические и стеклообразные образцы были получены при дегидратации монокристаллов KDP-Mn^{2+} , KDP-Tl^+ и KDP-NO_3^- .

Для всех кристаллических образцов были получены кривые ТСЛ, подобные приведенным на рисунке 3. Наличие примесных ионов не приводит к появлению новых пиков ТСЛ. Меняется спектральный состав рекомбинационного свечения. Например, в KDP-Tl^+ спектральный состав пика ТСЛ с максимумом при 100 К содержит две полосы излучения при 3,1 и 3,76 эВ. Первая полоса излучения характерна для матрицы, а вторая — для внутрицентральной люминесценции ионов одновалентного таллия [7]. При облучении ионизирующей радиацией ионы таллия могут быть ловушками для электронов и дырок. Установлено, что после облучения рентгеновскими лучами выход фотолюминесценции ионов одновалентного таллия уменьшается по сравнению с тем, что было до облучения. Это объясняется тем, что при воздействии ионизирующей радиации происходит изменение зарядового состояния примесных ионов. Появление в пике ТСЛ при 100 К примесной люминесценции показывает, что радиационно-наведенные примесные центры являются центрами рекомбинации.



Дозы облучения — 50 Гр (1); 75 Гр (2); 100 Гр (3); 125 Гр (4); 150 Гр (5)

Рисунок 3. Кривая ТСЛ KDP, активированного ионами марганца, после предварительной термообработки до 350 °С

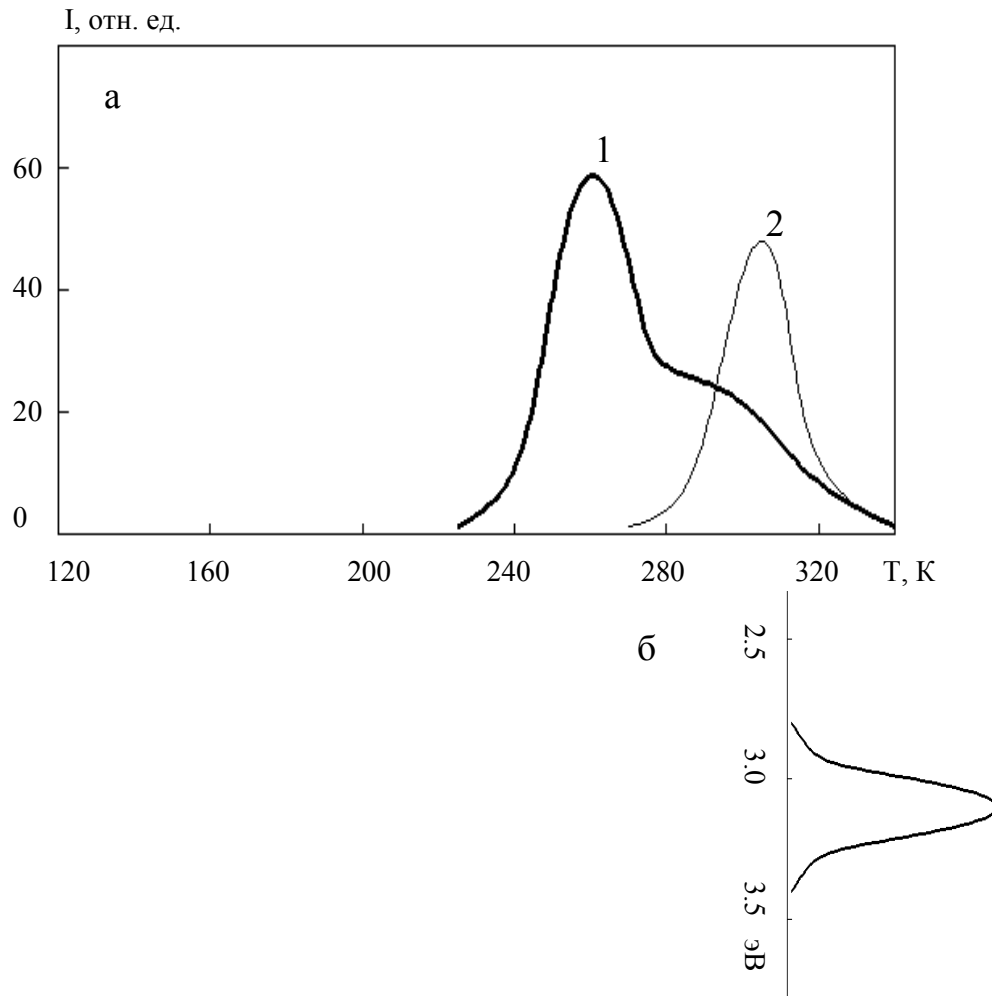


Рисунок 4. Кривая ТСЛ (а) и спектральный состав (б) пика ТСЛ для кристалла $\text{KPO}_3\text{-Tl}^+$. Доза облучения — 4 кГр

Нитратные анионы NO_3^- являются эффективными ловушками для свободных электронов [8]. Поскольку вид кривых ТСЛ у кристаллических образцов KDP-Mn^{2+} , KDP-Tl^+ и KDP-NO_3^- одинаков, можно сделать вывод, что механизм рекомбинационной люминесценции при 100 К дырочный. В этой температурной области происходит термическая активация миграции автолокализованных дырок.

На рисунке 4 приведена кривая ТСЛ для стеклообразного метафосфата калия, активированного ионами таллия. Из рисунка 4 видно, что наличие примесных ионов приводит к появлению нового пика ТСЛ. Он проявляется в виде плеча на высокотемпературном крыле пика ТСЛ матрицы. Изотермическим отжигом при 260 К его удалось выделить (кривая 2). Оказалось, что спектральный состав нового пика свечения с максимумом при 305 К совпадает со спектральным составом пика ТСЛ матрицы. Следовательно, можно утверждать, что в стеклообразном образце ионы таллия не являются центрами рекомбинации.

На рисунке 5 приведена зависимость выхода люминесценции одновалентного таллия от температуры нагревания. Измерения проводились следующим образом: при 80 К образец $\text{KPO}_3\text{-Tl}$ облучался рентгеновскими лучами; измерялась интенсивность примесной фотолюминесценции; затем образец нагревался до определенной температуры и вновь охлаждался до 80 К; снова измерялась интенсивность примесной люминесценции и т.д. Поскольку образцы были порошкообразные, то измерение спектров оптического поглощения затруднено. О концентрации примесных ионов можно судить по выходу люминесценции. Из рисунка 5 видно, что при нагревании образца до 305 К происходит увеличение выхода примесной люминесценции. Следовательно, при облучении происходит изменение зарядового состояния части ионов таллия, которые распадаются в области 305 К.

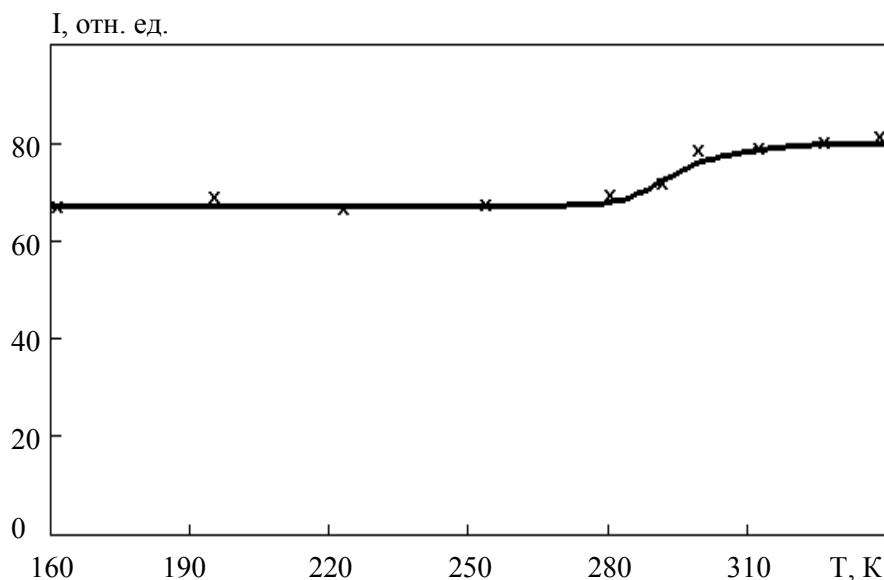


Рисунок 5. Температурная зависимость выхода примесной люминесценции у предварительно облученного $\text{KPO}_3\text{-Tl}^+$

Аналогичные результаты были получены для KDP-NO_3^- в стеклообразном состоянии. Наличие примесных анионов приводит к появлению нового пика ТСЛ при 175 К. Спектральный состав пиков ТСЛ при 175 К и 260 К одинаков и состоит из одной полосы излучения с максимумом при 3,1 эВ. Полученные результаты позволяют утверждать, что механизм рекомбинационного процесса при 260 К в стеклообразном метафосфате калия является электронным, т.е. подвижный электрон рекомбинирует с неподвижной дыркой.

Таким образом, в результате проведенных исследований показано, что в кристаллическом метафосфате калия в области 100 К реализуется дырочный механизм рекомбинационного процесса. В стеклообразном состоянии разупорядочение анионной подсистемы препятствует миграции дырок. Механизм рекомбинационного процесса становится электронным.

Список литературы

- 1 Кузьменков М.И., Печковский В.В., Плышевский С.В. Химия и технология метафосфатов. — Минск, 1985. — С. 25–64.
- 2 Hukuda K., Nakahara M., Kusumo N. ESR studies on gamma-irradiated $(\text{KPO}_3)_n$ // J. Polymer Science: Polymer Physic. — 1970. — Vol. 8. — № 3 — P. 447–453.
- 3 Nakai Y. Electron Paramagnetic Resonance Study of γ -Ray Irradiated Phosphate Glasses // Bull. Chem. Soc. Japan. — 1964. — Vol. 37. — № 7. — P. 1084–1085.
- 4 Лепилина Р.Г., Смирнова Н.М. Термограммы неорганических фосфатных соединений. — Л.: Наука, 1984. — 270 с.
- 5 Штольц В., Бернхардт Р. Дозиметрия ионизирующих излучений. — Рига: Зинатне, 1982. — 142 с.
- 6 Tsushida K., Abe P., Naito M. Paramagnetic centers in potassium dihydrogen phosphate // Phys. Soc. Japan. — 1973. — Vol. 35. — № 3. — P. 806–810.
- 7 Ким Л.М., Кукетаев Т.А., Балтабеков А.С., Тагаева Б.С. Рекомбинационная люминесценция в кристаллах $\text{KPO}_3\text{-Ti}$ // Тезисы IV Уральского семинара ТТД-2008 по люминесцентным материалам и твердотельным детекторам ионизирующих излучений. — Екатеринбург, 2008. — С. 125.
- 8 Нурахметов Т. Электронные возбуждения и радиационные дефекты в гранецентрированных ЩГК и сульфатах щелочных и щелочноземельных металлов: Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — Алматы, 2001. — 23 с.

А.С.Балтабеков, Т.Ә.Көкетаев, А.Д.Тулөгүлов

Әр түрлі модификациялы Курроль тұздарындағы рекомбинациялық

Таза және Ti^+ , Mn^{2+} немесе NO_3^- иондарымен активтенген KPO_3 -ғы рекомбинациялық люминесценцияға зерттеу жүргізілді. Кристалл мен шыныда рекомбинациялық процестер әр түрлі температурада белсенді болатыны көрсетілді. Кристалдық калий метафосфаттағы ТСЛ-ң 100 К шыңы рекомбинацияның кемтікті механизміне негізделген. Шынытәріздес KPO_3 -гі ТСЛ-ң 260 К шыңы рекомбинацияның электронды механизміне байланысты.

A.S.Baltabekov, L.M.Kim, A.D.Tulegulov

The particularities of recombination processes in salts Kurrol with different modifications

The research of recombination luminescence in pure and doped by Ti^+ , Mn^{2+} or NO_3^- ions in KPO_3 is carried out. It is shown, that in a crystal and glass the recombination processes are activated at different temperatures. It is established, that the TL at 100 K in crystal of potassium metaphosphate is caused by hole the mechanism of recombination. In glasslike KPO_3 the TL peak at 260 K is connected to the electronic mechanism of recombination.

К.Б.Бижанова¹, К.Ш.Шункеев²

¹Каспийский государственный университет технологии и инжиниринга им. Ш.Есенова, Актау;

²Актюбинский государственный педагогический институт

Ассоциация междоузельных атомов галогена в кристаллах KCl в поле примеси легких катионов-гомологов

Методом абсорбционной спектроскопии исследованы механизмы образования X_3^- -центров в кристаллах KCl при ассоциации междоузельных атомов галогена (H-центров) в поле катионов-гомологов малого радиуса (Li, Na) и катионной вакансии, входящей в состав диполя — $Sr^{++}v_c^-$. На основании экспериментальных и расчетных данных установлено, что $(Cl_3^-)_{aca} Li_i^+ Cl_i^-$ и $(Cl_3^-)_{aca} Sr_c^+ Cl_i^-$ -центры в кристаллах KCl-Li и KCl-Sr образуются при ассоциации междоузельных атомов (H-центров) в поле диполя $Li_i^+ v_c^-$ и $Sr^{++}v_c^-$ соответственно, а $(Cl_3^-)_{aca} Na_i^+ Cl_i^-$ -центры в кристалле KCl-Na образуются при ассоциации междоузельных атомов галогена (H-центров) в поле $v_c^- \dots Na_i^+$ предварительно созданные в решетке при распаде автолокализованных анионных экситонов.

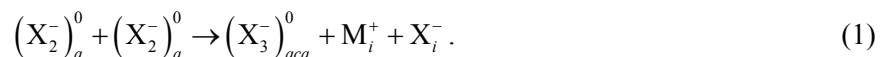
Ключевые слова: механизмы образования, абсорбционная спектроскопия, ассоциация междоузельных атомов, галоген, автолокализованные экситоны, кристаллы, вакансии.

Введение

В настоящее время процессы радиационного дефектообразования в щелочно-галогидных кристаллах (ЩГК) принято интерпретировать как безызлучательную релаксацию автолокализованных экситонов в анионной подрешетке, ведущую к рождению междоузельных атомов галоида (H-центров), и электронов, локализованных в поле анионной вакансии (F-центров) [1].

Для ЩГК F-центры стабильны по крайней мере до 450÷500 К, а H-центры уже выше 50 К становятся подвижными и активно взаимодействуют между собой и с другими радиационными дефектами решетки. Поэтому эффективность радиационного дефектообразования в ЩГК при температурах, когда H-центры подвижны ($T > 50$ К), определяется эффективностью их стабилизации.

В чистых ЩГК, когда отсутствуют мелкие ловушки для стабилизации H-центров, главными комплементарными радиационными дефектами к F-центрам являются X_3^- -центры, которые образуются при взаимодействии двух H-центров — $(X_2^-)_a$:



В результате данной реакции в решетке образуется линейный трехгалогидный центр $(X_3^-)_{aca}$, занимающий один катионный (c) и два анионных (a) узла решетки [1] и дающий полосы поглощения в области 5,3 эВ в кристалле KCl.

Реакция (1) может осуществляться с большей эффективностью, если ассоциация H-центров будет происходить около катионов меньшего радиуса, чем основной катион (KCl-Li, KBr-Li, KCl-Na и т.д.), или в случае, если заранее созданы дивакансии ($v_a^+ v_c^-$) (например, пластической деформацией) и на их базе происходит перестройка кристаллической решетки с образованием $(X_3^-)_{aca}$ -центров.

Следует отметить, что когда ассоциация двух H-центров происходит в поле катионных дефектов ($v_c^- \dots M_i^+$), созданных при непосредственном распаде анионных экситонов, могут образовываться $(X_3^-)_{aca}$ -центры, как пространственно разделенные с междоузельными диполями ($M_i^+ X_i^-$), так и коррелированные с парой междоузельников- $(X_3^-)_{aca} M_i^+ X_i^-$ [1, 2].

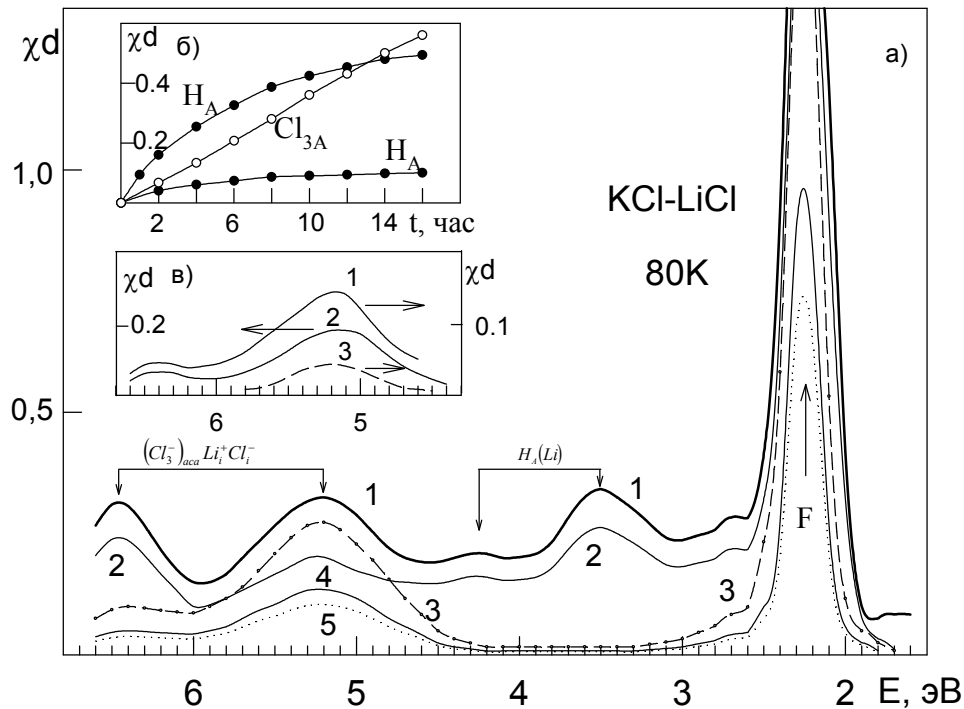
Ассоциация междуузельного галогена в поле лития (Li) в KCl

В кристаллах KCl установлено, что полоса поглощения с максимумом 4,95 эВ термически разрушается в диапазоне температур 200–270 К, когда становятся подвижными одиночные катионные вакансии (v_c^-), интерпретирована как обусловленная $(Cl_3^-)_aca K_i^+ Cl_i^-$ -центрами, а полоса поглощения с максимумом 5,3 эВ, максимально разрушающаяся при 400 К, приписана $(Cl_3^-)_aca$ -центрам [1–3].

В кристаллах KCl-Li при температурах выше температуры делокализации H -центров их ассоциация определяет природу и эффективность устойчивого радиационного дефектообразования в решетке. Например, температура разрушения $H_A(Li)$ -центров в кристаллах KCl-Li и KBr-Li около 220 К. От присутствия примесей может изменяться как структура ди- H -образований, так и эффективность их радиационного создания.

В связи с этим методом абсорбционной спектроскопии проводили исследования механизмов образования $(X_3^-)_aca$ -центров в поле легкого примесного катиона в кристаллах KCl-Li.

При облучении рентгеновскими лучами кристалла KCl-Li при 80 К, кроме полос поглощения F -центров (2,26 эВ) и $H_A(Li)$ -центров (3,5 эВ и 4,2 эВ), возникает полоса поглощения с максимумом 5,2 эВ в области спектра Cl_3^- -центров (рис. 1).



а) 1 — сразу после облучения; 2 — после последующей F -подсветки при 80 К; 3, 4, 5 — после последующего нагрева до 310, 360 и 400 К соответственно.
 На вставке: б) Кривые нарастания числа $H_A(Li^+)$ - и Cl_3^- -центров в кристалле KCl-Li от времени X -облучения при 80 К; в) 1 — поглощение, уходящее при F -подсветке (разность кривых 1 и 2 (а)); 2, 3 — поглощение, уходящее при нагреве 310→360 К и 360→400 К соответственно

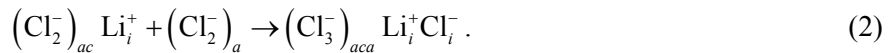
Рисунок 1. Спектры поглощения кристалла KCl-Li при 80 К после рентгеновского облучения в течение 4 часов

Исследование при 80 К спектров поглощения кристалла KCl-Li сразу после X -облучения (кривая 1) и после F -подсветки (2а), а также после термического отжига Cl_{3A} -центра (4а, 5а и 2а рис. 1) показало, что поведение полос поглощения при 5,1 эВ (Cl_3^- -область) и 6,4 эВ (Cl_i^- -область) скоррелировано.

После F, F'-подсветки обесцвечиваются все полосы поглощения радиационных дефектов, однако наиболее существенно обесцвечиваются спектры поглощения радиационных дефектов в области Cl_3^- -центров (рис. 1а). После прекращения оптической стимуляции путем импульсных отжигов термически отжигались спектры поглощения, оставшиеся от радиационных дефектов. После нагрева до 310 К термически отжигаются спектры поглощения с максимумами при 3,5 и 4,2 эВ, а также 6,4 эВ. Этот эффект интерпретируется тем, что при температурах 210–240 К происходит термическое разрушение $I_A(\text{Li})$ - и $H_A(\text{Li})$ -центров (кривая 3, рис. 1). При этом возрастает спектр поглощения Cl_{3A} -центров, по-видимому, за счет ассоциации H , $H_A(\text{Li})$ -центров. При дальнейшем нагреве кристалла KCl-Li термически отжигаются Cl_{3A} -центры (360 К) и Cl_3^- -центры (400 К) с одновременным разрушением F(2,29 эВ)-центров (см. кривые 4 и 5, также на вставке в).

На рисунке 1б приведены кривые нарастания числа $H_A(\text{Li})$ - и Cl_3^- -центров кристалла KCl-Li при 80 К после рентгеновского облучения, из которого следует, что наблюдается сверхлинейный рост числа Cl_3^- -центров по отношению к числу $H_A(\text{Li})$ -центров. Аналогичная зависимость получена и при облучении кристалла KCl-Li при 200 К. Особенно убедительным подтверждением является факт последующего за насыщением $H_A(\text{Li})$ -центров небольшого спада их числа при продолжающемся росте числа X_3^- -центров (см. рис. 1б). Эти экспериментальные результаты являются подтверждением осуществления ассоциативного механизма создания катионных дефектов согласно реакции (3) в кристалле KCl-Li. Аналогичная квадратичная зависимость увеличения числа Cl_{3z}^- -центров от числа H_2 -центров была обнаружена для KCl-Sr в [4–6].

В KCl-Li, кроме Cl_3^- -центров (полосы поглощения при 5,3 эВ), взамен $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{K}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центров в чистом KCl (полоса поглощения при 4,9 эВ), вплоть до 300 К, эффективно создаются дисперсионные центры с полосой 5,1 эВ. По-видимому, эти центры имеют структуру $(\text{Cl}_3^-) \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и образуются при взаимодействии подвижных H -центров с $H_A(\text{Li})$ -центрами. При этом диполи $\text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ возникают непосредственно в ходе реакции, которую, учитывая структуру $H_A(\text{Li})$ -центров в KCl, можно представить следующим образом:



Этот процесс аналогичен ассоциации H -центров в чистом кристалле (см. реакцию (1)), но энергетически более выгоден, так как ион лития уже до реакции частично вытолкнут из катионного узла решетки (Li^+ в $H_A(\text{Li})$ -центре занимает нецентральное положение, т.е. смещен в соседнее тетраэдрическое междоузлие по направлению $\langle 111 \rangle$ [7]).

При осуществлении реакции (2) следует ожидать в кристалле KCl появления полосы поглощения в районе спектра при 6,4 эВ, где должен находиться спектр поглощения I -подобного центра, т.е. междоузельного иона хлора (Cl_i^-), входящего в состав $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$. С целью изучения этого вопроса были измерены при 80 К спектры возбужденного поглощения кристалла KCl-Li до 6,8 эВ.

Действительно, в спектре поглощения кристалла KCl-Li после рентгеновского облучения при 80 К, кроме известных полос поглощения радиационных дефектов (F-, Cl_3^- -, $H_A(\text{Li})$ -центров), зарегистрирована новая полоса поглощения с максимумом при 6,4 эВ (рис. 1а).

В кристалле KCl-Li структура $H_A(\text{Li})$ -центра, согласно экспериментальным данным электронно-парамагнитного резонанса (ЭПР), по ориентации резко отличается от других H_A -центров. Направление ориентации $H_A(\text{Li})$ -центра в решетке KCl-Li ближе к оси [100], чем [110] из-за существенного различия размеров (в 2 раза) калия и лития. Известно, что литий в кристалле KCl-Li занимает не центральное положение в катионном узле решетки, а смещен в направлении [111] в междоузлие [8, 9].

По данным ЭПР, ось $H_A(\text{Li})$ -центра в кристалле KCl-Li отклонена от направления [100] на 26° [7, 8], в то время как H -центр, т.е. $(\text{Cl}_2^-)_a^0$ молекула, в регулярной решетке имеет ориентацию [110].

Таким образом, полученные экспериментальные результаты путем реализации комплексной методики свидетельствуют о том, что Cl_{3A} -центры в KCl-Li имеют структуру $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$, согласно реакции (2) при взаимодействии двух H -центров около Li^+ . В соответствии с этим $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центр характеризуется наличием двух полос поглощения с максимумами 5,1 и 6,35 эВ.

В кристаллах KCl-Sr нами обнаружены полосы поглощения при 5,6 и 6,4 эВ, которые симбатно отжигаются при 375 К, по-видимому, соответствуют центру типа $(\text{Sr}^{++})_c^+ (\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{Cl}_i^-$, где присутствуют Cl_3^- -молекула и междуузельный ион хлора (Cl_i^-) .

Таким образом, изложенные экспериментальные факты привели к заключению, что Cl_{3A}^- -центры в кристалле KCl-Li (полосы поглощения при 5,1 и 6,35 эВ) и Cl_{3Z}^- -центры в кристалле KCl-Sr (полосы поглощения 5,6 и 6,4 эВ), образующиеся при взаимодействии подвижных H -центров с $H_A(\text{Li}^+)$ - и $H_2(\text{Sr}^{++})$ -центрами, имеют структуру $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 (\text{Sr}^{++})_c^+ \text{Cl}_i^-$ соответственно.

Ассоциация междуузельного галогена в поле натрия (Na) в KCl

В кристалле KCl-Li из-за нецентрального положения лития в катионном узле решетки создается образование дипольного характера, состоящее из лития, частично занимающего катионный узел и частично катионную вакансию — $\text{Li}_c^+ \text{v}_c^-$. Несимметричное положение лития в катионном узле решетки KCl-Li связано с тем, что размер иона лития в два раза меньше размера иона калия.

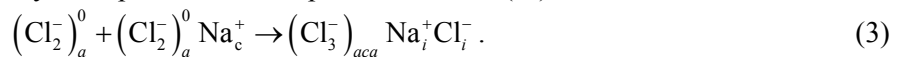
В кристалле KCl-Na соотношение ионных радиусов катионов составляет почти 1,4 раза, причем ион натрия расположен в центре катионного узла, т.е. занимает центрально-симметричное положение, и $H_A(\text{Na})$ -центр ориентирован в решетке близко к осям $\langle 110 \rangle$ [10].

В связи с эти очень интересно исследовать кристалл KCl-Na по аналогичной методике на предмет механизма образования Cl_3^- -центров.

Для кристалла KCl-Na по спектру поглощения не обнаружено сверхлинейного роста числа Cl_3^- -центров по отношению к росту числа H_A -центров, из которого следует, что реакция взаимодействия между подвижными атомами галогена с $H_A(\text{Na})$ -центрами, приводящая к созданию $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центров, не реализуется.

Разложением спектров поглощения X-облученных при 80 К кристаллов KCl-Na после отжига нагревом до различных температур и измерением спектров при 80 К выделены «чистые» Cl_3^- -центры при 5,3 эВ, примесные $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центры, характеризующиеся двумя полосами поглощения при 5,05 эВ и 6,4 эВ, как в случае KCl-Li.

По-видимому, в кристалле KCl-Na реакция $H-H_A(\text{Na})$ -взаимодействия по аналогии с кристаллом KCl-Li (2), как указано ниже, требует затрат больше энергии, чем $H-H_A(\text{Li})$ -взаимодействие

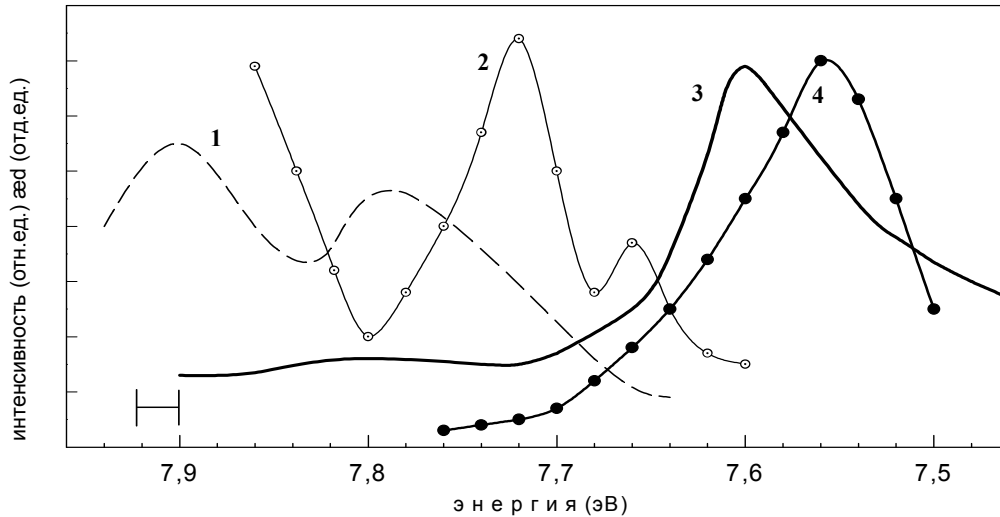


По-видимому, реакция (3) реализуется при последующем взаимодействии двух подвижных атомов галогена в поле катионных дефектов $(\text{v}_c^- \dots \text{Na}_i^+)$, созданных при распаде электронных возбуждений. На основе изучения спектров поглощения X-облученных при 80 К кристаллов KCl-Na установлено, что присутствие в KCl примеси натрия (10^{-4}) увеличивает в ~ 3 раза эффективность радиационного создания Cl_3^- -центров, в состав которых входит катионная вакансия (v_c^-) .

Из этого следует, что имеется другой канал создания катионных дефектов в кристаллах KCl-Na в отличие от KCl-Li. Одной из возможностей, по-видимому, является безызлучательный распад экситонов около натрия с рождением катионных вакансий и междуузельных ионов натрия $(\text{v}_c^- \dots \text{Na}_i^+)$.

На основании экспериментальных данных [11], при дальнейшем исследовании мы исходили из того, что в кристалле KCl-Na фотонами с энергией в области 7,59÷7,65 эВ непосредственно создаются экситоны около Na^+ , излучательный распад которых проявляется в полосе излучения около 2,8 эВ.

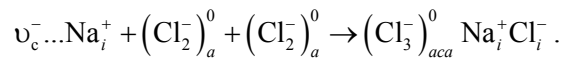
Поиск прямых проявлений распада автолокализованных экситонов в поле натрия (e_{Na}^0) на катионные френкелевские дефекты представляет собой трудную задачу, поскольку продукты распада $(\text{v}_c^- \dots \text{Na}_i^+)$ — оптически не проявляемые радиационные дефекты. Поэтому для экспериментального обнаружения катионных френкелевских дефектов при распаде околонатриевых экситонов (e_{Na}^0) наиболее перспективно изучить создание радиационных дефектов, в состав которых входят катионные вакансии, т.е. такие, как $(X_3^-)_{aca}$ - и V_F -центры $(\text{v}_c^- e^+)$.



- 1 — спектр поглощения тонкой пленки KCl при 10 К;
 2 — спектр возбуждения экситонной люминесценции (e^0) при 2,3 эВ для кристалла KCl при 4,2 К;
 3 — спектр возбуждения околонатриевой экситонной (e_{Na}^0) люминесценции при 2,8 эВ для KCl-Na при 80 К;
 4 — спектр создания V_F -центров ($v_c^- e_s^+$), построенный по интенсивности пика ТСЛ при 230 К (3) в KCl-Na

Рисунок 2. Оптические характеристики кристаллов KCl и KCl-Na

Для кристалла KCl-Na нами измерены с шагом на 0,5 эВ спектры создания радиационных дефектов после облучения при 80 К постоянной дозой фотонов в области спектра при 7,5; 7,55; 7,6; 7,65; 7,7 и 7,75 эВ. Особый интерес вызвал спектр создания V_F -центра, представляющий собой дырку, локализованную в катионной вакансии ($v_c^- e_s^+$). Информацию о спектрах создания радиационных дефектов при возбуждении фотонами различной энергии получили путем регистрации термостимулированной люминесценции кристалла KCl-Na при изодозовом режиме облучения. На рисунке 2 (кривая 4) приведен спектр создания V_F -центра ($v_c^- e_s^+$), построенный по интенсивности пика термостимулированной люминесценции при 230 К в кристалле KCl-Na. Из кривой 4 следует, что спектр создания V_F -центра проходит через максимум при 7,56 эВ, что очень близко по спектральному составу максимуму спектра возбуждения (7,6 эВ) околонатриевого экситона (e_{Na}^0). Этот экспериментальный факт является прямым доказательством того, что при распаде экситона, локализованного в поле легкого катиона (Na) реализуется создание катионных френкелевских дефектов $e_s^0(\text{Na}) \rightarrow v_c^- \dots \text{Na}_i^+$, а затем на их базе происходит ассоциация двух подвижных атомов галогена с образованием $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центра по следующей реакции:



Дискуссия

Для кристаллов KCl-Li, KCl-Sr и KCl-Na методом абсорбционной спектроскопии установлен спектральный состав, созданный рентгеновской радиацией, галогенных $(X_3^-)_{aca}^0$ - и $(X_3^-)_{aca}^0 M_i^+ X_i^-$ - центров.

В чистых кристаллах KCl экспериментально установлено, что после рентгеновского облучения в них образуются как изолированные $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0$ -, так и ассоциированные $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{K}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центры соответственно. В этом случае в качестве междуузельного металла выступает катион основной решетки K_i^+ .

В кристаллах KCl-Li и KCl-Na радиацией преимущественно создается вместо основного катиона междуузельный примесный катион-гомолог Li_i^+ и Na_i^+ , ассоциированный междуузельным галогеном с образованием $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центров соответственно. В кристалле KCl-Sr (из-за компенсации заряда) до рентгеновского облучения в решетке образуется комплекс $\text{Sr}^{++} v_c^-$, и поэтому

взаимодействие двух междоузельных атомов галогена происходит практически в месте катионной вакансии слегка возмущенной зарядом стронция, занимающего катионный узел решетки с образованием $(\text{Sr}^{2+})_c^+ (\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 (\text{Cl}_i^-)^-$ -центров.

Следует обратить внимание на тот факт, что зарегистрирована полоса поглощения в области спектра поглощения, характерная для междоузельного иона галогена (Cl_i^-) , входящего в состав $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$, $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{Sr}_c^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центра в кристаллах KCl-Li, KCl-Sr и KCl-Na соответственно.

Однако их механизмы образования различаются: в кристаллах KCl-Na $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Na}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центры образуются по экситонному механизму, путем взаимодействия двух междоузельных атомов галогена в поле созданных катионных дефектов при распаде автолокализованного анионного экситона на катионные френкелевские дефекты $(\text{v}_c^- \dots \text{M}_i^+)$; в кристаллах KCl-Li и KCl-Sr $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{Sr}_c^+ \text{Cl}_i^-$ -центры образуются по ассоциативному механизму, путем взаимодействия двух междоузельных атомов галогена в поле $\text{Li}_{ic}^+ \text{v}_c^-$ и $(\text{v}_c^- \text{Sr}^{++})_c^+$ комплексов соответственно. На рисунке 3 представлена схема взаимодействия двух H -центров в поле $\text{Li}_{ic}^+ \text{v}_c^-$ и $(\text{v}_c^- \text{Sr}^{++})_c^+$ комплексов с образованием $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{Sr}_c^+ \text{Cl}_i^-$ -центров.

Основное различие этих кристаллов состоит в различии радиусов примесного катионного иона (Na, Li), который должен быть вытолкнут в междоузлие при создании $(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{M}_{Ai}^+ \text{X}_i^-$ -центров в ходе $H-H_A$ ассоциаций.

Таким образом, критерием реализации механизма образования катионных френкелевских дефектов при ассоциации $H-H_A$ взаимодействия является тот факт, что в кристаллах KCl радиус примесного (r_{Li}) или собственного (r_{K}) катионов должен быть меньше радиусов тетраэдрической пустоты ($r_{\text{Li}} < r_{\text{t}}$ и $r_{\text{K}} < r_{\text{t}}$) и «окна» ($r_{\text{Li}} < r_x$, $r_{\text{K}} < r_x$) в тетраэдрическую пустоту по направлению $\langle 111 \rangle$.

Для этого из стехиометрических параметров решетки необходимо было рассчитать радиус тетраэдрической пустоты ($r_{\text{t}} = \frac{\sqrt{3}a}{4} - r_a$), который находится в центре пересечения пространственных диагоналей кубической ячейки, и радиус «окна» ($r_x = \frac{a}{\sqrt{6}} - r_a$), образованного из трех ближайших ионов галоида в тетраэдрическую пустоту по направлению $\langle 111 \rangle$, где a — постоянная решетки; r_a — ионный радиус аниона.

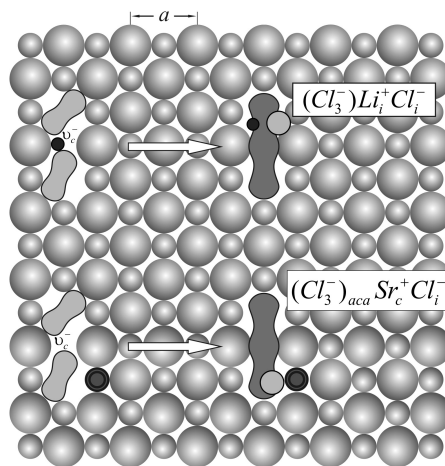


Рисунок 3. Схема взаимодействия двух H -центров в поле $\text{Li}_{ic}^+ \text{v}_c^-$ и $(\text{v}_c^- \text{Sr}^{++})_c^+$ комплексов с образованием

$(\text{Cl}_3^-)_{aca} \text{Li}_i^+ \text{Cl}_i^-$ и $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{Sr}_c^+ \text{Cl}_i^-$ -центров в кристаллах KCl-Li и KCl-Sr соответственно

Согласно полученным расчетным данным, исследуемые кристаллы можно условно разделить на три группы:

1) $r_c > r_\tau$ и $r_c > r_x$. В этот класс входит кристалл KCl, для которого радиус собственного катиона (r_c) превышает как радиус тетраэдрической пустоты (r_τ), так и радиус «окна» (r_x), т.е. $\frac{r_\tau}{r_c} = 0,84$,

$$\frac{r_x}{r_c} = 0,57.$$

Поэтому в кристалле KCl процесс создания катионных френкелевских дефектов при ассоциации H - H_A взаимодействия должен быть затруднен;

2) $r_c < r_\tau$ и $r_c > r_x$. В этот класс входит кристалл KCl-Na, где катион вполне может находиться в междоузельной пустоте решетки ($\frac{r_\tau}{r_c} = 1,15$), однако для этого процесса существует определенный

барьер, так как радиус катиона превышает радиус «окна», который он должен преодолеть ($\frac{r_x}{r_c} = 0,78$).

3) $r_c < r_\tau$ и $r_c < r_x$. К этому классу принадлежит кристалл KCl-Li, у которых радиус «окна» в тетраэдрическую пустоту имеет больший размер, чем радиус лития ($\frac{r_\tau}{r_{Li}} = 1,66$), и радиус тетраэдрической пустоты имеет больший размер, чем радиус лития ($\frac{r_x}{r_{Li}} = 1,12$).

На основании вышеизложенных данных можно предположить, что для чистого кристалла KCl образование катионных френкелевских дефектов требует больших затрат энергий для «проталкивания» катиона через «окно», состоящее из ближайших анионов, в тетраэдрическую пустоту.

В кристалле KCl-Li ион лития беспрепятственно может попасть в междоузлие, так как его радиус меньше как радиуса «окна», так и радиуса тетраэдрической пустоты ($r_{Li} < r_\tau$ и $r_{Li} < r_x$). Поэтому при взаимодействии двух H -центров около иона лития легко образуются $(Cl_3^-)_{aca} Li_i^+ Cl_i^-$ -центры.

Заключение

На основании экспериментальных и расчетных данных можно предположить, что $(Cl_3^-)_{aca} Li_i^+ Cl_i^-$ и $(Cl_3^-)_{aca} Sr_c^+ Cl_i^-$ -центры в кристаллах KCl-Li и KCl-Sr образуются при ассоциации междоузельных атомов (H -центров) в поле диполи $Li_{ic}^+ v_c^-$ и $Sr^{++} v_c^-$ соответственно, а $(Cl_3^-)_{aca} Na_i^+ Cl_i^-$ -центры в кристалле KCl-Na образуются при ассоциации междоузельных атомов (H -центров) в поле $v_c^- \dots Na_i^+$, предварительно образованных в решетке при распаде автолокализованных анионных экситонов [11].

Список литературы

- 1 Луцик Ч.Б., Луцик А.Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. — М.: Наука, 1989.
- 2 Lushchik Ch., Elango A., Gindina R. et al. Mechanisms of cation defects creation in alkali halides // Semicond. and Insulators. — 1980. — Vol. 5. — P. 133–158.
- 3 Луцик Ч.Б., Гиндина Р.И., Маароос А.А. и др. Радиационное создание катионных дефектов в кристаллах KCl // ФТТ. — 1977. — Т. 19. — Вып. 12. — С. 3625–3630.
- 4 Marat-Mendes J.N., Comins J.D. Capture of H-centers by IV dipoles during both X-irradiation and H-centre annealing in KCl-Sr // J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. — 1977. — Vol. 10. — P. 4425–4439.
- 5 Comins J.D., Carragher B.O. Model of first-stage F-center production in alkali halides containing divalent cation impurities // Phys. Rev., B. — 1981. — Vol. 24. — № 1. — P. 283–294.
- 6 Hoshi J., Saidoh M., Itoh N. Stabilization of the Interstitial Center by Divalent impurities in alkali halides // Cryst. Latt. Def. — 1975. — Vol. 6. — P. 15–34.
- 7 Шункеев К., Бармина А., Мясникова Л. и др. Релаксация автолокализованных экситонов в щелочно-галогидных кристаллах при понижении симметрии решетки низкотемпературной одноосной деформацией // Изв. вузов. Физика. — 2009. — № 8/2. — С. 212–215.

- 8 *Schoemaker D., Kolopus J.L.* Electron Paramagnetic Resonance and Optical Absorption Studies of the $V_1(\text{Li})$ Center in KCl-Li // *Phys. Rev., B.* — 1970. — Vol. 2. — № 4. — P. 1148–1159.
- 9 *Schoemaker D., Yasaities E.* Reorientation Motions of $H_A(\text{Li}^+)$ -Center in KCl-Li // *Phys. Rev., B.* — 1972. — Vol. 5. — P. 4970–4986.
- 10 *Delbecq C.J., Hutchinson E., Schoemaker D. et al.* ESR and Optical Absorption Study of the V_1 Center in KCl-NaCl // *Phys. Rev.* — 1969. — Vol. 187. — № 3. — P. 1103–1120.
- 11 *Луцик Ч.Б., Гиндина Р.И., Луцик Н.Е. и др.* Распад экситонов с рождением анионных и катионных френкелевских дефектов в KCl-Na // *Тр. ИФ АН ЭССР.* — 1982. — Т. 53. — С. 146–171.

К.Б.Бижанова, К.Ш.Шүнкеев

KCl кристалдары торы түйіндері арасында орналасқан галоген атомдарының жеңіл катион-гомологтардың сапаларының өрісіндегі ассоциациясы

Абсорбциялық спектроскопия әдісімен KCl кристалдарында түйінаралық галоген атомдарының (H-центрлер) қоспалы жеңіл катион (Li, Na) және $Sr^{++}v_c^-$ диполь құрамына кіретін катиондық вакансия өрісінде әсерлесуінен туатын X_3^- -радиациялық ақауларының табиғаты зерттелді. Эксперименттер мен есептеулер нәтижелері KCl-Li және KCl-Sr кристалдарында $(Cl_3^-)_{aca} Li_i^+ Cl_i^-$, сондай-ақ $(Cl_3^-)_{aca} Sr_c^+ Cl_i^-$ радиациялық ақаулары сәйкес $Li_{ic}^+ v_c^-$, $Sr^{++}v_c^-$ дипольдар өрісінде түйінаралық галоген атомдарының (H-центрлер) әсерлесу кезінде, ал KCl-Na кристалындағы $(Cl_3^-)_{aca} Na_i^+ Cl_i^-$ радиациялық ақаулары түйінаралық галоген атомдарының (H-центрлер) кристалда өздігінен қармалған аниондық экситондардың ыдырауы кезінде пайда болған $v_c^- \dots Na_i^+$ өрісінде әсерленуінен пайда болатындығы тағайындалды.

К.В.Бизанова, К.Ш.Шункеев

The association of the interstitial halogen atoms in KCl crystals in the field of impurity light cation-homologs

Using the methods of absorption spectroscopy the creation mechanisms of X_3^- -centers in KCl crystals at the association of interstitial halogen atoms (H-centers) in the field of cation-homologs of minor radius (Li, Na) and cation vacancies (in $Sr^{++}v_c^-$ dipoles) are studied. On the basis of experimental and calculation data it was registered that $(Cl_3^-)_{aca} Li_i^+ Cl_i^-$ and $(Cl_3^-)_{aca} Sr_c^+ Cl_i^-$ -centers in KCl-Li and KCl-Sr crystals (H-centers) in the dipole field $Li_{ic}^+ v_c^-$ and $Sr^{++}v_c^-$, accordingly, and $(Cl_3^-)_{aca} Na_i^+ Cl_i^-$ -centers in KCl-Na crystals are created at the association of the interstitial halogen atoms (H-centers) in the field of $v_c^- \dots Na_i^+$ preliminary created in the lattice at the decay of the self-trapped anion excitons.

К.Б.Бижанова¹, К.Ш.Шункеев²

¹Кастийский государственный университет технологий и инжиниринга им. Ш.Есенова, Актау;

²Актюбинский государственный педагогический институт

Механизмы радиационного создания X_3^- -центров в кристаллах KCl, KBr и KI при пластической и упругой деформации

Методами абсорбционной спектроскопии исследованы механизмы создания дефектов в щелочно-галлоидных кристаллах KCl, KI и KBr. Установлено, что при понижении симметрии решетки кристаллов KCl, KBr и KI пластической и упругой деформацией пластическая деформация кристаллов KCl, KBr и KI увеличивает эффективность создания радиационных дефектов — $(X_3^-)_{aca}^0$ и $[(X_2)_2]_{acc}$ -центров, в состав которых входят ди- и квартет вакансии, созданные при взаимодействии дислокаций; упругая деформация приводит к уменьшению эффективности создания радиационных дефектов — $(I_3^-)_{aca}^0$ -центров в кристалле KI. Отмечено, что в кристаллах KCl и KBr упругая деформация не влияет на эффективность радиационного создания $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров.

Ключевые слова: радиационное создание, кристаллы, пластическая деформация, упругая деформация, симметрия решетки, вакансии, галоген.

Введение

Длительное время в качестве возмущающих факторов ближайшего окружения локализованного междоузельного атома галогена использовались катионные примеси, которые играли стабилизирующую роль подвижного H -центра [1, 2]. Помимо катионов-гомологов возмущающим фактором кристаллической решетки может являться и пластическая, и упругая деформация, в результате которой существенно понижается точечная симметрия кристаллической решетки [3–5].

В щелочно-галлоидных кристаллах (ЩГК) из зарядовых соображений вакансионные дефекты должны рождаться парами, состоящими из анионных и катионных вакансий. Большинство этих пар входит в большие или меньшие скопления. Такой вывод был сделан авторами [6] на основании данных, полученных при измерении теплопроводности пластически деформированных кристаллов LiF.

Информация о создании электронных возбуждений, локализованных вблизи вакансионных дефектов решетки получены по регистрации спектров поглощения или возбуждения предварительно пластической деформированных ЩГК [3–5]. По релаксации электронных возбуждений ЩГК в поле ди- и квартет-вакансий интерпретирован эффект, что при взаимодействии дислокаций, создаваемых пластической деформацией, рождение вакансий парами энергетически более выгодно, чем создание одиночных вакансий.

На основе механических характеристик ЩГК, согласно пределу упругости (τ_c), режимы экспериментов специально выбирались по пластическому и упругому воздействию одноосной деформации кристаллов. При напряжениях выше $\tau > \tau_c$ деформация становится преимущественно пластической, а при $\tau < \tau_c$ — упругой. Причем предел упругости зависит от температуры деформации.

Поэтому пластическая деформация кристаллов осуществлялась при комнатной температуре (300 К) при $\epsilon > 2\%$, а упругая деформация — при низкой температуре (80 К) при $\epsilon < 1,8\%$.

Механизмы радиационного создания X_3^- -центров в ЩГК при пластической деформации

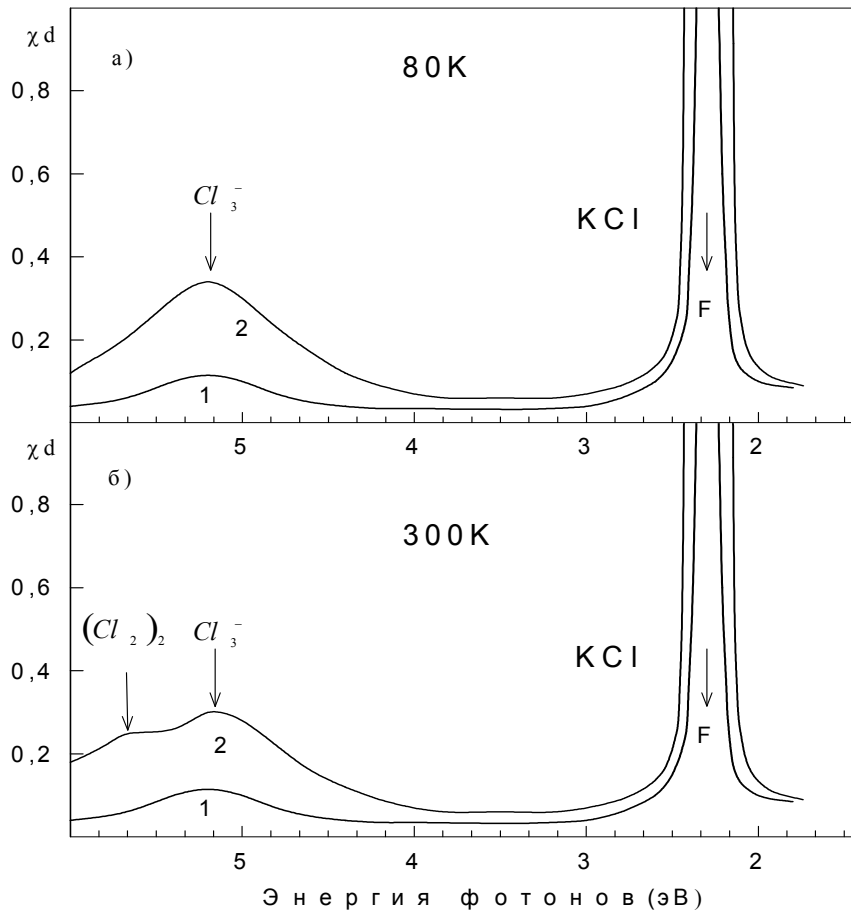
В экспериментах при пластической деформации особое внимание было сосредоточено на анализе спектров поглощения галогенных радиационных дефектов, которые являются индикаторами концентрации предварительно созданных вакансионных дефектов деформации (например, дивакансии $v_a^+ v_c^-$).

Эксперименты были проведены в следующей последовательности: кристалл предварительно пластически деформировался ($\epsilon=4-5\%$) одноосным сжатием в криостате при высоком техническом вакууме (10^{-6} Торр) при комнатной температуре, затем деформированный кристалл погружался до 80 К, и при этой температуре происходило облучение рентгеновской радиацией, после чего регист-

рировались спектры поглощения как при 80 К, так и после импульсного нагрева кристалла. Суть импульсных отжигов кристалла заключалась в нагреве облученного кристалла до определенной температуры, как правило, шагом через 10–20 К, и при данной температуре выдерживался 3–5 мин, а затем кристалл снова охлаждался до 80 К путем заливки жидкого азота в резервуар криостата.

Таким образом, все измерения спектров поглощения осуществлялись при 80 К.

В качестве примера на рисунке 1 приведены спектры поглощения кристалла КСl.



1 — недеформированный; *2* — деформированный при 300 К до 4–5 %;
а — облучение при 80 К, измерение 80 К; *б* — облучение при 300 К, измерение 80 К

Рисунок 1. Спектры поглощения X-облученных в изодозном режиме ($t=90$ мин) кристаллов КСl

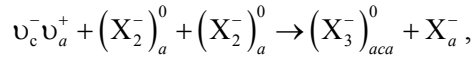
Из рисунка 1 видно, что при рентгеновском облучении при 80 К четко выделяются $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0$ -центры с максимумом спектров поглощения при 5,3 эВ. Следует отметить, что, во-первых, отсутствуют дополнительные полосы в спектре поглощения, характерные дипольным $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0 \text{M}_i^+ \text{Cl}_i^-$ -центрам, во-вторых, эффективность элементарных $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0$ -центров возрастает более чем в 3 раза, по сравнению с не деформированным кристаллом КСl.

При рентгеновском облучении при 300 К предварительно пластически деформированных кристаллов КСl (измерение спектров поглощения происходило при 80 К), помимо элементарного $(\text{Cl}_3^-)_{aca}^0$ -центра аналогично кристаллу КВr [3], появляются спектры поглощения $[(\text{Cl}_2)_2]_{aca}$ -центров с максимумом при 5,8 эВ.

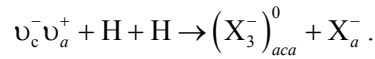
При рентгеновском облучении при 300 К предварительно пластически деформированных кристаллов Кl, помимо элементарного $(\text{I}_3^-)_{aca}^0$ -центра (максимум спектра поглощения при 3,8 эВ) анало-

гично кристаллам KBr и KCl, появляются в спектрах поглощения $[(I_2)_2]_{aca}$ -центры с максимумом при 4,5 эВ.

Таким образом, в кристаллах KBr, KCl и KI предварительно образованные пластической деформацией ди($v_c^- v_a^+$)- и квартет $2[v_c^- v_a^+]$ -вакансии способствуют образованию галогенных радиационных дефектов преимущественно $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров при взаимодействии двух междоузельных атомов галогена, схематически представленных на рисунке 2, согласно следующей реакции:



или



В заключение следует отметить тот факт, что в настоящее время структура галогенных радиационных дефектов достаточно надежно установлена и может дать информацию о структуре дорадиационных дефектов, возникающих в ходе пластической деформации. Действительно, эффективное радиационное создание $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров говорит о многочисленности ди-вакансий в деформированном кристалле, так как $(X_3^-)_{aca}^0$ -центры легко возникают при заполнении ди-вакансий двумя H -центрами (рис. 2). Радиационное создание $[(X_2)_2]_{aca}$ -центров указывает на наличие в деформированном кристалле квартетов вакансий, на базе которых при участии четырех H -центров формируется $[(X_2)_2]_{aca}$ -центр.

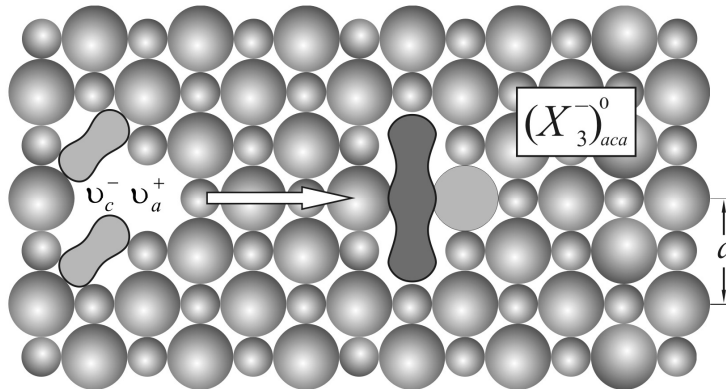
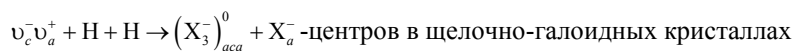


Рисунок 2. Схема взаимодействия двух H -центров в поле ди-вакансий ($v_a^+ v_c^-$) с образованиями



Таким образом, следует отметить, что пластическая деформация в ЩГК создает вакансионные дефекты (ди- и квартет-вакансии) и на их базе при облучении кристаллов радиационно создаются $(X_3^-)_{aca}^0$ и $[(X_2)_2]_{aca}$ -центры.

В кристаллах KBr, KCl и KI вакансионные дефекты, созданные пластической деформацией, играют роль зонда для стабилизации подвижных междоузельных атомов галогена, в результате которого эффективно создаются $V_{I_3}^-$, Cl_3^- и $(I_3^-)_{aca}^0$ -центры соответственно.

Механизмы радиационного создания X_3^- -центров в ЩГК при низкотемпературной упругой деформации

Суть дальнейших экспериментов по абсорбционной спектроскопии заключается в том, что под постоянно действующей упругой деформацией, которая должна изменить миграцию самого междоузельного атома галогена, исследовать механизмы образования $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров в кристаллах KBr,

KCl и KI. При низкотемпературной упругой деформации в решетке не создаются вакансионные дефекты как в случае пластической деформации.

Следует отметить, что в отличие от пластической деформации при низкотемпературной упругой деформации эксперименты проводятся под действием напряжения при 80 К в сжатом состоянии кристалла.

Исследования эффективности образования $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров при низкотемпературной упругой деформации проводились на сверхчистых кристаллах KCl, KBr и KI, выращенные из зонноочищенного сырья в Институте физики Тартуского университета Эстонии.

В кристаллах KCl и KBr концентрация F -центров при приложении напряжения остается без изменения. Это свидетельствует о том, что существенные изменения эффективности создания стабильных радиационных дефектов не происходят. Однако для кристалла KBr наблюдалось некоторое перераспределение галогенных радиационных дефектов между полосами Vr_3^- - и Vr_2^- -центров: уменьшается концентрация Vr_3^- -центров и растет эффективность создания Vr_2^- -центров.

Таким образом, для кристаллов KCl и KBr упругая низкотемпературная деформация приводит к уменьшению эффективности создания $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров в отличие от пластической деформации, где предварительно создаются ди- и квартет-вакансии.

Совершенно контрастно сказывается низкотемпературная упругая деформация на эффективности радиационного дефектообразования в кристалле KI. Как видно из рисунка 3а, количество радиационных дефектов в напряженном кристалле более чем на порядок ниже по сравнению с тем, что образуется в ненапряженном кристалле. Причем уменьшается количество как комплементарных F - и I_3^- -центров, так и α -центров (т.е. эффективность создания последних следует за эффективностью создания F - и I_3^- -центров). Кинетика нарастания радиационных дефектов с увеличением дозы рентгеновского облучения отражена на вставке рисунка 3б. Из рисунка 3б четко видны уменьшения скорости радиационного дефектообразования при приложении механического напряжения и уменьшения примерно в 5 раз концентрации F -центров. Стрелкой указано направление уменьшения концентрации F -центров.

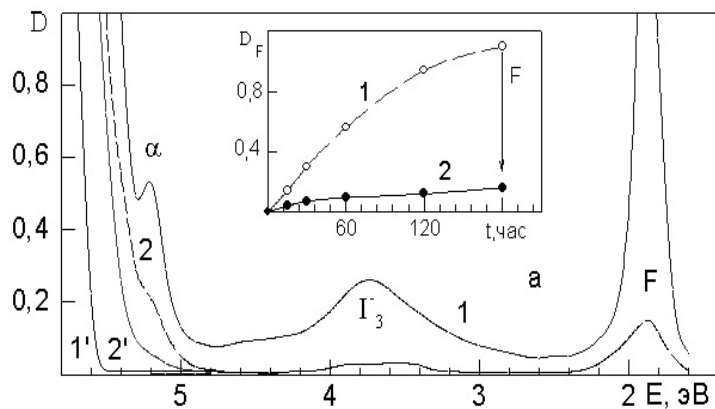
Благодаря тому, что в кристалле KI мы имели возможность регистрировать спад фундаментального поглощения, были исследованы также изменения, происходящие в этой области спектра. Край фундаментального поглощения исходного недеформированного кристалла (кривая 1' на рис. 3а) при приложении напряжения сдвигается в низкоэнергетическую сторону спектра (кривая 2' на рис. 3а). После рентгеновского облучения напряженного кристалла и отжига возникших радиационных дефектов нагревом до 490 К край фундаментального поглощения полностью не возвращается в начальное состояние. Эти сдвиги отражают создание преимущественно вакансионных дефектов в ходе пластической деформации кристалла. Обнаруженные сдвиги показывают, что при одноосном сжатии кристалла порядка 2÷3 % при 80 К наряду с упругой деформацией [3–6] возникает также и пластическая деформация, остающаяся после снятия напряжения.

К уменьшению эффективности создания устойчивых радиационных дефектов в ЩГК при понижении симметрии решетки могут приводить различные причины: либо канал распада экситонов на F , H -пары становится невыгодным, либо увеличиваются обратные рекомбинации из-за трудностей разделения первичных F , H -дефектов, либо уменьшается эффективность ассоциации междоузельных H -центров.

Первые две причины уменьшения эффективности радиационного создания X_3^- -центров приводят к закрытию канала безызлучательного распада электронных возбуждений, а третья причина зависит от расстояния взаимодействия подвижного атома галогена между собой в напряженной решетке.

Для выяснения этих причин в экспериментальном отношении благоприятное условие создается в кристаллах, активированных катионами-гомологами, например, KI-Na и KBr-Na, так как в этих кристаллах радиацией создаются X_3^- - и $H_A(\text{Na})$ -центры.

Если в поле упругого напряжения в кристалле будет ослаблено дальнедействующее взаимодействие двух H -центров, то независимо от кристалла эффект уменьшения концентрации X_3^- -центров (H - H взаимодействие) должен сопровождаться эффектом увеличения концентрации $H_A(\text{Na})$ -центров.



- 1' — спектры поглощения недеформированного и необлученного KI;
 2' — спектры поглощения деформированного ($\epsilon=1,5\%$) по кристаллографическому направлению $\langle 100 \rangle$ при 80 K, но необлученного кристалла KI; 1 — спектры поглощения недеформированного, но облученного рентгеновской радиацией при 80 K в течение 3 ч кристалла KI;
 2 — спектры поглощения деформированного ($\epsilon=1,5\%$) по кристаллографическому направлению $\langle 100 \rangle$ при 80 K и облученного рентгеновской радиацией при 80 K в течение 3 ч кристалла KI.
 На вставке: кривые накопления F -центров в кристалле KI в отсутствии деформации (1) и при сжатии ($\epsilon=1,5\%$) по $\langle 100 \rangle$ при 80 K (2)

Рисунок 3. Влияние низкотемпературной упругой деформации на спектры поглощения кристаллов KI после облучения рентгеновской радиацией в течение 3 ч при 80 K

Для проверки того, не является ли последний эффект ответственным за уменьшение радиационного дефектообразования в напряженном кристалле KI, мы провели исследование воздействия одноосного сжатия на радиационное дефектообразование в кристаллах KI-Na. Эффективность создания радиационных дефектов при приложении одноосного сжатия к кристаллу KI-Na, также как в чистом кристалле KI, значительно уменьшается. Причем снижаются концентрации как собственных радиационных дефектов — F , I_3^- -центров, так и примесных радиационных дефектов — $I_A(\text{Na})$, $H_A(\text{Na})$ -центров.

Экспериментально нами установленный эффект уменьшения радиационного дефектообразования в кристаллах KI (а также RbI) обусловлен упругой деформацией одноосно-напряженного кристалла и что он не связан с изменением ассоциации первичных междоузельных дефектов в напряженном образце. Введение в кристалл KI катионов-гомологов малого радиуса (Na), чем основной катион (K), способствует стабилизации подвижных H -центров (если они существуют), в условиях упругой напряженной решетки эффективность радиационного дефектообразования в KI-Na так же, как и в KI уменьшается на порядок.

Таким образом, единственным объяснением причины сокращения дефектообразования в напряженных кристаллах KI и KI-Na остается уменьшение эффективности безызлучательного канала распада экситонов на радиационные дефекты в поле упругой деформации решетки.

При объяснении причин различия во влиянии одноосного сжатия в кристаллах KI, с одной стороны, и KCl, KBr — с другой, мы опирались на рассмотренный в [7] модернизированный метод геометрической модели ЩГК. Предполагается, что размер возникающего H -центра определяется величиной радиуса атома (R_a^0), а максимально возможный радиус пустоты (R_{\max}), в которой должен разместиться H -центр, определяется эластичностью анионов. Если $R_{\max} > R_a^0$, то создается благоприятная ситуация для образования H -центра в решетке, если, наоборот, $R_{\max} < R_a^0$, то атом галоида (а значит H -центр) не помещается в названную пустоту.

Результаты расчетов R_{\max} и ϵ_{\max} (%) при $R_{\max} = R_a^0$ показывают, что для кристаллов KI процесс радиационно стимулированного создания междоузельного атома галогена (H -центра) затруднен, так как $R_{\max} < R_a^0$, а для кристаллов KCl и KBr, наоборот, облегчен $R_{\max} > R_a^0$.

Таким образом, становится очевидным эффект уменьшения радиационного дефектообразования в кристаллах KI и KI-Na, зависящий от степени упругого напряжения, в отличие от кристаллов KCl и KBr.

На основании расчетных данных становится понятным противоречивые на первый взгляд экспериментальные результаты по абсорбционной спектроскопии относительно эффективности образования X_3^- -центров в кристаллах KCl, KBr и KI при низкотемпературной упругой деформации из-за размерности релаксированного H -центра.

Дискуссия

В пластически деформированных кристаллах в значительных количествах содержатся различные вакансионные и дислокационные дефекты. Любое нарушение периодичности кристаллической решетки может повлиять на электронную структуру кристалла как через вносимые нарушением зарядовые особенности, так и посредством изменения ближайшего к нарушению кристаллического окружения. Для случая одиночных анионных вакансий (v_a^+) в ЩГК существен эффективный заряд (+1) относительно решетки этих дефектов, являющийся причиной того, что в зоне запрещенных энергий в кристалле с вакансиями возникают глубокие дискретные энергетические уровни захвата для электронов и дырок. На базе этих уровней могут формироваться различные радиационные дефекты, такие как F^- , V_K^- , V_F -центры и др.

В пластически деформированных ЩГК эффективно создавались такие радиационные дефекты, как $(X_3^-)_{aca}^0$ и $[(X_2)_2]_{acac}$ -центры, в состав которых входят ди- ($v_c^-v_a^+$) и квартет- [$2(v_c^-v_a^+)$] вакансии. Эти экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что пластическая деформация в решетке создает ди- ($v_c^-v_a^+$) и квартет-вакансии [$2(v_c^-v_a^+)$].

Из перечисленных экспериментальных результатов сделан вывод, что пластическая деформация в ЩГК создает парные вакансионные дефекты (ди- и квартет-вакансии), которые являются ловушками для стабилизации подвижных междоузельных атомов галогена, приводящие к эффективному росту концентрации $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров, так как ассоциация двух H -центров происходит на базе ди-вакансий ($v_c^-v_a^+$) согласно схеме, представленной на рисунке 4а.

Таким образом, в поле вакансионных дефектов пластической деформации в решетки ЩГК создается энергетически выгодная ситуация для формирования термически устойчивых радиационных галогенных дефектов.

При одноосной упругой деформации ЩГК одновременно изменяются два параметра: понижается симметрия кристалла и изменяется постоянная решетки (a'). В наших экспериментах были подобраны максимально приближенные условия для осуществления упругой деформации: при низких температурах (80 К), при постоянном воздействии на кристалл деформации.

Следует особо отметить о экспериментальных данных, ярко свидетельствующих об уменьшении эффективности создания I_3^- -центров в кристаллах KI при низкотемпературной упругой деформации, в основе которой лежит стабилизация H -центра в анионном узле решетки (рис. 4б). Причем не только I_3^- -центры, которые являются продуктами взаимодействия двух H -центров в кристаллах KI, но и других радиационных дефектов, не связанных со стабилизационными процессами H -центров.

Этот экспериментальный факт говорит о том, что при низкотемпературной упругой деформации безызлучательный канал распада автолокализованных экситонов в ЩГК на первичные радиационные дефекты становится энергетически невыполнимым, как продемонстрировано на рисунке 4б.

Стехиометрические параметры H -центра показывают, что в иодидах (LiI, NaI, KI и RbI) процесс создания H -центров закрыт из-за невыгодности образования междоузельного атома галоида H -центра, так как его размер больше размера пустоты решетки (рис. 4б). Это говорит о том, что в кристалле KI эффективность образования $(I_3^-)_{aca}$ -центров резко должна снижаться.

На основании расчетных данных можно четко интерпретировать экспериментальные результаты по абсорбционной спектроскопии относительно эффективности образования X_3^- -центров в хлоридах, бромиды и иодидах при низкотемпературной упругой деформации из-за размерности релаксированного H -центра: в кристаллах KCl и KBr эффективность образования $(Cl_3^-)_{aca}$ и $(Br_3^-)_{aca}$ -центров соот-

ветственно остается без изменения, а в кристалле KI эффективность образования $(\Gamma_3^-)_{aca}$ -центров резко снижается.

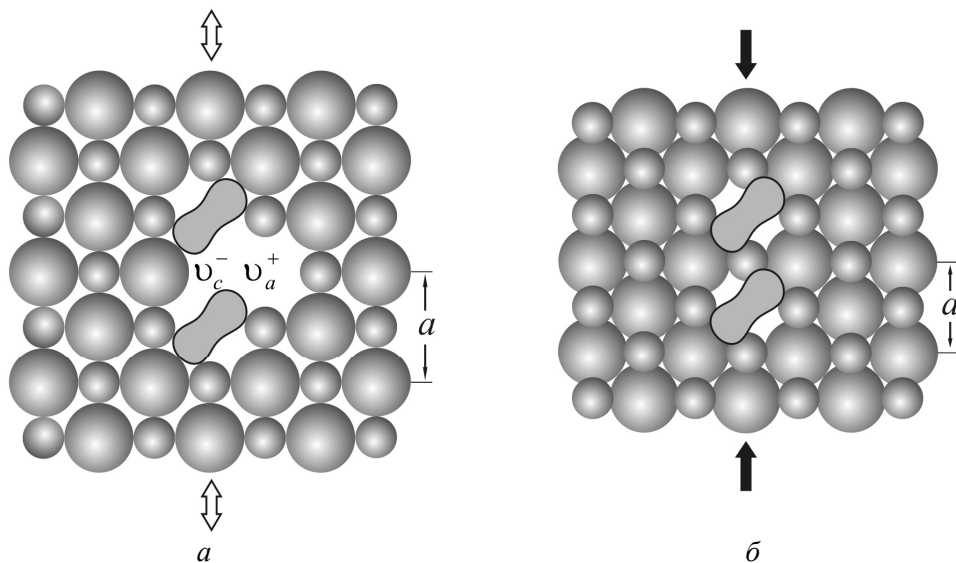


Рисунок 4. Схема взаимодействия двух H -центров после пластической деформации при 300 К (а) и низкотемпературной 80 К (б) упругой деформации в решетке ЦГК

Заключение

При понижении симметрии решетки кристаллов KCl, KBr и KI пластической и упругой деформацией установлены следующие закономерности:

- пластическая деформация кристаллов KCl, KBr и KI увеличивает эффективность создания радиационных дефектов — $(X_3^-)_{aca}^0$ и $[(X_2)_2]_{acac}$ -центров, в состав которых входят ди- и квартет-вакансии, созданные при взаимодействии дислокаций;
- упругая деформация приводит к уменьшению эффективности создания радиационных дефектов — $(\Gamma_3^-)_{aca}^0$ -центров в кристалле KI. В кристаллах KCl и KBr упругая деформация не влияет на эффективность радиационного создания $(X_3^-)_{aca}^0$ -центров. Расчеты подтверждают, что при упругой деформации в кристалле KI процесс радиационно-стимулированного создания междоузельного атома галогена (H -центра) затруднен, а в кристаллах KCl и KBr сохраняется до определенной степени относительной деформации.

Список литературы

- 1 Бекешев А., Васильченко Е., Даулетбекова А. и др. Радиационно-стимулированный выход примеси в междоузлия в кристаллах KBr-Li и KCl-Li // ФТТ. — 1996. — Т. 38. — № 3. — С. 769–778.
- 2 Бекешев А., Васильченко Е., Шункеев К., Эланго А. Стабилизация междоузельных радиационных дефектов в одноосносжатых при 80 К кристаллах KBr // ФТТ. — 1996. — Т. 38. — № 8. — С. 2394–2405.
- 3 Акилбеков А.Т., Васильченко Е.А., Сармуханов Е.Т. и др. Радиационное дефектообразование в пластически деформированном KBr // ФТТ. — 1991. — Т. 33. — № 3. — С. 868–873.
- 4 Vasilchenko E., Sarmukhanov E., Shunkeev K., Elango A. Electronic excitations in KBr and KI crystals near vacancy defects of different size // Phys. St. Sol. (b). — 1992. — Vol. 174. — P. 155–163.
- 5 Shunkeev K., Sarmukhanov E., Barmina A. et al. Specific Features of the Temperature Quenching of Luminescence of Self-Trapped Excitance in Alkali Halide Crystals under Low Temperature Deformation // Physics of the Solid State. — 2008. — Vol. 50. — № 10. — P. 1799–1802.
- 6 Смирнов И.А., Смирнов Б.И. Теплопроводность пластически деформированных кристаллов LiF // ФТТ. — 1968. — Т. 10. — № 1. — С. 307–310.
- 7 Рябых С.М., Бугаенко Л.Т. Модернизированная геометрическая модель кристаллов и ее применение в физике твердого тела // Изв. АН Латв. ССР. Сер. физ. и тех. наук. — 1990. — № 2. — С. 77.

К.Б.Бижанова, К.Ш.Шүнкеев

Пластикалық және серпімді деформация әсерінен KCl, KBr, KI кристалдарында радиациялық X_3^- -орталықтарының пайда болу механизмі

Пластикалық және серпімді деформациялардан KCl, KBr және KI кристалдарының симметриялары төмендеген кездегі галогендік радиациялық ақаулардың пайда болу механизмдері абсорбциялық спектроскопия әдісімен зерттелді. KCl, KBr және KI кристалдарында құрамына пластикалық деформация әсерінен туатын ди- және кваттет вакансиялар кіретін радиациялық ақаулардың $(X_3^-)_{aca}^0$ және $[(X_2)_2]_{acac}$ пайда болу мүмкіндігінің артатындығы тағайындалды. KI кристалында серпімді деформация әсерінен галогендік радиациялық ақаулардың $(X_3^-)_{aca}^0$ пайда болу мүмкіндігінің азаятындығы, ал KCl және KBr кристалдарында серпімді деформацияның әсері болмайтындығы байқалды. Есептеулер нәтижелері серпімді деформация әсері кезінде KI кристалында түйінаралық галоген атомын (H-ақау) радиациямен тудыру мүмкіндігінің күрт азайып кететіндігін, ал KCl және KBr кристалдарында, керісінше, жеңілдейтіндігі дәлелденді.

Bizanova¹ K.B., Shunkeyev² K.Sh.

The radiation creation mechanism of X_3^- -centers in KCl, KBr and Ki crystals at plastic and elastic stress

Using absorption spectroscopy the work researches the creation mechanism of halogen radiation defects in KCl, KBr and KI crystals at lattice symmetry lowering by plastic and elastic stress. It is registered that at plastic stress to KCl, KBr and KI crystals the radiation defect creation efficiency increases ($(X_3^-)_{aca}^0$ and $[(X_2)_2]_{acac}$ -centers), which content di- and quartet of vacancies created at dislocation interaction. It is registered that at KI crystal the stress leads to the radiation defect creation efficiency decrease ($(X_3^-)_{aca}^0$ -centers), but it does not influence to KCl and KBr crystals. The calculations confirm that at elastic stress in KI crystal the process of radiation-stimulated creation of interstitial halogen atom (H-center) is troubled and in KCl and KBr crystals is maintained to the considerable value of relative elastic stress.

Е.К.Жумадилов, З.Ф.Мурашова

Карагандинский государственный технический университет

Электрофизические свойства ферритов $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba)

Исследована температурная зависимость электропроводности впервые синтезированных ферритов $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) в интервале температур 300-400 К. Проведены измерения электрического сопротивления по двухэлектродной схеме. Установлена связь электропроводности со структурой соединений. Сделан анализ сегнетоэлектрических свойств $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$.

Ключевые слова: ферриты, электропроводность, температурная зависимость, структура, сегнетоэлектрики, двухэлектродная схема, энергия активации.

В связи с открытием в последнее время веществ, обладающих одновременно сегнетоэлектрическими и ферро- или антиферромагнитными свойствами, следует ожидать дальнейшего расширения области применения сегнетоэлектриков [1, 2]. Для практики важно то, что в таких веществах диэлектрические, магнитные и другие свойства взаимосвязаны. На этой основе уже имеется ряд принципиально новых устройств и приборов, в которых электрическим полем управляются магнитные параметры и, наоборот, магнитное поле используется для управления электрическими параметрами.

Целью данной работы являлось исследование температурной зависимости электропроводности впервые синтезированных ферритов $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) [3, 4], установление связи электропроводности со структурой соединений и энергией активации, анализ сегнетоэлектрических свойств.

Рентгенографическое исследование вышеуказанных ферритов в [3, 4] показали, что все соединения кристаллизуются в ромбической сингонии, причем с возрастанием ионного радиуса щелочноземельного металла от магния к барию наблюдается увеличение параметра c : $14,7 \text{ \AA} \rightarrow 15,13 \text{ \AA} \rightarrow 16,64 \text{ \AA} \rightarrow 17,16 \text{ \AA}$. Соответственно в этом же порядке возрастают объемы их элементарных ячеек: $104,24 \text{ \AA}^3 \rightarrow 112,93 \text{ \AA}^3 \rightarrow 122,08 \text{ \AA}^3 \rightarrow 126,59 \text{ \AA}^3$.

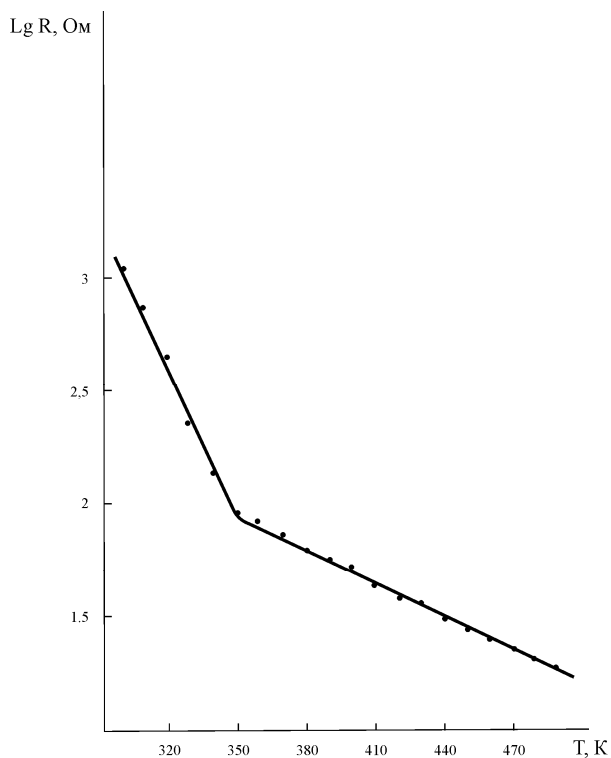


Рисунок 1. Зависимость сопротивления от температуры для феррита магния $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$



Рисунок 2. Зависимость сопротивления от температуры для феррита кальция $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$

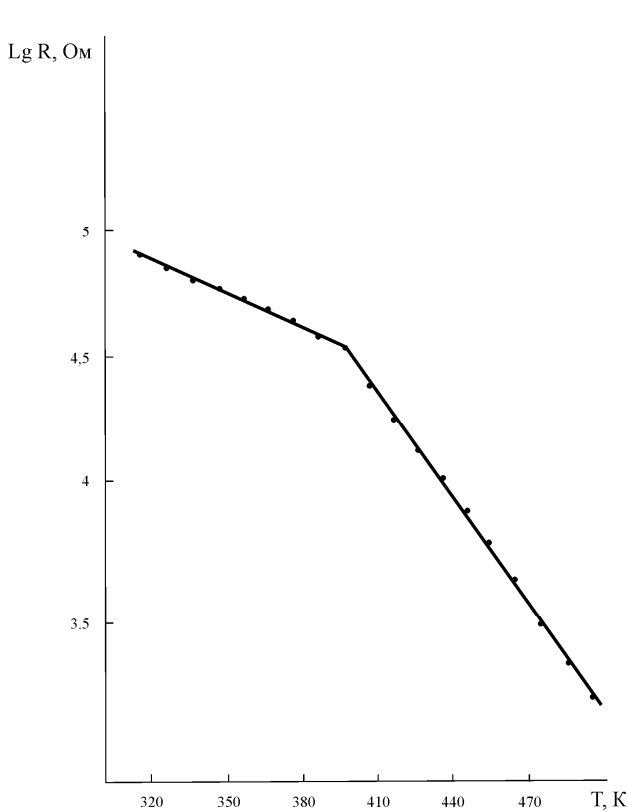


Рисунок 3. Зависимость сопротивления от температуры для феррита стронция $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$

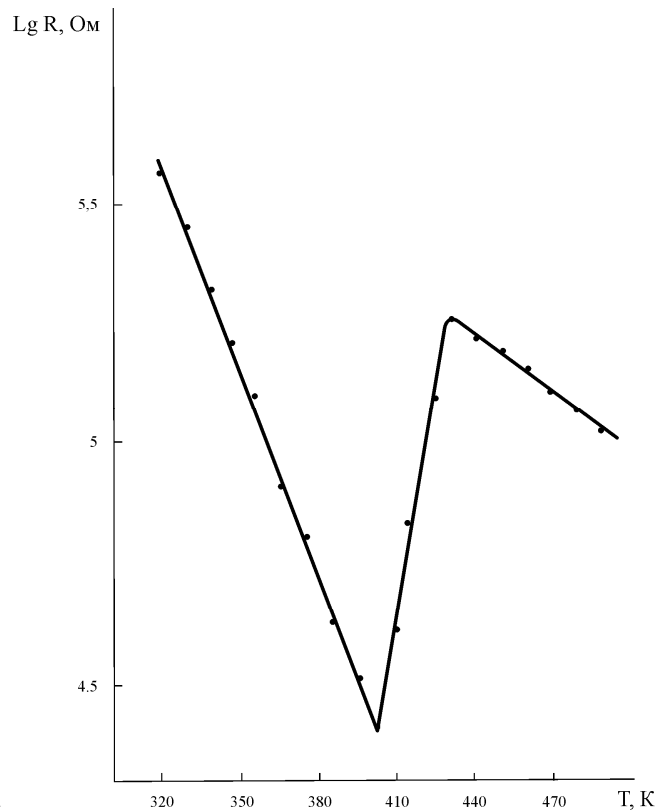


Рисунок 4. Зависимость сопротивления от температуры для феррита бария $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$

Электрофизические измерения сопротивления проведены по двухэлектродной схеме в температурном интервале 300–490 К. Исследуемые образцы представляли собой плоскопараллельные пластинки в виде дисков, диаметром 10 мм, которые в последующем обжигали в печи с силитовыми нагревателями, электроды нанесены вжиганием серебряной пасты на всей рабочей поверхности. Нагревательное устройство для получения нужной температуры представляло собой специальную печь цилиндрической формы для равномерного нагрева рабочего объема, скорость нагрева составляла ~ 5 К/мин. Температура измерялась хромель-алюмелевой термопарой.

В связи с тем, что керамические материалы обладают определенной инерционностью, измерения электрофизических характеристик проводились после определенной предварительной выдержки при фиксированных температурах. Результаты электрофизических измерений представлены на рисунках 1–4.

В исходном состоянии (300 К) при одинаковых геометрических параметрах образцов сопротивление возрастает от феррита магния к ферриту бария. Электрофизические свойства коррелируют с изменением параметра c решеток, определенного рентгенофазовым анализом.

В процессе нагрева все образцы обнаруживают полупроводниковые электрофизические свойства: с увеличением температуры сопротивление уменьшается (увеличивается электропроводность).

Однако характер изменения электропроводности в зависимости от температуры у исследуемых образцов различный. Так, если для ферритов магния и стронция (рис. 1, 3) резких скачков изменения электропроводности в зависимости от температуры не наблюдается, то для ферритов кальция и бария в различных температурных интервалах отмечаются аномальные эффекты.

Следует отметить, что это эффект носит размытый характер, свойственный керамической технологии синтеза образцов. Эти аномальные эффекты можно отнести к фазовым переходам [5].

Для $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$ область аномального эффекта находится в интервале 370–430 К, для $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ — 400–430 К, что совпадает с термодинамическими исследованиями [3, 4].

При аномальном эффекте электропроводность с ростом температуры уменьшается (растет сопротивление), т.е. у образца проявляются металлические свойства. Для металлов в области средних и высоких температур сопротивление пропорционально абсолютной температуре

$$R_T = R_0 (1 + \alpha \Delta T), \quad (1)$$

где R_0 — сопротивление при начальных условиях; α — температурный коэффициент сопротивления; $\Delta T = T - T_0$.

Из последней формулы следует

$$\alpha = \frac{R_T - R_0}{R_0 \Delta T}. \quad (2)$$

Возрастание электрической проводимости полупроводников с увеличением температуры обусловлено ростом концентрации носителей тока. Нагрев приводит к перебросу электронов из валентной зоны в зону проводимости, т.е. росту носителей тока. Температурная зависимость электропроводности полупроводников задается соотношением

$$\sigma_T = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right), \quad (3)$$

где σ_0 — проводимость при начальных условиях; ΔE — ширина запрещенной зоны; k — постоянная Больцмана.

Расчет ширины запрещенной зоны проводился следующим образом. Известно, что сопротивление определяется по формуле

$$R = \rho \frac{l}{S} = \frac{l}{\sigma S}, \quad (4)$$

где ρ — удельное сопротивление; l и S — длина и площадь поперечного сечения образца соответственно.

Подставив значение σ из выражения (3) в формулу для сопротивления (4), получим

$$R = \frac{l}{\sigma_0 S} \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right). \quad (5)$$

Введя обозначение $R_0 = \frac{l}{\sigma_0 S}$, приведем формулу к виду

$$R = R_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right). \quad (6)$$

Формула (6) лежит в основе одного из методов определения ширины запрещенной зоны полупроводников.

После логарифмирования последнего выражения приводим формулу (6) к виду

$$\ln R = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT}. \quad (7)$$

Последнее выражение для температур T_1 и T_2 и соответствующих им сопротивлений R_1 и R_2

$$\ln R_1 = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT_1}; \quad \ln R_2 = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT_2}. \quad (8)$$

Вычитая второе равенство из первого и исключая R_0 , получаем

$$\ln R_1 - \ln R_2 = \frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) = \frac{\Delta E (T_2 - T_1)}{2kT_1 T_2}. \quad (9)$$

Из последнего выражения получим ΔE

$$\Delta E = \frac{2kT_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{R_1}{R_2} = \frac{2kT_1 T_2}{0,43(T_2 - T_1)} \lg \frac{R_1}{R_2}. \quad (10)$$

Рассчитанные по формуле (10) для линейных участков графиков зависимости $\lg R(T)$, значения ширины запрещенной зоны ΔE и по формуле (2) температурные коэффициенты сопротивления для аномальных участков приведены ниже.

Ширина запрещенной зоны ΔE для феррита кальция в области 300–360 К равна 2,2 эВ, в интервале 430–490 К — 2,5 эВ, температурный коэффициент сопротивления при 370–430 К $\alpha_t = +0,005 \text{ К}^{-1}$. Для образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ в области 300–400 К $\Delta E = 2,5$ эВ, в области 430–490 К $\Delta E = 0,8$ эВ, температурный коэффициент сопротивления при 400–430 К $\alpha_t = +0,19 \text{ К}^{-1}$.

Таким образом, до фазового перехода в указанных двух образцах ширина запрещенной зоны возрастает от феррита кальция к ферриту бария. Но если для феррита кальция после аномального скачка ширина запрещенной зоны становится больше (2,5 эВ), то для феррита бария, наоборот, ширина запрещенной зоны уменьшается от 2,5 до 0,8 эВ. Возможно, это связано с характером структурных изменений, так как для феррита кальция температурный коэффициент равен $+0,005 \text{ K}^{-1}$, тогда как для феррита бария — $0,19 \text{ K}^{-1}$.

Как отмечено в [5], по анализу температурной зависимости σ полупроводников и ее связи с энергией активации ΔE_A из уравнения $\sigma_T = \sigma_0 \exp(-\Delta E_A / 2kT)$ следует, что $\lg \sigma$ является в первом приближении линейной функцией обратной температуры, т.е. $\lg \sigma = f(10^4 / T)$. Очевидно, что на графике эта зависимость должна выражаться прямыми линиями в пределах, где $\Delta E_A = \text{const}$ и подвижность носителей заряда (электронов и дырок) $\mu = \text{const}$, что и наблюдается в первом приближении на рисунках 5, 6.

Рассчитанная величина энергии активации для $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$, $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ изменяется в незначительных пределах от 0,01 до 0,03 эВ, тогда как для $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ изменяется в 3,5 раза от 0,04 до 0,14 эВ и в высоко- и в низкотемпературной областях.

Таким образом, для ферритов $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ во всем исследованном интервале температур характер электропроводности является полупроводниковым, тогда как для ферритов $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$, $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ характер электропроводности меняется от полупроводникового к металлическому в определенном интервале температур.

Нами также были проведены исследования сегнетоэлектрических свойств $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$.

Сегнетоэлектриками, по определению, называется группа кристаллических диэлектриков, обладающих в определенном интервале температур самопроизвольной (спонтанной) поляризацией, которая сильно изменяется под влиянием внешних воздействий — электрического поля, деформации, изменения температуры. Поляризация сегнетоэлектрического образца во внешнем электрическом поле состоит, во-первых, в смещении границ доменов и росте размеров тех доменов, векторы электрических моментов которых близки по направлению к напряженности внешнего поля, и, во-вторых, в повороте электрических моментов доменов по полю. В достаточно сильном поле достигается состояние насыщения, когда весь образец однородно поляризован по полю и его поляризованность не изменяется при дальнейшем увеличении напряженности внешнего поля. Одной из самых важных отличительных характеристик сегнетоэлектриков является явление диэлектрического гистерезиса. Наличие петли гистерезиса, описывающей зависимость между электрической индукцией и напряженностью электрического поля на образце, обнаружено у исследуемого образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$.

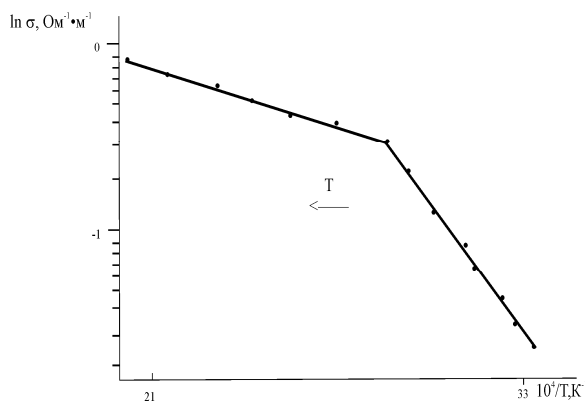


Рисунок 5. Температурная зависимость электропроводности для $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$

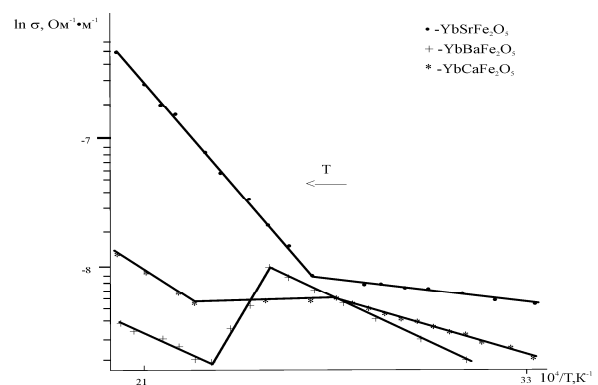


Рисунок 6. Температурная зависимость электропроводности для $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ (•); $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ (+), $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$ (*)

Наиболее распространенный способ получения зависимости электрической индукции от напряженности внешнего электрического поля $D(E)$ основан на схеме Соьера-Гауэра петли гистерезиса. Нами была получена хорошо наблюдаемая на осциллографе С1–83 петля гистерезиса феррита бария (рис. 7).

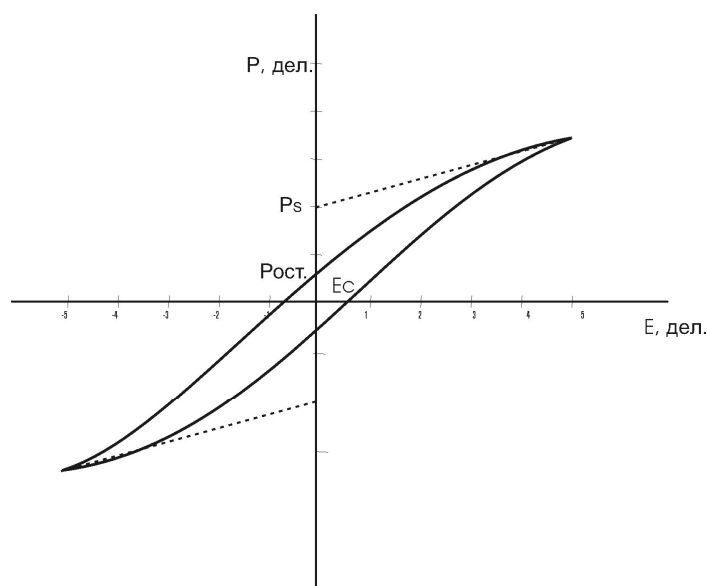


Рисунок 7. Петля гистерезиса образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$

Таким образом экспериментально установлено, что исследуемый образец $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ обладает сегнетоэлектрическими свойствами.

Список литературы

- 1 Вевцев Ю.Н., Гагулин В.В., Любимов В.Н. Сегнетомагнетики. — М.: Наука, 1982. — 224 с.
- 2 Летюк Л.М. Химия и технология ферритов. — Л.: Химия, 1983. — 252 с.
- 3 Касенов Б.К., Толоконников Е.Г., Мустафин Е.С. и др. Синтез ферритов $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$, их рентгенографические, термодинамические и электрофизические свойства // Журн. неорг. химии. — 2006. — Т. 51. — № 3. — С. 416.
- 4 Толоконников Е.Г., Мустафин Е.С., Касенова Ш.Б. и др. Синтез, рентгенографические и термодинамические свойства ферритов $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$. // Журн. неорг. химии. — 2005. — Т. 50. — № 2. — С. 187.
- 5 Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. — М.: Наука, 1978. — 791 с.

Е.К.Жұмаділов, З.Ф.Мурашова

$\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) ферриттерінің электрофизикалық қасиеттері

Мақалада жаңа ферриттердің $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) электрофизикалық қасиеттерін зерттеудің нәтижелері келтірілген. Электрөткізгіштіктің 300–400 К аралығындағы температураға тәуелділігі зерттелген. Барлық қосындыларда жартылай өткізгіштік қасиеттің бар екендігі көрсетілді. Тәжірибелік көрсеткіштер бойынша есептелген қосындының тыйым салынған белдеулердің енінің мәндері ұсынылды. Магний және стронций ферриттеріндегі тәжірибе нәтижесі бойынша электрөткізгіштіктің температураға тәуелділігі, ал кальций және барий ферриттерінде әсерлі температуралық аралықтардағы аномалдық эффекті байқалды.

E.K.Zhumadilov, Z.F.Murashova

Electrophysical properties of ferrites $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba)

In the work there are presented the results of studying electric-and-physical properties of new ferrites. There is studied the temperature dependence of electric conductivity in the range of 300 to 490 K. It is shown that all the compounds reveal semi-conductive properties. There are presented the calculated of the experimental data values of the width of the forbidden zone of the compounds considered. According to experimental data, there is no abrupt change in electrical conductivity depending on temperature in ferrites of magnesium and strontium, there are anomalous effects in ferrites of calcium and barium, in various temperature ranges.

I.Kh.Zharekeshev

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty

Iterative calculation of electron wave functions in quantum nanoclusters

Propose a new efficient computation of the eigenfunctions of the electron. Studied quantum states in disordered nanoclusters large. For calculations, the Anderson model with a random impurity potential. The calculation of the spectrum and wave functions of the electrons carried by the Lanczos iterations. It is shown that this method allows to approach the experimental situation in nanoelectronics with real cluster sizes up to 100 Å

Key words: custom function, the electron, quantum states, the model of Andersen, the Lanczos iteration, nanoelectronics, clusters, the actual size.

1. Introduction

The investigation of the conductivity of an electronic system of very small sizes corresponding to the dimensions of nanodevices belongs to the very heart of the modern condensed matter physics. The classical Drude theory of the electronic transport was built on the idea of free electrons scattered by positive ions located in sites of a metallic lattice. A crucial point of this approach was the mean free path, the average length an electron flies before it encounters a lattice ion. Therefore, the electron conductivity should be proportional to the mean free path, according to the classical theory of metals. This was established experimentally as being too large, i.e. around 100nm, meaning two orders of magnitude larger than the lattice constant. The wave character of an electron causes the electron to diffract from an ideal nanocrystal. Actually, the resistance appears only when electrons scatter from imperfections in a crystal, such as impurities, lattice shifts, dislocations, declinations etc. Since there is no perfect ideal crystal in the nature, the experimentalists mostly deal with the disordered samples. The main consequence is: the more the imperfections, the smaller the mean free path and the lower the conductivity. The question arises: will any increase in the degree of the lattice disorder lead to just a decrease of the mean free path and thus to a lower electronic conductivity? A half century ago P.Anderson has discovered that beyond a critical amount of disorder of impurity potential the diffusive motion of the electrons not only reduced, it can come to a complete stopping [1]. The electron becomes trapped by the disorder and the conductivity may vanish to zero. This is due to effects of quantum localization, resulting from the enhanced backscattering provided that the motion of the electron is phase-coherent (the phase of the wave function is preserved). This is a key concept for a metal-insulator transition, based on the quantum interference phenomena. The critical amount of potential disorder, at which the extended wave functions become suddenly localized, is called the critical disorder. Thus, the one-electron states in the presence of a random impurity potential can be localized in a finite range of space at the critical point of the metal-insulator transition.

The metal insulator transition is of particular interest from the viewpoint of studying the spatial structure of the wave functions and the statistical properties of the energy spectrum of the electrons. It was found that the correlations between the amplitudes of wave functions exactly at the critical point possess the universal properties [2]. In other words, the statistics of the eigenstates calculated for finite sizes of nanoclusters can be extrapolated to those in the thermodynamic limit. At the same time the behaviour of the electron states exactly at the critical point of the transition is neither localizes, nor delocalized, it is essentially multifractal [3]. To gain knowledge about the multifractal nature of the critical wave functions one need to explore a precise structure of the eigenstates which is possible only by the exact numerical calculations. That is why it is important to investigate the nature of eigensolutions by using direct large-scale computer diagonalization. The Lanczos algorithm is one of the most effective computational tools for searching for few extreme eigenvalues and corresponding eigenvectors of large sparse Hermitian matrices [4]. It has been successfully applied to many problems in atomic, molecular and condensed matter physics, where it is required to gain information about low-lying excitations in a spectrum close to the ground state. In many applications the matrices are sparse due to various constraints, for example, a limited connectivity and a short-range coupling. Practically, the number of non-zero matrix elements is often proportional to the dimension of the matrix N rather than to N^2 .

2. Iteration scheme

One of the common models used for describing electron transport properties in disordered systems close to the transition is the Anderson model of localization. The Hamiltonian of the model defined on a three-dimensional lattice is given by the operator

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + t \sum_{i,j \neq i} |i\rangle\langle j|, \quad \text{Eq. (1)}$$

where $|i\rangle$ ($\langle i|$) is the creation (annihilation) operator of an electron at a lattice site n , and m labels the neighbour sites to the site n . The on-site energies ε_i are random variables uniformly distributed within an interval of width W , such that W parameterizes the disorder. The second term corresponds to the hopping processes between the neighbour sites in the lattice. The transfer integral t can be set to unity ($t = 1$). The metal-insulator transition in the band centre, $E = 0$, occurs at the disorder $W = W_c \approx 16.4$. This value of W is called critical disorder. The sparse structure of the matrix A corresponding to the Hamiltonian H makes the Lanczos method the most suitable for solving the eigenvalue problem $H\psi_n = E\psi_n$ of large systems. For instance, the number of non-zero off-diagonal elements per line equals six in a simple cubic lattice of linear size L . Indeed, this speeds up substantially the most time-consuming part of the implementation, namely the matrix–vector multiplications. A single matrix–vector product needs computer time proportional to $N = L^3$.

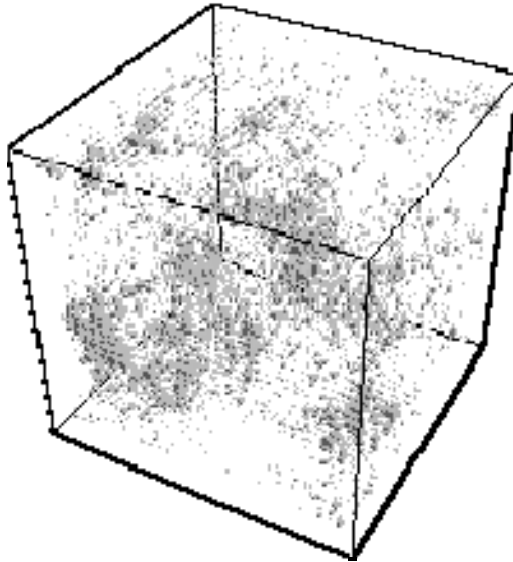


Figure 1. Illustration of the spatial distribution of the amplitude squares of the wave function of the electronic quantum state in the middle of the Anderson model (Eq. 1). The disorder W is chosen to be exactly at the critical point of the metal-insulator transition. The linear size of the cubic nanocluster is $L = 100$. The intensity is proportional to the amplitude squared. The sizes of tiny cubes correspond to the electron density at certain coordinate. One can clearly observe the multifractal structure of the electron wave function spread over the whole nanocluster

In addition, by applying the helical boundary conditions instead of the traditionally used periodic boundary conditions, as in [2], it is possible to eliminate several expensive loops of the program. Another advanced optimization is to reorganize the position of the co-diagonals, so that some of them go beyond the borders of the original square matrix A , becoming a continuation of other co-diagonals. This leads to a rectangular matrix of size $(L^2 + N)N$. All of the off-diagonal matrix entries are presented in the form of six co-diagonals with the same length N parallel to the main diagonal and horizontally shifted from it by the distances $-L^2$; $-L$; -1 ; 1 ; L ; L^2 , respectively. This restructuring of the matrix A does not change the components of the resulting matrix–vector product. In fact, it allows to avoid the procedure of ‘look-up’ of the table-given positions of the A -matrix elements, which are usually necessary for the standard Lanczos diagonalization of the Anderson Hamiltonian [1, 3]. As a consequence, the memory requirements are also markedly diminished. Thus, instead of storing the initial structure of the matrix in the main processor memory, one needs only the fast random-number generator in order to create repeatedly the same set of diagonal elements for each matrix-vector multiplication. The convergence process to the eigensolutions was controlled by deter-

mining the upper limit of the user-specified tolerance, meaning that the norm of the matrix $(H\psi_n - E\psi_n)$ should be much more less that the minimal scale of the problem.

It is known [4] that due to the floating point arithmetic, which leads to round-off errors, the Lanczos vectors lose their global orthogonality. Therefore, after the recursions finish the size M of the tri-diagonal matrix (transfer matrix [4]) after approaches should be at least $M=2,2/N$. The figure 1 shows the number of iterations as a function of energy of the electron inside of the model spectrum. The above-mentioned size M is required in order to detect the pairs of eigenvalues and the corresponding eigenvectors with absolute precision less than 10^{-9} in the internal part of the spectrum, where the density of states is maximal. Closer to the energy band edge the optimal value of M drastically decreases. Stability of the modified Lanczos-like algorithm has been tested in a wide range of the system size L ranging from 5 to 100. There is a specific property of the spectrum of disordered systems at criticality, which turns to be important and helpful for the converging procedure.

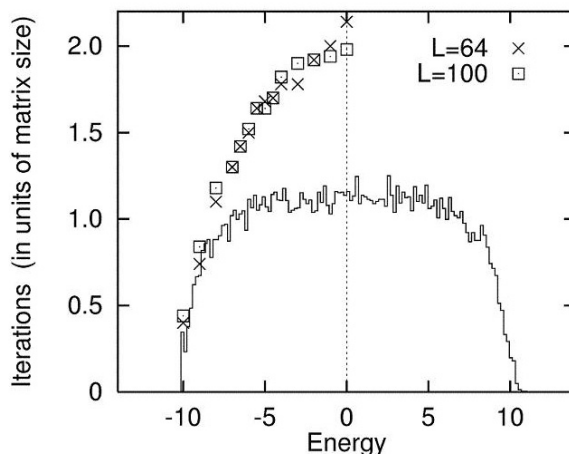


Figure 2. The number of iterations (ratio M/N) as a function of energy E . M and N is size of the transfer-matrix and of the initial matrix, respectively. The result is for an eigenpair with the highest achievable accuracy at the disorder $W=16.4$ for different cube sizes L .

The mobility edge is exactly at the band centre of the nanocluster.

The spectral density of states shown by the step line defines the band boundaries

It is a strong quantum-mechanical level repulsion that decreases the probability to find two eigenvalues close to each other by decreasing the spacing between them. This property facilitates not only the speed of the iterations, but also the bisection algorithm for finding the eigenvalues of the TM -matrix. The latter becomes more time-consuming, when one needs to calculate a relatively large part of the spectrum (more than 10 % of all of the eigenvalues). In this case the performance has been further improved by parallelizing the bisection algorithm for consequent energy sub-intervals. By varying the disorder W apart from the critical value, we have checked that the size of the transfer-matrix should be slightly larger in order to reach the desirable accuracy of the eigenvalues in a given part of the spectrum.

3. Critical statistics

One can numerically study statistical properties of fluctuations in electron spectra of 3D disordered systems. The nearest-neighbour level spacing distribution, the two-point correlation function and the form-factor have been shown with high precision to exhibit size-independence at the critical point of the Anderson transition. With increasing the size of the system they scale towards the corresponding results of the RMT below the critical disorder ($W < W_c$), and to the Poisson distribution above the critical value ($W > W_c$). As a result, in the thermodynamic limit only three universal statistics exist, including the critical statistics precisely at the transition. In the metallic phase, the range of validity of the Wigner-Dyson statistics extends to the infinite energy, because the Thouless conductance diverges for large L . In the insulating phase, the Poisson limit is expected to apply since the statistics is a consequence of the superposition of the contributions from many independent localization volumes.

In the case when time-reversal symmetry is preserved one can compare $P(s)$ in the metallic regime for periodic and Dirichlet boundary conditions. We have found that it is important to distinct between the Wigner surmises and the results of the RMT, in order to extract the weak-localization corrections. It is con-

sistent with our results to assume that the level statistics depends on the boundary conditions, not only in the metallic regime, but also at the critical point, since at $W = W_c$ the localization length diverges. The influence of the broken time-reversal symmetry on the critical level statistics is also essential. In the Aharonov-Bohm geometry we found a family of scale-invariant level statistics, which are controlled only by the AB-flux. By increasing the flux, the level spacing distribution shows a crossover from the critical orthogonal to the critical unitary form, so called COE-CUE crossover.

Analogous study can be performed for investigating the crossover between the critical orthogonal (COE) and the critical symplectic ensembles (CSE). In this case, the controlling parameter is the strength of the spin-orbit coupling characteristic of the broken rotational symmetry. The COE-CSE transition in the regime of the strongest spin-orbit coupling has been discussed in the literature. We have calculated the dependence of the level number variance on its mean value in a given energy interval in the metallic regime. The number variance undergoes a smooth crossover from the Wigner-Dyson theory for small energy to the diffusive regime for large energy, which is governed by the single parameter. Interestingly, in higher dimensions, $d > 3$, when the diffusive approximation breaks down, the number variance should reveal a new behaviour regime governed by an additional spatial scale. All this represents a collection of the most important spectral statistical measures at criticality exploited for the numerical-scaling evaluation. They indicate the presence of the new class of statistical ensembles inherent to the disordered-induced metal-insulator transitions.

This means there exist three generic situations for a given basic symmetry. Although occupying an intermediate position, these 'critical' ensembles are essentially different from both the standard Wigner ensembles and the Poisson ensemble of completely uncorrelated variables. A disordered system in the thermodynamic limit can be prescribed to only one of these three ensemble classes. The fact that the spectrum of a disordered system has the properties of a critical ensemble obviously signalizes that the system undergoes the transition between the metallic and insulating regime. By other words, the spectral critical statistics play role of an adequate precursor of the localization transition. Similarly to the ergodic regime, depending on fundamental symmetry the system at criticality falls into one of the classes: Critical Orthogonal, Critical Unitary and Critical Symplectic. The description of the Anderson transition in terms of the spectral statistical quantities peculiar to the new critical classes implies relevance and significance for other physical problems, where crossover between the two limits of non-integrable and exactly solvable models is accompanied by a critical phenomenon [2]. For example, an analogue to the Anderson transition in nonlinear physics called the dynamical localization allows the semi-classical description of integrability-to-chaos transition.

The localization of the wave functions in the momentum space gives rise to the Anderson-type transition in the ballistic domain. One should notice that the universality of the critical level statistics implies the independence on the system size and on the type of disorder model. In addition, they should be invariant with respect to the type of the underlying lattice and to the energy. On the other hand, the level statistics at the Anderson transition is shown to be sensitive to the basic symmetry. It depends also on the type of boundary conditions and on the shape of a sample (aspect ratio). Dependence on the dimensionality of the system is an additional important issue, which deserves separate investigation. It is found that in the four-dimensional systems the critical level statistics at the localization transition tends towards the Poisson limit, while the numerical studies performed for $2 < d < 3$, e.g. on the bifractal structure with $d = 2,58$, demonstrate that $P(s)$ scales closer to the Wigner-Dyson distribution.

4. Discussions

After employing various successful optimizations it was possible to compute not only the extreme eigenvalues in the tails of the density of states, but also the interior of the spectrum of disordered lattices of large size $N = 100 \times 100 \times 100$. The maximal dimensions of the matrices from previous diagonalization studies [1–3] have been exceeded by more than two orders of magnitude. The spectral fluctuations represented in terms of the level spacing distribution and the two-level correlation function exhibit scale-invariant behaviour. Moreover, they proved to be independent of the type of boundary conditions, provided that it belongs to a given topology. We have verified that for sufficiently large sizes one does not need to average over different random systems with the same disorder W . This is due to the ergodicity principle, which establishes equivalence between averaging over an ensemble of many systems and averaging over the energy of a single system. We have also succeeded in determining several eigenstates of unprecedented matrix sizes of million-by-million very close to the centre of the spectrum by partly using the conventional version of the restarted Lanczos solver with reorthogonalization [4].

This was performed on a single-processor workstation Alpha UNIX within a period of few days (10000 CPU-seconds). We have investigated the probability distribution of the local amplitudes of the wave functions and the energy dependence of their mutual correlations at the transition. It is interesting to notice that the achieved scale of disordered Hamiltonians becomes now comparable with typical realistic sizes of quantum dots and quantum wires in many experimental situations, although the Anderson model of localization does not take electron–electron interactions into account. We have also applied similar optimization techniques for diagonalizing the Hubbard model, where in addition to the disorder a few spinless fermions can interact if they are on the nearest-neighbouring lattice sites (short-range coupling). The sparseness of the matrix of the Hubbard model is, however, less advantageous compared to the non-interacting models.

5. Conclusions

An implementation of an advanced numerical algorithm for solutions of eigenvalue problems which appear in modelling electronic properties of quantum disordered nanoclusters is considered. I study the electron wave states at the localization transition caused by a chaotic impurity potential on the basis of the Anderson lattice model. The calculation of the internal part of the electron spectrum and the corresponding wave functions for very huge and sparse Hamiltonian matrices of sizes up to million-by-million is performed by the Lanczos type method especially developed for explore the statistical properties of energy levels and eigenfunction amplitudes. It is known that the correlations of eigenvalues are decoupled from the correlations of the eigenfunctions only in 'pure' Gaussian ensembles. Besides, in the crossover regime between different universality classes the long-range spatial wave function correlations do not vanish in contrast to the 'pure' limiting symmetry cases. As to the mobility edge, the spectral correlations in the crossover regime should generally be considered in close relation with the eigenfunctions correlations. One might expect that the multifractal properties of the critical wave functions undergo a smooth transition between the 'pure' critical ensembles. Exploring these issues, as well as investigating the statistical properties in higher dimensions is a challenging problem left for the future.

Literature

- 1 *Anderson P.W.* // Phys. Rev. — 1958. — Vol. 109. — P. 1492–1509.
- 2 *Zharekeshv I.Kh., Kramer B.* // Phys. Rev. Lett. — 1997. — Vol. 79. — P. 717–720.
- 3 *Shklovskii B.I., Shapiro B., Sears B.R., Shore H.B.* // Phys. Rev. — 1993. — Vol. B47. — P. 11487–11490.
- 4 *Cullum J.K., Willoughby R.K.* Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue problems. — Boston: Ed. Birkhauser, 1985. — 355 p.

И.Х.Жарекешев

Кванттық нанокластерлердегі электронның толқындық функцияларын итеративтік есептеп шығару

Электронның өзіндік функцияларын жаңа тиімді жолмен есептеп шығару ұсынылған. Үлкен көлемді реттелмеген нанокластерде кванттық сәттер зерттелген. Бұл үшін ретсіз қоспалы потенциалды Андерсонның моделі қолданылды. Электрондардың спектрі мен толқындық функциялары Ланцоштың итерациялық тәсілін қолдану арқылы есептеліп шығарылған. Бұл тәсілдің көлемі 100 Å электроникада эксперименталдық жағдайға жақындаудың мүмкіндігі дәлелденген.

И.Х.Жарекешев

Итеративные вычисления волновых функций электронов в квантовых нанокластерах

Предлагается новое эффективное вычисление собственных функций электрона. Изучены квантовые состояния в неупорядоченных нанокластерах большого размера. Для расчетов используется модель Андерсона с хаотическим примесным потенциалом. Вычисление спектра и волновых функций электронов проводится методом итераций Ланцоша. Показано, что этот метод позволяет приблизиться к экспериментальной ситуации в нанoeлектронике с реальными размерами кластеров до 100 Å.

Б.А.Прмантаева

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

Упругое рассеяние протонов на ${}^9\text{Li}$ в рамках глауберовской теории

Проведен расчет дифференциальных сечений упругого рассеяния протонов на ядре ${}^9\text{Li}$ при энергии $E = 60$ МэВ/нуклон в рамках дифракционной теории Глаубера в инверсной кинематике. Рассчитаны волновые функции ядра в рамках трехчастичных моделей $\alpha - t - 2n$ и ${}^7\text{Li} - n - n$ с реалистическими потенциалами межкластерных взаимодействий. Факторизованная на подсистемы запись оператора многократного рассеяния позволила проследить за вкладом отдельных членов в сечение и их интерференцией. Установлена «микроскопическая» динамика процесса рассеяния. Сделан вывод о том, что для описания сечения в широком угловом диапазоне необходимо учитывать все кратности рассеяния в операторе Ω .

Ключевые слова: глауберовская теория, упругое рассеяние, протоны, нейтронная стабильность, энергия, волновая функция, Ω оператор.

Введение

Изучение процессов рассеяния экзотических нестабильных ядер, расположенных вблизи границы нейтронной стабильности, на различных мишенях, обнаружило качественно новый тип ядерной структуры — гало. В стабильных и близких к стабильным ядрах нейтронное и протонное распределения по существу однородные. Некоторые ядра, расположенные на границе нейтронной стабильности, имеют протяженные низкоплотностные распределения слабосвязанных избыточных нейтронов, названных гало, вокруг компактного распределения большинства нуклонов, представляющих собой кор. Гало-ядра характеризуются большим поперечным сечением взаимодействия (приводящим к большому среднеквадратичным радиусам), близкими магнитными и квадрупольными моментами самого ядра и его кора, слабой энергией связи валентных нуклонов и узким импульсным распределением продуктов в реакциях фрагментации и кулоновской диссоциации. Не у всех нейтроноизбыточных ядер наблюдается гало-структура. Если имеется превышение концентрации нейтронов над протонами, которое обычно наблюдается на ядерной поверхности, не сопровождаемое увеличением ее размера, то такую структуру называют «шубой». ${}^9\text{Li}$ принадлежит к такому типу ядер, у которых наличие «шубы» не приводит к «разбуханию» ядра. Для примера приведем экспериментальные значения среднеквадратичных радиусов типичного гало-ядра ${}^{11}\text{Li}$: $R_m = 3,71(20)$ фм, ядра ${}^9\text{Li}$: $R_m = 2,44(6)$ фм и ${}^6\text{Li}$: $R_m = 2,44(7)$ фм (по последним данным, приведенным в [1]). Отсюда можно сделать вывод, что ядро ${}^9\text{Li}$ даже при наличии «шубы» является более плотно упакованным, чем ${}^6\text{Li}$, у которого энергия связи нуклонов в αd -канале мала и которое является достаточно рыхлым.

В настоящей работе в рамках дифракционной теории Глаубера проведен расчет дифференциальных сечений упругого рассеяния протонов на ядре ${}^9\text{Li}$ при энергии 60 МэВ/нуклон [2] (проведен в ускорительной лаборатории RIKEN (Япония)) в инверсной кинематике. Волновые функции (ВФ) ядра рассчитаны в рамках трехчастичных моделей: $\alpha - t - 2n$ [3] и ${}^7\text{Li} - n - n$ с реалистическими потенциалами межкластерных взаимодействий.

1. Краткий формализм

Матричный элемент рассеяния в дифракционной теории записывается следующим образом:

$$M_{if}(\vec{q}_\perp) = \sum_{M_i M_f} \frac{ik}{2\pi} \int d\vec{\rho}_\perp d\vec{R}_A \exp(i\vec{q}_\perp \vec{\rho}_\perp) \delta(\vec{R}_A) \langle \Psi_i^{JM_i} | \Omega | \Psi_f^{JM_f} \rangle, \quad (1)$$

где $R_A = \frac{1}{A} \sum_{n=1}^A r_n$ — координата центра масс ядра; \vec{k} — импульс налетающих частиц в с.ц.м.; в стандартной теории Глаубера рассеяние происходит в плоскости, перпендикулярной налетающему пучку (обычно пучок направлен по оси z , тогда плоскостью реакции будет xy), поэтому здесь $\vec{\rho}_\perp, \vec{q}_\perp$ — прицельный параметр и переданный в реакции импульс являются двумерными векторами (в отличие от трехмерных их будем обозначать нижним индексом « \perp »), лежащими в плоскости xy . В переданном

импульсе \vec{q} учитывается только поперечная компонента, продольной пренебрегают. В случае упругого рассеяния $|q| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, θ — угол рассеяния.

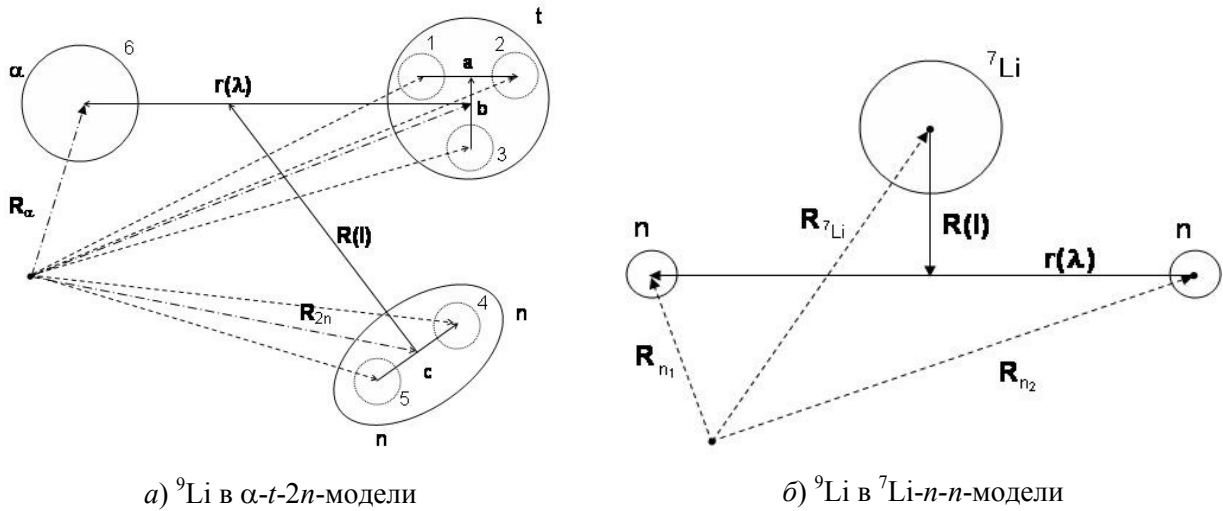


Рисунок 1. Схема ядра

Волновую функцию ядра ${}^9\text{Li}$ с полным угловым моментом J (для основного состояния $J^\pi = \frac{3}{2}^-, S = \frac{1}{2}$) и его проекцией M_J в α - t - $2n$ -модели (схема представлена на рис. 1а) можно записать в виде

$$\Psi_{i,f}^{JM_J} = \Psi_\alpha(\vec{R}_\alpha) \Psi_t(\vec{r}_1\vec{r}_2\vec{r}_3) \varphi_{2n}(\vec{r}_4\vec{r}_5) \sum_{\lambda LS} \Psi_{\lambda LS}(\vec{r}, \vec{R}), \quad (2)$$

где $\Psi_\alpha(\vec{R}_\alpha)$, $\Psi_t(\vec{r}_1\vec{r}_2\vec{r}_3)$, $\varphi_{2n}(\vec{r}_4\vec{r}_5)$, $\Psi^{JM_J}(\vec{r}, \vec{R})$ — ВФ α -частицы, тритона (t), бинейтрона ($2n$) и относительного движения в координатах Якоби. Внутренние ВФ α -частицы и t записываются в виде разложения по гауссоидам

$$\Psi_\alpha(\vec{R}_\alpha) = N_\alpha \sum_\alpha C_\alpha \exp(-v_\alpha \vec{R}_\alpha^2); \quad (3)$$

$$\Psi_t(\vec{r}_1\vec{r}_2\vec{r}_3) = N_t \sum_t C_t \exp\left(-\frac{1}{2} v_t \sum_{i=1}^3 (\vec{r}_i - \vec{R}_t)^2\right), \quad (4)$$

здесь N_α, N_t — нормировочные коэффициенты; C_α, C_t — коэффициенты разложения; значения которых взяты из следующих работ: [4] — для α -частиц; [5] — для t .

Т а б л и ц а 1

Веса разных конфигураций волновой функции ${}^9\text{Li}$ из работы [6]

α - t - $2n$ -модель				
λ	ℓ	L	S	P, %
2	1	2	1/2	55,49
1	2	2	1/2	20,08
3	2	2	1/2	20,05
${}^7\text{Li}$ - n - n -модель				
0	0	0*	1/2	98,41
1	1	1	1/2	0,09
2	2	0*	1/2	1,5

Относительные веса конфигураций ядра ${}^9\text{Li}$ приведены в таблице. Из нее видно, что максимальный вклад в ВФ в α - t - $2n$ -модели дают три компоненты, из которых мы ограничимся первой, а в ${}^7\text{Li}$ - n - n -модели абсолютно доминирует компонента с нулевыми квантовыми числами.

Здесь мы учитываем компоненты ВФ $\Psi_{\lambda lm}^{JM_j}(\vec{r}, \vec{R})$, записываем их в следующем виде:

$$\Psi_{\lambda lLS}(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_{\lambda=2, l=1, L=2}(\vec{r}, \vec{R}) + \Psi_{\lambda=1, l=2, L=2}(\vec{r}, \vec{R}) + \Psi_{\lambda=3, l=2, L=2}(\vec{r}, \vec{R}). \quad (5)$$

Оператор Ω в глауберовской теории записывается в виде ряда многократного рассеяния

$$\Omega = 1 - \prod_{v=1}^A (1 - \omega_v(\vec{p}_\perp - \vec{p}_{\perp v})) = \sum_{v=1}^A \omega_v - \sum_{v(\mu)} \omega_v \omega_\mu + \sum_{v(\mu(\eta))} \omega_v \omega_\mu \omega_\eta + \dots (-1)^{A-1} \omega_1 \omega_2 \dots \omega_A, \quad (6)$$

где A — число нуклонов в мишени; $\vec{p}_{\perp v}$ — двумерный аналог трехмерных одночастичных координат нуклонов \vec{r}_v . Учитывая строение ядра ${}^9\text{Li}$, представленного в трехчастичных моделях, перепишем оператор (7) в альтернативном виде, исходя из факта, что рассеяние происходит на α -частице, тритоне и бинейтроне, составляющих ядро ${}^9\text{Li}$:

$$\Omega = \Omega_\alpha + \Omega_t + \Omega_{2n} - \Omega_\alpha \Omega_t - \Omega_\alpha \Omega_{2n} - \Omega_t \Omega_{2n} + \Omega_\alpha \Omega_t \Omega_{2n}, \quad (7)$$

где каждый из операторов как ω_v — профильные функции, которые, в свою очередь, выражаются через амплитуду протон-нуклонного рассеяния $f_{pN}(q)$:

$$\omega_v(\vec{p}_\perp - \vec{p}_{\perp v}) = \frac{1}{2\pi ik} \int d\vec{q}_\perp \exp(-i\vec{q}_\perp(\vec{p}_\perp - \vec{p}_{\perp v})) f_{pN}(q), \quad (8)$$

чтобы вычислить матричный элемент (1) с ВФ (2–5) и оператором (7) и проинтегрировать по координатам, от которых они зависят. Это достаточно сложная задача, и решить ее аналитически (до определенного момента) удастся только благодаря записи ВФ и операторов в виде разложения по гауссоидам. Так как задача сопряжена с вычислением многократных интегралов, то при аналитическом интегрировании мы не теряем точности, что неизбежно при численном счете. Ввиду громоздкости окончательных выражений расчет их проводился на компьютере.

Вычисления с ВФ ${}^9\text{Li}$ в ${}^7\text{Li}$ - n - n -модели проводятся аналогично приведенным выше, однако существенно упрощаются, так как квантовые числа принимают одно значение: $\lambda = \ell = L = 0$, поэтому суммирование по проекциям моментов проводить не приходится. Волновая функция в этой модели (рис. 1б) запишется следующим образом:

$$\Psi_{i,f}^{JM_j} = \Psi_{7\text{Li}}(\vec{R}_{7\text{Li}}) \varphi_n(\vec{r}_1) \varphi_n(\vec{r}_2) \sum_{\lambda lLS} \Psi_{\lambda lLS}(\vec{r}, \vec{R}). \quad (9)$$

Дифференциальное сечение рассеяния, измеряемое в эксперименте, есть квадрат модуля матричного элемента

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2J+1} |M_{if}(\vec{q}_\perp)|^2. \quad (10)$$

Подставив в формулу (1) оператор Ω в виде ряда многократного рассеяния (7), запишем (10) в следующем виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2J+1} \left| \frac{ik}{2\pi} \sum_{M_j M'_j} \int d\rho_\perp dR_0 \exp(iq_\perp \rho_\perp) \delta(R_0) \times \right. \quad (11)$$

$$\left. \times \left\{ \langle \Psi_i^{JM_j} | \Omega_\alpha + \Omega_t + \Omega_{2n} | \Psi_f^{JM'_j} \rangle - \langle \Psi_i^{JM_j} | \Omega_\alpha \Omega_t + \Omega_\alpha \Omega_{2n} + \Omega_t \Omega_{2n} | \Psi_f^{JM'_j} \rangle + \Psi_i^{JM_j} | \Omega_\alpha \Omega_t \Omega_{2n} | \Psi_f^{JM'_j} \right\} \right|^2,$$

который наглядно показывает вклад разных кратностей рассеяния в операторе Ω в ДС.

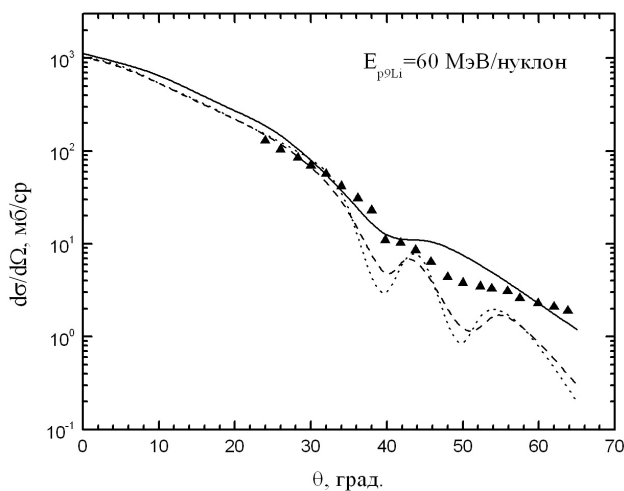
2. Обсуждение результатов

В рамках дифракционной теории Глаубера проведен расчет дифференциальных сечений (ДС) упругого рассеяния протонов на ядре ${}^9\text{Li}$ при $E = 60$ МэВ/нуклон (расчет из работы [6]) в зависимости от разных модельных ВФ. Результаты расчетов приведены на рисунках 2 и 3.

На рисунке 2 представлены расчеты сечений с разными модельными функциями ядра ${}^9\text{Li}$: пунктир и точечная кривые демонстрируют расчеты с α - t - $2n$ -, сплошная — с ${}^7\text{Li}$ - n - n - ВФ. Расчет с обоими вариантами α - t -потенциалов (пунктир — модель 1, точечная — модель 2) приводит примерно к одинаковому результату в описании ДС, небольшое отличие наблюдается лишь в области минимумов сечения. Более существенные различия замечены между расчетами с ВФ в разных моделях: сечение с α - t - $2n$ - ВФ при энергии $E = 60$ МэВ/нуклон имеет более выраженную дифракционную структуру, чем с ${}^7\text{Li}$ - n - n - ВФ. Сплошная кривая во всей области углов лежит ниже пунктирной и точечной, причем расхождение в абсолютной величине сечений увеличивается с увеличением угла рассеяния. Почему ДС с ${}^7\text{Li}$ - n - n - ВФ имеет более гладкую структуру, без выраженных минимумов и максимумов?

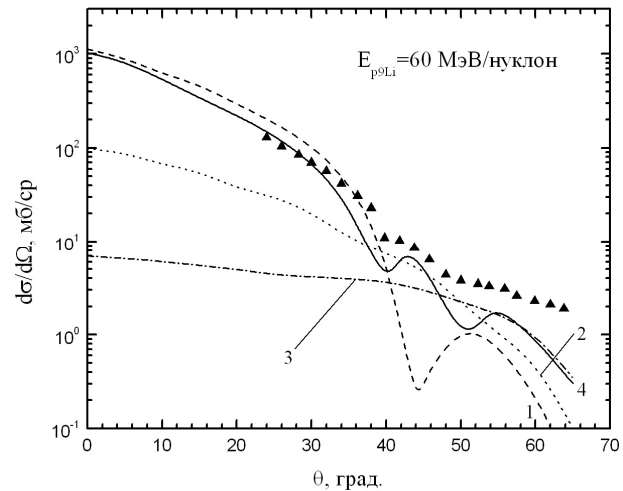
Это следствие различного описания внутренней структуры ядра, о чем свидетельствует и значение квадрупольного момента Q . Теоретическое значение квадрупольного момента, вычисленное с α - t - $2n$ ВФ ${}^9\text{Li}$, равно $Q_{\text{теор.}} = -17,4$ мб, с ${}^7\text{Li}$ - n - n ВФ — $Q_{\text{теор.}} = -40,0$ мб, тогда как измеренное — $Q_{\text{эксп.}} = -27,4$ мб. Это весьма важная характеристика, определяющая квадрупольную деформацию ядра. Для используемых в расчете модельных ВФ она почти на 40 % не совпадает с экспериментальной (как в меньшую, так и в большую сторону). Как было показано в работах многих авторов [7–13], заполнение дифракционных минимумов происходит как раз в сильно деформированных ядрах со спином $J > 1$ (например, в ${}^7\text{Li}$ [7–10], у которого $Q_{\text{эксп.}} = -40$ мб, в ${}^9\text{Be}$ [11–13], у которого $Q_{\text{эксп.}} = 53$ мб). Так что наличие в точечной и пунктирной кривых глубоких минимумов может быть связано с недоучетом квадрупольной деформации ядра.

При $E = 60$ МэВ/нуклон обе кривые качественно правильно передают ход сечения, однако они лежат выше экспериментальных точек приблизительно на 30 %, что совпадает с выводом работы [14], в которой говорится, что глауберовская модель, распространенная на низкие энергии, переоценивает экспериментальные данные на 40–50 %.



Пунктир — модель 1; точечная — модель 2 в α - t - $2n$ -модели; сплошная — в ${}^7\text{Li}$ - n - n -модели; $E = 60$ МэВ/нуклон. Экспериментальные данные из [15]

Рисунок 2. Дифференциальное сечение ${}^9\text{Li}$ -рассеяния с различными модельными ВФ ${}^9\text{Li}$



Кривые 1, 2, 3 и 4 — одно-, двух-, трехкратные соударения и их сумма. Расчет из работы [6]. Экспериментальные данные из [15]

Рисунок 3. Вклад в ДС разных кратностей рассеяния

Рассмотрим более детально вклад в сечение разных кратностей рассеяния в операторе Ω для ВФ в α - t - $2n$ -модели (вариант 1), изображенный на рисунке 3. Сечение однократного рассеяния получаем, когда в формуле (11) учитываем только первый член, описывающий рассеяние на α -частице, t и $2n$ (кривая 1). Сечение двукратного рассеяния — это вклад второго слагаемого в формуле (11) (кривая 2) и трехкратного — вклад третьего слагаемого в (11) (кривая 3). Суммарная кривая 4 (это та же кривая, что и пунктирная на рис. 1) учитывает все члены формулы (11). Из рисунков видно, что при малых углах рассеяния $\theta < 40^\circ$ основной вклад дает однократное рассеяние на кластерах α , t , $2n$. При больших углах она быстро спадает и в области $50^\circ > \theta > 40^\circ$ доминируют члены двукратного рассеяния, при углах же $\theta > 50^\circ$ вклад дает трехкратное рассеяние. В областях, где кривые пересекаются, наблюдаются минимумы в суммарном сечении, обусловленные интерференцией разных кратностей рассеяния. Ряд (7) знакопеременный, поэтому перекрестные члены одно-двух- и двух-трехкратного соударений входят в суммарное сечение со знаком минус. В областях минимумов $\theta \approx 40$ и 50° наблюдается еще одна особенность: первый минимум на рисунке мог быть глубже, если бы не было учтено трехкратное рассеяние, второй же минимум не столь глубок из-за однократного рассеяния, которое частично его заполняет.

Заключение

Существенной частью представленного расчета является то, что мы использовали реалистические ВФ, полученные в рамках современных ядерных моделей. То, что глауберовская теория обхо-

дится без свободно варьируемых параметров, дает возможность тестировать модельные ВФ и делать выводы о структурных особенностях ядер и межкластерных потенциалах, в которых они рассчитаны. Так, ВФ в α - t - $2n$ -модели хуже (чем в ${}^7\text{Li}$ - n -модели) описывают ДС при всех энергиях, что может быть следствием как неадекватного кластерного разбиения, так и плохой подгонки двух кластерных потенциалов взаимодействия (так как в литературе нет $V_{\alpha-2n}$, V_{t-2n} -потенциалов, они были сконструированы на основе $V_{\alpha-n}$, V_{t-n} -потенциалов с четно-нечетным расщеплением фазовых сдвигов). То, что ВФ в ${}^7\text{Li}$ - n -модели лучше описывает экспериментальные данные при всех энергиях, подтверждает доминирующую двухкомпонентную структуру ${}^9\text{Li}$ в виде кора ${}^7\text{Li}$ и «шубы» из двух нейтронов.

Факторизованная на подсистемы запись оператора многократного рассеяния позволила проследить за вкладом отдельных членов в сечение, их интерференцией, установив тем самым «микроскопическую» динамику процесса рассеяния. Наблюдаемая картина позволяет сделать вывод о том, что для описания сечения в широком угловом диапазоне необходимо учитывать все кратности рассеяния в операторе Ω .

Список литературы

- 1 Dobrovolsky A.V. et al. // Nucl. Phys. — 2006. — A766. — P. 1.
- 2 Moon C.B. et al. // Phys. Let. — 1992. — B297. — P. 39.
- 3 Жусупов М.А., Сагиндыков Ш.Ш., Сахиев С.К. // Ядерная и радиационная физика: Матер. конф. — Алматы, 2005. — С. 247.
- 4 Dakhno L.J., Nikolaev N.N. // Nucl. Phys. — 1985. — A436. — P. 653.
- 5 Дубовиченко С.Б., Жусупов М.А. // Изв. АН КазССР. Сер. физ.-мат. — 1987. — № 4. — С. 64.
- 6 Жусупов М.А., Зайкин А.Ю., Ибраева Е.Т., Сагиндыков Ш.Ш. // Изв. РАН. Сер. физ. — 2007. — Т. 6. — С. 804–810.
- 7 Li Qing-run, Zhou Jin-li // J. Phys. — 1991. — G43. — P. 1664.
- 8 Лукьянов В.К. // ЯФ. — 2006. — Т. 69. — С. 1063.
- 9 Glower C.W., Foster C.C., Schwandt P. et al. // Phys. Rev. — 1991. — C43. — P. 1664.
- 10 Naoko Nose, Kenji Kume, Shinichiro Yamaguchi // Phys. Rev. — 1994. — C50. — P. 321.
- 11 Алхазов Г.Д. и др. // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 29. — С. 88.
- 12 Roy G. et al. // Nucl. Phys. — 1985. — A442. — P. 686.
- 13 Kelly J.J. // Phys. Rev. — 1988. — C38. — P. 1490.
- 14 Gupta D., Samanta C., Kanungo R. // Nucl. Phys. — 2000. — A674. — P. 77.
- 15 Carr J.A. // Phys. Rev. — 1997. — C56. — P. 324.

Б.А.Прмантаева

Протондардың глаубердің теориясы аймағында ${}^9\text{Li}$ ядросынан шашыратылуы

Мақалада атқыш протонның ${}^9\text{Li}$ ядросында серпімді шашыратылуы Глаубердің көп еселі шашырау теориясы аумағында дифференциалдық көлденең қимасы энергиясы $E = 60$ МэВ/нуклон есептелінген. Дифференциалдық қиманы есептеуі α - t - $2n$ және ${}^7\text{Li}$ - n - n үш бөлшекті модельдерде ${}^9\text{Li}$ ядросының толқындық функциясының екі түрімен жүргізілген. Есептелген дифференциалдық көлденең қима тәжірибе нәтижелерімен салыстырғанда ${}^9\text{Li}$ ядросының толқындық функциясы α - t - $2n$ моделіне қарағанда ${}^7\text{Li}$ - n - n моделінде күшті сипатталғаны жөнінде қорытындылар жасауға мүмкіндік берді.

B.A.Prmantaeva

Elastic scattering of protons by ${}^9\text{Li}$ under Glauber theory

The connection of differential cross section with the intercluster potentials has been made. With the function in three-body α - t - $2n$ and ${}^7\text{Li}$ - n - n ${}^9\text{Li}$ models the principal characteristics of elastic scattering of protons obtained (in inverse kinematics). Within the diffraction theory of Glauber the differential cross sections for elastic scattering of protons at ${}^9\text{Li}$ -nucleus at $E = 60$ MeV/nucleon have been calculated. A comparison of the computed characteristics with the experimental data allowed draw a conclusion about appropriateness wave functions and adequacy potentials which they was calculated.

Ж.К.Смагулов

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

Бимолекулярные процессы взаимодействия триплетных молекул на поверхности кремнезема

Исследованы триплет-триплетный перенос энергии и триплет-триплетная аннигиляция на поверхности кремнезема. В качестве адсорбатов использовались антрацен, 1,2-бензантрацен, эозин. Отмечено, что сорбция осуществлялась на поверхности силохрома С-80 и химически модифицированного кремнезема. Показано, что триплет-триплетная аннигиляция осуществляется внутри островковых кластеров на поверхности. Перенос энергии возбуждения также происходит при островковом заполнении поверхности силохрома.

Ключевые слова: триплет-триплетный перенос, энергия, эозин, адсорбаты, кремнезем, поверхность, силохром, кластеры, аннигиляция.

Изучение процессов переноса энергии и электрона на поверхности твердого тела представляет научный и практический интерес. Это связано с тем, что современные технологии создания функциональных элементов молекулярной электроники, физических и химических сенсоров, молекулярный катализ и т.д. основаны природой и закономерностями обмена энергией и электроном между адсорбированными частицами и поверхностью твердого тела.

Изучению триплет-триплетного (Т-Т) переноса энергии от адсорбатов бензофенона к нафталину на разнопористых кремнеземах посвящена работа [1]. Показано, что, наряду со статистическим переносом энергии, может протекать перенос энергии по диффузионному механизму. Методом импульсного фотолиза исследовался Т-Т перенос энергии от 9-антраценкарбоксида к оксазиновому красителю на поверхности TiO_2 в [2].

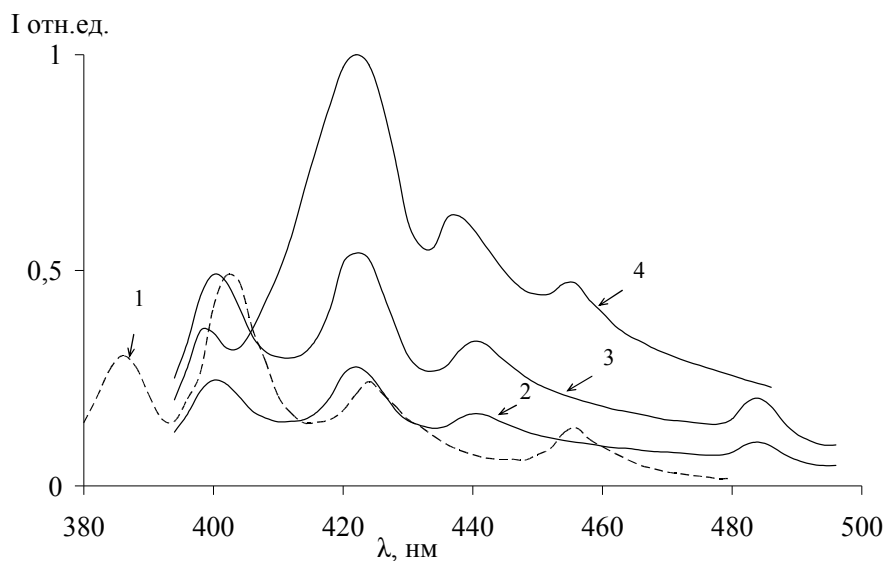
Реакции возбужденных триплетных молекул в жидких растворах осуществляются в контактных комплексах столкновения [3]. На поверхности твердого тела такие комплексы могут образовываться в статистических кластерах или в результате диффузии возбужденных молекул. Изучение свойств фосфоресценции и аннигиляционной замедленной флуоресценции (АЗФ) может дать ответ о механизме переноса энергии на поверхности. В настоящей работе представлены результаты исследования межмолекулярного переноса энергии по триплетным уровням молекул, сорбированных пористой поверхностью.

Гомогенная триплет-триплетная аннигиляция (ТТА) изучалась на примере молекул антрацена и 1,2-бензантрацена. В качестве сорбента использовался силохром С-80 (удельная поверхность $S = 80 \text{ м}^2/\text{г}$, диаметр пор $\sim 40\text{--}50 \text{ нм}$). Люминофоры на поверхность сорбента наносились из гексановых растворов. Статические концентрации составляли $C = 10^{-3}\text{--}10^{-4} \text{ моль}/\text{нм}^2$. Перед измерениями осуществлялась дегазация кюветы с образцом до остаточного давления $10^{-4} \text{ мм рт. ст.}$ в течение 2 ч. Фотовозбуждение осуществлялось второй гармоникой рубинового лазера ОГМ-20.

Адсорбция ароматических углеводородов на поверхности негидратированного силохрома С-80 приводит к деформации и длинноволновому сдвигу спектров флуоресценции по сравнению со спиртовыми растворами. На рисунке 1 приведены спектры быстрой флуоресценции антрацена в гексане (кривая 1) и на поверхности силохрома (кривые 2–4). Из рисунка видно, что у адсорбатов спектр флуоресценции смещен на 20 нм в длинноволновую сторону. Смещение спектров, видимо, обусловлено неспецифической адсорбцией молекул антрацена на ОН-группах поверхности кремнезема [4]. Повышение концентрации адсорбата на поверхности кремнезема также приводит к дополнительному искажению спектров флуоресценции. Аналогичные картина наблюдается и у образцов с 1,2-бензантраценом.

После импульсного лазерного возбуждения адсорбатов антрацена и 1,2-бензантрацена наблюдалась АЗФ в результате процесса ТТА, так как данные молекулы имеют большую величину энергии $S_1\text{--}T_1$ -расщепления и интеркомбинационные переходы из триплетного в нижнее возбужденное синглетное состояние не реализуются. Интенсивность, спектральный состав и кинетика затухания АЗФ зависели от концентрации адсорбатов на поверхности. При малых концентрациях ($C = 2,10^{-3} \text{ моль}/\text{нм}^2$) затухание было экспоненциальным у обоих люминофоров, а выше этой концентрации наблюдалась биэкспоненциальность с константами: $k_{\text{АЗФ}} = 1,5 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ и $k_{\text{АЗФ}} = 0,6 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ для

1,2-бензантрацена. В спектре длительной люминесценции 1,2-бензантрацена наблюдалось свечение эксимеров с $\lambda_{\max} = 520$ нм.



Концентрация: 2 — 10^{-3} моль/нм²; 3 — 10^{-2} моль/нм²; 4 — $2 \cdot 10^{-1}$ моль/нм²

Рисунок 1. Спектры флуоресценции антрацена в гексане (1) ($C = 2 \cdot 10^{-5}$ моль/л) и на поверхности силохрома (2–4)

Результаты температурных исследований представлены на рисунке 2, из которого видно, что при концентрации 1,2-бензантрацена $C = 2 \cdot 10^{-3}$ моль/нм² на поверхности (кривая 2) интенсивность свечения не зависит от температуры в интервале 100–270 К и лишь незначительно увеличивается вблизи комнатной температуры.

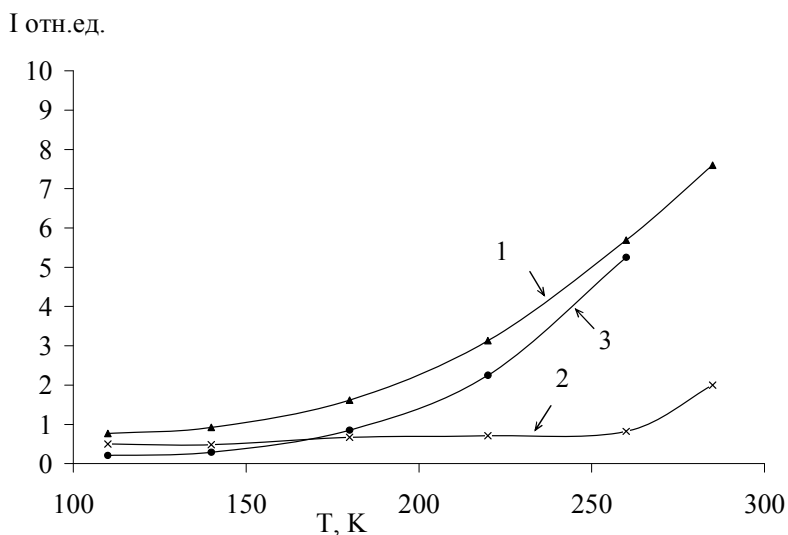


Рисунок 2. Зависимость интенсивности АЗФ адсорбатов 1,2-бензантрацена (1 — $4 \cdot 10^{-1}$; 2 — $2 \cdot 10^{-3}$ моль/нм²) и антрацена (3 — $4 \cdot 10^{-1}$ моль/нм²) на С-80 от температуры

При больших концентрациях, $C = 4 \cdot 10^{-1}$ моль/нм², с понижением температуры происходит монотонное уменьшение интенсивности свечения (кривые 1, 3).

Одновременно с уменьшением интенсивности АЗФ при понижении температуры происходило вымораживание быстрой составляющей затухания АЗФ. При этом величина константы скорости затухания АЗФ обоих люминофоров стремилась к значению $k_{\text{АЗФ}} = 0,6 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$, характерному для малых концентраций молекул на поверхности сорбента.

Полученные данные по ТТА ароматических молекул на поверхности сорбента при еще домонослойных концентрациях позволяют сделать вывод об островковой (кластерной) сорбции люминофоров под влиянием универсальных межмолекулярных взаимодействий на ОН-группах поверхности оксида кремния. При этом Т-Т взаимодействие в этих условиях осуществляется в контактных комплексах, которые образуются в результате миграции внутри кластера. Поскольку интенсивность АЗФ практически не зависит от температуры, то следует предположить, что кластер имеет кристаллическую природу и АЗФ обусловлена миграцией некогерентных экситонов.

При больших концентрациях, когда есть условия для образования сплошного монослоя из молекул люминофоров, формирование триплетных комплексов происходит по диффузионному механизму. Действительно, из наклона кривых 1 и 3 (рис. 2) АЗФ в координатах $\ln(I_{0\text{АЗФ}}/I_{\text{АЗФ}})$ от I/T были определены активационные барьеры температурного тушения АЗФ, равные $\Delta E_A = 7,3$ кДж·моль⁻¹ и $\Delta E_A = 9,3$ кДж·моль⁻¹ для 1,2-бензантрацена и антрацена соответственно. Полученные значения энергии активации свойственны процессам диффузионного перемещения физически сорбированных молекул [5].

Таким образом, на поверхности кремнезема можно наблюдать ТТА ароматических углеводородов, адсорбированных из раствора под влиянием универсальных межмолекулярных взаимодействий, когда молекулы люминофора диффундируют внутри островкового кластера на поверхности.

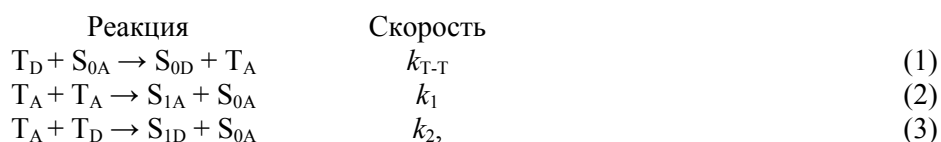
Рассмотрим процессы обмена триплетной энергией между разнородными частицами на поверхности сорбента. В качестве донора энергии использовали триплетные молекулы эозина, а акцептором выступали молекулы антрацена в основном электронном состоянии.

Эозин адсорбировали из водных растворов. Поверхностную концентрацию красителя определяли, измеряя оптическую плотность растворов красителя до и после сорбции. Антрацен наносили на воздушно-осушенный адсорбент, содержащий эозин, из гексановых растворов с последующим удалением растворителя под вакуумом 10–15 торр при температуре 35–40 °С. Фотовозбуждение предварительно вакуумированных образцов осуществляли лазерным импульсом на удвоенной частоте неодимового лазера ($\lambda = 532$ нм, $\tau = 20$ нс) в полосе поглощения красителя.

При возбуждении адсорбированного эозина наблюдается его замедленная флуоресценция ($\lambda_{\text{max}} = 560$ нм) и фосфоресценция ($\lambda_{\text{max}} = 680$ нм). Константы скоростей этих процессов при концентрации красителя до $C = 7,4 \cdot 10^{-3}$ моль/нм² совпадали, что свидетельствовало об испускании молекулами адсорбата замедленной флуоресценции типа *E*.

После нанесения на кремнезем с адсорбированным на нем эозином ($C = 7,4 \cdot 10^{-3}$ моль/нм²) антрацена до его концентрации $1,75 \cdot 10^{-3}$ моль/нм² наблюдается значительное монотонное уменьшение интенсивности замедленной флуоресценции и фосфоресценции красителя (рис. 3, кривые 1, 2). Дальнейшее увеличение концентрации антрацена приводит к росту интенсивности замедленной флуоресценции эозина и падению интенсивности фосфоресценции. Минимум выхода фосфоресценции наблюдается при концентрации антрацена на поверхности ($C = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/нм²). Одновременно с этим наблюдалась АЗФ антрацена, интенсивность которой увеличивалась с ростом концентрации люминофора. Следует отметить, что быстрая флуоресценция эозина практически не изменялась с увеличением концентрации антрацена, что свидетельствовало о развитии Т-Т переноса энергии между возбужденными триплетными состояниями красителя и основным состоянием молекул антрацена.

Полученные результаты могут быть объяснены в рамках спин-селективных фото процессов, протекающих между красителями и ароматическими углеводородами в жидких растворах [6].



где индексы *A* и *D* относятся к акцептору (антрацену) и донору (эозину) триплетной энергии соответственно, а *k* — константы соответствующих процессов.

Увеличение интенсивности свечения антрацена (рис. 3 кривая 3) обусловлено реакцией (2), а рост интенсивности свечения акцептора (кривая 1) — гетероаннигиляционным процессом (3). Кинетические процессы (1) и (2) представляют собой последовательные реакции первого и второго порядков. Поэтому осциллограммы замедленной флуоресценции имели характерные стадии нарастания свечения и последующего затухания. Время нарастания АЗФ акцептора зависело от концентрации

антрацена и уменьшалось от 60 ($C = 1,7 \cdot 10^{-3}$ моль/нм²) до 5 мкс ($C = 2,9 \cdot 10^{-3}$ моль/нм²). Время нарастания замедленной флуоресценции эозина в результате процесса гетероаннигиляции было меньше 1 мкс. Увеличение интенсивности фосфоресценции донора при концентрации антрацена большей, чем $C = 1,8 \cdot 10^{-2}$ моль/нм², может быть объяснено возрастанием обратного переноса энергии с триплетных молекул антрацена на эозин, так как разность триплетных уровней взаимодействующих молекул лежит в пределах kT .

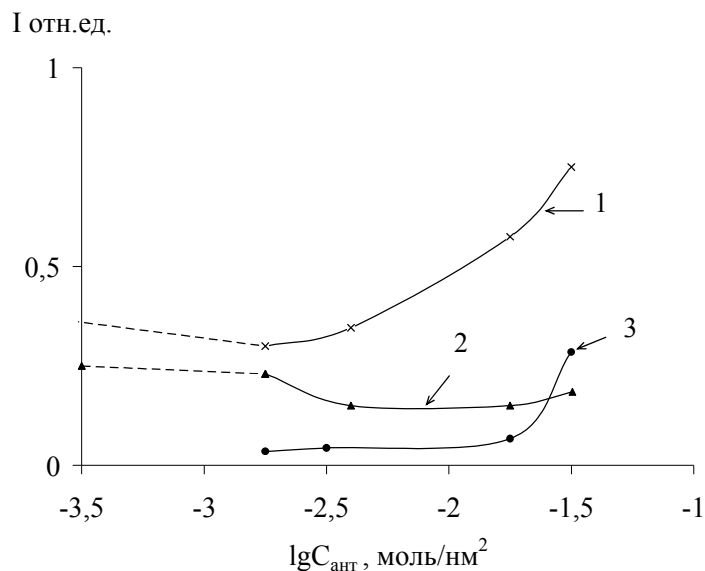


Рисунок 3. Зависимость интенсивности замедленной флуоресценции (1); фосфоресценции (2) эозина ($C = 7,4 \cdot 10^{-3}$ моль/нм²) и АЗФ антрацена (3) от концентрации антрацена на поверхности силохрома С-80

В пределах изученных концентраций эозина и антрацена на поверхности затухание фосфоресценции молекул эозина для медленной компоненты было экспоненциальным, и уменьшение времени жизни триплетных состояний красителя в присутствии антрацена позволило вычислить константу скорости Штерна-Фольмера ($k_{Ш-Ф}$) (рис. 4) тушения триплетных состояний эозина молекулами антрацена в основном состоянии

$$\tau_{0D}/\tau - 1 = k_{Ш-Ф} C_A,$$

где τ_{0D} и τ — время жизни триплетных состояний эозина в присутствии антрацена с его концентрацией $C = 7,4 \cdot 10^{-3}$ моль/нм² и k — бимолекулярная константа тушения, т.е. константа скорости Т-Т переноса энергии. Значение $k_{Т-Т}$ оказалось равным $9 \cdot 10^8$ моль⁻¹нм²с⁻¹. Полученное значение $k_{Т-Т}$ более чем на два порядка меньше константы тушения пирена бромнафталином, адсорбированных на сухом кремнеземе [7].

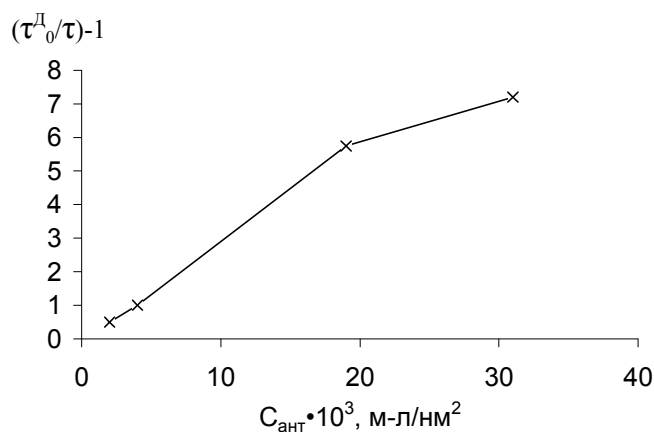


Рисунок 4. Вычисление константы Штерна-Фольмера тушения триплетных состояний адсорбатов молекул эозина молекулами антрацена

Полученные данные позволяют сделать некоторые предположения об адсорбции и динамике фотопроцессов исследованных соединений на поверхности кремнезема для поверхностных концентраций эозина и антрацена, равных соответственно $C = 7,4 \cdot 10^{-3}$ моль/нм² и $C = 2,9 \cdot 10^{-3}$ моль/нм². В предположении о статическом распределении молекул среднее расстояние между ними равно примерно 80 Å. При таких расстояниях перенос энергии по обменному механизму и ТТА возможны лишь при наличии латеральной диффузии, о существовании которой можно говорить в большей мере для молекул антрацена, для которых специфические взаимодействия с силанольными группами кремнезема проявляются в значительно меньшей степени, чем у содержащих электронодонорные атомы молекул эозина. Диффузия и фотопроцессы с участием изученных соединений могут развиваться в приповерхностном слое молекул воды, существование которого даже в условиях «горячей» пробоподготовки было обнаружено в экспериментах. Следует отметить, что изменение степени гидратации поверхности кремнезема приводило к изменению констант тушения пирена бромнафталином более чем в три раза [7].

Таким образом, наиболее вероятным является предположение об островковом заполнении поверхности кремнезема адсорбированными молекулами эозина и антрацена. Подтверждением этому служит сокращение стадии нарастания свечения гетероаннигиляционной замедленной флуоресценции эозина, когда миграция возбуждения или диффузия молекул происходят в ограниченном пространстве кластера.

Химическое модифицирование поверхности твердого тела позволяет в широких пределах изменять свойства поверхности. Рассмотрим результаты исследований АЗФ антрацена и 1,2-бензантрацена, сорбированных на поверхности химически модифицированного кремнезема. В качестве сорбента использовался химически модифицированный углеводородными радикалами C₁₆H₃₃ силохром С-80.

Измерения спектров быстрой флуоресценции антрацена и 1,2-бензантрацена на поверхности иммобилизованного силохрома С-80 (ИМС-80) показали, что у адсорбатов спектры на ИМС-80, в отличие от их спектров на С-80, не искажаются и совпадают с их спектрами в растворах. Поэтому можно говорить, что адсорбция молекул осуществляется не на силанольных группах. Число привитых Н-алкильных групп на единицу площади равно 2,3 [8], что составляет 50 % от всех имеющихся силанольных групп на поверхности кремнезема (~4,6 групп/нм²) [9]. Следовательно оставшиеся ОН-группы экранируются углеводородными цепями и молекулы люминофоров не имеют возможности сорбироваться на них. Тогда и большую адсорбционную емкость ХМК, в отличие от не иммобилизованного кремнезема, можно объяснить тем, что на ХМК сорбция происходит на длинных Н-алкильных группах.

Исследование спектров замедленной флуоресценции показало, что спектр эксимерного свечения отсутствует. Следовательно молекулы люминофоров даже при больших концентрациях ($C \sim 10^{-1}$ моль/нм²) не образуют полислои. Они могут быть распределены равномерно по объему привитой фазы, а из-за слабости межмолекулярного взаимодействия адсорбат-адсорбент могут перемещаться по поверхности. В пределах поверхностных концентраций $2 \cdot 10^{-3}$ – $4 \cdot 10^{-1}$ моль/нм² кинетика затухания была экспоненциальной, что свидетельствует об однородном распределении частиц на поверхности.

Температурная зависимость интенсивности АЗФ 1,2-бензантрацена показала, что с понижением температуры сорбента до 250 К наблюдается уменьшение интенсивности АЗФ. Из графика зависимости интенсивности свечения от температуры в предположении аррениусовской была определена энергия активации процесса ТТА, которая оказалась равной 12,1 кДж/моль, что соответствует физической сорбции.

Полученные результаты можно объяснить следующим образом. Молекулы ароматических углеводородов адсорбируются на Н-алкильных группах за счет неспецифических универсальных ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Длинные углеводородные группы занимают определенный приповерхностный объем, который можно рассматривать как псевдожидкостную фазу, где находятся молекулы адсорбата. Перемещения, а следовательно, встреча и последующая ТТА происходят из-за конформационной подвижности Н-алкильных групп. Температурный ход интенсивности АЗФ молекул 1,2-бензантрацена на поверхности ХМК можно объяснить тем, что с понижением температуры уменьшается конформационная подвижность углеводородных цепей. Это приводит к снижению скорости диффузии триплетных молекул, что проявляется в уменьшении интенсивности АЗФ.

Для доказательства диффузии молекул люминофоров в псевдожидкостном слое и оценки константы скорости диффузии был исследован Т-Т перенос энергии от эритрозина к антрацену на поверхности ХМК. Концентрация эритрозина составляла $C = 6 \cdot 10^{-3}$ моль/нм², а концентрация антрацена

изменялась в пределах от $C = 2 \cdot 10^{-3}$ до 10^{-1} моль/нм². Были получены качественно аналогичные результаты как и в случае Т-Т переноса энергии на поверхности немодифицированного силохрома С-80. Из кинетики тушения фосфоресценции эритрозина антраценом была вычислена константа скорости тушения триплетных состояний донора $k_{T-T} = 5,4 \cdot 10^9$ моль⁻¹нм²с⁻¹.

Из анализа полученных результатов можно сделать следующие выводы. Химическое модифицирование поверхности кремнезема Н-алкильными группами увеличивает адсорбционную емкость сорбента. Углеродородные группы равномерно покрывают поверхность кремнезема. Ароматические углеводороды физически сорбируются на поверхности ХМК и могут перемещаться в псевдожидкостном слое.

Список литературы

- 1 *Turro N.J., Zimmt M.B., Gould L.R.* Triplet Energy Transfer as a Probe of Surface Diffusion rates: A Time-Resolved Diffuse reflectance Transient Absorption Spectroscopy Study // *J. Amer. Chem. Soc.* — 1985. — Vol. 107. — № 20. — P. 5826–5827.
- 2 *Kamat P.V., Ford W.E.* Photochemistry on Surface: Triplet-Triplet Energy Transfer on Colloidal TiO Particles // *Chem. Phys. Lett.* — 1987. — Vol. 135. — № 4–5. — P. 421–426.
- 3 *Паркер С.* Фотолуминесценция растворов. — М.: Мир, 1972. — 510 с.
- 4 *Киселев А.В.* Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии. — М.: Высш. шк., 1986. — 359 с.
- 5 *Эткинс Э.* Физическая химия. — М.: Мир, 1980. — Т. 2. — С. 502.
- 6 *Ибраев Н.Х.* Люминесценция и динамика электронных возбуждений в молекулярных конденсированных средах. — Алматы, 1998. — 32 с.
- 7 *De Mayo P., Nataryan L.V., Ware W.K.* Surface Photochemistry. The Effect of Surface Modification on the Singlet Quenching of Pyrene Adsorbed on Silica Gel by L-bromonaphthalene // *Chem. Phys. Lett.* — 1984. — Vol. 107. — № 2. — P. 187–192.
- 8 *Лисичкин Г.В., Кудрявцев Г.В., Сердан А.А. и др.* Модифицированные кремнеземы в сорбции и катализе. — М.: Химия, 1986. — 237 с.
- 9 *Айлер Р.К.* Химия кремнезема: растворимость, полимеризация, коллоидные и поверхностные свойства, биохимия. — М.: Мир, 1982. — Т. 1–2. — 118 с.

Ж.К.Смағұлов

Кремнезем бетінде орналасқан триплет күйлеріндегі молекулалардың өзара әрекеттесуі

Кремнезем бетіндегі триплет-триплеттік энергия тасымалдауы және триплет-триплеттік аннигиляция процестері зерттелді. Адсорбат ретінде антрацен, 1,2-бензантрацен, эозин, силохром С-80 және химикалық өзгертілген кремнезем қолданылды. Кластер ішіндегі қозу миграция процесі бөлшектердің әсерлесу процесімен анықталынатыны көрсетілді. Триплет-триплеттік энергия тасымалдауда силохром бетінде аралдық толтыру кезінде байқалды.

Zh.K.Smagulov

Biomolecular processes the interaction of triplet molecules on the surface of silica

The processes of triplet-triplet annihilation and triplet-triplet energy transfer on the surface of silica are investigated. As adsorbates were used antrotsen, 1,2-benzoantrotsen, eosin. The sorption was realized on surfaces silochromes C-80 and chemical modification of cremneseum. It is shown that the interaction of particles occurs due to migration of excitations within the cluster. The carrying of energy of the excitement also occurs when surface of silochrome was filling by isle form method.

В.М.Юров, С.А.Гученко, Н.Х.Ибраев

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

Сухое трение и поверхностная энергия твердых тел

В работе рассмотрены особенности измерения коэффициентов трения в вакууме. Получены формулы для температурной зависимости поверхностного натяжения и для коэффициентов трения. Проведен анализ связи поверхностной энергии с коэффициентами сухого трения. Теоретически вычислены коэффициенты трения в паре металл-металл. Даны рекомендации по выбору материалов для пар трения.

Ключевые слова: трение, поверхностная энергия, коэффициенты трения, поверхностное натяжение, пары металл-металл.

Введение

Сила трения — это совокупный эффект, возникающий в результате самых различных физических явлений: упругости, адгезии, вязкости, капиллярных сил, химических особенностей, фононного и электростатического взаимодействий и др. В зависимости от условий может преобладать то или другое явление.

В случае сухого трения считается, что при скольжении трущихся поверхностей микронеровности задевают друг за друга. При преодолении препятствий возникают атомарные вибрации, которые в виде фононов рассеиваются, унося энергию. Кроме того, при разрыве адгезионных связей, возникающих между выступами соприкасающихся поверхностей, в металлических образцах образуются пары электрон–дырка, на возникновение которых также затрачивается энергия (этот эффект значительно слабее, чем фононное рассеяние). В случае мягких образцов возможно и разрушение микронеровностей, в этом случае механическая энергия расходуется на разрушение атомарных связей.

Основное уравнение макротрибологии — известный еще в школе закон Амонтона–Кулона. Считается, что макроскопическая площадь соприкосновения тел состоит из элементарных контактов, имеющих гораздо меньшую суммарную площадь.

Сухое трение в элементарном контакте описывается моделью Боудена–Тейбора [1]. Она использует герцевское представление об упругой деформации в месте контакта, а в качестве параметра трения служит напряжение сдвига.

Интенсивное развитие приборостроения в космонавтике, ракетной технике и в ряде других областей выдвигает задачу обеспечения надёжной работы подвижных узлов исполнительных механизмов приборов в экстремальных условиях (вакуум, высокая температура, интенсивное излучение, высокие контактные нагрузки и т.д.).

Проблема повышения надёжности исполнительных механизмов приборов в таких условиях тесно связана с вопросами триботехники, с исследованиями контактного взаимодействия взаимно перемещающихся твёрдых тел, в результате которого в зоне контакта возникают силы трения. Современная трибология располагает рядом фундаментальных теоретических и экспериментальных закономерностей, которые, безусловно, могут позволить в ближайшие годы успешно решать задачи в области сухого трения.

На сегодняшний день особое внимание уделяется таким разделам и направлениям трибологии и триботехники, как:

- разработка научных основ и практических рекомендаций, необходимых для создания износостойких антифрикционных материалов, новых технологий упрочнения и нанесения покрытий;
- создание и оптимальное использование универсальных и целевых установок машин трения при исследованиях по трибологии и в практических задачах триботехники для оценки и выбора оптимальных материалов в конкретных служебных условиях.

В связи с указанными выше направлениями на передний план выдвигаются следующие проблемы:

- повышение работоспособности материалов и узлов трения в широком диапазоне температур;
- обеспечение минимального сопротивления движению деталей подшипников скольжения;
- обеспечение экономически целесообразной долговечности узлов трения или, по возможности, равной износостойкости по сравнению с другими частями приборов при работе в различных средах;

– обеспечение минимальной разницы коэффициентов трения покоя и движения, уменьшение их величины до минимума в конкретных парах трения.

Особенности работы узлов трения в условиях космического вакуума

Использование обычных смазок в узлах трения, работающих в условиях космического вакуума, неприемлемо. Вследствие высокой упругости паров большинство жидкостей и смазок в вакууме испаряется и теряет свои смазывающие свойства. Действие температуры еще более усугубляет этот процесс.

Работу узлов трения без смазки в вакууме следует рассматривать как взаимодействие поверхностей при сухом трении. В этом случае в отличие от узлов жидкостного трения контактирующие поверхности не разделены искусственно созданной масляной пленкой, частично или полностью устраняющей контакт между ними. Однако нельзя считать, что несмазанные маслом поверхности вступают в непосредственный контакт друг с другом.

В реальных условиях поверхность узлов трения может быть покрыта окисной пленкой, которая возникает при их изготовлении, примесью чужеродных металлов, структурными дефектами и т.д. В космосе начинает играть роль модификация поверхности за счет облучения частицами высокой энергии.

Боуден с сотрудниками измерили коэффициенты трения для чистых металлов [1]. С их поверхности атомы воздуха и окисные пленки были удалены нагреванием в вакууме. Полученные коэффициенты трения колебались от 1 до 5, а для некоторых пар достигали 10 и выше, тогда как в обычных условиях они составляли менее 1. Это указывает на то, что для уменьшения коэффициента трения в вакууме необходимо модифицировать поверхность узлов трения и, в частности, использовать специальные покрытия, полученные также в условиях вакуума [2].

Процесс модификации поверхности должен заканчиваться образованием на поверхностях трения тонких слоев вторичных структур, предохраняющих материал от схватывания и задиоров, а также равновесной шероховатости, необходимой для обеспечения стабильного значения коэффициента трения [3].

В этой области наукой еще не вполне раскрыты механизмы самоорганизации в зоне контакта и пути воздействия на способность пар трения к самоорганизации, когда система сама формирует оптимальную микрогеометрию поверхностей, защитные пленки, перестраивает структуру поверхностных слоев металла, меняет твердость в целях сохранения нормального функционирования.

Особенности измерения коэффициента трения в вакууме

В настоящее время используются многочисленные методы испытания на трение и износ. Большое число методов и установок, среди которых лишь немногие унифицированы, приводит к неоправданым затратам труда и средств из-за несопоставимости получаемых результатов.

Отсутствие унифицированных методов испытаний объясняется сложностью процессов, происходящих при трении и износе материалов, наличием большого числа факторов, влияющих на эти процессы, а самое главное — разноречивостью взглядов и теоретических позиций, с которых рассматриваются процессы трения и износа.

Особенно трудоемки испытания в высоком вакууме, требующие сравнительно дорогого оборудования, высокой квалификации экспериментатора, больших затрат времени. Многочисленные факторы, влияющие на трение и износ, необходимость изучения их действия в совокупности и взаимовлиянии приводят к необходимости проведения большого числа опытов [4].

В таблице 1 мы приводим значения коэффициентов сухого трения в парах трения, взятые из различных литературных источников, и результаты теоретических расчетов, проведенных нами в работе [5].

Т а б л и ц а 1

Коэффициенты сухого трения для пар наиболее распространенных материалов

Комбинации материалов		Коэффициент сухого трения	Теоретический коэффициент трения [5]
1	2	3	4
Алюминий	Алюминий	1,05–1,35	0,3 (1,2)
Алюминий	Низкоуглеродистая сталь	0,61	–
Латунь	Сталь	0,35	–
Кадмий	Кадмий	0,5	–

1	2	3	4
Кадмий	Хром	0,41	
Хром	Хром	0,41	
Медь	Медь	1,0	0,5 (1,3)
Медь	Низкоуглеродистая сталь	0,53	–
Графит	Графит (в вакууме)	0,5–0,8	–
Графит	Графит	0,1	–
Железо	Железо	1,0	0,6 (1,4)
Магний	Магний	0,6	–
Никель	Никель	0,7–1,1	0,8 (1,2)
Никель	Низкоуглеродистая сталь	0,64	–
Платина	Платина	1,2	0,6 (1,4)
Серебро	Серебро	1,4	0,4 (1,2)
Сталь	Сталь	0,8	–
Карбид вольфрама	Карбид вольфрама	0,2–0,25	–
Карбид вольфрама	Медь	0,35	–
Цинк	Цинк	0,6	–
Свинец	Свинец	–	0,1 (0,4)
Олово	Олово	–	0,2 (0,7)

Из таблицы 1 видно различие между экспериментальными и теоретическими значениями коэффициентов сухого трения. Ниже мы обсудим причины указанных различий.

Температурная зависимость поверхностного натяжения твердых тел

Поверхностное натяжение — основная термодинамическая характеристика слоя жидкости или твердого тела на границе раздела фаз. Поверхностное натяжение зависит от температуры. Для многих неассоциированных жидкостей (вода, расплавы солей, жидкие металлы) вдали от критической температуры хорошо выполняется линейная зависимость

$$\sigma = \sigma_0 - \alpha(T - T_0),$$

где σ и σ_0 — поверхностное натяжение при температурах T и T_0 соответственно; $\alpha \approx 0,1$ мН/(м·К) — температурный коэффициент поверхностного натяжения.

Экспериментальное определение поверхностного натяжения твердых тел затруднено тем, что их молекулы (атомы) лишены возможности свободно перемещаться. Исключение составляет пластическое течение металлов при температурах, близких к точке плавления [6].

Недавно нами предложено 3 метода экспериментального определения поверхностного натяжения твердых тел — диэлектриков и магнитных материалов [7–9]. В [5] нами предложен метод экспериментального определения поверхностного осаждаемых покрытий. В [10–12] нами обсуждались некоторые вопросы, затронутые в настоящей работе.

В этой работе мы проводим анализ температурной зависимости поверхностного натяжения твердых тел на основе развитого нами подхода (см., напр., [13, 14]).

Рассмотрим сначала гомогенную поверхность, которая содержит \bar{N} поверхностных атомов (молекул) и характеризуется термодинамическим потенциалом Гиббса G° . Возникновение, например, поверхностного тока плотностью j является откликом системы поверхностных электронов на внешнее электрическое поле E и имеет вид [13]

$$\Phi = \frac{1}{1 + C_1 \exp\left\{-\frac{E_m - G^\circ/\bar{N}}{kT}\right\}}, \quad (1)$$

где Φ — функция отклика поверхностных состояний; $C_1 = 2\Delta S k \tau_p / \tau = const$ (смысл входящих в это выражение величин такой же, как и в [13]); $E_m = eE$, e — заряд электрона.

После линеаризации (1) при $\Phi = j$ получаем

$$j = \frac{kT}{C_1} \frac{eE}{G^\circ} \cdot \bar{N}. \quad (2)$$

Когда $\bar{N} = const$, мы из (2) имеем закон Ома в дифференциальной форме

$$\vec{j} = g \vec{E}, \quad (3)$$

где g — электрическая проводимость.

Приведенный пример показывает справедливость наших предпосылок, положенных в основу модели.

Если теперь в качестве функции отклика системы поверхностных атомов (молекул) взять поверхностное натяжение σ , то из уравнения (2) следует

$$\sigma = \beta \frac{N_s}{G^0}, \quad (4)$$

где β — некоторая постоянная; N_s — число поверхностных атомов (молекул).

В случае идеальных твердых растворов

$$G_{\text{р-ра}}^0 = X_1 G_1^0 + X_2 G_2^0 + \dots + X_n G_n^0 = \sum_{i=1}^n X_i G_i^0, \quad (5)$$

где X_i — мольная концентрация i -ой компоненты, причем

$$\sum_{i=1}^n X_i = 1. \quad (6)$$

Из уравнения (4) следует, что чем больше потенциал Гиббса поверхности того или иного материала, тем меньше поверхностное натяжение. А уравнения (5) и (6) совместно с (4) показывают как можно изменять поверхностное натяжение в ту или другую сторону, подбирая компоненты сплава или модифицируя поверхность путем имплантации, азотирования и т.д.

Температурная зависимость энергии Гиббса представлена выражением

$$G^0 = a + bT + cT^2, \quad (7)$$

где коэффициенты a , b , c для многих материалов приведены в справочниках.

Подставляя (7) в (4), получим

$$\sigma = \beta \frac{N_s}{a + bT + cT^2}. \quad (8)$$

Из (8) видно, что поверхностное натяжение твердых тел уменьшается с ростом температуры, как и в случае жидкостей или расплавов. Однако зависимость не линейная.

В большинстве случаев — $bT \gg cT^2$ и уравнение (8) дает гиперболическую зависимость поверхностного натяжения σ от температуры (см. рис. 1). Отметим, что подобная зависимость справедлива для межфазной границы твердое тело — вакуум, когда величина $N_s = const$.

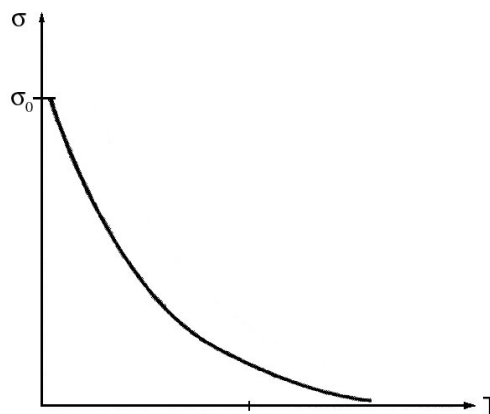


Рисунок 1. Зависимость поверхностного натяжения σ от температуры согласно формуле (8)

Если $N_s \neq const$, т.е. $N_s = f(T)$, и происходит процесс десорбции поверхностных атомов или молекул, то зависимость поверхностного натяжения σ от температуры становится сложнее.

Различие в зависимости поверхностного натяжения σ от температуры для жидких и твердых тел обусловлено их различием в поверхностной энергии ω .

В случае жидкостей σ и ω совпадают, а в случае твердых тел — нет; они связаны уравнением Шаттльворта и Херинга [6]

$$\sigma = \omega + \Omega(\partial\omega/\partial\Omega)_T, \quad (9)$$

где Ω — площадь поверхности твердого тела.

Силу сухого трения скольжения в случае молекулярного механизма можно представить в виде

$$F_{mp} = \int_L \sigma dl \approx \sigma L = kN, \quad (10)$$

где σ — поверхностное натяжение твердого тела; L — длина пройденного при скольжении пути; k — коэффициент трения; N — сила нормального давления.

Поскольку теоретические значения коэффициента трения в таблице 1 приведены для температур, близких к точке плавления [11], то и получились заниженные значения. Учет приведенных выше рассуждений и формул позволяет внести температурную поправку в значение коэффициента трения, которые и приведены в скобках в таблице 1.

Поверхностная энергия (натяжение) и коэффициенты сухого трения

Частицы, расположенные на поверхности, находятся в другом окружении по сравнению с частицами, находящимися в объеме фазы, т.е. взаимодействуют как с однородными частицами, так и с частицами другого рода. Следствием этого является то, что средняя энергия g_s частицы, находящейся на поверхности раздела фаз, отличается от средней энергии такой же частицы в объеме фазы g_v (причем энергия частицы на поверхности может быть как больше, так и меньше энергии частицы в объеме). Поэтому важнейшей характеристикой поверхностной фазы является поверхностная энергия ω_s — разность средней энергии частицы, находящейся на поверхности, и частицы, находящейся в объеме фазы, умноженная на число частиц на поверхности N :

$$\omega_s = N_s(g_s - g_v); \quad (11)$$

$$\sigma = \frac{\omega_s}{S}. \quad (12)$$

Очевидно, что общая величина поверхностной энергии фазы будет определяться величиной её поверхности S . Поэтому для характеристики поверхности раздела, отделяющей данную фазу от другой, вводится понятие поверхностного натяжения (о котором мы говорили выше) σ — отношение поверхностной энергии к площади поверхности раздела фаз; величина поверхностного натяжения зависит только от природы обеих фаз.

Полезная информация о поверхностной энергии металлов может быть получена в рамках метода функционала плотности. При этом наиболее часто в расчетах используется модель «желе», при которой положительный заряд ионов заменяется однородным положительным фоном [15, 16]. В рамках такой модели можно вычислить работу выхода электронов, которая экспериментально определяется с приемлемой точностью. Сравнение теории с экспериментом показало, что для ряда чистых металлов метод функционала плотности действительно дает неплохие результаты [16].

Поверхностная энергия (натяжение) пропорциональна энергии связи двух атомов поверхности. Не углубляясь в тонкости расчетов, приведем известные уже результаты [17].

Т а б л и ц а 2

Энергия связи (ккал/моль) пар атомов металлов [17]

Металл	Ag	Cd	Cu	Mg	Sn	Pb	Zn
Ag	29,4	4,6	39,9	6,5	18,7	29,6	4,4
Cd		—	6,7	—	4,8	8,1	—
Cu			36,8	9,7	32,2	36,2	6,8
Mg				—	5,3	4,5	—
Sn					31,3	21,1	5,5
Pb						29,3	8,3
Zn							—

Ряд элементов M , упорядоченный по относительному сродству Ag к M , можно представить в виде $Pb > Sn > (Cu, Mg) > Zn > Cd$ (табл. 2). Данные таблицы позволяют установить соответствующий ряд элементов M , упорядоченный по относительному сродству Cu к M : $Pb > Sn > (Mg, Ag) > Zn > Cd$.

Таким образом, наиболее перспективными для создания антифрикционных пар трения являются сплавы из комбинации серебра или меди со свинцом или оловом.

Приведем теперь данные наших расчетов коэффициентов сухого трения в парах металлов [5].

Т а б л и ц а 3

Теоретические значения коэффициента трения скольжения в паре металл–металл

Пара трения	k	Пара трения	k
Свинец — свинец	0,1	Серебро — серебро	0,4
Олово — олово	0,2	Золото — золото	0,4
Железо — железо	0,6	Медь — медь	0,5
Алюминий — алюминий	0,3	Никель — никель	0,8
Кобальт — кобальт	0,7	Платина — платина	0,6

Сравнение таблиц 2 и 3 показывает полную корреляцию между поверхностной энергией (энергией связи) и коэффициентом сухого трения в паре металл–металл.

Первый вывод, который следует из такого сравнения, — нельзя использовать в антифрикционных парах трения однородные пары металлов.

На практике ситуация оказывается сложнее и в парах трения используются сплавы более сложного состава. Однако и в этом случае рассмотренная нами закономерность «работает».

Получение композиционных сплавов для изготовления пар трения — задача технически непростая, а экономически — невыгодная, поскольку износ даже в несколько микрон нередко приводит к выходу детали из работы. При этом в отходы уходит большое количество дорогостоящих сплавов.

Именно поэтому в большинстве развитых странах идут по пути не увеличения выпуска специальных сплавов, а по пути модификации поверхности пар трения путем нанесения покрытий, азотирования, нитроцементации и т.д.

Одним из приоритетных направлений современной науки и техники является разработка новых материалов, в частности, создание многокомпонентных нанокompозитных покрытий с характерным размером зерна менее 100 нм. Ожидается, что основной движущей силой научно-технического развития к середине XXI века станет нанотехнология. Сущность нанотехнологий состоит в их способности работать на атомном, молекулярном и надмолекулярном уровнях, в интервале размеров от 1 до 50 нм, для того чтобы создавать, обрабатывать и использовать материалы, устройства и системы, обладающие новыми свойствами и функциональными возможностями, благодаря малому размеру элементов их структуры [18]. С физической точки зрения переход к наносостоянию связан с появлением размерных эффектов, под которыми следует понимать комплекс явлений, обусловленных изменением свойств вещества вследствие совпадения размера блока микроструктуры и некоторой критической длины, характеризующей данное явление (длина свободного пробега электронов и фотонов, толщина стенки доменов, критический радиус дислокационной петли и др.).

Размерные эффекты проявляются, когда средний размер кристаллических зёрен составляет менее 50 нм, и наиболее отчетливо наблюдаются, когда размер зёрен приближается к величине менее 10 нм. В этой связи наноматериалы можно классифицировать по геометрической форме и размеру структурных элементов, из которых они состоят. Основными типами наноматериалов по размеру зёрен являются кластерные материалы, волоконные материалы, плёнки и покрытия, многослойные (многокомпонентные) структуры, а также объёмные нанокристаллические материалы, зерна которых имеют нанометровые размеры во всех трёх направлениях.

Необходимо отметить уникальность наноструктурированных и нанокompозитных покрытий, которая заключается в высокой объёмной доле границ раздела фаз и их прочности, в отсутствии дислокаций внутри кристаллитов и возможности изменения соотношения объёмных долей кристаллической и аморфной фаз, а также взаимной растворимости металлических и неметаллических компонентов. Так, например, наличие большой площади раздела фаз (объёмная доля которых может достигать $\leq 50\%$) в нанокompозитных покрытиях и плёнках позволяет существенно изменять их свойства как путем модификации структуры и электронного строения, так и за счет легирования различными элементами [18]. Воеводин и другие (см., напр., в [18]) разработали комбинацию покрытий TiC/C и MoS₂ в системах с малым трением в меняющейся среде, например, в летательных аппаратах и многообразных космических аппаратах. Несмотря на достигнутые успехи, можно сказать, что мы находимся в начале пути и многие процессы, связанные с размерными эффектами, еще далеки от детального теоретического обоснования [15–18].

Второй вывод, который следует из нашего анализа, заключается в следующем: уменьшение коэффициента сухого трения возможно за счет уменьшения поверхностной энергии при использовании пар трения, у которых значительно различается работа выхода электронов. Это приводит к различию в контактной разности потенциалов и, соответственно, к уменьшению поверхностной энергии.

Заклучение

Основной механизм трения в вакууме (при отсутствии смазочных пленок) — это адгезия очень малых контактных поверхностей с последующим разрушением образованных при этом адгезионных мостиков связи при сдвиге одной поверхности относительно другой.

Чрезвычайно низкая скорость восстановления поверхностных пленок в космическом вакууме за счет окисления, вызванная очень низким содержанием кислорода в окружающей среде, увеличивает трение и способствует большему износу материалов.

Вопросы, поднятые в настоящей работе, требуют дальнейших теоретических и экспериментальных исследований.

Список литературы

- 1 Боуден Ф.П., Тейбор Д. Трение и смазка твердых тел. — М.: Машиностроение, 1968. — 543 с.
- 2 Савостиков В.М., Сергеев С.М., Табаченко А.Н. Трибологические исследования ионно-вакуумных композитных покрытий на основе карбоборидов и сульфидов металлов // 6 International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows: Proceedings. — Tomsk, Russia, 2002. — 23–28 Sept. — P. 606–609.
- 3 Savostickov V.M., Sergeev S.M. and etc. Technological Methods of Gradient Composite Coatings Formation in Conditions of Different Plasma Combination in a Common Vacuum Chamber // 9 International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows: Proceedings. — Tomsk, Russia, 2008. — P. 527–530.
- 4 Цимбал И.Р. Обеспечение эксплуатационных свойств пар трения приборов, работающих в экстремальных условиях: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. — СПб., 2009. — 20 с.
- 5 Юров В.М., Гученко С.А., Ибраев Н.Х. Поверхностное натяжение и трение скольжения твердых тел // Вестн. КарГУ. Сер. Физика. — 2009. — № 3(55). — С. 10–18.
- 6 Гохштейн А.Я. Поверхностное натяжение твердых тел и адсорбция. — М.: Наука, 1976. — 256 с.
- 7 Юров В.М. и др. Способ измерения поверхностного натяжения твердых тел: Патент РК № 57691. — Оpubл. 15.12.2008 // Бюлл. № 12.
- 8 Юров В.М. и др. Способ измерения поверхностного натяжения и плотности поверхностных состояний диэлектриков: Патент РК № 58155. — Оpubл. 15.12.2008 // Бюлл. № 12.
- 9 Юров В.М. и др. Способ измерения поверхностного натяжения магнитных материалов: Патент РК № 58158. — Оpubл. 15.12.2008 // Бюлл. № 12.
- 10 Юров В.М., Гученко С.А., Ибраев Н.Х. К вопросу о температурной зависимости поверхностного натяжения твердых тел // Вестн. развития науки и образования. — М.: Наука, 2009. — № 5. — С. 3–10.
- 11 Юров В.М., Гученко С.А., Ибраев Н.Х. Поверхностное натяжение металлов в жидкой и твердой фазах // Научное обозрение. — М.: Наука, 2009. — № 5. — С. 31–40.
- 12 Юров В.М., Гученко С.А., Ибраев Н.Х. Поверхностное натяжение наночастиц // Научная жизнь. — М.: Наука, 2009. — № 5. — С. 14–21.
- 13 Юров В.М. Термодинамика люминесцирующих систем // Вестн. КарГУ. Сер. Физика. — 2005. — № 3(39). — С. 13–15.
- 14 Юров В.М. Магнитная восприимчивость малых частиц ферромагнетиков // Современные проблемы науки и образования. — М.: Изд-во РАЕН, 2009. — № 4. — С. 152–156.
- 15 Оура К., Лифишиц В.Г., Саранин А.А. и др. Введение в физику поверхности. — М.: Наука, 2006. — 490 с.
- 16 Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности. — Долгопрудный: Изд. дом «Интеллект», 2008. — 568 с.
- 17 Сергеев Г.Б. Нанохимия. — М.: КДУ, 2007. — 336 с.
- 18 Погребняк А.Д., Шпак А.П., Азаренков Н.А., Береснев В.М. Структура и свойства твердых и сверхтвердых покрытий // Успехи физических наук. — 2009. — Т. 179. — № 1. — С. 35–64.

В.М.Юров, С.А.Гученко, Н.Х.Ыбыраев

Құрғақ үйкеліс және катты денелердің беттік энергиясы

Макалада вакуумда үйкеліс күш коэффициентін өлшеудің ерекшеліктері қарастырылады. Үйкеліс коэффициенттері және беттік керілудің температуралық тәуелділігі үшін формулалар алынды. Беттік энергиямен құрғақ үйкеліс коэффициентінің байланысына талдау жасалды. Металл-металл жұбына үйкеліс коэффициенті теориялық есептелінді. Үйкеліс жұбы үшін материал таңдау бойынша ұсыныстар берілген.

V.M.Jurov, S.A.Guchenko, N.Kh.Ibrayev

Dry friction and superficial energy of firm bodies

In work features of measurement of factors of a friction in vacuum are considered. Formulas for temperature dependence of a superficial tension and for friction factors are received. The analysis of communication of superficial energy with factors of a dry friction is carried out. Friction factors in steam metal-metal are theoretically calculated. Recommendations for choice materials for friction pairs are given.

ЖЫЛУ ФИЗИКАСЫ ЖӘНЕ ТЕОРИЯЛЫҚ ЖЫЛУ ТЕХНИКАСЫ ТЕПЛОФИЗИКА И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ТЕПЛОТЕХНИКА

УДК 533.601

К.К.Кусайынов, Н.С.Смакова, Н.Н.Омаров

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

Исследование аэродинамики вращающегося тела с округленными торцами

В работе рассмотрено появление сил в цилиндре влиянием потока ветра — лобовое сопротивление и подъемная сила. Исследование проведено для полусферического цилиндра. Из полученных данных были построены графики. Отмечена основная цель работы — при уменьшении лобового сопротивления подъемная сила должна увеличиться. Эти различия показаны на графиках. Доказано, что полученные результаты в будущем могут дать возможность улучшить работу ветродвигателей.

Ключевые слова: поток ветра, лобовое сопротивление, полусферический цилиндр, подъемная сила, ветродвигатель.

Исследование законов воздействия воздуха на движущиеся в нем тела возможно двумя методами: сообщением телу некоторой скорости относительно неподвижного воздуха или сообщением воздуха некоторой скорости по отношению к неподвижно укрепленному телу.

Большинство задач экспериментальной аэродинамики связано с изучением движения тел относительно неподвижного воздуха или жидкости. Однако можно явление обратить и исследовать движение воздуха или жидкости относительно неподвижного тела. Результаты такого рода исследований при желательном соблюдении условий обращения движений (при исключении из опытов дополнительных явлений, связанных с границами потоков) дают полное соблюдение законов обтекания тел при прямом и обращенном движении.

Натурные испытания позволяют в опытах выдержать полное динамическое подобие. Но их главный недостаток состоит в том, что, помимо дороговизны и сложности, натурные исследования технически затруднены. Во многих случаях совершенно невозможно проведение исследований многочисленных вариантов аппарата, выявление взаимного влияния отдельных его элементов, например, крыла и оперения или винта и фюзеляжа. Поэтому аэромеханические испытания в натуре дополняют и завершают испытания в аэродинамических трубах.

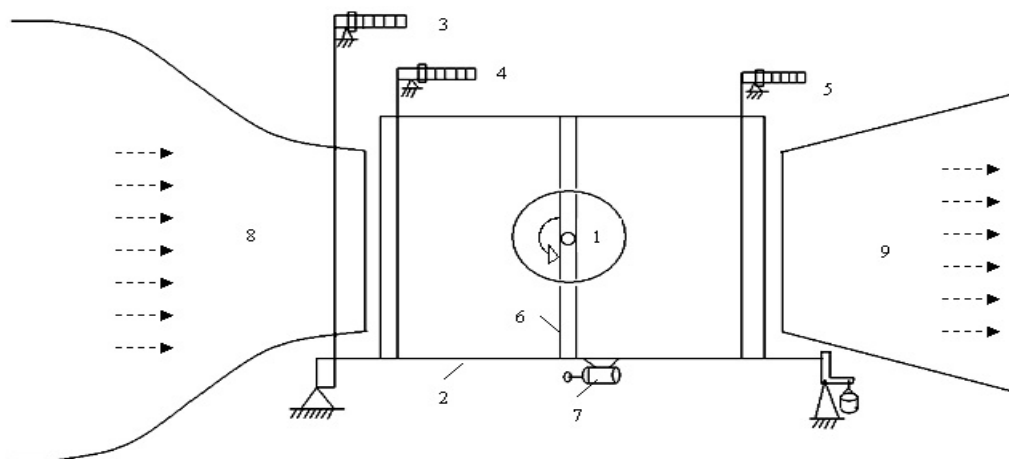
Цилиндрическое тело классически является неотъемлемым элементом практически всех аэрогидродинамических аппаратов и теплообменных устройств. Особый интерес представляют особенности аэродинамики при поперечном обтекании и одновременном вращении цилиндра вокруг своей оси. В монографии [1] приведено описание использования вращения поперечно обтекаемого цилиндра как способа устранения разности между скоростью внешнего потока и скоростью стенки с целью предотвращения образования и отрыва пограничного слоя.

На верхней стороне цилиндра, где течение жидкости и вращение стенки направлены в одну и ту же сторону, отрыв пограничного слоя полностью отсутствует. На нижней стороне, где течение жидкости и вращение стенки направлены в противоположные стороны, отрыв почти не возникает [2]. Линии тока подтверждают появление большой поперечной силы, направленной вверх, что связано с явлением, известным под названием эффекта Магнуса. Для тел иной формы осуществить движение обтекаемой стенки технически очень трудно, в связи с чем этот способ управления пограничным слоем почти не нашел практического применения. Современный уровень развития техники и высоких технологий позволяет использовать вращающийся цилиндр в качестве специального элемента аэро-

динамических аппаратов для создания большой подъемной силы, направленной поперек направления обтекаемого потока.

Цилиндр приводился во вращение с помощью ременной передачи, питаемой от автотрансформатора электродвигателем с переменными оборотами. Скорость вращения цилиндра фиксировалась с помощью тахометра. Воздушный поток в рабочей части аэродинамической трубы достаточно равномерный по всему сечению [3, 4].

Экспериментальный стенд был установлен в рабочей части аэродинамической трубы Т-1-М на аэродинамических весах с помощью тонких металлических растяжек для уменьшения сопротивления вспомогательных элементов. Трехкомпонентные аэродинамические весы с достаточно высокой степенью точности позволяют измерять подъемную силу и силу лобового сопротивления [5]. Скорость потока в рабочей части аэродинамической трубы изменялась плавно. Средняя погрешность измерения подъемной силы и силы лобового сопротивления составляла 5 %.



1 — исследуемый цилиндр; 2 — рамка аэродинамических весов; 3 — весы для определения силы лобового сопротивления; 4, 5 — весы для определения подъемной силы; 6 — крепления цилиндра; 7 — мотор для вращения цилиндра; 8, 9 — сопло аэродинамической трубы

Рисунок 1. Экспериментальный стенд для исследования аэродинамических характеристик вращающегося цилиндра

Силу лобового сопротивления и подъемную силу измеряли динамическими весами, установленными в рабочей части аэродинамической трубы. Для этого, установив на подвеску рабочей части аэродинамической трубы цилиндр, приступают к измерению лобового сопротивления и подъемной силы при разных скоростях потока.

Поток воздуха, набегаая на лобовую часть цилиндра, прикладывает силу, которая отражается на весах (рис. 1).

Коэффициент K_r в соответствии с [6] и с учетом данных эксперимента может быть определен по формуле

$$K_r = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2\pi}, \quad \varphi_1 \geq \varphi_2, \quad (1)$$

где φ_1 и φ_2 — положение точек отрыва потока на верхней и нижней сторонах цилиндра; K_r — коэффициент.

При безотрывном обтекании, а также непосредственно на поверхности цилиндра $K_r = 1$, что соответствует случаю $\varphi_1 + \varphi_2 = 2\pi$, при $\varphi_1 + \varphi_2 = \pi$ коэффициент K_r будет равняться 0,5.

Значение коэффициента силы Магнуса $C_{y1} = \pi\theta$ при $K_r = 0,5$ является максимальным (асимптотическим) для реального, отрывного обтекания цилиндра, что следует из экспериментальных данных, которые будут приведены ниже.

При наличии прямых концевых поверхностей, согласно имеющимся к настоящему времени экспериментальным данным, $C_{y1} \leq \pi\theta$ и $C_{x1} > 0$, причем в области $\theta < 0,5$ коэффициент C_{y1} может принимать отрицательные значения, где C_{x1} — коэффициент сопротивления.

Для иллюстрации характера обтекания вращающегося (и неподвижного) цилиндра на рисунке 2 приведены схемы течения для двух вариантов обтеканий, здесь A и B — передняя и задняя критические точки течения; O — точка отрыва потока; φ — угловое положение точек отрыва; θ — относительная скорость вращения цилиндра; $Re_{кр}$ — критическое число Рейнольдса [6]. Видно существенное отличие отрывного обтекания цилиндра (b) от безотрывного (a). Схема (a) представляет теоретическое решение [6] для потенциального обтекания, при котором $C_{y1} = 2\pi\theta$ и $C_{x1} = 0$, что не соответствует действительности. Для отрывного течения на вращающемся цилиндре при рассматриваемых условиях, как отмечено выше, $C_{y1} \leq \pi\theta$ и $C_{x1} > 0$.

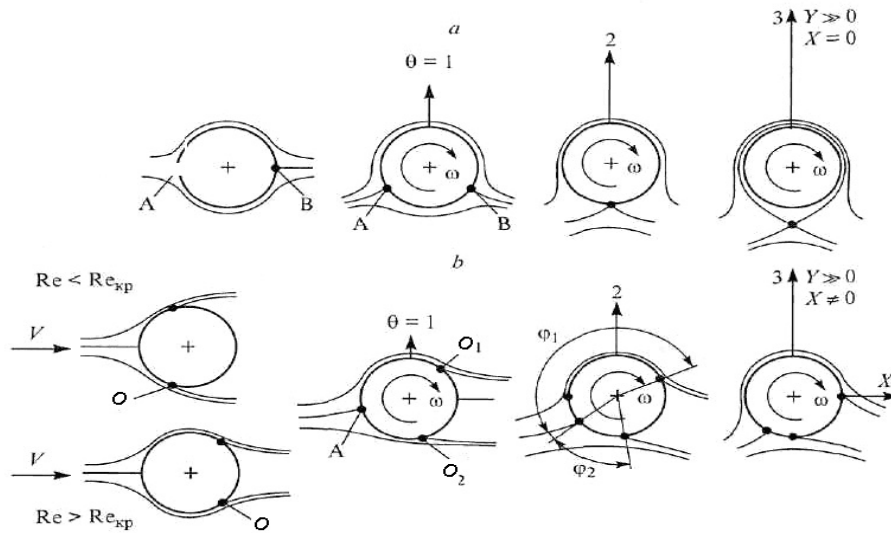


Рис. 2. Схемы обтекания цилиндра при $\theta > 0$: a — безотрывное потенциальное; b — с отрывом потока

На рисунках 3–6 приведены результаты экспериментального исследования аэродинамических характеристик цилиндра, проведенные в лаборатории гидродинамики и теплообмена.

Эксперимент проводился с цилиндрами переменного сечения в виде цилиндра с полусферическими и полуэллиптическими торцевыми элементами. Результаты измерения аэродинамических характеристик исследованных тел представлены на графиках в виде зависимостей:

- зависимости подъемной силы от числа оборотов изучаемого тела и от скорости набегающего потока (рис. 3, 4);
- силы лобового сопротивления и коэффициента лобового сопротивления зависят от числа оборотов вращения исследуемого тела (рис. 5, 6).

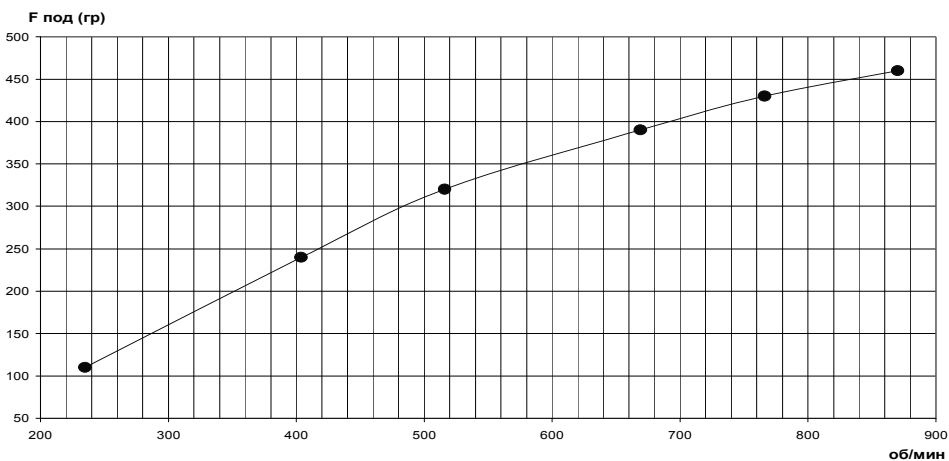


Рисунок 3. Зависимость подъемной силы от числа оборотов в минуту для цилиндра с округленными торцами при $U = const$

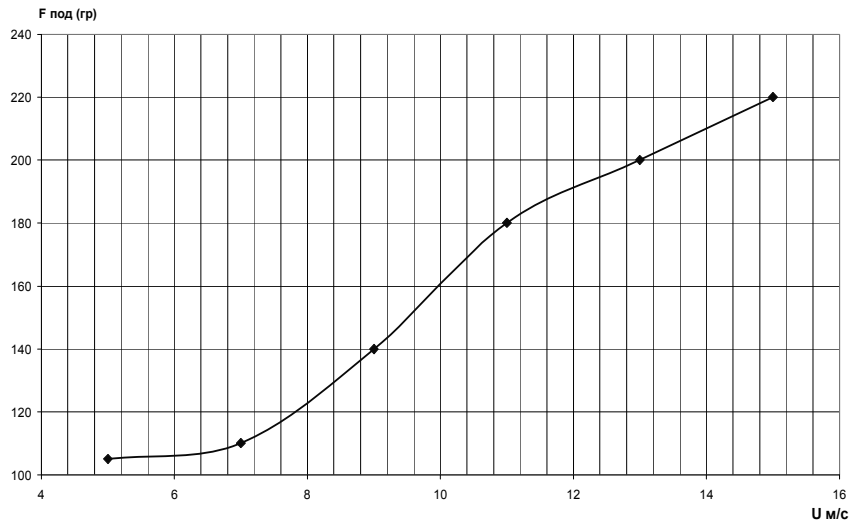


Рисунок 4. Зависимость подъемной силы от скорости потока при $n = \text{const}$

Из графиков для подъемной силы видно, что с ростом количества оборотов цилиндра подъемная сила возрастает. Этот рост тем выше, чем больше скорость набегающего потока.

Но величина подъемной силы возрастает только до определенного значения скорости вращения цилиндра, при дальнейшем увеличении частоты вращения рост не наблюдается.

Расчет лобового сопротивления проводился по формуле

$$F_{л.с.} = \frac{F_{сопр}}{k}, \quad (2)$$

где k — коэффициент аэродинамических весов; $F_{л.с.}$ — сила лобового сопротивления.

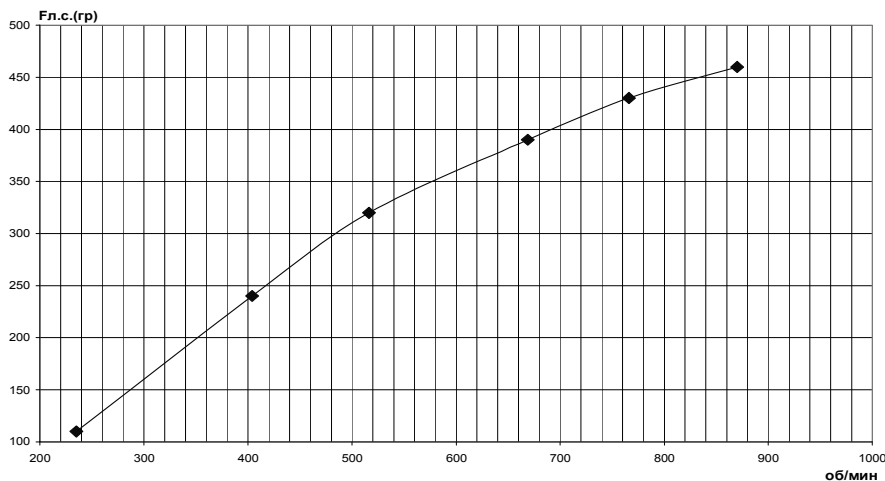


Рисунок 5. Зависимость силы лобового сопротивления от числа оборотов в минуту для цилиндра с округленными торцами при $U = \text{const}$

Сводный график зависимости коэффициента лобового сопротивления от количества оборотов для цилиндра с округленными торцами представлен на рисунке 6. Расчет коэффициента сопротивления проводился по формуле

$$C_x = \Delta F_{л.с.} / \left(\rho \frac{u^2}{2} \cdot S \right), \quad (3)$$

где C_x — коэффициент лобового сопротивления; $F_{л.с.}$ — сила лобового сопротивления; ρ — плотность воздуха; u — скорость потока; S — площадь лобовой части исследуемого тела (миделевого сечения).

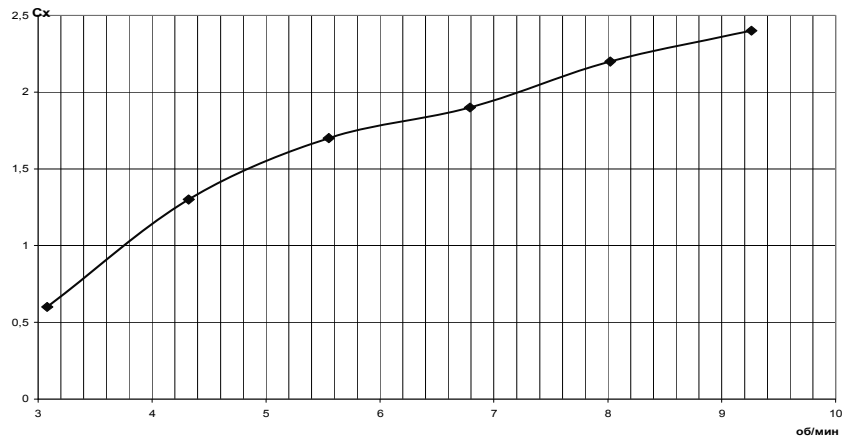


Рисунок 6. Зависимость коэффициента лобового сопротивления от числа оборотов в минуту для цилиндра с округленными торцами при $U = \text{const}$

Из полученного графика видно, что с ростом количества оборотов в минуту лобовое сопротивление цилиндра со сферическими торцами возрастает.

Подводя итоги изучения зависимости подъемной силы и лобового сопротивления от скорости вращения цилиндра, приходим к выводу о том, что с ростом скорости потока, скорости вращения цилиндра возрастает как подъемная сила, так и сила сопротивления.

Вращающийся цилиндр с округленными торцами переменного сечения может быть использован в качестве элемента ветродвигателя, который работает значительно эффективнее, чем элемент в виде крыловых профилей при малых скоростях потока.

Список литературы

- 1 *Исатаев С.И., Акылбаев Ж.С., Турмухамбетов А.Ж.* Аэрогидродинамика и теплообмен криволинейных тел. — Алматы: Ғылым, 1996. — 437 с.
- 2 *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. — М.: Наука, 1974. — 712 с.
- 3 *З.Кусаиынов К., Жуматаева Г.С.* Влияние вращения цилиндрических элементов ветроустановки на ее аэродинамические характеристики // Возобновляемая энергетика: Тез. 1-й Центрально-Азиатской конф. — Караганда, 2005. — С. 49, 50.
- 4 *Акылбаев Ж.С., Кусаиынов К., Сакипова С.Е. и др.* Исследование подъемной силы вращающегося цилиндра при поперечном обтекании турбулентным потоком газа // Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование. — Алматы: Изд. КазНУ, 2003. — С. 78.
- 5 *Юшина Л.Е.* Влияние формы необогреваемого торца на теплообмен поперечно обтекаемого цилиндра // Теплообмен и теплофизические свойства вещества: Сб. науч. тр. — Киев: Наук. думка, 1984. — С. 17–23.
- 6 *Бычков Н.М.* Ветроустройство с эффектом Магнуса. 2. Характеристики вращающегося цилиндра // Теплофизика и аэромеханика. — 2005. — Т. 12. — № 1. — С. 59–175.

Қ.Қ.Құсайынов, Н.С.Смақова, Н.Н.Омаров

Екі жағы жартылай сфералармен аяқталатын айналмалы цилиндрдің аэродинамикасын зерттеу

Мақалада жел ағыны әсерінен цилиндрде пайда болатын күштер қарастырылған. Бұл күштер — маңдайлық кедергі және көтеру күші. Зерттеу жартылай сфералық цилиндрге жүргізілді. Алынған нәтижелер көмегімен графиктер тұрғызылды. Негізгі мақсатымыз маңдайлық кедергіні азайтып, көтеру күшін көбейту болып табылады. Бұл айырмашылықтар графиктерде көрсетілген. Алынған нәтижелер келешекте жел қозғалтқыштар жұмысын арттыруға мүмкіндік береді.

K.K.Kusaiynov. N.S.Smakova. N.N.Omarov

Research of aerodynamics of a rotating body with approximated by end faces

In this paper the emergence of forces in the cylinder of the influence of the wind flow. These forces are the drag and lift. The study was conducted in a cylinder with rounded ends. With the combined results, we construct graphs. The main objective is to minimize the frontal barrier and increase the force multiply. These differences are shown in the graphs. Taken results are given in the future to improve the work of the wind engine.

УДК 681.516.83.669.09

Е.М.Есиркеев

*Baker Hughes, Атырау***Моделирование физических процессов электрооборудования
прокатных станов в программе MatLab+SIMULINK**

Показано, что одной из основных проблем прокатного производства является повышение точности прокатки листа. В статье рассмотрена модель процессов в двигателях постоянного тока с независимым возбуждением и системы управления с подчиненным регулированием прокатных станов в программе MatLab+SIMULINK. Определено, что моделирование работы электрического оборудования прокатных станов в программе MatLab+SIMULINK позволяет наглядно увидеть физические процессы, происходящие во время работы в самом стане в процессе прокатки холодной полосы. Сделан вывод: результаты моделирования позволяют установить связь между входными и выходными параметрами электрической схем.

Ключевые слова: электрооборудование, моделирование, физические процессы, прокатный стан, независимое возбуждение, холодная полоса, дефекты.

Одной из наиболее важных проблем прокатного производства является повышение точности прокатки. Поэтому при автоматизации прокатных станов центральной задачей является разработка систем автоматического поддержания заданных геометрических параметров готового листа. Системы автоматического регулирования электрооборудованием прокатных станов строятся на основе математических моделей физических процессов работы стана.

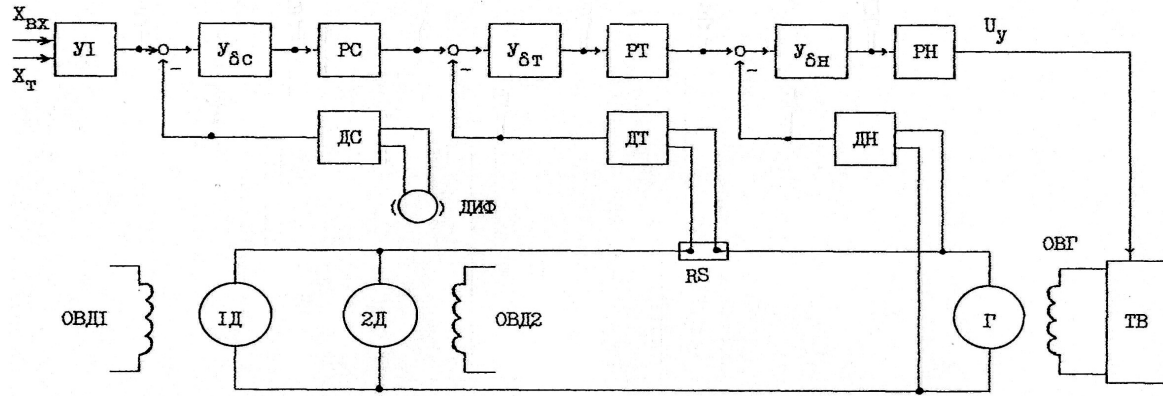
В данной статье рассматривается моделирование переходных процессов электрооборудования непрерывного шестиклетевого стана «1400» холодной прокатки в линейно-прокатном цехе № 3 металлургического комбината «МитталСтил Темиртау», в частности, двигателя постоянного тока независимого возбуждения и системы управления с подчиненным регулированием в пакете программ Matlab+Simulink.

Непрерывный шестиклетевой стан холодной прокатки обеспечивает прокатку стальной полосы с толщиной подката 1,5...5,0 мм и шириной 1250...2350 мм. На рисунке 1 представлена функциональная схема системы управления главного электропривода рабочего вала клетки стана.

Электропривод вала представляет систему Γ - D при питании обмотки возбуждения генератора (Γ) от тиристорного возбудителя (TB). Система регулирования построена по принципу подчиненного регулирования и включает в себя три основных контура.

Контур регулирования напряжения KPH генератора с регулятором напряжения PH , выходом которого является напряжение управления U_y тиристорного возбудителя TB , питающего обмотку возбуждения генератора $OBГ$. Обратная связь по напряжению генератора в KPH замкнута через датчик напряжения $ДН$.

Контур регулирования тока KPT якоря двигателя, содержащий регулятор тока PT , контур регулирования KPH генератора и датчик тока $ДТ$ с шунтом RS в обратной связи.



У1 — суммирующий усилитель; $U_{\delta c}$, $U_{\delta t}$, $U_{\delta n}$ — звенья, позволяющие оценить ошибку регулирования; РС — регулятор скорости; ДС — датчик скорости; РТ — регулятор тока; ДТ — датчик тока; РН — регулятор напряжения; ДН — датчик напряжения; ОВД1, 2 — обмотки возбуждения двигателя; Д1, 2 — двигатели; ДИФ — дифференциально-импульсный фазочувствительный выпрямитель; RS — шунт; Г — генератор; ОВГ — обмотка возбуждения генератора; ТВ — тиристорный выпрямитель

Рисунок 1. Функциональная схема электропривода валка стана «1400» холодной прокатки «МитталСтил Темиртау»:

Контур регулирования скорости КРС с регулятором скорости РС. На вход датчика скорости ДС поступает сигнал, пропорциональный скорости якоря двигателя, с дифференциально-импульсного фазочувствительного выпрямителя ДИФ.

В контурах регулирования технически реализованы и выделены звенья $U_{\delta c}$, $U_{\delta t}$, $U_{\delta n}$, позволяющие оценить ошибку системы регулирования при снятии ее частотных характеристик. Обмотки возбуждения ОВД1, ОВД2 двухякорного 1Д, 2Д электродвигателя валка стана включены в систему регулирования тока возбуждения двигателя, которая не рассматривается. Задание скорости вращения всех валков клеток стана осуществляется сигналом $X_{вх}$ через суммирующий усилитель У1.

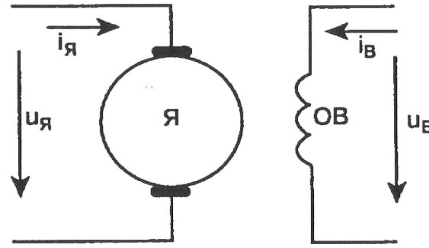
На рисунке 1 цифрами указаны выходные координаты, используемые при снятии динамических характеристик электропривода валка клетки стана [1].

На рисунке 2 схематически показан двигатель постоянного тока с независимым возбуждением. Уравнения, которыми описываются электромагнитные и электромеханические процессы в этом двигателе, имеют вид [2]:

$$\left. \begin{aligned} u_B &= L_B \frac{di_B}{dt} + r_B \cdot i_B; \\ u_Y &= L_Y \frac{di_Y}{dt} + r_Y \cdot i_Y + e_Y; \\ J \frac{d\omega_m}{dt} &= M - M_H; \\ \Phi_B &= k_\Phi \cdot i_B; \\ e_Y &= k_E \cdot \omega_m \cdot \Phi_B; \\ M &= k_M \cdot i_Y \cdot \Phi_B. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

В уравнениях (1) индексом «В» отмечены переменные и параметры, относящиеся к обмотке возбуждения, индексом «Я» — переменные и параметры, относящиеся к якорю, коэффициенты k_Φ , k_E , k_M являются конструктивными постоянными.

Приведем уравнения (1) к безразмерному виду, приняв в качестве базовых единиц номинальные значения переменных двигателя: $U_{B,НОМ}$, $U_{Y,НОМ}$, $\Phi_{B,НОМ}$, $\omega_{0,НОМ} = \frac{U_{Y,НОМ}}{k_E \cdot \Phi_{B,НОМ}}$, $M_{K,НОМ} = k_M \cdot \Phi_{B,НОМ} \cdot \frac{U_{Y,НОМ}}{r_Y}$.



$i_Я$ — ток якоря; $u_Я$ — напряжение якоря; $Я$ — якорь; $ОВ$ — обмотка возбуждения; $i_В$ — ток обмотки возбуждения; $u_В$ — напряжение обмотки возбуждения

Рисунок 2. Двигатель постоянного тока с независимым возбуждением

$$\left. \begin{aligned} \bar{u}_В &= T_B \frac{d\bar{i}_В}{dt} + \bar{i}_В; \\ \bar{u}_Я &= T_Я \frac{d\bar{i}_Я}{dt} + \bar{i}_Я + \bar{\Phi}_В \cdot \bar{\omega}_м; \\ T_m \frac{d\bar{\omega}_м}{dt} &= \bar{\Phi}_В \cdot \bar{i}_Я - \bar{M}_Н; \\ \bar{\Phi}_В &= k_\phi \cdot \bar{i}_В, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

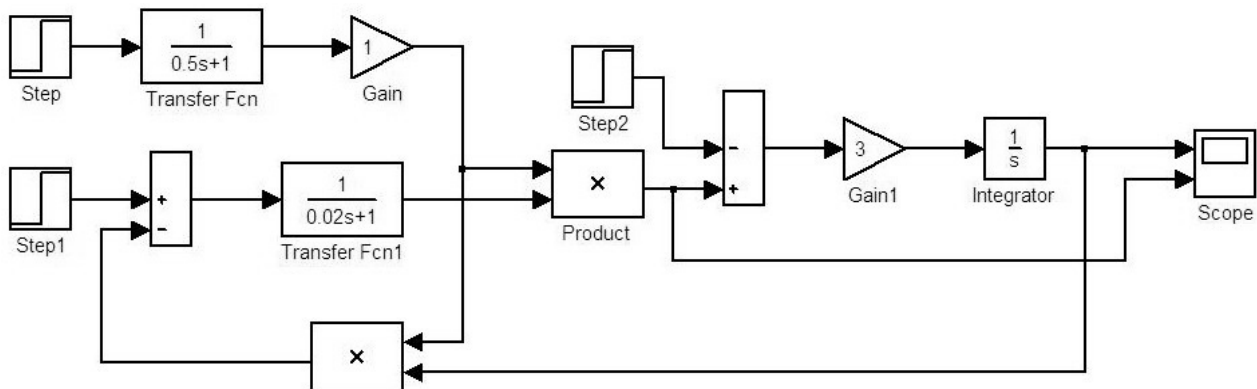
где $\bar{u}_В = \frac{u_В}{U_{В.НОМ}}$; $\bar{u}_Я = \frac{u_Я}{U_{Я.НОМ}}$; $\bar{i}_В = \frac{i_В \cdot r_B}{U_{В.НОМ}}$; $\bar{i}_Я = \frac{i_Я \cdot r_Я}{U_{Я.НОМ}}$; $\bar{\Phi}_В = \frac{\Phi_В}{\Phi_{В.НОМ}}$; $\bar{\omega}_м = \frac{\omega_м}{\omega_{0.НОМ}}$; $\bar{M}_Н = \frac{M_Н}{M_{К.НОМ}}$ — относительные переменные состояния двигателя; $T_B = \frac{L_B}{r_B}$, $T_Я = \frac{L_Я}{r_Я}$, $T_m = \frac{J \cdot \omega_{0.НОМ}}{M_{К.НОМ}}$,

$k_\phi' = k_\phi \cdot \frac{U_{В.НОМ}}{r_B \cdot \Phi_{В.НОМ}}$ — параметры двигателя.

Уравнения (2) могут быть представлены в операторной форме

$$\left. \begin{aligned} \bar{u}_В &= (s \cdot T_B + 1) \cdot \bar{i}_В; \\ \bar{u}_Я &= (s \cdot T_Я + 1) \cdot \bar{i}_Я + \bar{\Phi}_В \cdot \bar{\omega}_м; \\ s \cdot T_m \cdot \bar{\omega}_м &= \bar{\Phi}_В \cdot \bar{i}_Я - \bar{M}_Н; \\ \bar{\Phi}_В &= k_\phi' \cdot \bar{i}_В, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

которым соответствует модель, представленная на рисунке 3, окно настройки параметров моделирования — на рисунке 4.



Step — блок источника сигнала; *Transfer Fcn* — блок интегрирования с передаточной функцией; *Sum* — сумматор; *Product* — блок умножения; *Gain* — коэффициент; *Integrator* — интегратор; *Scope* — экран

Рисунок 3. Модель двигателя постоянного тока с независимым возбуждением

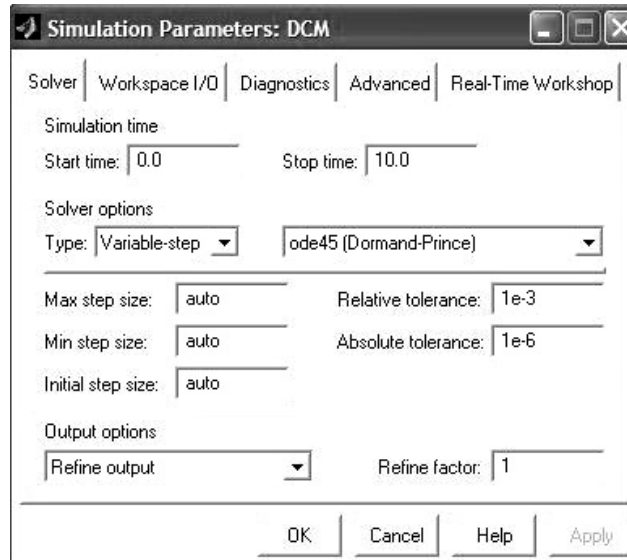


Рисунок 4. Окно настройки параметров моделирования

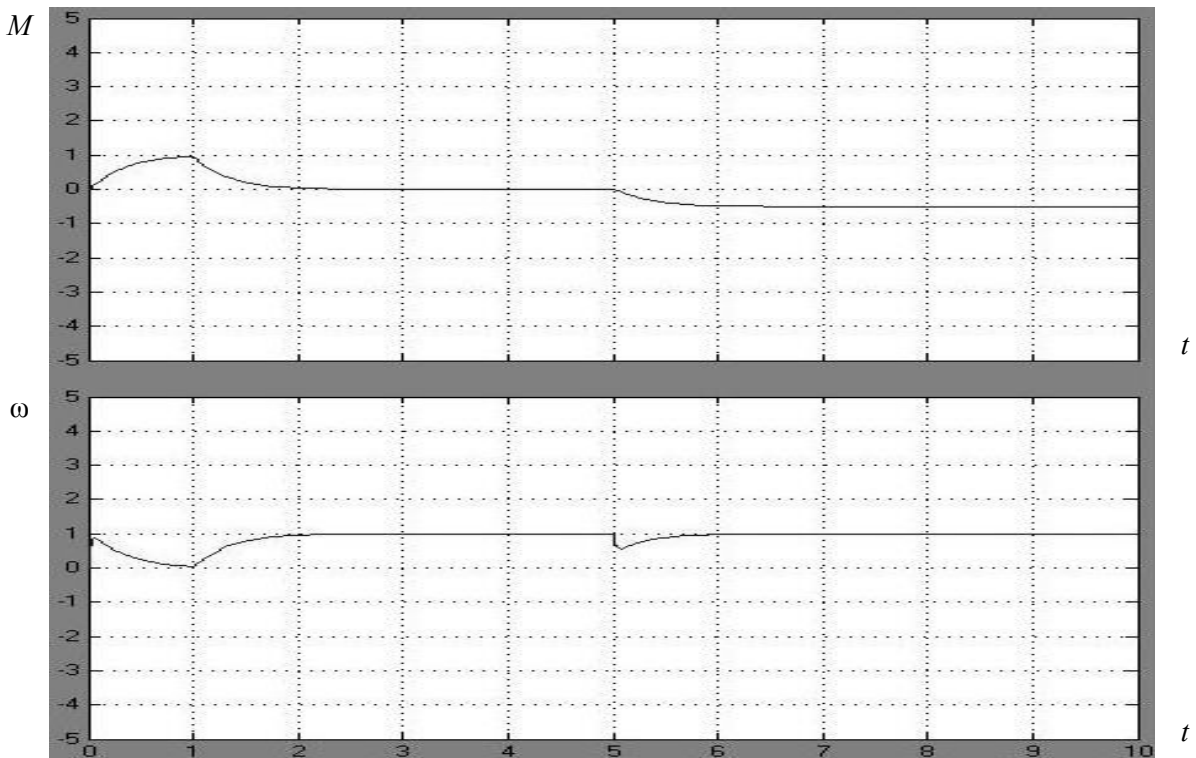
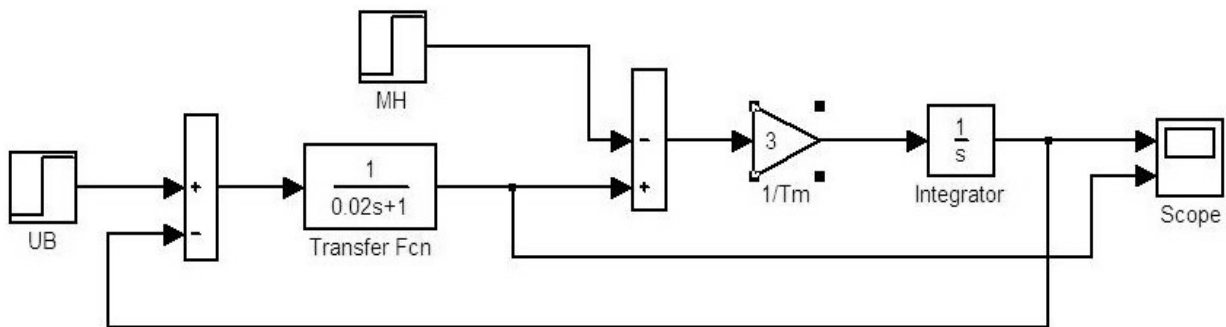


Рисунок 5. Результаты моделирования двигателя постоянного тока с независимым возбуждением

Модель имеет два входа управления: $U_{\text{я}}$ — управление по цепи якоря; $U_{\text{в}}$ — управление по цепи возбуждения и один вход по возмущению $M_{\text{н}}$ — возмущение по моменту нагрузки. Блок (*Transfer Fcn*) моделирует цепь возбуждения (постоянная времени $T_{\text{в}} = 0,5$ с). Блок (*Transfer Fcn1*) моделирует цепь якоря (постоянная времени $T = 0,02$ с). Блоки (*Product*, *Product1*) реализуют умножение в соответствии с уравнениями 2 и 3 системы (3). Блоки (*Sum1*, *Gain*, *Integrator*) реализуют третье уравнение системы (3). На рисунке 4 показано окно настройки параметров моделирования, а на рисунке 5 представлены результаты моделирования двигателя, управляемого по цепи якоря. Управление по цепи возбуждения подается намного раньше для того, чтобы к моменту подачи управляющего и возмущающего воздействия поток в машине уже установился. Как следует из рисунков 4, 5, все время моделирования принято равным 10 с, сигнал по управлению подается спустя 2 с с начала моделирова-

ния, а возмущение — спустя 5 с с начала моделирования. На рисунке 5 представлен переходный процесс по моменту и по скорости.

В двигателе с независимым возбуждением поток можно считать постоянным. В этом случае модель двигателя упрощается, она представлена на рисунке 6.



Step — блок источника сигнала; *Sum* — сумматор; *Transfer Fcn* — блок интегрирования с передаточной функцией; *Gain* — коэффициент; *Integrator* — интегратор; *Scope* — экран

Рисунок 6. Модель двигателя постоянного тока независимого возбуждения при постоянном потоке возбуждения

В приводах постоянного тока прокатных станов с двигателем с независимым возбуждением иногда используется так называемое двухзонное регулирование. В этом случае двигатель управляется и по цепи якоря, и по цепи возбуждения. Обычно эти управления разнесены. По цепи якоря при постоянном потоке возбуждения управление осуществляется при значительных моментах на валу, а управление по цепи возбуждения — при малых моментах.

На рисунке 7 представлены результаты моделирования при двухзонном регулировании двигателя, когда при малых моментах необходимо получить скорость большую идеального холостого хода. Для этого в реальных системах уменьшают поток двигателя. В окне настройки блока (U_b , рис. 8) видно, что через пять секунд после пуска в два раза уменьшается поток двигателя, при этом скорость возрастает также в два раза. Моделирование производилось при моменте нагрузки $M_H = 0,1 \cdot M_{KНОМ}$.

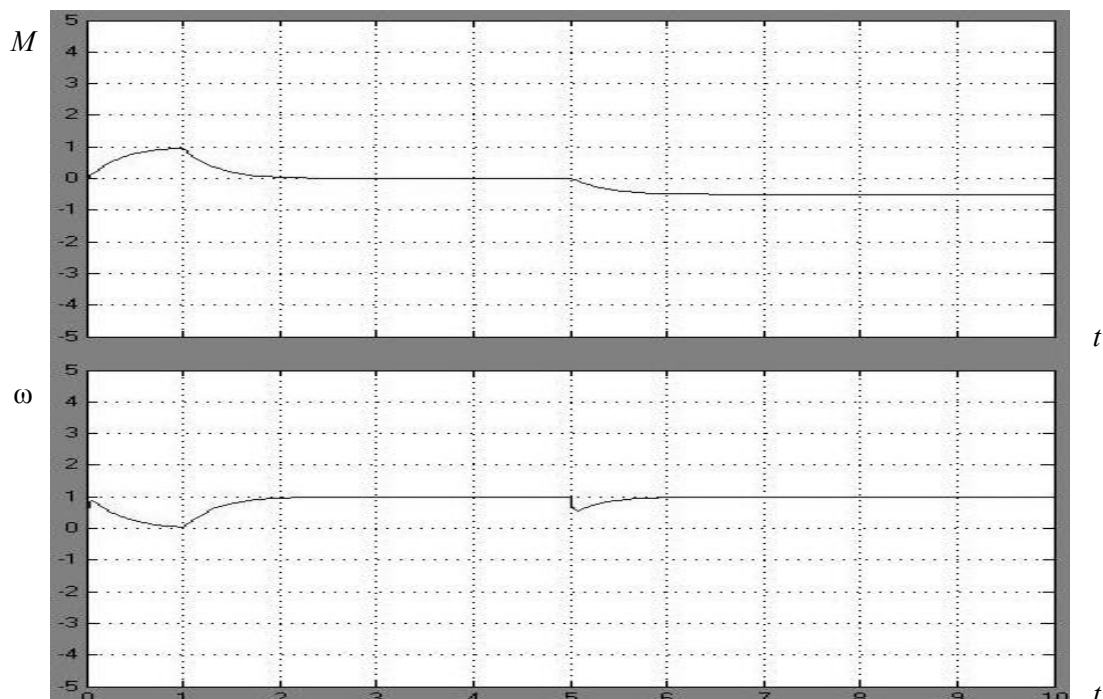


Рисунок 7. Результаты моделирования двигателя постоянного тока независимого возбуждения с управлением по цепи якоря и возбуждения

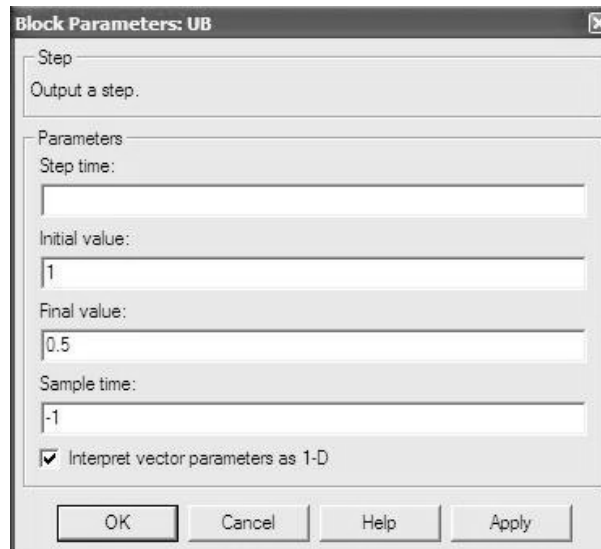


Рисунок 8. Окно настройки двигателя постоянного тока с независимым возбуждением с управлением по цепи якоря и возбуждения

Требования высокой точности регулирования и высокого быстродействия, которые предъявляются к современному электроприводу прокатных станов, обуславливают применение замкнутых систем. Только замкнутые системы позволяют осуществить реализацию в электроприводе прокатных станов двух основных принципов:

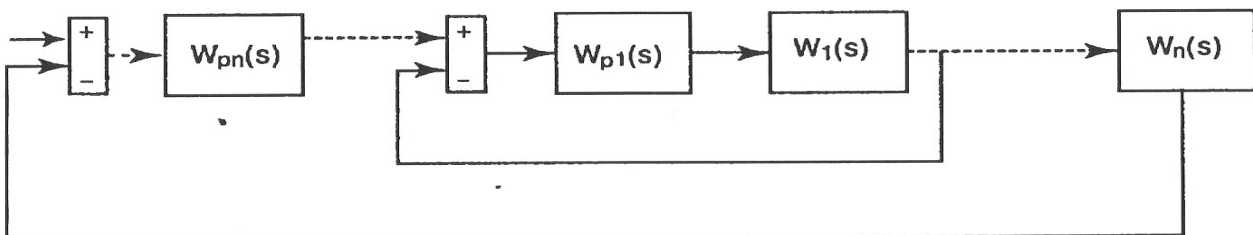
- 1) регулируемая величина на выходе электропривода (скорость, угол, момент и т.д.) должна по возможности точнее повторять задающий (входной) сигнал;
- 2) регулируемая величина на выходе электропривода по возможности не должна зависеть от возмущающих воздействий на электропривод. Такими возмущающими воздействиями могут быть напряжение питания, температура, момент нагрузки, временные зависимости параметров и т.д.

Поэтому основным принципом управления является принцип обратной связи, позволяющий осуществить контроль качества регулирования по отклонению управляемого параметра от заданного. Каждый элемент функциональной схемы электропривода описывается в статике и динамике передаточной функцией.

В электроприводе в основном применяются три структуры построения:

- 1) с промежуточным суммирующим элементом;
- 2) с независимым регулированием параметров;
- 3) с подчиненным регулированием.

Из всех перечисленных способов построения преимущественное распространение в электроприводах прокатных станов получили системы с подчиненным регулированием. В них на вход каждого регулятора $W_{p1}(s)$ – $W_{pn}(s)$ подается сигнал с предыдущего каскада (рис. 9), соответствующий заданному уровню регулируемой величины, и сигнал с выхода данного каскада, отвечающий фактическому уровню. Важным достоинством данной структуры является возможность простыми средствами осуществить ограничение любой из координат системы. Для этого достаточно ограничить задание данной координаты.



$W_{pn}(s)$ — передаточные функции звеньев системы; *Sum* — сумматор

Рисунок 9. Структура схемы подчиненного электропривода

Передаточная функция регулятора подбирается так, чтобы при включении последовательно с соответствующим звеном системы $W_1(s) \dots W_n(s)$ была скомпенсирована большая постоянная времени.

Если исходная система представляет колебательное звено с передаточной функцией

$W_1(s) = \frac{1}{T^2 \cdot s^2 + 2 \cdot T \cdot \zeta \cdot s + 1}$, то в соответствии с изложенным подходом регулятор должен быть

ПИД-регулятором с передаточной функцией

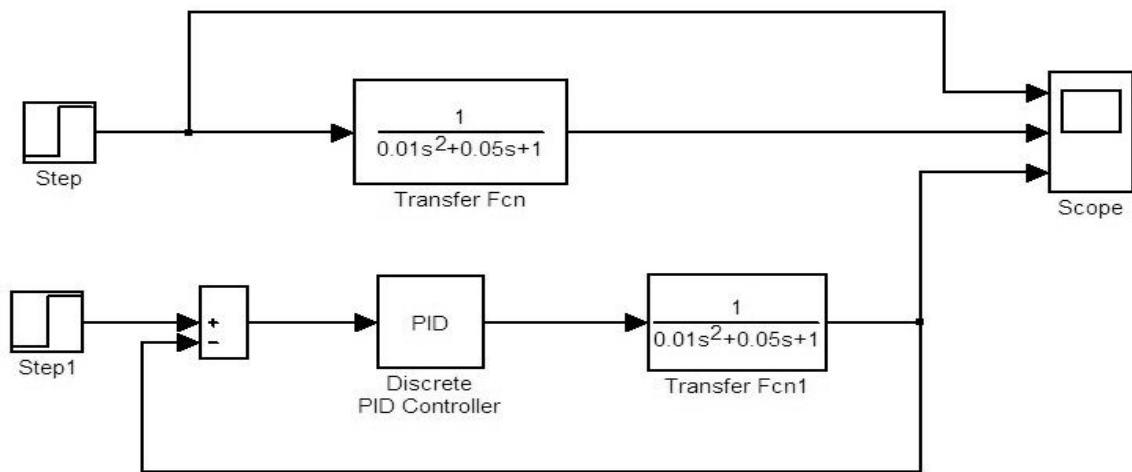
$$W_{PI} = \frac{T^2 \cdot s^2 + 2 \cdot T \cdot \zeta \cdot s + 1}{T_0 \cdot s} = \frac{T^2}{T_0} \cdot s + \frac{2 \cdot T \cdot \zeta}{T_0} + \frac{1}{T_0 \cdot s} = k_D \cdot s + k_{PI} + \frac{k_{II}}{s}.$$

В этом случае передаточные функции разомкнутой и замкнутой системы примут вид:

$$W_{PA3.1} = \frac{1}{T_0 \cdot s};$$

$$W_{3AM.1} = \frac{1}{1 + T_0 \cdot s}.$$

Модель и результаты моделирования для этого случая представлены на рисунках 10, 11.



Step — блок источника сигнала; *Transfer Fcn* — блок интегрирования с передаточной функцией;
Sum — сумматор; *Discrete PID Controller* — пропорционально-интегрально-дифференциальный контроллер;
Scope — экран

Рисунок 10. Модель колебательного звена с регулятором

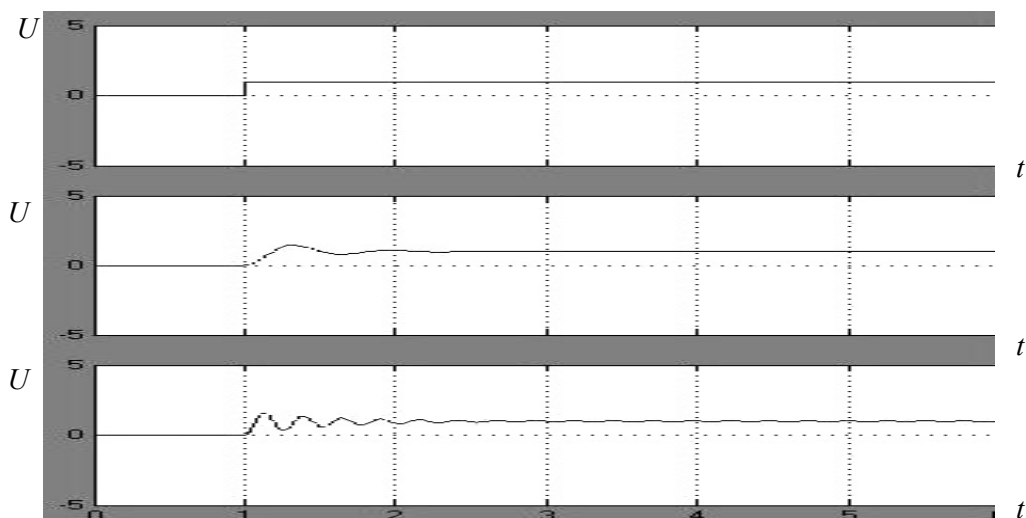


Рисунок 11. Результаты моделирования колебательного звена с регулятором

Таким образом, практически для всех реальных ситуаций первый внутренний контур электропривода с подчиненным управлением можно представлять аperiодическим звеном с достаточно малой постоянной времени.

Перейдем к рассмотрению второго контура. Если исходное звено второго контура является интегрирующим с передаточной функцией $W_2(s) = \frac{1}{T_2 \cdot s}$, то общая передаточная функция первого и ис-

ходного второго звена будет равна $W_{раз2}(s) = \frac{1}{(T_0 \cdot s + 1) \cdot T_2 \cdot s}$ [2].

На основе результатов моделирования можно сделать вывод о непосредственной связи между электрическими параметрами электрооборудования прокатного стана и физическими и химическими процессами, протекающими в самом стане в процессе прокатки стальной полосы, что позволяет контролировать процесс прокатки. Для элементов электропривода прокатного стана существует однозначная связь между видом дефекта и относительных чувствительностей передаточных функций, что позволит сформулировать требования к необходимому диапазону изменения электрических параметров электрооборудования стана, выделить наиболее информативные координаты автоматизированного электропривода, которые характеризуются максимальной чувствительностью к изменению состояния автоматизированного электропривода при дефекте.

Список литературы

- 1 Железнов Ю.Д., Коцарь С.Л., Абиев А.Г. Статические исследования точности тонколистовой прокатки. — М.: Металлургия, 1974. — 240 с.
- 2 Ковчин С.А., Сабинин Ю.А. Теория электропривода. — СПб.: Энергоатомиздат, 1994. — 496 с.

Е.М.Есіркеев

MatLab + SIMULINK бағдарламасы бойынша жұмыс істейтін илек станының электр жабдықтарында жүретін физикалық үдерістердің үлгілерін жасау

Прокаттық өндірістің негізгі мәселесі — прокаттың нақтысын көбейту. Мақалада прокаттық станнның тәуелсіз қозуымен тұрақты тоқты электр қозғауыштың және оның бағыну бақылауы бар басқару жүйесінің қалыптасу процестерінің модельдері Matlab + SIMULINK программасында қарастырылған. Ондай бағдарламада жасалған прокаттық станнның электр жабдығының модельдері жұмыс кезінде орын алатын физикалық процестерін көрнекті түрде көрсетеді. Модельдің шешімдері электр жүйенің кіру және шығу параметрлерінің байланысын орнатады. Осы мағлұматқа байланысты суық прокатка станнның электр жабдығының техникалық диагностика жүйесін құрастыруға болады.

E.M.Esirkeev

Simulation of physical processes of electric rolling mills in the program MatLab+SIMUNK

The main problem of rolling manufacture is the increase of accuracy of a rolling sheet. This article presents a model of processes in the engine of a constant current with independent excitation and control system with the subordinated regulation of rolling mills in the program Matlab+Simulink. The modeling of work of an electric equipment of rolling mills in the program Matlab+SIMULINK allows evidently to see physical processes occurring in an operating time mill. The results of modeling allow to establish relation between entrance and target parameters of electrical system. On the basis of these data it is possible will construct system of diagnostics of an electric equipment of rolling mills.

С.А.Ефименко¹, В.С.Портнов², А.К.Турсунбаева², А.Д.Маусымбаева²

¹ТОО «Корпорация Казахмыс», Жезказган;

²Карагандинский государственный технический университет

Рентгенорадиометрический анализ медных руд фильтрами Росса

Теоретически обоснована методика рентгенорадиометрического опробования медно-цинковых руд Жезказганского месторождения для отбора фильтров Росса. Рассмотренная методика сравнена со стандартным методом. Отмечено, что в 8 раз уменьшилась погрешность измерения гамма-излучения медных аналитических линий. Представлено применение пары фильтров «Никель–алюминий». Сделан вывод, что в результате применения метода повысились метрологические свойства.

Ключевые слова: медно-цинковые руды, фильтры Росса, метрология, методика, рентгенорадиометрический анализ, погрешность измерения.

Дифференциальным фильтрам Росса, несмотря на очевидные преимущества, свойственны и существенные недостатки, как то: зависимость точности рентгенорадиометрического анализа (РРА) от стабильности усилительных свойств энергодисперсного спектрометра; концентрационное вырождение чувствительности; низкая точность РРА в области низких содержаний определяемого элемента.

Известно, что фильтры Росса балансируются на пробе руды, в которой отсутствует определяемый элемент, но представлены все остальные рудные компоненты данного месторождения. Подбором поверхностной плотности фильтров добиваются равенства замеров плотности потока рентгеновской флуоресценции в дифференциальном окне спектрометра, как после поглощающего, так и после пропускающего фильтра.

Аппроксимируя форму линий вторичного спектра кривой Гаусса, это условие можно записать в виде

$$N_p = N_a; \quad (1)$$

$$N_p = \frac{N'_o}{\sigma_p \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(E_i - E_p)^2}{2\sigma_p^2}}; \quad (2)$$

$$N_a = \frac{N''_o}{\sigma_a \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(E_i - E_a)^2}{2\sigma_a^2}}; \quad (3)$$

$$N'_o = \frac{K_p M_p N_o}{\mu_o^p - \mu_p} \cdot (e^{-\mu_p m_p} - e^{-\mu_o^p m_p}); \quad (4)$$

$$N''_o = \frac{K_a M_a N_o}{\mu_o^a - \mu_a} \cdot (e^{-\mu_a m_a} - e^{-\mu_o^a m_a}); \quad (5)$$

где N_p и N_a — плотность потоков гамма-излучения аналитической линии определяемого элемента для пропускающего (p) и поглощающего (a) фильтров соответственно; N_o — плотность потока излучения от пробы, падающего на фильтры; K_p , M_p , K_a , M_a — коэффициенты, зависящие от геометрических условий измерений и атомных констант, соответственно для пропускающего и поглощающего фильтров; m_p , m_a , μ_p , μ_a — поверхностные плотности и массовые коэффициенты ослабления для аналитических линий пропускающего и поглощающего фильтров соответственно; μ_o^p , μ_o^a — массовые коэффициенты ослабления пропускающего и поглощающего фильтров для излучения «пустой» пробы; $\sigma = RE/\sqrt{8 \ln 2}$ — параметр разброса линий приборного спектра с энергией E ; E_p , E_a , E_i — энергии аналитических линий фильтров и анализируемого элемента.

Из условий балансировки фильтров (2) и (3) видно, что измерение плотности потока аналитической линии определяемого элемента производится на склонах пиков собственных линий фильтров, что указывает на значительную зависимость результатов анализа от стабильности рабочих характеристик аппаратуры вообще, и на низких концентрациях определяемого элемента в особенности. Для оценки этой погрешности, дифференцируя уравнения (2) и (3) по dE , предположив, что параметр разброса линий σ не меняется при смещении линий (пиков) на величину dE , получим:

$$dN_p = N_p \cdot \frac{(E_i - E_p)}{\sigma_p^2} dE_p; \quad (6)$$

$$dN_a = N_a \cdot \left(\frac{E_i - E_a}{\sigma_a^2} \right) \cdot dE_a. \quad (7)$$

Полагая, что для линий фильтров $\sigma_p = \sigma_a = \sigma$, а величина смещения линий в обоих случаях одинакова $dE_p = dE_a = dE$, с учетом условия (1) получим:

$$dN_a = \left(\frac{E_i - E_a}{E_i - E_p} \right) \cdot dN_p. \quad (8)$$

Из выражения (8) очевидно, что смещение dN_a для линии поглощающего фильтра в точке $E = E_i$ в $(E_i - E_a) / (E_i - E_p)$ раз превышает смещение dN_p для линии пропускающего фильтра в той же точке, причем абсолютное смещение пиков, как следует из (7) и (8), прямо пропорционально интенсивности данных линий, энергетическому расстоянию между линиями фильтра и определяемого элемента, величине энергетического смещения dE (аппаратурной нестабильности) и обратно пропорционально величине амплитудного разрешения детектора. Для снижения влияния аппаратурной нестабильности следует увеличивать величину разрешения детектора, что неминуемо приведет к ухудшению чувствительности ПРА.

Для повышения точности выделения аналитической линии анализируемого элемента на фоне аналитической линии мешающего элемента с близким (соседним), но обязательно большим, атомным номером, при низких содержаниях анализируемого элемента в пробе авторами предложена новая методика, по которой анализ на медь порошковой пробы медно-цинковой руды осуществляется в следующей последовательности: производится замер флуоресцентного излучения от пробы, прошедшего через «пропускающий» никелевый фильтр (рис. 1а); затем выполняется замер флуоресцентного излучения от пробы, прошедшего через «поглощающий» алюминиевый фильтр ($K\alpha$ -линия фильтра полностью разделяется детектором с $K\alpha$ -линией меди), и от мишени из никеля (рис. 1б). По разностному спектру можно судить о содержании меди в анализируемой пробе.

При проведении работ использовалась измерительная установка РРК-103 «Поиск» с датчиком БВД-П. Детектор — пропорциональный счетчик с ксеноновым наполнением СИ-13Р и разрешением в диапазоне энергий от 7 до 10 кэВ порядка 17%. Радионуклид — кадмий-109. Прежде чем рассматривать технологию балансировки предлагаемой пары фильтров Росса, остановимся на некоторых аспектах балансировки «классической» пары фильтров на медь в присутствии цинка: никель (пропускающий) — кобальт (поглощающий):

1. Поверхностную плотность никелевого фильтра $m(\text{Ni})$ выбирают из условия ослабления этим фильтром потока рентгеновской флуоресценции линии $\text{Cu } K\alpha$ примерно в два раза:

$$N_{\text{Cu}}^{\text{Ni}} = N_{\text{Cu}} \cdot e^{-\mu_{\text{Cu}}^{\text{Ni}} m(\text{Ni})} = 0,5 N_{\text{Cu}}, \quad (9)$$

где $N_{\text{Cu}}, N_{\text{Cu}}^{\text{Ni}}$ — плотность потока рентгеновской флуоресценции линии $\text{Cu } K\alpha$ до и после никелевого фильтра; $\mu_{\text{Cu}}^{\text{Ni}}$ — массовый коэффициент ослабления линии $\text{Cu } K\alpha$ никелевым фильтром, равный $48,5 \text{ см}^2/\text{г}$.

Из условия (9) находим $m(\text{Ni}) = \ln 2 / \mu_{\text{Cu}}^{\text{Ni}} = 0,0143 \text{ г}/\text{см}^2$.

2. Находим степень ослабления никелевым фильтром потока рентгеновской флуоресценции линии $\text{Zn } K\alpha$ мешающего элемента

$$K_{\text{Zn}}^{\text{Ni}} = N_{\text{Zn}} / N_{\text{Zn}}^{\text{Ni}} = N_{\text{Zn}} / N_{\text{Zn}} \cdot e^{-\mu_{\text{Zn}}^{\text{Ni}} m(\text{Ni})} = e^{\mu_{\text{Zn}}^{\text{Ni}} m(\text{Ni})} \approx 80 \text{ раз},$$

где $N_{\text{Zn}}, N_{\text{Zn}}^{\text{Ni}}$ — плотность потока линии $\text{Zn } K\alpha$ до и после никелевого фильтра; $\mu_{\text{Zn}}^{\text{Ni}}$ — массовый коэффициент ослабления линии $\text{Zn } K\alpha$ в никелевом фильтре, равный $306 \text{ см}^2/\text{г}$.

3. Находим поверхностную плотность кобальтового фильтра $m(\text{Co})$ при балансировке фильтров по линии $\text{As } K\alpha$, для чего добьемся равенства потоков излучения этой линии, прошедшей как через никелевый, так и через кобальтовый фильтры:

$$N_{\text{As}}^{\text{Ni}} = N_{\text{As}}^{\text{Co}}; \quad (10)$$

$$N_{\text{As}}^{\text{Ni}} = N_{\text{As}} \cdot e^{-\mu_{\text{As}}^{\text{Ni}} m(\text{Ni})}; \quad (11)$$

$$N_{\text{As}}^{\text{Co}} = N_{\text{As}} \cdot e^{-\mu_{\text{As}}^{\text{Co}} m(\text{Co})}, \quad (12)$$

где $N_{As}, N_{As}^{Ni}, N_{As}^{Co}$ — плотность потока линии $AsK\alpha$ до и после прохождения никелевого и кобальтового фильтров; $\mu_{As}^{Ni}, \mu_{As}^{Co}$ — массовые коэффициенты поглощения линии $AsK\alpha$ в никелевом и кобальтовом фильтрах (равны соответственно 180 и 165 $см^2/г$).

$$m(Co) = N_{As}^{Ni} \cdot m(Ni) / N_{As}^{Co} = 0,0156 \text{ г/см}^2.$$

4. Определим степень ослабления линии $CuK\alpha$ при $\mu_{Cu}^{Co} = 338 \text{ см}^2/г$

$$K_{Cu}^{Co} = \frac{N_{Cu}}{N_{Cu}^{Co}} = \frac{N_{Cu}}{N_{Cu} \cdot e^{-\mu_{Cu}^{Co} m(Co)}} = e^{\mu_{Cu}^{Co} m(Co)} = 195 \text{ раз.}$$

В режиме измерений с амплитудной селекцией импульсов порядок балансировки дифференциальных фильтров аналогичен описанному выше. Разница лишь в том, что измерительный канал анализатора настраивается на максимум линии $AsK\alpha$. При этом разница замеров с фильтрами при переводе анализатора в рабочий режим (настройка на максимум фотопика линии $CuK\alpha$) согласно теории должна оставаться постоянной и отличной от нуля при промере пробы, содержащей цинк. Однако из-за временной нестабильности аппаратуры эти условия не выполняются, так как «полоса вырезания» анализатора скользит по склонам собственных фотопиков фильтров, которые сдвинуты относительно друг друга [1].

Именно это обстоятельство является основной причиной значительных погрешностей РРА в области низких содержаний определяемых элементов.

Для устранения этого обстоятельства авторами предлагается к применению:

1) другая, отличная от «классической», пара дифференциальных фильтров Росса: алюминий (пропускающий) — никель (поглощающий);

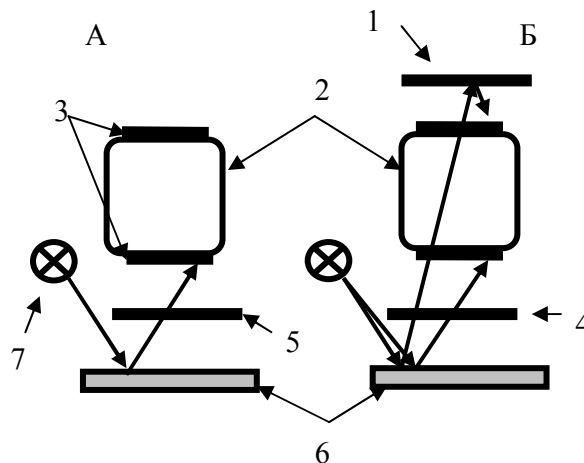
2) дополнительная никелевая мишень, устанавливаемая над вторым окном детектора СИ-13Р тогда, когда под первым окном детектора находится алюминиевый фильтр (рис. 1).

Для пары фильтров «никель–алюминий» параметры балансировки, рассчитанные по методике, приведенной выше, следующие:

а) поверхностные плотности фильтров: $m(Ni) = 0,0143 \text{ г/см}^2$; $m(Al) = 0,1082 \text{ г/см}^2$;

б) коэффициенты ослабления линии $ZnK\alpha$ фильтрами: никелевым — 80 раз, алюминиевым ($\mu_{Zn}^{Al} = 41,5 \text{ см}^2/г$) — 89 раз;

в) коэффициенты ослабления линии $CuK\alpha$ фильтрами: кобальтовым — 195 раз, алюминиевым ($\mu_{Cu}^{Al} = 50,7 \text{ см}^2/г$) — 241 раз.



1 — никелевая мишень; 2 — пропорциональный детектор излучений; 3 — входные окна детектора; 4 — алюминиевый фильтр; 5 — никелевый фильтр; 6 — проба; 7 — радионуклид кадмий-109

Рисунок 1. Принцип возбуждения и регистрации потоков излучений в модифицированном варианте дифференциальных фильтров Росса. Фазы работы фильтров: первая (А) и вторая (Б)

Таким образом, пара фильтров «никель–алюминий» имеет практически те же показатели ослабления линий $CuK\alpha$ и $ZnK\alpha$, что и классическая пара фильтров «никель–кобальт».

«Никелевая» мишень используется для компенсации влияния на результаты РРА фотопика собственной рентгеновской флуоресценции никелевого фильтра. С ее помощью во вторичном гамма-спектре формируется фотопик никеля, идентичный тому, что формируется от никелевого фильтра. Источником возбуждающего излучения может быть либо рассеянное излучение основного радионуклида кадмий-109, либо прямое излучение от дополнительного радионуклида кадмий-109, установленного со стороны второго окна детектора. С помощью такого методического приема удалось изъять из спектра фотопик линии $NiK\alpha$ от никелевого фильтра и тем самым значительно повысить чувствительность РРА на медь.

Для расчета поверхностной плотности никелевой мишени воспользуемся следующей схемой:

1) плотность потока рентгеновской флуоресценции никелевого фильтра N_{Ni}^{ϕ} при возбуждении фильтра рассеянным излучением радионуклида с плотностью потока N_s определим из выражения

$$N_{Ni}^{\phi} = \frac{K_1 N_s}{\mu_{Ni}^{Ni} - \mu_s^{Ni}} \cdot \left(e^{-\mu_s^{Ni} n(Ni)} - e^{-\mu_{Ni}^{Ni} m(Ni)} \right), \quad (13)$$

где N_{Ni}^{Ni}, N_s^{Ni} — массовые коэффициенты ослабления линии $NiK\alpha$ и рассеянного излучения радионуклида в никелевом фильтре;

2) плотность потока рентгеновской флуоресценции никелевой мишени N_{Ni}^m , возбуждаемой рассеянным излучением радионуклида после прохождения алюминиевого фильтра и газа-наполнителя детектора, определим из выражения

$$N_{Ni}^m = \frac{K_2 N_s'}{\mu_{Ni}^{Ni} - \mu_s^{Ni}} \cdot \left[1 - e^{-(\mu_{Ni}^{Ni} + \mu_s^{Ni}) m_{Ni}^m} \right]; \quad (14)$$

$$N_s' = N_s \cdot e^{-\mu_s^{Al} m^{Al}} \cdot e^{-\mu_s^z \rho_z d}, \quad (15)$$

где μ_s^{Al}, μ_s^z — массовые коэффициенты ослабления рассеянного излучения радионуклида в алюминиевом фильтре и газе-наполнителе детектора; K_1 и K_2 — постоянные коэффициенты, зависящие от атомных констант и геометрии измерений; ρ_z — условная плотность газа-наполнителя; d — диаметр детектора (см);

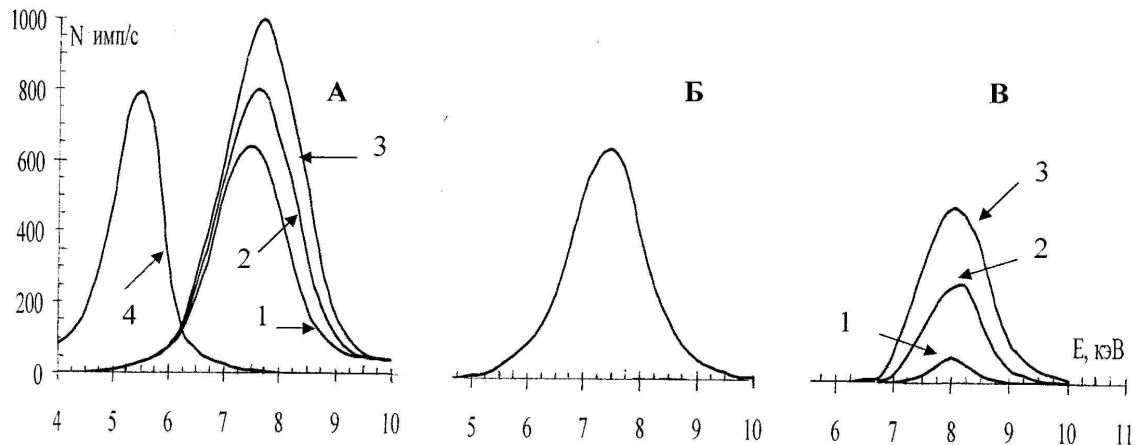
3) поверхностную плотность никелевой мишени находим из выражения

$$N_{Ni}^m = \frac{1}{\mu_s^{Ni} + \mu_{Ni}^{Nu}} \cdot \ln \left[1 - \frac{(\mu_s^{Ni} \mu_{Ni}^{Ni}) K_1 N_s \cdot \left(e^{-\mu_s^{Ni} m(Ni)} - e^{-\mu_{Ni}^{Ni} m(Ni)} \right)}{\left(\mu_s^{Ni} - \mu_{Ni}^{Ni} K_2 N_s e^{-\mu_s^{Al} m^{Al}} \cdot e^{-\mu_s^z \rho_z d} \right)} \right]; \quad (16)$$

4) подставляя в (16) численные значения величин: $d = 3,5$ см; $\rho(\text{аргон}) = 0,001784$ г/см³; $\mu_s^{Al}, \mu_s^{Ni}, \mu_{Ni}^{Nu}, \mu_s^z = \mu_s^{Ar}$ равны соответственно: 2,95; 28,3; 59,1 и 7,52 см²/г при условии, что $N_{Ni}^{\phi} = N_{Ni}^m$ и $K_1 = K_2$, получим значение величины $m_{Ni}^m = 0,0384$ г/см² (аналогичные расчеты можно сделать для детектора с ксеноновым и криптоновым газом-наполнителем).

На рисунке 2 приведены фрагменты спектров вторичного излучения проб медной руды после прохождения никелевого (а) и алюминиевого плюс никелевая мишень (б) фильтров, а также разностный спектр (в). Спектр после алюминиевого фильтра плюс никелевая мишень представлен фотопиком линии $NiK\alpha$ от никелевой мишени. Амплитуда пика постоянна и не зависит от концентрации меди в пробе. На этот фотопик практически не накладывается фотопик линии $CuK\alpha$, целиком поглощаемой на алюминиевом фильтре. В энергетический интервал (7,75–8,35 кэВ), вырезаемый из вторичного спектра дифференциальным окном амплитудного анализатора импульсов, не попадает и приведенный на спектре фотопик линии $StK\alpha$ (рис. 1а). Следует ожидать, что в указанный интервал не попадут и линии элементов с $Z < 28$.

В случае использования классической пары фильтров «никель–кобальт» измерения рентгеновской флуоресценции меди производят на правых склонах фотопиков линий $NiK\alpha$ и $CoK\alpha$. При этом одновременность измерений с фильтрами является одной из причин существенных ошибок определений содержания меди в случае, если спектры сдвигаются вследствие флуктуаций, либо напряжения питающей сети, либо коэффициента передачи усилительного тракта аппаратуры, либо чрезмерной импульсной загрузки детектора.



1 — 0,10 % Cu; 2 — 1,6 % Cu; 3 — 3,50 % Cu; 4 — CrK α

Рисунок 2. Спектры РРА проб медной руды с фильтрами Росса по предложенному способу

Оценка стабильности аналитических параметров у обеих методик реализации РРА с помощью дифференциальных фильтров Росса показала преимущество предложенной методики, разброс параметра $\Delta N_{\text{Cu}} = N_{\text{Ni}} - N_{\text{Al+Ni}}$ составил всего 1,7 % против 12,1 % в традиционной методике.

Изложенная выше методика в течение ряда лет успешно апробирована на медно-цинковых рудах Жезказганского месторождения, причем метрологические характеристики РРА оказались значительно лучше, чем при использовании классической пары дифференциальных фильтров Росса.

Список литературы

- 1 Бахтияров А.В. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии и геохимии. — Л.: Недра, 1985. — 257 с. УДК 669.213:66.094.6

С.А.Ефименко, В.С.Портнов, Ә.К.Тұрсынбаева, А.Д.Маусымбаева

Росс сүзгілері арқылы мыс кендерінің рентгенорадиометрикалық талдауы

Жезқазған кен орны мыс-мырышты кендерді рентгенорадиометриялық талдау үшін Росс сүзгілерін сұрыптау әдістемесі теориялық негізделінді. Сүзгілер стандартты әдістемемен салыстырылды. Мыстың аналитикалық сызықтарының гамма-сәулелену ағындық өлшеу қателігі 8 есе кеміді. «Никель–алюминий» фильтрлерін буындық қолдануы ұсынылды. Бұл әдістен кейін метрологиялық көрсеткіштер әлдеқайда өсті.

S.A.Efimenko, V.S.Portnov, A.K.Tursunbaeva, A.D. Maussymbayeva

X-ray radiometric analysis of copper ores with Ross filters

Theoretically substantiated method of selection of Ross filters for X-ray radiometric analysis of copper-zinc ore deposit Zhezkazgan. Compared with the standard method. While the measurement error of gamma-ray analysis of copper lines has decreased by 8 times. Proposed to use a pair of filters «nickel-aluminum». After that method increased metrological characteristics.

Уплотнение частиц при кучном выщелачивании

Рассмотрены результаты пор твердого тела, состоящие из одного размера сферических частиц. Приведены вопросы уплотнения частиц мелкой фракцией. Показано несколько способов уплотнения. Получаемая модель при кучном выщелачивании металлов сравнивается с точным состоянием. Для каждого конкретного вида изучены технологические показатели.

Ключевые слова: твердое тело, поры, мелкие фракции, выщелачивание, уплотнение, сферические частицы.

Введение

Успешное применение кучного выщелачивания предполагает высокую проницаемость руд после того, как они будут подвергнуты дроблению или другим видам обработки и сложены в штабель; при этом естественно ставится цель: обеспечить равномерное распределение цианидного выщелачивающего раствора при его просачивании через штабель.

Золото-серебряные руды отличаются чрезмерно высоким содержанием глинистой составляющей или тонких фракций, образовавшихся во время дробления. Для этого типа руд очень трудно обеспечить высокие показатели кучного выщелачивания. Наличие в исходном материале чрезмерного количества тонкого шлама (обычно это фракция 50 микрон или с размером частиц менее 270 меш на сите Тайлера) замедляет просачивание через штабель выщелачивающего раствора, вызывает каналообразование либо приводит к формированию внутри штабеля нетронутых или невыщелоченных зон. Это может приводить к неоправданному замедлению выщелачивания и существенному снижению извлекаемости металлов. Даже может дойти до того, что глины и шламы полностью «запечатывают» штабель, и раствор будет стекать по краям рудной кучи, не проникая в ее глубину [1].

Проблема кучного выщелачивания руд, содержащих тонкую фракцию, может быть еще более осложнена при формировании и подготовке штабеля к обработке, поскольку во время этих операций может происходить естественная сортировка, разделение грубого и более мелко измельченного материала. Это явление приводит к концентрации тонкой фракции в центральной части отдельных рудных куч (загрузок) и одновременной концентрации более крупных рудных обломков в нижней прибортовой части и в основании куч.

В настоящей работе мы рассмотрим физические основы уплотнения частиц и применимость полученных результатов к кучному выщелачиванию металлов.

Уплотнение твердых частиц

Уплотнение (прессование) частиц можно определить как выбор размеров пор, их формы и пропорций в зернистом материале, который бы обеспечивал получение системы с нужной пористостью.

Пористость $\bar{\epsilon}$ слоя равна доли от общего пространства, выраженной в процентах, которая не занята зернистым материалом.

Объемная (или кажущаяся) плотность равна массе частиц в единице объема слоя. Кажущийся объем V_a равен объему слоя, занятому единичным истинным объемом частиц. Коэффициент уплотнения равен части (доли) полного объема слоя V_e , занятой зернистым материалом V_p , т.е. равен отношению V_p/V_e . Коэффициент пористости (или относительная пористость) равен $1 - V_p/V_e$.

Эффективность уплотнения $P\bar{\epsilon}$ равна доле имеющегося объема с порами (скажем, слоя, образованного грубыми частицами), которая занята поступающим твердым материалом (обычно более мелкими фракциями). Она совпадает с коэффициентом уплотнения P_f , когда имеющийся объем равен объему контейнера, а твердый материал является первой компонентой.

Поры в теле могут быть различных типов. Обычно называют шесть типов пор: (1) закрытые, или герметичные, поры, (2) каналные поры, соединяющие отдельные поры, (3) тупиковые поры, (4) петлевые поры, (5) ячеистые поры и (6) микропоры. Помимо перечисленных, могут существовать и другие виды пор, которые непрерывно проходят от одной поверхности тела к другой, возможно, по извилистому пути.

В зависимости от метода определения, основанного на поглощении соответствующей жидкости, все поры были разделены на два типа: (а) закрытые и (б) открытые. Количество жидкости, поглощенное в данном объеме, будет соответствовать открытой пористости, которую принято называть «кажущейся пористостью».

Разность между «истинной пористостью» (которую рассчитывают по плотности материала) и «кажущейся пористостью» называют «скрытой пористостью».

Теоретически, в слое, состоящем из одномерных сферических частиц, средний размер поры будет равен размеру пустого пространства, образованного при однослойном шахматном расположении трех сфер. Радиус поры

$$r = 0,154R, \quad (1)$$

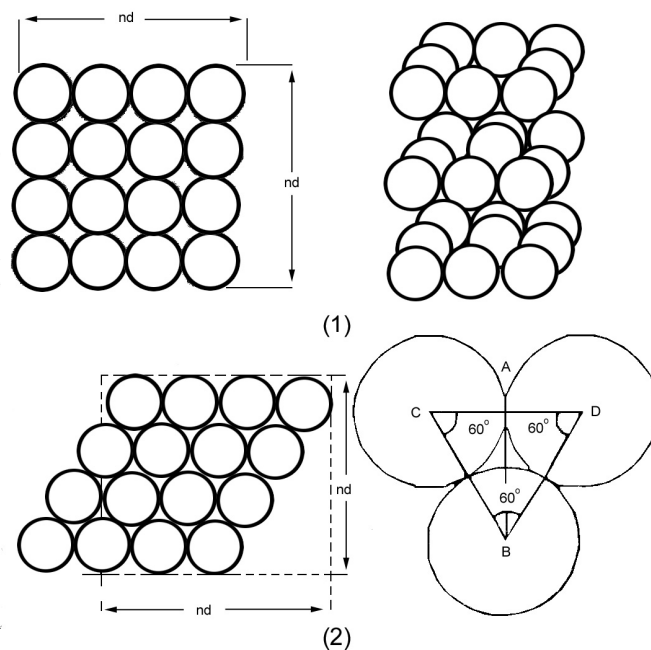
где r — радиус поры; R — радиус частицы.

Распределение частиц по размерам определяют с помощью микроскопа, ртутными порозиметрами и газоабсорбционными методами.

Теоретическое уплотнение сферических частиц можно установить исходя из тех же геометрических соображений, которые используются для определения упаковки ионов в кристаллической решетке [2, 3].

Сферические частицы одинакового размера могут упаковываться в пяти различных модификациях: (1) кубической, (2) одиночной шахматной, (3) двойной шахматной, (4) пирамидальной и (5) тетраэдрической. Упаковка сферических одномерных частиц не зависит от их диаметров.

(1) Кубическая упаковка (рис. 1а). Каждая сфера соприкасается с четырьмя другими сферами в одном слое. Все слои идентичны. Самая высокая точка сферы нижнего слоя контактирует с самой нижней точкой верхнего слоя. Пусть в одном слое n сфер расположено вдоль оси x и n сфер вдоль оси y . Таким образом, площадь поверхности одного слоя будет равна $(nd)^2$ единицам, где d — диаметр сферы; n таких слоев накладываются друг на друга, удовлетворяя условию кубической упаковки. Теоретический объем пор при кубической упаковке составляет 47,64 %.



1 — кубическая; 2 — одиночная шахматная

Рисунок 1. Упаковка сферических частиц

(2) Одиночная шахматная упаковка (рис. 1б). Каждая сфера соприкасается с шестью сферами в одном и том же слое. Межцентровое расстояние двух последовательных сфер, расположенных на оси y , равно $(\sqrt{3}d/2)$. Следовательно, число сфер, которое может уложиться вдоль оси y , будет равно $(2n/\sqrt{3})$. Число сфер вдоль оси x останется тем же, т.е. равным n .

Образующиеся таким образом n слоев накладываются друг на друга точно так же, как при кубической упаковке, что приводит к одиночной шахматной упаковке. Объем пор в этом случае равен 39,55 %.

(3) Двойная шахматная упаковка (рис. 2). При такой упаковке каждая сфера соприкасается с шестью сферами в данном слое, но сфера в верхнем слое располагается в углублении между двумя соседними сферами в нижнем слое.

Здесь число сфер вдоль оси x равно n , однако число сфер вдоль каждой из осей y и z равно $(2n/\sqrt{3})$. Объем пор равен 30,16 %.

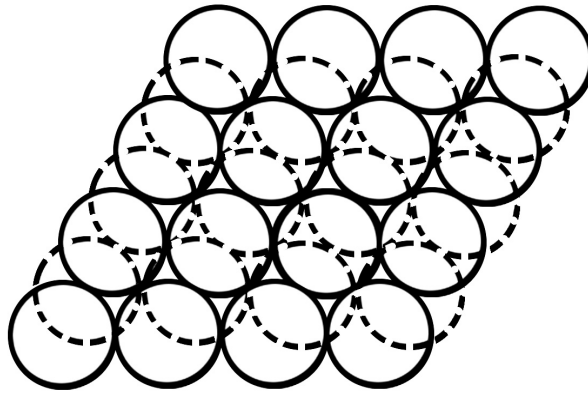
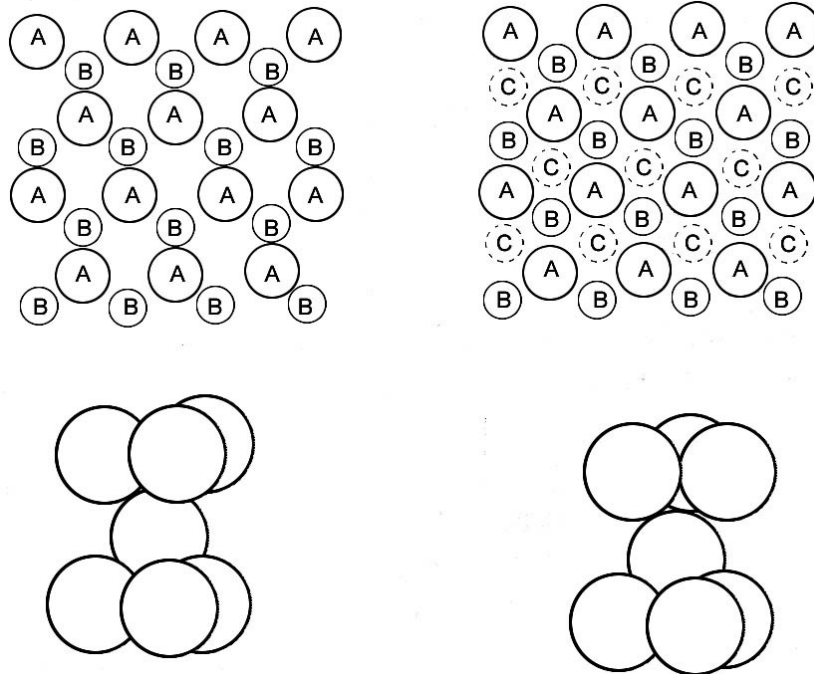


Рисунок 2. Двойная шахматная упаковка сферических частиц

(4) Пирамидальная и (5) тетраэдрическая упаковки (рис. 3). Здесь образуются слои из плотно упакованных сфер, т.е. слои, в которых каждая сфера соприкасается с шестью другими сферами в данном слое. Обозначим последовательные слои буквами А, В, С и т.д.



1 — гексагональная плотная упаковка; 2 — кубическая плотная упаковка

Рисунок 3. Плотная упаковка сферических частиц

Второй слой (В) из плотно упакованных сфер может располагаться на первом слое (А) таким образом, что каждая сфера слоя (В) будет лежать в углублении между тремя соседними сферами нижнего слоя (А). Тогда третий слой (С), схожий во всех отношениях с первыми двумя слоями, может

располагаться на втором слое так, что каждая сфера слоя (С) будет лежать в углублении между тремя соседними сферами слоя (В). Этого можно достичь двумя путями:

– (а) слой (С) может формироваться непосредственно на слое (А) так, что каждый третий слой структуры будет идентичен первому. Последовательность АВАВАВ... и т.д. полностью характеризует структуру, в которой А указывает расположение сфер в одном слое, а В — расположение сфер в слое непосредственно над ним. Такая упаковка называется «тетраэдрической, или гексагональной плотной, упаковкой»;

– (б) слой (С) может располагаться в совершенно новом положении, так что слои А, В и С уже не схожи друг с другом. Это дает последовательность АВС, АВС, АВС... и т.д. Такой порядок приводит к образованию пирамиды, и упаковка называется «пирамидальной, или кубической плотной, упаковкой».

В обеих плотноупакованных структурах каждая сфера контактирует с двенадцатью другими сферами, шесть из которых находится в одной плоскости, и по три — в соседних слоях сверху и снизу. Они отличаются только расположением сфер в этих соседних слоях. Объем пор в этих структурах равен 25,95 %. Данные для пяти видов упаковки одномерных сферических частиц приведены в таблице. Следует упомянуть, что, независимо от вида упаковки, суммарная пористость не зависит от диаметра частиц.

Т а б л и ц а

Систематическая упаковка одномерных сферических частиц

№ п/п	Вид упаковки	Объем пор	Координационное число
1	Кубическая	47,64	6
2	Одиночная шахматная	39,55	8
3	Двойная шахматная	30,16	10
4	Пирамидальная	25,95	12
5	Тетраэдрическая	25,95	12

Из таблицы видно, что у сферических одномерных частиц пористость и координационное число тесно взаимосвязаны. Как следует из таблицы, эта взаимосвязь действительно существует только при упорядоченной упаковке. Имеется возможность достижения некоторого промежуточного значения пористости между любыми двумя ближайшими видами упаковки путем правильного расположения частиц без изменения координационного числа. Например, когда координационное число равно шести (как в случае упорядоченной кубической упаковки), пористость слоя может варьировать от 47,6 до 39,5 %. Таким образом, корреляция между координационным числом и пористостью оказывается не столь жесткой, как это обычно принято считать. К такому же выводу пришли и другие авторы, которые показали наличие локальных изменений суммарной пористости в пределах одного слоя.

Выше было показано, что упаковка (уплотнение) одномерных сферических частиц не позволяет получить совершенно беспористый слой, минимальная пористость в такой системе, обусловленная упаковкой, может быть не ниже примерно 26 %. Чтобы обеспечить дальнейшее уменьшение пористости, в матрицу из грубых частиц нужно ввести более мелкие частицы определенных размеров. Введение таких мелких частиц в объем пор грубых частиц может осуществляться двумя способами, которые схематически иллюстрируются рисунком 4.

Согласно первому варианту упаковки (рис. 4) пустоты между первичными частицами заполняются вторичными частицами, размер которых равен размеру этих пустот, так что меньшие вторичные частицы соприкасаются со всеми окружающими их первичными частицами. Объемы пор, остающиеся после введения вторичных частиц, заполняются еще меньшими третичными частицами этим же методом и т.д., вплоть до практически полного заполнения всех пор. Такой способ заполнения пор вплоть до пятеричных частиц дает остаточную пористость уплотненного слоя, примерно равную 14,9 %. Однако подобный способ уплотнения частиц редко применяется на практике, возможно, вследствие пассивности частиц меньшего размера при заполнении ими пор в жесткой структуре слоя.

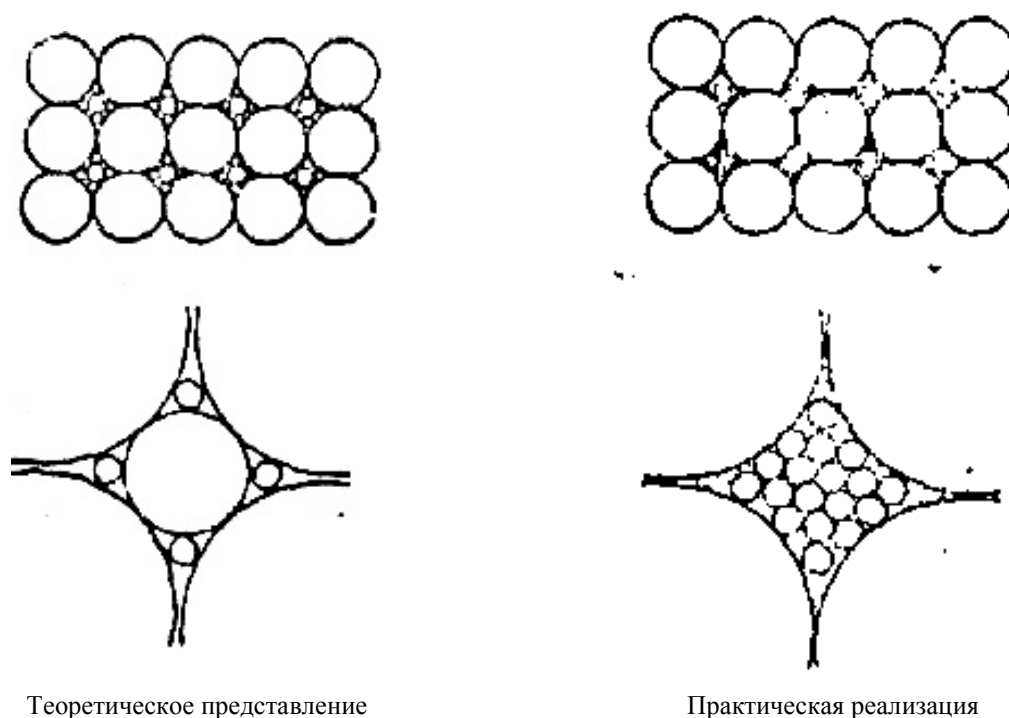


Рисунок 4. Многокомпонентная упаковка сферических частиц различных размеров

Второй способ уплотнения, основанный на использовании двух частиц со сравнительно большим отношением диаметров, очевидно, легче реализуется в практических ситуациях, так как мелкая фракция свободно проходит через сетку из грубых частиц. Из рисунка 4 видно, что вторичные частицы могут свободно заполнять все пустоты благодаря тому, что они уплотняются точно так же, как и первичные частицы. Другими словами, объем пор первичных частиц будет заполняться вторичными частицами с остаточной пористостью, приблизительно равной 26 %. Этот вид уплотнения известен как «заполнение зазоров», или «прерывистое заполнение». Поэтому, теоретически, оптимальное количество второй компоненты с очень большим отношением диаметров может уменьшить пористость получающегося уплотненного слоя от 26 до $26 \cdot 0,26 = 6,76$ %.

Окомковывание руд при кучном выщелачивании

На рисунке 4 показана реальная ситуация, возникающая в штабелях руд, подготовленных для кучного выщелачивания.

Когда отдельные загрузочные кучи внутри штабеля подвергаются выравниванию перед установкой разбрызгивающей раствор системы, происходит дальнейшее разделение материала, поскольку тонкая фракция избирательно просыпается вниз. Результатом такого рода сегрегации материала является появление отдельных участков или зон с различной проницаемостью. Вследствие этого выщелачивающие растворы начинают просачиваться вниз преимущественно через участки, сложенные грубозернистым материалом, минуя, либо лишь слегка увлажняя участки, сложенные тонкой фракцией или шламами. Эффективное использование кучного выщелачивания при освоении ресурсов низкосортных золото-серебряных руд, находящихся на грани кондиционности, потребовало внедрения новых методов, способных обеспечить более равномерное распределение рудного материала по крупности в пределах штабеля при его формировании и более надежный контроль за поведением шламов во время выщелачивания.

Предварительное окомкование руд доказало свою эффективность при переработке кучным выщелачиванием низкосортного материала с низкими фильтрационными свойствами. В некоторых случаях схема «окомкование–кучное выщелачивание» представляет собой единственное разумное решение проблемы исходного сырья для переработки. В то же время дробильные комплексы и агломерационные системы достаточно капиталоемки, поэтому они не должны включаться в схему промышленной переработки, если это не является абсолютно необходимым [1].

Заключение

Из приведенного анализа физических основ уплотнения следует, что прежде чем запускать агломерационное производство в коммерческих масштабах, самым внимательным образом должны быть изучены технологические параметры окомкования для каждого конкретного вида сырья.

Список литературы

- 1 Кучное выщелачивание золота. Зарубежный опыт и перспективы развития: Справоч. / Под ред. В.В.Караганова и Б.С.Ужкенова. — Алматы, 2002. — 260 с.
- 2 Шаскольская М.П. Кристаллография. — М.: Высш. шк., 1974. — 268 с.
- 3 Васильев А.Н. Физическая кристаллография. — М.: Высш. шк., 1978. — 196 с.

Ә.К.Тұрсынбаева

Үйінді сілтілеу кезіндегі бөліктердің тығыздалынуы

Өлшемі бірдей сфералық бөліктерден тұратын қатты денелердің кеуектігін қарастыру нәтижелері берілген. Тығыздалған бөлшектерді ұсақ фракциямен толтыру сұрақтары талқыланған. Бірнеше тығыздалу әдістері келтірілген. Металдардың үйінді сілтілеу кезінде пайда болатын модель шын жағдаймен салыстырылды. Әр шикізат үшін технологиялық көрсеткіштер зерттелді.

A.K.Tursunbayeva

Compaction of particles in the heap leaching

The brought results of consideration to porosity hard body, consisting of one size of the spherical particles. They are discussed questions of the filling the times small faction compacting particles. Article shows several ways to seal. The model is compared with the real situation arising at compact leaching of metals. For each material studied technological characteristics.

УДК 537.533.34

В.Е.Гладков, Е.Л.Ли

*Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова***Повышение эффективности обучения физике на основе использования элементов современных образовательных технологий на примере темы «Постоянный электрический ток»**

Рассмотрена возможность применения нескольких элементов образовательных технологий для обеспечения личностно-ориентированного развивающего обучения. Технологический подход рассмотрен на примере изучения темы «Постоянный электрический ток» в восьмом классе. Используются опорные конспекты, уровневые учебные задания, обобщающие задания, элементы компьютерных технологий. Установлено положительное влияние модифицированной технологии обучения на успеваемость учеников.

Ключевые слова: компьютерные технологии, личностно-ориентированное обучение, опорный конспект, обобщающие задания, модифицированная технология.

Решение задач образования и развития школьников, их воспитание и подготовка к труду возможны лишь при усвоении ими основ физической науки.

На это направлена реализация принципа генерализации учебного материала — такого его отбора и такой методики преподавания, при которых главное внимание обращено на изучение основных факторов, понятий, законов, теорий и методов физической науки, на обобщение широкого круга физических явлений на основе теории. Отсюда вытекает повышение требований к умению учащихся применять основные исходные положения науки для самостоятельного объяснения физических явлений, результатов эксперимента, действия приборов и установок [1].

В каждом разделе курса выделен основной материал, что позволяет добиваться глубокого и прочного его усвоения, не загружая память учащихся множеством частных факторов.

Разборка технологии обучения требует от учителя глубокой проработки материала на основе различных источников литературы, выделения в соответствии с учебной программой существенных признаков и формирования минимального теоретического и практического материала. Этот материал средствами выбранной образовательной технологии обучения или элементов разных образовательных технологий, объединенных в модифицированную технологию, должен быть доведен до понимания и усвоения учащимися.

Нами рассматривается возможность применения элементов нескольких образовательных технологий для обеспечения личностно-ориентированного развивающего обучения. Технологический подход рассматривается на примере изучения темы «Постоянный электрический ток» в восьмом классе. Используются следующие элементы образовательных технологий: опорные конспекты, уровневые учебные задания, обобщающие задания и элементы компьютерных технологий [1].

При формировании структуры технологического процесса обучения все элементы образовательных технологий должны быть логически связаны между собой и подчинены так называемому рабочему инструменту технологии обучения [2].

В качестве рабочего инструмента технологии обучения могут быть выбраны формы наглядности учебного материала, формы или виды организации учебной работы, организация определенной структуры учебного материала, выделение базового уровня и т.д. Определение рабочего инструмента

технологии обучения означает, что все элементы технологического процесса, методики и способы обучения будут подчинены выбранному рабочему инструменту. Степень реализации этой взаимосвязи и будет определять успех предлагаемой модифицированной технологии обучения.

В качестве рабочего инструмента предлагаемой модифицированной технологии обучения нами выбраны опорные конспекты учебного материала. Опорные конспекты в практику обучения введены В.Ф.Шаталовым и в настоящее время являются дидактическими элементами многих образовательных технологий обучения [1].

Рассмотрим модифицированную технологию обучения на основе технологической схемы учебного процесса, представленной на рисунке 1.



Рисунок 1. Структура технологического процесса обучения

На основе проработки учителем учебного материала, выделения существенных признаков, составляются календарный учебный план и дифференцированные обобщающие задания. Обобщающие задания позволяют учителю еще раз в соответствии с календарным планом продумать структуру изучаемого материала, проверить степень отражения существенных признаков в обобщающем задании, которое будет использовано в заключении изучения раздела для проверки степени превращения знаний и практических навыков в поведенческий репертуар обучаемых. Одновременно дифференцированное обобщающее задание наряду с календарным планом определяет уровень изучения материала и использования практических заданий.

Обобщающие задания решают и очень важную дидактическую задачу — развитие навыков самостоятельной работы учащихся, навыков работы с учебной литературой, обеспечивают развитие личности школьника. Таким образом, обобщающие задания являются важным элементом предлагаемой модифицированной технологии обучения.

Передача информации учащимся осуществляется в рамках традиционной классно-урочной системы. Технологическим элементом, определяющим процесс передачи информации от учителя к учащимся, являются опорные конспекты, разработанные учителем к каждому уроку в соответствии с календарным планом. Опорный конспект включает в себя в сжатом виде главную информацию темы

урока, которую учащиеся должны усвоить и запомнить. Эта информация неоднократно будет востребована как базовая, при изучении последующего материала. Таким образом, опорный конспект выполняет не только систематизирующую и обобщающую роль при изучении материала урока, но и служит основой для изучения последующего материала, является основой повторения материала и базой для выработки практических навыков при решении задач и средством диалогического общения при подведении итогов по пройденному материалу. Эти функции опорного конспекта превращают его в рабочий инструмент технологии обучения.

В современных условиях развития интерактивных средств и многообразия мультимедийных материалов возникает возможность использования на уроках мультимедийных материалов в виде презентаций, слайдов и т.д.

Постоянной составляющей этих презентаций являются элементы опорных конспектов. Учащиеся накапливают презентации в электронном виде по мере изучения раздела и используют по собственной инициативе и указанию учителя в учебной деятельности.

С внедрением в практику обучения элементов компьютерных технологий возникает возможность интенсифицировать процесс обучения за счет исключения из учебной практики конспектирования материала за учителем. Учащиеся могут получить все методические заготовки учителя в электронном виде от конспекта изучаемой темы до алгоритма решения задач и методички для выполнения лабораторной работы.

Процесс изучения темы заканчивается защитой обобщающих дифференцированных заданий. Заключительная контрольная работа, как правило, шире обобщающего задания. Она включает дополнительные теоретические вопросы, составленные на основе опорных конспектов, и задачи аналогичные тем, что и в обобщающих заданиях.

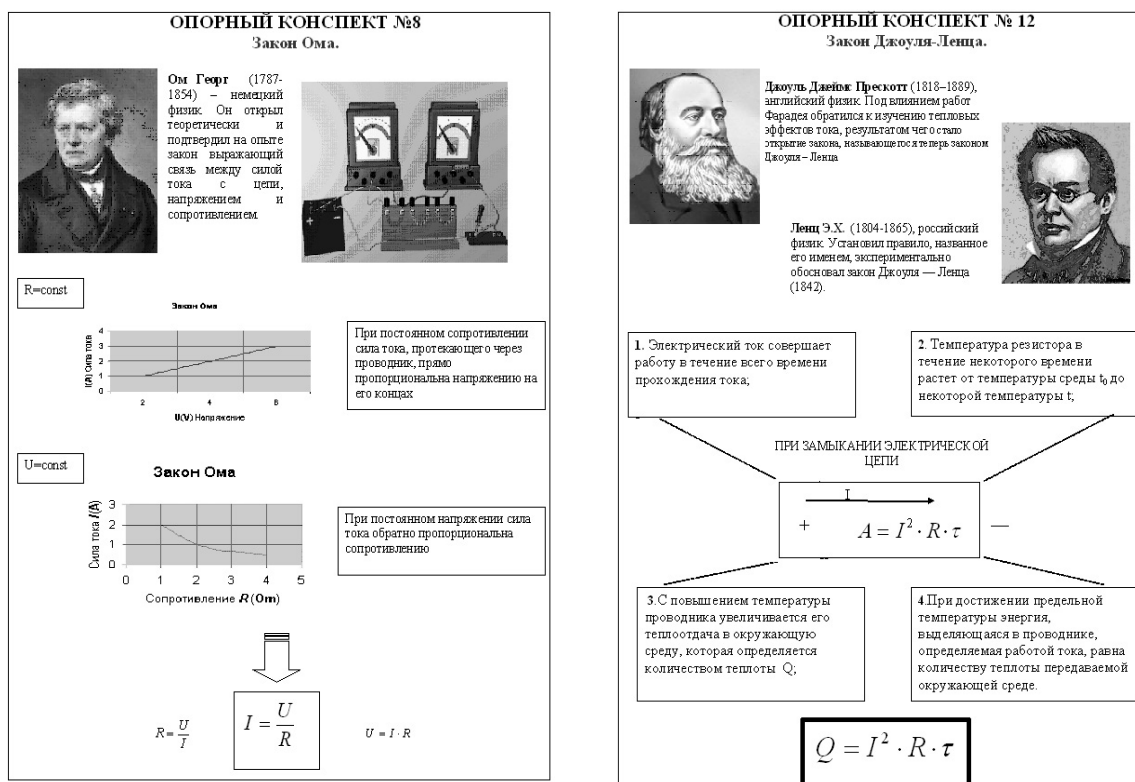


Рисунок 2. Примеры опорных конспектов

Каждый опорный конспект рассчитан на сдвоенный урок физики объемом два часа. При изучении темы, в соответствии с календарным планом, составлено 13 опорных конспектов, отражающих существенные признаки изучаемого материала:

- ОК № 1 – Электрический ток.
- ОК № 2 – Электрическая цепь. Действие электрического тока.
- ОК № 3 – Электрический ток в проводниках.
- ОК № 4 – Сила тока. Единицы измерения силы тока.

- ОК № 5 — Электрическое напряжение.
- ОК № 6 — Электрическое сопротивление.
- ОК № 7 — Реостаты. Потенциометры.
- ОК № 8 — Закон Ома.
- ОК № 9 — Последовательное и параллельное соединение проводников.
- ОК № 10 — Метод равных потенциалов.
- ОК № 11 — Работа и мощность электрического тока.
- ОК № 12 — Закон Джоуля–Ленца.
- ОК № 13 — Электронагревательные приборы. Лампа накаливания. Короткое замыкание.

Рассмотрим применение модифицированной технологии обучения на примере темы «Постоянный электрический ток» в восьмом классе с физико-математическим уровнем обучения. В качестве примера рассмотрены опорные конспекты ОК-8 и ОК-12. Примеры опорных конспектов ОК-8 и ОК-12 приведены на рисунке 2. ОК-8 посвящен закону Ома. В нем дается краткая историческая справка, схема установки. Приводится график зависимости силы тока от напряжения при постоянном сопротивлении и график зависимости силы тока от сопротивления при постоянном напряжении. Исходя из полученных зависимостей силы тока, напряжения и сопротивления, выводится закон Ома. ОК-12 посвящен закону Джоуля–Ленца. В опорном конспекте дается краткая историческая справка об ученых, экспериментально обосновавших тепловые эффекты тока. Даны подробная схема обоснования закона Джоуля–Ленца и вывод математической формулировки закона Джоуля–Ленца.

На основе модифицированной технологии обучения разработаны поурочные планы учебных занятий по теме «Постоянный электрический ток». В структуру каждого плана заложено использование элементов модифицированной технологии обучения: опорные конспекты, обобщающие задания, уровневая дифференциация, мультимедийные презентации, краткий конспект (в том числе в электронном виде) изучаемого материала.

Для анализа эффективности применения элементов образовательных технологий при обучении физике были проведены следующие исследования: анкетирование и анализ успеваемости учащихся до и после ее применения модифицированной технологии обучения.

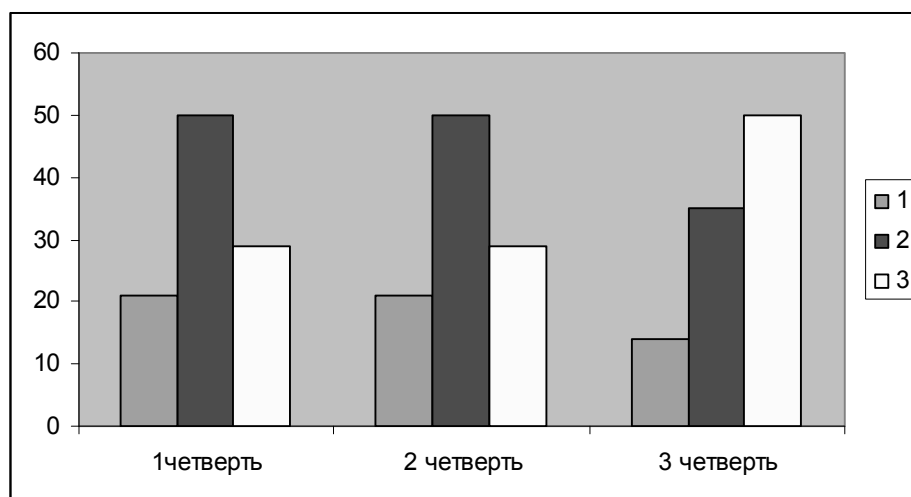


Рисунок 3. Анализ успеваемости учащихся до и после применения модифицированной технологии обучения

Анализ результатов показал, что учащиеся хорошо относятся к применению опорных конспектов. На основании ответов учащихся можно сделать вывод о том, что опорные конспекты облегчают восприятие материала, повышают его доступность. Аналогичный вывод можно сделать и о мультимедийных презентациях. Неоднозначное отношение учащихся к обобщающим заданиям, так как их выполнение занимает значительное время и задания требуют затраты определенных усилий.

Результаты успеваемости учащихся до и после применения модифицированной технологии обучения приведены на рисунке 3.

Высота столбцов на диаграмме пропорциональна относительному количеству оценок, выраженному в процентах. Как видно из диаграммы, количество хороших и отличных оценок в третьей чет-

верти, после применения модифицированной технологии, возросло. Это так же, как и анкетирование, указывает на положительное влияние модифицированной технологии обучения.

Список литературы

- 1 Селевко Г.К. Современные образовательные технологии. — М.: Народное образование, 1998. — 256 с.
- 2 Левитес Д.Г. Практика обучения: современные образовательные технологии. — М.: Ин-т практ. психологии; Воронеж: НВО «МОДЕК», 1989. — 288 с.

В.Е.Гладков, Е.Л.Ли

«Тұрақты электр тоғы» тақырыбының мысалында қазіргі білім беру технологиялар элементтерін қолдану негізінде физиканы оқыту нәтижелігін жоғарлату

Тұлғалық-бағытталған даму оқытуын қамтамасыздандыру үшін білім беру технологияларының кейбір элементтерін қолдану мүмкіндігі қарастырылған. Тірек конспектілері, жалпыланған деңгейлік тапсырмалар және компьютерлік технологияларының элементтері қолданылған. Модификациялық оқыту технологиясының жұмыс құралы ретінде оқу материалының тірек конспектілері таңдалған. Тірек конспектілерінің жалпыланған жүйеленген ролі, материалды зерттеу барысында болатын мүмкіндіктері, есептерді шығару кезінде тәжірибелік дағдыландыруы, оқыту көрсетілімдердегі тірек конспектілерінің элементтерін қолдану дәрежелігі көрсетілген.

V.E.Gladkov, E.L.Lee

Improving the efficiency of teaching Physics on the basis of using the elements of modern educational technologies by the example of the theme «Direct electric current

The opportunity of application of several elements of educational technologies for providing personally-oriented developing teaching is considered. Basic supporting outlines, different level generalizing tasks and elements of the computer technologies are used. Basic supporting outlines of teaching material are chosen as the working tool of the modified technology of teaching. The systematizing generalizing role of basic supporting outlines and their opportunities for studying the material, its review, development the practical skills in the process of tasks solving. The efficiency of using the elements of basic supporting outlines in educational presentations is shown.

В.Е.Гладков, А.Е.Туребаева

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

Использование элементов кредитной системы обучения в школе на примере темы «Механическая работа. Закон сохранения энергии»

Предложена схема обучения физике в школе с использованием элементов кредитной технологии. Конструктивно схема реализована в рамках учебно-методического комплекса. В качестве рабочего инструмента предлагаемой технологии обучения использованы обобщающие задания. Отмечено, что основным компонентом заданий является самостоятельная работа школьников под контролем учителя (СРШУ). Приведены результаты анкетирования учащихся и сравнительный анализ успеваемости за время до использования предлагаемой технологии обучения и после.

Ключевые слова: кредитная технология, обобщающие задания, учебно-методический комплекс, СРШУ, обучение физике.

В связи с внедрением в вузах Республики Казахстан кредитной технологии обучения, основой которой является самостоятельная работа студентов, возникает большой разрыв между методикой обучения в школе и в вузе. Первокурсники оказываются совершенно неподготовленными к учебному процессу по кредитной технологии обучения. В этой связи возникает необходимость внедрения в школах элементов кредитной технологии обучения с целью адаптации учащихся — будущих студентов к самостоятельной работе и развитию навыков обучения по кредитной технологии.

Нами предложена схема использования элементов кредитной технологии обучения в школе (рис. 1). Структурно схема реализуется в рамках учебно-методического комплекса (УМК). В отличие от вуза, в школе предлагается в УМК включать меньший по объему материал (модуль). Это может быть отдельная глава или несколько глав учебника, которые можно объединить одной связанной идеей, темой. На этапе формирования навыков самостоятельной работы такая более глубокая дифференциация учебного материала школьного курса позволяет облегчить выработку навыков самостоятельной работы в рамках кредитной технологии обучения. Структура УМК в школе может быть аналогичной структуре УМК в вузе [1].

Методика обучения основана на смещении центра тяжести обучения на самостоятельную работу школьника под руководством учителя (СРШУ). С этой целью используются элементы образовательных технологий, в которых самостоятельная работа занимает одно из главных мест. К таким технологиям относятся технология модульного обучения, вузовская технология, технологии на основе активизации и интенсификации деятельности учащихся, эффективности управления и организации учебного процесса и др. [2].

В процессе преподавания главное внимание должно быть обращено на изучение основных фактов, понятий, законов, теорий и методов физики, на обобщение широкого круга физических явлений на базе теории. Необходимо научить школьников применять исходные положения науки для самостоятельного объяснения физических явлений, результатов эксперимента, действия приборов и установок. Выделение основного материала в каждом разделе курса физики помогает добиваться глубокого и прочного его усвоения.

В предлагаемой технологии выделение основного материала, его интерпретация и акцентирование внимания на главном осуществляется в УМК в кратком изложении учебного материала по теме каждой части модуля — микромодуля. Микромодуль охватывает материал одного или нескольких уроков и содержит часть материала модуля, законченную по содержанию. Концентрации внимания на главном способствуют опорные конспекты по каждому микромодулю [3].

Учащиеся одновременно работают с кратким конспектом, опорным конспектом, с текстом и иллюстративным материалом учебника. В ходе этой работы поступающая в сознание информация формирует первые представления об изучаемом явлении. При воспроизведении текста эти представления развертываются в новый текст, которые, сохраняя смысл исходной информации, существенно отличаются от начального текста по форме и структуре. Опорный конспект и краткое изложение материала в УМК позволяют облегчить восприятие материала на этапе формирования первичных представлений.

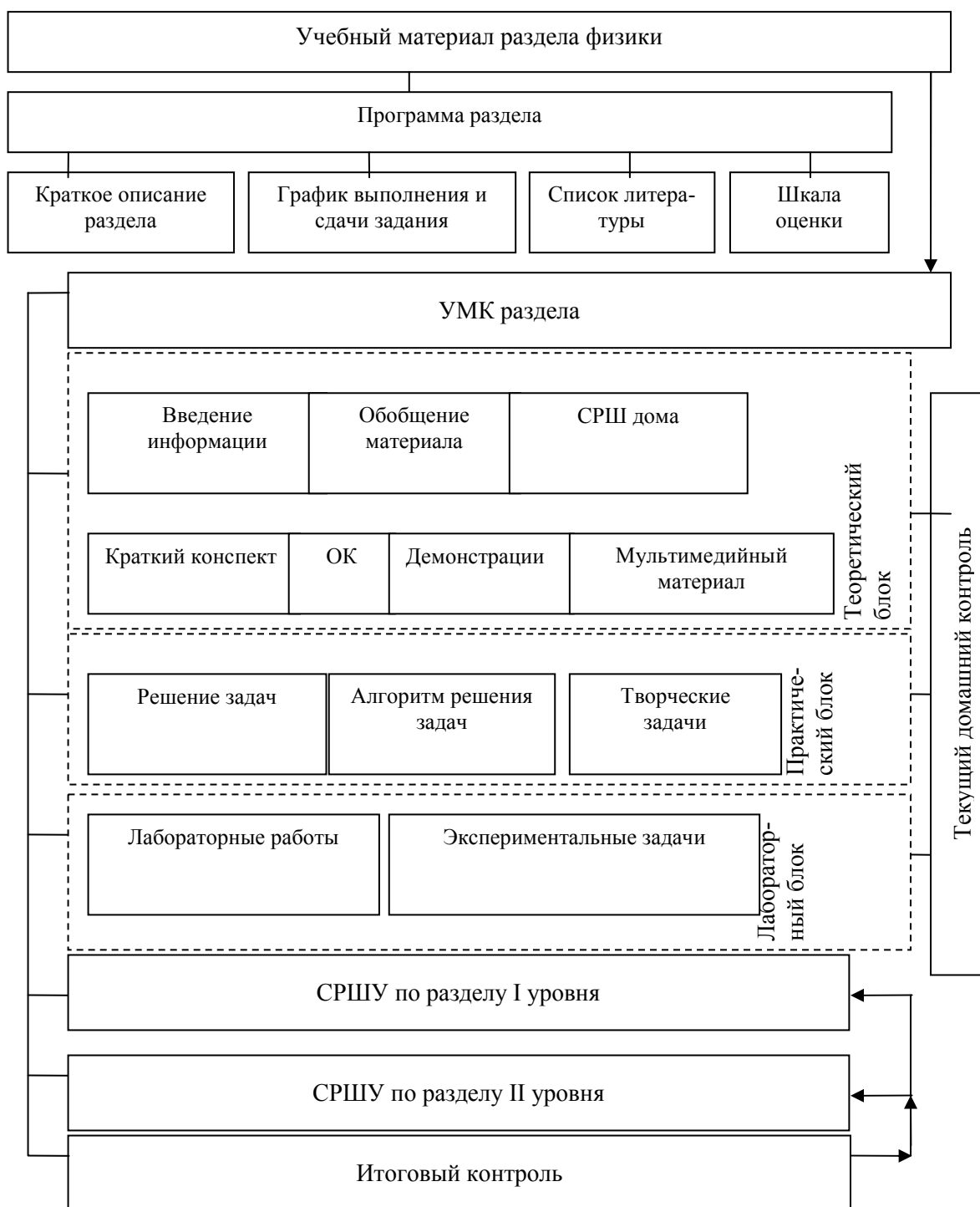


Рисунок 1. Технологическая схема реализации кредитной системы в школе

Систематическая работа учащихся по этой схеме позволяет им постепенно овладеть логическими цепочками, заложенными в УМК. У учащихся вырабатываются навыки самостоятельного анализа учебного материала, выделения главного, навыки не выучивания материала, а обоснованного введения физической величины, определения, принципа, закона.

Рабочим инструментом рассматриваемой технологии обучения в школе являются обобщающие задания, которые в технологической схеме представлены блоками: «Введение информации», «Обобщение материала», «СРШ» и заключительным контрольным блоком «СРШУ двух уровней». Функция рабочего инструмента технологии определяется тем, что в эти задания заложены основное содержание изучаемого модуля, логические цепочки, связывающие весь материал в единую систему, алгоритмы решения задач, выполнения лабораторных работ и творческие вопросы.

Обобщающие задания позволяют систематизировать и обобщить материал модуля, создать условия, при которых практические навыки и знания в целом формулируются не на основе запоминания и зубрежки, а на основе практической самостоятельной деятельности ученика под руководством учителя.

Решение главных учебно-воспитательных задач достигается на уроках сочетанием разнообразных форм и методов обучения. Большое значение придается самостоятельной работе учащихся. Цели такой работы разнообразны: активизация учебно-познавательной деятельности школьников по усвоению основных фактов, понятий, законов и теорий физики; повторение и закрепление исходного теоретического материала, выполнение фронтальных лабораторных работ или лабораторного практикума; рассмотрение некоторых приложений физики; применение знаний в процессе решения задач; обобщение и систематизация знаний.

Логическим продолжением теоретической части микромодуля является практическая, основным содержанием которой является решение задач. Согласно схеме предлагаемой технологии обучения выработка практических навыков начинается с решения задач в рамках алгоритма, которой охватывает решения большинства типичных задач микромодуля. По мере выработки навыков уровень сложности задач возрастает до решения творческих задач.

Неослабное внимание следует уделять работе учащихся с книгой: учебником, справочной литературой, методической литературой по решению задач. При работе с учебником и дополнительной литературой необходимо формировать умение выделять в тексте основные вопросы, видеть и понимать логические связи внутри материала, объяснять изучаемые явления и процессы.

Решение физических задач следует оптимально сочетать с другими методами обучения. Целесообразно выделять время для проведения специальных практикумов по решению задач. Решение задач проводится, как правило, сначала в общем виде, что не исключает применения численных методов решения задач с использованием ЭВМ.

По мере выработки практических навыков учащимся даются задачи разных уровней, систематизирующие и обобщающие материал микромодуля. Учащиеся работают над этим заданием самостоятельно дома. Затем проводится урок — самостоятельная работа школьников под контролем преподавателя (СРШУ). Это занятие может быть проведено в разной форме в зависимости от уровня подготовки учащихся. Если уровень подготовки учащихся соответствует физико-математическому, то урок — СРШУ может быть проведен в форме семинара или конференции. При стандартном уровне подготовки урок — СРШУ проводится в виде консультации.

Основной учебный материал должен быть усвоен школьниками на уроке. Это требует от учителя постоянного продумывания методики организации урока, применения разнообразных форм учебной деятельности: изложения нового материала на лекции с использованием мультимедийных технологий, по решению задач, широкого использования эксперимента, организации самостоятельной работы учащихся с книгой и при решении задач. Необходимо совершенствовать методы повторения и контроля знаний.

Особо важное значение придается самостоятельному выполнению школьниками учебного эксперимента — демонстрационных опытов, фронтальных лабораторных работ, лабораторного практикума.

В предложенной структурной схеме технологии обучения предлагается выполнение практикума по модульной схеме. В рамках учебного модуля лабораторные работы по материалу микромодулей выполняется отдельным микромодулем. Количество лабораторных работ обычно составляет от четырех до шести. Выполнение лабораторных работ по модульной схеме позволяет осуществить обобщающий, системный подход, заключающийся в выполнении работ и обработке результатов измерений по предварительно отработанному алгоритму. Начиная с девятого класса, где вводится алгоритм выполнения лабораторных работ, все лабораторные занятия переводятся в разряд СРШУ. Роль преподавателя на таких занятиях сводится к консультационной деятельности.

Домашнее задание служит, как правило, для закрепления уже изученного материала, отработки соответствующих умений. Полезно дифференцировать объем и сложность домашних заданий с учетом индивидуальных особенностей учащихся.

Внеклассная работа по физике или самостоятельная работа школьника (СРШ) включает в себя такие виды учебной деятельности, как написание рефератов по отдельным вопросам, подготовку к олимпиадам по индивидуальной программе, выполнение учебно-исследовательской работы и т.д. СРШ, таким образом, дополняет все другие формы организации учебных занятий, объединяясь с НИР в единую систему, которая реализуется в кредитной технологии обучения в школе.

Основные преимущества использования в обучении той или иной технологии состоят в том, что технология обучения реализует системный подход в обучении на основе некоторого признака, являющегося рабочим инструментом технологии обучения [3].

В предлагаемой модификации кредитной технологии обучения в школе в качестве рабочего инструмента выбраны обобщающие задания. Функциональная схема обобщающего задания, или рабочего инструмента, кредитной технологии обучения представлена на рисунке 2.

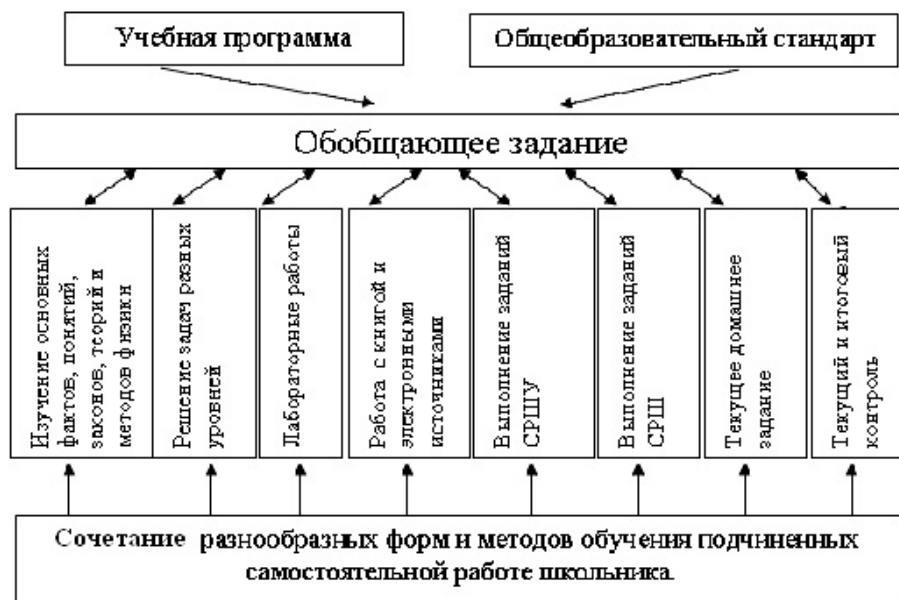


Рисунок 2. Функциональная схема обобщающего задания

Обобщающее задание составляется в начале изучения модуля (микромодуля) в соответствии с:

- учебной программой;
- образовательными, развивающими и воспитательными целями;
- учетом основных понятий, законов, теории и методов физики, которые учащиеся должны усвоить;
- типовыми задачами, на основе которых будут отрабатываться практические навыки;
- учебным экспериментом, его содержанием и методикой обработки результатов наблюдений;
- технологией и методикой обучения.

Таким образом, опытный учитель, составляя обобщающее задание или прорабатывая ранее использованное, может вносить коррективы в структуру материала и методику обучения, накапливая и совершенствуя свой педагогический опыт. Начинающий учитель, используя составленные опытными педагогами обобщающие задания, может быстрее адаптироваться, как к структуре учебного материала, так и к технологии обучения.

Учащиеся с обобщающим заданием встречаются на заключительном этапе изучения учебного модуля (микромодуля). Выполняя эти задания, как зачетные, самостоятельно под контролем учителя, учащиеся привлекают весь изученный материал, алгоритмы решения задач, выработанные практические навыки и навыки работы с методической литературой. В процессе самостоятельной работы над обобщающим заданием учащиеся реализуют педагогические приемы учителя, заложенные в обобщающее задание.

Таким образом, обобщающее задание, являясь рабочим инструментом кредитной технологии обучения школьников, организует деятельность учителя, с одной стороны, и работу учащихся — с другой, направляя их взаимодействие к достижению дидактических учебных целей.

Рассмотрим реализацию кредитной технологии обучения в школе на примере учебного модуля «Работа. Энергия. Закон сохранения энергии». Так как модуль охватывает большой по объему материал, модуль был разделен на четыре микромодуля:

- Работа силы. Мощность;
- Энергия;

- Закон сохранения энергии;
- Движение жидкостей и газов.

В каждом микромодуле выполняется цикл учебной работы определяемой технологической схемой (рис. 1). В кратком конспекте выделяются существенные базовые признаки (табл. 1).

Т а б л и ц а 1

Существенные признаки учебного материала модуля

№ п/п	Существенные признаки			
	Микромодуль 1	Микромодуль 2	Микромодуль 3	Микромодуль 4
1	Работа постоянной силы, составляющей постоянный угол с направлением перемещения	Энергия	Замкнутые и не замкнутые системы	Метод Эйлера. Основные определения
2	Принцип суперпозиции: если на тело действует несколько сил, то каждая сила совершает работу независимо от наличия других сил	Теорема о кинетической энергии. Кинетическая энергия	Закон сохранения полной механической энергии, если внутренние силы потенциальные	Уравнение неразрывности струи и жидкости
3	Работа результирующей силы при равномерном и равноускоренном движении	Потенциальные силы	Закон сохранения энергии, если часть внутренних сил не потенциальна	Уравнение Бернулли и его следствия
4	Графический способ определения работы	Потенциальная энергия	Закон сохранения энергии, если система незамкнута	Подъемная сила крыла самолета
5	Средняя и мгновенная мощность			

Для того чтобы обеспечить доступность учебного материала и его системное восприятие, используются опорные конспекты материала микромодулей. Примеры опорных конспектов приведены на рисунке 3.

Материал опорных конспектов, содержащий основную информацию микромодулей, служит далее определяющим ориентиром при составлении обобщающих заданий, разработке алгоритмов решения задач, организации самостоятельной работы, с одной стороны, и, с другой — он выдается учащимся и служит концентрации их внимания на главном.

В соответствии с опорными конспектами определяются типы задач, которые необходимо решить на уроках, дома и включить в обобщающие задания микромодулей.

Дополнением к опорным конспектам при организации решения задач являются алгоритмы их решения. В рассматриваемом модуле наиболее продуктивным и сложным является алгоритм решения задач на закон сохранения энергии, который можно определить следующей последовательностью действий.

1. Записать условие задачи, сделать рисунок и отразить условие задачи на рисунке.
2. Выбрать систему взаимодействующих тел, определить является ли она замкнутой, и являются ли внутренние силы потенциальными.
3. Если система замкнута и внутренние силы потенциальные, то полная механическая энергия (E) в любом состоянии одна и та же, т.е.

$$E_1 = E_2.$$

4. Если часть внутренних сил не потенциальна и система не замкнута, то изменение полной механической энергии определяется работой потенциальных (A_1) и внешних сил (A_2)

$$E_2 - E_1 = A_1 + A_2.$$

5. Полученное уравнение по пунктам 3 или 4 дополняется уравнениями, которые вытекают из анализа условия задачи.

6. При равном числе уравнений и неизвестных в этих уравнениях система уравнений решается относительно неизвестных.

7. Полученный результат можно проверить, например, по размерности определяемых величин.

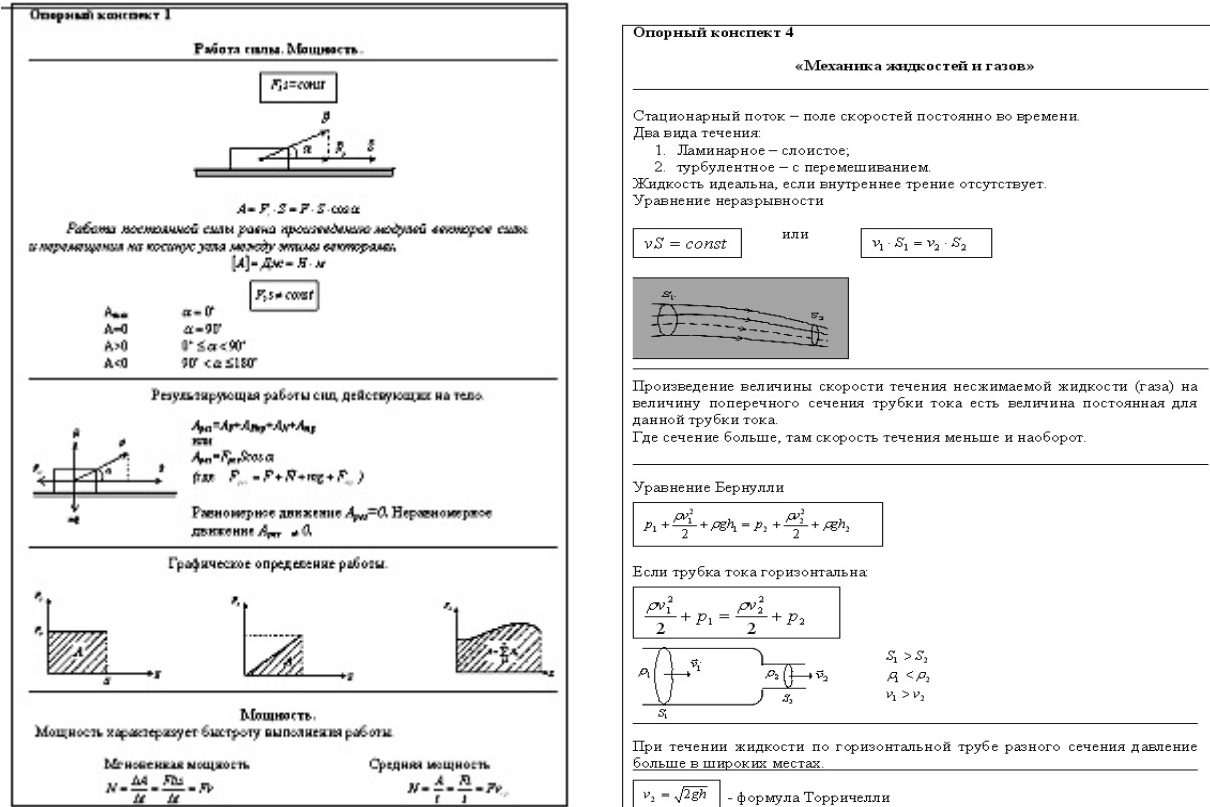


Рисунок 3. Опорные концепты

Таким образом, после выделения существенных признаков изучаемого модуля, определения основных типов решаемых задач, реализации материала в опорных концептах и алгоритмах решения задач приступают к составлению обобщающих заданий по микромодулям. Примеры обобщающего задания по второму микромодулю показаны в таблице 2.

Предложенная технология была апробирована на педагогической практике студентов выпускного курса в течение 10 недель в 9 А классе гимназии № 93.

С целью выявления эффективности предложенной технологии преподавания раздела «Механическая работа. Закон сохранения энергии» были проведены анкетирование учащихся и сравнительный анализ успеваемости учащихся за время до использования технологии обучения и после.

Результаты анкетирования показали, что 10 % учащихся затрудняются в выполнении самостоятельной работы; использование опорных концептов помогло всем учащимся систематизировать материал при изучении нового материала, решении задач, подготовке к текущему и итоговому контролю; все учащиеся выразили желание работать с использованием УМК. Учащиеся считают полезным и необходимым систематическое выполнение обобщающих заданий, особенно решение задач под контролем учителя, отмечая существенные временные затраты на выполнение этих заданий.

Таблица 2

Обобщающие задания

1	Энергия	1. Определение энергии 2. Теорема о кинетической энергии. Ввести понятие кинетической энергии. 3. Потенциальные силы. 4. Ввести понятие потенциальной энергии. 5. Потенциальная энергия: – поля сил тяжести; – поля сил упругости; – поля сил всемирного тяготения	349, 352, 356, 365, 366, 379. 4.8, 4.16, 4.25, 4.30	Н.И.Гольд- фарб; А.П.Рым- кевич	2.3.5, 2.3.6, 2.3.8, 2.3.13, 2.3.17, 2.3.19, 2.3.21, 2.3.26, 2.3.27, 2.3.30	Под редакцией О.Я.Сав- ченко
---	---------	--	---	--	---	------------------------------------

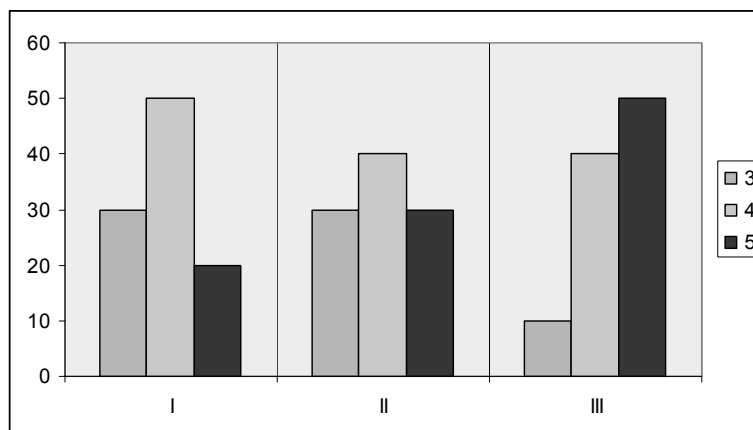


Рисунок 4. Анализ успеваемости учащихся

Анализ успеваемости учащихся приведен на диаграмме (рис. 4). Высота столбцов определяет количество соответствующих оценок в процентах по отношению и общему их числу при итоговом контроле за I, II, III четверти. В I и II четверти учебные занятия проводились по традиционной технологии обучения. В III четверти в процессе обучения применялись элементы кредитной технологии обучения. Сравнительный анализ качества обучения показывает рост в III четверти общего числа «хороших» и «отличных» оценок, что с учетом результатов анкетирования характеризует положительное влияние применения элементов кредитной технологии обучения.

Список литературы

- 1 Кубеев Е.К., Дьяков Д.В., Акыбаева Г.С. Методические указания по составлению и оформлению учебно-методического комплекса дисциплины для студентов, обучающихся по кредитной системе. — Караганда: Изд-во КарГУ, 2004. — 23 с.
- 2 Селевко Г.К. Современные образовательные технологии. — М.: Народное образование, 1998. — 256 с.
- 3 Левитес Д.Г. Практика обучения: современные образовательные технологии. — М.: Ин-т практ. психологии; Воронеж: НВО «МОДЕК», 1989. — 288 с.

В.Е.Гладков, А.Е.Туребаева

«Механикалық жұмыс. Энергияның сақталу заңы» тақырыбының мысалында кредиттік жүйенің оқыту элементтерін мектепте қолдану

Кредиттік жүйенің оқыту элементтерін мектепте қолдану сызбасы ұсынылған. Сызба құрылымдық түрде оқыту-әдістемелік кешенінің шеңберінде іске асады. Бұл оқыту технологиясының жұмыс құралы ретінде жалпыланған тапсырмалар саналады. Жалпыланған тапсырмалар сабақтардың негізгі мазмұнын құрайды, бастысы мұғалімнің бақылауымен өтетін оқушының өздік жұмысы (МОӨЖ) болып есептеледі. Сондай-ақ сабақтар оқушылардың сыныптан тыс өздік жұмыстарымен (ОӨЖ) толықтырылады.

V.E.Gladkov, A.E.Turebaeva

Using of the elements of credit system of teaching at school by the example of the theme: « Mechanical work. Energy conservation law»

The scheme of using the elements of credit technology of teaching at school is offered. Structurally the scheme is realized within the framework of teaching-methodical complex. The generalizing tasks are the working tool of the suggested technology of teaching. Generalizing tasks are the basic contents of the lessons-lectures where the individual work of the pupil under the control of teacher (IWPT) is the basic component. These lessons are supplemented with out-of-class individual work of the pupils (IWP).

АВТОРЛАР ТУРАЛЫ МӘЛІМЕТТЕР СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Балтабеков А.** — докторант PhD кафедры спектроскопии конденсированного состояния, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Бижанова К.Б.** — старший преподаватель кафедры физики и информатики, Каспийский государственный университет технологии и инжиниринга им. Ш.Есенова, Актау.
- Гладков В.Е.** — доцент кафедры общей и теоретической физики к.т.н., доцент, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Гученко С.А.** — инженер кафедры спектроскопии конденсированного состояния, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Есиркеев Е.М.** — аспирант кафедры физики, Карагандинский государственный технический университет.
- Ефименко С.А.** — главный геофизик к.т.н., ТОО «Корпорация Казахмыс», Жезказган.
- Жарекешев И.Х.** — вед. науч. сотр. лаборатории микро- и оптоэлектроники к.ф.-м.н., НИИЭТФ КазНУ им. аль-Фараби, Алматы.
- Жумадилов Е.К.** — доцент кафедры физики к.ф.-м.н., доцент, Карагандинский государственный технический университет.
- Ибраев Н.Х.** — профессор кафедры спектроскопии конденсированного состояния д.ф.-м.н., профессор, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Кукетаев Т.А.** — профессор кафедры спектроскопии конденсированного состояния д.ф.-м.н., профессор, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Кусайынов К.К.** — зав. кафедрой инженерной теплофизики им. проф. Ж.С.Акылбаева д.т.н., профессор, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Ли Е.Л.** — студентка физического факультета, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Маусымбаева А.Д.** — магистрантка, Карагандинский государственный технический университет.
- Мурашова З.Ф.** — доцент кафедры физики к.ф.-м.н., доцент, Карагандинский государственный технический университет.
- Омаров Н.Н.** — инженер кафедры инженерной теплофизики им. проф. Ж.С.Акылбаева, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Портнов В.С.** — начальник Учебно-методического управления д-р т.н., профессор, Карагандинский государственный технический университет.
- Прмантаева Б.А.** — доцент кафедры технической физики и радиоэлектроники к.ф.-м.н., доцент, Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Астана.
- Смагулов Ж.К.** — доцент кафедры радиофизики и электроники к.ф.-м.н., доцент, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Смакова Н.С.** — магистрантка, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Тулугулов А.Д.** — доцент кафедры спектроскопии конденсированного состояния к.ф.-м.н., Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Туребаева А.Е.** — студентка физического факультета, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.
- Турсунбаева А.К.** — директор Центра маркетинга и договорных услуг к.т.н., доцент, Карагандинский государственный технический университет.
- Шункеев К.Ш.** — проректор по учебной и учебно-методической работе д.ф.-м.н., профессор, Актюбинский государственный педагогический институт.
- Юров В.М.** — докторант кафедры спектроскопии конденсированного состояния к.ф.-м.н. доцент, Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова.