БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЖУРНАЛ
БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

ФИЗИКА

JOURNAL
OF THE BELARUSIAN STATE UNIVERSITY

PHYSICS

Издается с января 1969 г.
(до 2017 г. – под названием «Вестник БГУ.
Серия 1, Физика. Математика. Информатика»)

Выходит три раза в год

1 2023

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор — **ВОРОПАЙ Е. С.** – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: voropay@bsu.by

Заместитель главного редактора — **ТИВАНОВ М. С.** – кандидат физико-математических наук, доцент; декан физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: tivanov@bsu.by

Ответственный секретарь — **КАБАНОВА О. С.** – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: kabanovaos@bsu.by

Анищик В. М. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
Бондаренко Г. Г. Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия.
Жуковский П. В. Люблинский технический университет, Люблин, Польша.
Кислицин С. Б. Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан.
Козлов С. А. Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия.
Кучинский П. В. НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
Максименко С. А. НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
Маскевич С. А. Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
Машлан М. Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия.
Патрин А. А. Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша.
Погребняк А. Д. Сумский государственный университет, Сумы, Украина.
Рамакришна Редди К. Т. Университет Шри Венкатесвара, Тирупати, Индия.
Ремнев Г. Е. Томский политехнический университет, Томск, Россия.
Толстик А. Л. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
Туроверов К. К. Институт цитологии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.
Ушаков Д. В. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
Хайнтцманн Р. Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия.
Чалов В. Н. Имперский колледж Лондона, Лондон, Великобритания.
Шандаров С. М. Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия.

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Ануфрик С. С. Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.
Гусев О. К. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
Казак Н. С. Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Килин С. Я. Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Кононов В. А. СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.
Маляревич А. М. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
Пенязьков О. Г. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Пилипенко В. А. Государственный центр «Белмикроанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.
Плетюхов В. А. Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.
Семченко И. В. Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Федосюк В. М. ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.
Шкадаревич А. П. Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь.

EDITORIAL BOARD

Editor-in-chief	**VOROPAY E. S.**, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: voropay@bsu.by
Deputy editor-in-chief	**TIVANOV M. S.**, PhD (physics and mathematics), docent; dean of the faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: tivanov@bsu.by
Executive secretary	**KABANOVA O. S.**, PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: kabanovaos@bsu.by

Anishchik V. M.	Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Bondarenko G. G.	Moscow Institute of Electronics and Mathematics of the National Research University «Higher School of Economics», Moscow, Russia.
Chalov V. N.	Imperial College London, London, United Kingdom.
Heintzmann R.	Institute of Physical Chemistry of the Jena University, Jena, Germany.
Kislitsin S. B.	Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.
Kozlov S. A.	Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia.
Kuchinski P. V.	A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maksimenko S. A.	Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maskevich S. A.	International Sakharov Environmental Institute of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maslan M.	Palacký University, Olomouc, Czech Republic.
Patryn A. A.	Politechnika Koszalińska, Koszalin, Poland.
Pogrebnjak A. D.	Sumy State University, Sumy, Ukraine.
Ramakrishna Reddy K. T.	Sri Venkateswara University, Tirupati, India.
Remnev G. E.	Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.
Shandarov S. M.	Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russia.
Tolstik A. L.	Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Turoverov K. K.	Institute of Cytology, Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia.
Ushakov D. V.	Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Zhukowski P. V.	Lublin University of Technology, Lublin, Poland.

EDITORIAL COUNCIL

Anufrik S. S.	Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus.
Fedosyuk V. M.	State Scientific and Production Association «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus.
Gusev O. K.	Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
Kazak N. S.	State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Kilin S. Y.	National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Kononov V. A.	«LOTIS TII», Minsk, Belarus.
Malyarevich A. M.	Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
Penyazkov O. G.	A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Pilipenko V. A.	JSC «Integral», Minsk, Belarus.
Pletyukhov V. A.	Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus.
Semchenko I. V.	State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Shkadarevich A. P.	Unitary Enterprise «STC "LEMT" of the BelOMO», Minsk, Belarus.

Теоретическая физика

Theoretical physics

УДК 539.12

УСТРАНЕНИЕ РАСХОДИМОСТИ В ЗАДАЧЕ О ЧАСТИЦЕ В СКАЛЯРНОМ КВАНТОВОМ ПОЛЕ

И. Д. ФЕРАНЧУК[1)]***, О. Д. СКОРОМНИК***[2)]***, НГУЕН КУАНГ ШАН***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Независимый исследователь, г. Гейдельберг, Германия*

Рассмотрена задача о взаимодействии частицы со скалярным квантовым полем. Применение теории возмущений в этой задаче приводит к ультрафиолетовой расходимости при вычислении энергии основного состояния, для перенормировки которой необходимо использовать неопределенный параметр – импульс обрезания. Описана итерационная схема для расчета наблюдаемых характеристик системы, позволяющая выйти за рамки теории возмущений. Найдена зависимость энергии основного состояния от константы связи и показано, что она не содержит расходимости, однако обладает логарифмической сингулярностью в пределе, когда константа связи частицы

Образец цитирования:
Феранчук ИД, Скоромник ОД, Нгуен Куанг Шан. Устранение расходимости в задаче о частице в скалярном квантовом поле. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:4–13.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-4-13

For citation:
Feranchuk ID, Skoromnik OD, Nguyen Quang San. Elimination of divergence for the problem of a particle in a scalar quantum field. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:4–13. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-4-13

Авторы:
Илья Давыдович Феранчук – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.
Олег Дмитриевич Скоромник – кандидат физико-математических наук; независимый исследователь.
Нгуен Куанг Шан – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:
Ilya D. Feranchuk, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
feranchuk@bsu.by
https://orcid.org/0000-0003-0476-8634
Oleg D. Skoromnik, PhD (physics and mathematics); independent researcher.
olegskor@gmail.com
Nguyen Quang San, PhD (physics and mathematics); researcher at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
quangsanbsu@gmail.com
https://orcid.org/0000-0003-2919-5414

с полем стремится к нулю. Такая функция не может быть представлена степенным рядом по константе связи, что объясняет неприменимость стандартной теории возмущений. Полученный результат имеет принципиальное значение для квантовой теории поля, поскольку показывает, что импульс обрезания, который используется для перенормировки при вычислении физических величин, определяется параметрами системы, а расходимости обусловлены наличием сингулярности в зависимости этих величин от константы связи.

Ключевые слова: регуляризация; теория возмущений; ультрафиолетовая расходимость; квантовая теория поля; квантовая электродинамика; операторный метод.

ELIMINATION OF DIVERGENCE FOR THE PROBLEM OF A PARTICLE IN A SCALAR QUANTUM FIELD

I. D. FERANCHUK [a], ***O. D. SKOROMNIK*** [b], ***NGUYEN QUANG SAN*** [a]

[a] *Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b] *Independent researcher, Heidelberg, Germany*
Corresponding author: I. D. Feranchuk (feranchuk@bsu.by)

The problem of the interaction of a particle with a scalar quantum field is considered. The use of perturbation theory in this problem leads to ultraviolet divergence in the calculation of the ground state energy, for the renormalisation of which it is necessary to use an indefinite parameter – momentum cutoff. The work describes an iteration scheme for calculating the observed characteristics of the system, which allows to go beyond the perturbation theory. The dependence of the ground state energy on the coupling constant was found and it is shown that it does not contain divergence, but it has a logarithmic singularity in the limit, when the coupling constant of the particle with the field tends to zero. Such a function cannot be represented as a power series over the coupling constant, which explains the inapplicability of the standard perturbation theory. The result obtained is of fundamental importance for quantum field theory, since it shows that the momentum cutoff, which is used for renormalisation when calculating physical quantities, is determined by the parameters of the system, and the divergences are due to the presence of a singularity in the dependence of these quantities on the coupling constant.

Keywords: regularisation; perturbation theory; ultraviolet divergence; quantum field theory; quantum electrodynamics; operator method.

Введение

Основным методом вычисления наблюдаемых величин в квантовой теории поля является теория возмущений по константе связи между взаимодействующими полями. Для большинства реальных систем при данном вычислении возникают расходящиеся интегралы из-за так называемых инфракрасных и ультрафиолетовых расходимостей. Эти расходимости устраняются с помощью процедуры перенормировки, которая сначала была детально разработана для квантовой электродинамики [1; 2], а затем обобщена для других моделей квантовой теории поля [3; 4]. В результате перенормировки наблюдаемые величины принимают конечные значения, однако такие параметры, как заряд или масса частиц, зависят от неопределенного импульса обрезания и принимают бесконечные значения. Один из создателей квантовой электродинамики, Р. Фейнман, сравнил такую процедуру с заметанием мусора под ковер [5].

Для того чтобы сделать расчеты строгими с математической точки зрения, необходимо ответить на вопрос: «Являются ли данные бесконечные величины неотъемлемым свойством исходного гамильтониана системы, или этот результат обусловлен некорректным использованием теории возмущений?» Так, например, в теории сверхпроводимости неприменимость теории возмущений обусловлена существенной особенностью в зависимости энергии системы от константы электрон-фононной связи [6]. Ответить на вышеуказанный вопрос в общем виде достаточно сложно, поэтому в настоящей работе рассматривается простая модель, а именно взаимодействие одной частицы со скалярным квантовым полем, и показывается, что ультрафиолетовая расходимость в данной системе обусловлена логарифмической особенностью в зависимости энергии от константы связи. С этой целью в работе построена итерационная схема решения уравнения Шрёдингера, которая позволяет выделить указанную особенность в аналитической форме.

Гамильтониан системы и результаты теории возмущений

Гамильтониан нерелятивистской частицы с массой $m = 1$, взаимодействующей со скалярным квантовым полем, в натуральной системе единиц ($\hbar = c = 1$) имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \tag{1}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}, \tag{2}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{f}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \right).$$

Здесь $\hat{p} = -i\nabla$ – оператор импульса; f – безразмерная константа связи; V – нормировочный объем; $\hat{a}^+_{\vec{k}}$ и $\hat{a}_{\vec{k}}$ – операторы рождения и уничтожения квантов полевой моды с частотой $\omega_{\vec{k}}$. Если выбрать вершинную функцию $Q_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{k}}}}$, $\omega_{\vec{k}} = k$, то оператор (1) описывает взаимодействие электрона с акустическими фононами кристалла. При $\omega_{\vec{k}} = 1$, $Q_{\vec{k}} = \frac{1}{k}$ и $f = 2^{\frac{5}{4}} \sqrt{\pi\alpha}$ оператор (1) соответствует гамильтониану Фрёлиха для задачи о поляроне, т. е. взаимодействию электрона с оптическими фононами [7–11].

Система, описываемая гамильтонианом (1), имеет дополнительный интеграл движения – оператор полного импульса

$$\hat{P} = -i\nabla + \sum_{\vec{k}} \vec{k} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}},$$

так что собственные векторы и собственные значения системы удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\hat{H} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle = E_{\vec{P}} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle,$$

$$\hat{P} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle = \vec{P} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle.$$

В нулевом приближении стандартной теории возмущений собственные функции и собственные значения оператора (2) имеют вид

$$\left| \Psi^{(0)}_{\vec{p},\, n_{\vec{k}}} \right\rangle = \frac{e^{i\vec{p}\vec{r}}}{\sqrt{V}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle, \; \sum_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle, \tag{3}$$

$$E^{(0)}_{\vec{P},\, n_{\vec{k}}} = \frac{1}{2} \left(\vec{P} - \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}} \right)^2 + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} n_{\vec{k}}, \; \vec{P} = \vec{p} + \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}}.$$

Здесь $\vec{p}$ – импульс свободной частицы, а $\left| n_{\vec{k}} \right\rangle$ – фоковские состояния фононного поля.

Для основного состояния системы находим

$$\left| \Psi^{(0)}_{\vec{P},\, 0} \right\rangle = \frac{e^{i\vec{P}\vec{r}}}{\sqrt{V}} |0\rangle, \; E^{(0)}_{\vec{P},\, 0} = \frac{P^2}{2}, \; \vec{P} = \vec{p}.$$

Поправка первого порядка теории возмущений равна нулю, а во втором порядке теории возмущений получаем

$$\Delta E^{(2)}_{\vec{P},\, 0} = -\frac{f^2}{2V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega_{\vec{k}}} \frac{1}{\frac{k^2}{2} - \vec{P}\vec{k} + \omega_{\vec{k}}} = -\frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} - \vec{P}\vec{k} + k \right)}.$$

Энергия связи E_{bs} и эффективная масса m_{eff} определяются при разложении по $\vec{P}$:

$$E^{(0)}_{\vec{P},\, 0} + \Delta E^{(2)}_{\vec{P},\, 0} \approx E_{bs} + \frac{P^2}{2m_{\text{eff}}} \equiv -\frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} + k \right)} + \frac{P^2}{2} - \frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} + k \right)^3} \left(\vec{P}\vec{k} \right)^2.$$

Таким образом, энергия связи частицы определяется логарифмически расходящимся на верхнем пределе интегралом (ультрафиолетовая расходимость):

$$E_{bs} = -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{L}{2}+1\right),\ L\to\infty, \tag{4}$$

где L – неопределенный параметр (импульс обрезания). Следовательно, энергия связи частицы стремится к бесконечности, а эффективная масса остается конечной:

$$m_{\text{eff}} \simeq 1 + \frac{f^2}{6\pi^2}.$$

Можно сравнить эти результаты с задачей о поляроне, в которой энергия связи частицы в основном состоянии и эффективная масса хорошо определены [7–11]:

$$E_{bs} \simeq -\alpha,\ m_{\text{eff}} \simeq 1 + \frac{\alpha}{6}.$$

Таким образом, для физически близких проблем применение теории возмущений приводит к качественно разным результатам. Это дает основание считать, что модификация теории возмущений может устранить ультрафиолетовую расходимость.

Базис неасимптотических состояний и итерационная схема

Как следует из формулы (3), при решении уравнения Шрёдингера в рамках теории возмущений используется базис асимптотически свободных состояний частицы и поля. Однако хорошо известно, что в задаче о поляроне в области сильной связи возникают состояния, в которых электрон описывается локализованными в пространстве волновыми функциями, качественно отличными от формулы (3). Как было показано в работе [12], использование асимптотически свободных состояний может быть причиной расходимости ряда теории возмущений. В связи с этим на основе операторного метода [13] была построена итерационная схема для численного расчета собственных значений E_s и собственных векторов $|\Psi_s\rangle$ с набором квантовых чисел s с использованием произвольного базисного набора векторов состояний для решения уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}|\Psi_s\rangle = E_s|\Psi_s\rangle.$$

В рамках операторного метода векторы состояний представляются следующим образом:

$$|\Psi_s\rangle = |\psi_s(\omega_s)\rangle + \sum_{l\neq s} C_{sl}|\psi_l(\omega_s)\rangle.$$

Здесь $|\psi_s(\omega_s)\rangle$ – базисный набор векторов состояний, зависящих от набора вариационных параметров ω_s.

Итерационные уравнения для собственных значений и коэффициентов разложения собственного волнового вектора имеют следующий вид [13]:

$$E_s^{(j)} = \left[1 + \sum_{l\neq s} C_{sl}^{(j-1)} I_{sl}\right]^{-1}\left[H_{ss} + \sum_{l\neq s} C_{sl}^{(j-1)} H_{sl}\right],$$

$$C_{sl}^{(i)} = \left[E_s^{(j-1)} - H_{gg}\right]^{-1}\left[H_{gs} - E_s^{(j-1)} I_{gs} + \sum_{l\neq s\neq g} C_{sl}^{(j-1)}\left(H_{gl} - E_{\boldsymbol{s}}^{(j-1)} I_{gl}\right)\right],$$

$$C_{sl}^{(-1)} = C_{sl}^{(0)} = 0,\ E_s^{(0)} = H_{ss},$$

где j – индекс итерации.

Точное значение E_s определяется пределом последовательности:

$$E_s = \lim_{j\to\infty} E_s^{(j)},\ j = 0, 1, \ldots.$$

Приведем выражение для энергии, полученное после двух итераций:

$$E_s^{(1)} = E_s^{(0)} = H_{ss}, \tag{5}$$

$$E_s^{(2)} = \left[1 + \sum_{l \neq s} \frac{\left(H_{ls} - E_s^{(0)} I_{ls}\right) I_{sl}}{E_s^{(0)} - H_{ll}}\right]^{-1} \left[H_{ss} + \sum_{l \neq s} \frac{\left(H_{ls} - E_s^{(0)} I_{ls}\right) H_{sl}}{E_s^{(0)} - H_{ll}}\right]. \quad (6)$$

Подчеркнем, что в это выражение входят матричные элементы полного гамильтониана, в отличие от теории возмущений, где отдельно используются матричные элементы гамильтониана невозмущенной системы и оператора возмущения.

Как известно, собственные значения E_s не зависят от выбора базиса и его параметров, так что выполняются условия

$$\frac{\partial E_s}{\partial \omega_s^n} \equiv 0,\ n = \{1,\ 2,\ \ldots\}.$$

Начальные элементы последовательностей определяются формулами

$$E_s^{(0)}\left(\omega_s\right) = H_{ss}\left(\omega_s\right),\ C_{sl}^{(0)} = 0,\ \left|\Psi_s^{(0)}\right\rangle = \left|\psi_s^{(\omega_s)}\right\rangle,\ \frac{\partial E_s^{(0)}}{\partial \omega_s^n} = 0. \quad (7)$$

Приведенная итерационная схема оказалась эффективной для многих задач о взаимодействии квантовых систем с внешними полями (см., например, [14; 15]).

Согласно операторному методу [12] скорость сходимости итерационной схемы зависит от выбора базиса, который должен учитывать качественные особенности системы. В рассматриваемой задаче такой особенностью, которая не описывается базисом (3), является существование локализованного в пространстве состояния частицы. Взаимодействие частицы с полем приводит к смещению положения равновесия осцилляторов поля, что описывается каноническим преобразованием, соответствующим когерентному состоянию, с выделением классической компоненты $u_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}}$ с произвольной фазой:

$$\hat{a}_{\vec{k}}^{+} \to \hat{a}_{\vec{k}}^{+} + u_{\vec{k}}^{*} e^{i\vec{k}\vec{R}},\quad \hat{a}_{\vec{k}} \to \hat{a}_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}}.$$

В результате в гамильтониане выделяется потенциальное поле $U\left(\vec{r}\right) = \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\left(\vec{r} - \vec{R}\right)}$, которое и приводит к локализованному состоянию частицы. С учетом этого базисный набор может быть выбран в виде

$$\left|\Psi\left(\vec{r},\ \vec{R}\right)\right\rangle = \varphi\left(\vec{r} - \vec{R}\right) \exp\left(\sum_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}}^{*} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} - u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}\right)\right) |0\rangle. \quad (8)$$

Величины $u_{\vec{k}}$ и волновая функция $\varphi\left(\vec{r} - \vec{R}\right)$ являются вариационными параметрами искомого базиса (играют роль параметров ω_s). Из условия (7) получаем уравнения для определения $u_{\vec{k}}$ и $\varphi\left(\vec{r} - \vec{R}\right)$:

$$\begin{gathered} \frac{\delta}{\delta u_{\vec{k}}}\left[\left\langle\Psi\left(\vec{r},\ \vec{R}\right)\middle|\hat{H}\middle|\Psi\left(\vec{r},\ \vec{R}\right)\right\rangle\right] = 0, \\ \frac{\delta}{\delta \varphi\left(\vec{r} - \vec{R}\right)}\left[\left\langle\Psi\left(\vec{r},\ \vec{R}\right)\middle|\hat{H}\middle|\Psi\left(\vec{r},\ \vec{R}\right)\right\rangle\right] = 0. \end{gathered} \quad (9)$$

Принимая во внимание гамильтониан (1), из первого условия в формуле (9) получаем

$$u_{\vec{k}} = -\frac{f}{\sqrt{2V\omega_{\vec{k}}^3}} \int d\vec{r} \left|\varphi\left(\vec{r}\right)\right|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}}.$$

Второе условие в формуле (9) приводит к дифференциальному уравнению для функции $\varphi\left(\vec{r}\right)$, однако с учетом свободы выбора вариационных функций для исследования задачи в аналитической форме используем нормированную пробную волновую функцию в виде

$$\varphi\left(\vec{r}\right) = \frac{\gamma^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{3}{4}}} e^{-\frac{\gamma^2 r^2}{2}}, \quad (10)$$

где γ – вариационный параметр.

В результате классическая компонента поля $u_{\vec{k}}$ и фурье-образ волновой функции (10) имеют следующий вид:

$$u_{\vec{k}} = -\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{1}{\sqrt{k^3}}\int d\vec{r}\left|\varphi(\vec{r})\right|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}} = -\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{e^{-\frac{k^2}{4\gamma^2}}}{\sqrt{k^3}}, \tag{11}$$

$$\varphi_{\vec{k}} = \int d\vec{r}\varphi(\vec{r})e^{-i\vec{k}\vec{r}} = 2\sqrt{2}\frac{\pi^{\frac{3}{4}}}{\gamma^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{k^2}{2\gamma^2}} = \varphi_0 e^{-\frac{k^2}{2\gamma^2}}. \tag{12}$$

Состояния (8) вырождены по координате $\vec{R}$, но из них можно составить такую линейную комбинацию, которая будет собственной для оператора полного импульса $\hat{P}$:

$$\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle = \frac{1}{N_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\sqrt{V}}\int d\vec{R}\varphi_{\vec{P}_1}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\exp\left[\left(\vec{P}_1 - \vec{k}\,n_{\vec{k}}\right)\vec{R}\right]\times$$

$$\times\exp\left[\sum_{\vec{k}_1}\left(u_{\vec{k}_1}e^{-i\vec{k}_1\vec{R}}\hat{a}^+_{\vec{k}_1} - u^*_{\vec{k}_1}e^{i\vec{k}_1\vec{R}}\hat{a}_{\vec{k}_1}\right)\right]\left|n_k\right\rangle,$$

$$\hat{P}\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle = \vec{P}_1\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle.$$

Здесь $N_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}$ – константа нормировки.

В частности, в нулевом приближении вектор основного состояния имеет вид

$$\left|\Psi^{gr}_{\vec{P}}\right\rangle = \frac{1}{N_{\vec{P}}\sqrt{V}}\int d\vec{R}\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_{\vec{k}}\left(u^*_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\vec{R}}\hat{a}^+_{\vec{k}} - u_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{R}}\hat{a}_{\vec{k}}\right)\right)\left|0\right\rangle,$$

а соответствующая энергия $E^{(0)}_{gr}$ определяется формулой

$$E^{(0)}_{gr}\left(\vec{P},\, f\right) = \frac{P^2}{2} - \vec{P}\vec{L} + F + T_f\left(\vec{P}\right) + T_{\text{int}}\left(\vec{P}\right),$$

где

$$\vec{L} = \frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\vec{k}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^*_{\vec{P}}(\vec{r})\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}-\vec{k}\right)\vec{R}},$$

$$F = \frac{1}{2}\frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k},\,\vec{q}}\vec{k}\vec{q}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\left|u_{\vec{q}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^*(\vec{r})\varphi\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{i\vec{P}\vec{R}+\Theta\left(\vec{R}\right)-i\left(\vec{k}+\vec{q}\right)\vec{R}},$$

$$T_f\left(\vec{P}\right) = \frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\left(k+\frac{k^2}{2}\right)\left|u_{\vec{k}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^*_{\vec{P}}(\vec{r})\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}-\vec{k}\right)\vec{R}},$$

$$T_{\text{int}}\left(\vec{P}\right) = \frac{f}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\frac{u_{\vec{k}}}{\sqrt{2kV}}\int d\vec{R}d\vec{r}\left(\varphi^*_{\vec{P}}\left(\vec{r}+\vec{R}\right)\varphi_{\vec{P}}(\vec{r}) + \varphi^*_{\vec{P}}(\vec{r})\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}\vec{R}+\vec{k}\vec{r}\right)},$$

$$\Theta\left(\vec{R}\right) = \sum_{\vec{k}}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\left(e^{-i\vec{k}\vec{R}}-1\right),$$

$$\left|N_{\vec{P}}\right|^2 = \int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^*_{\vec{P}}(\vec{r})\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\vec{P}\vec{R}}.$$

Уравнения (5) и (6) для поправки второго порядка принимают вид

$$E^{(2)} = \frac{E^{(0)}_{gr} + \sum\limits_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}\neq 0} C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\left\langle\Psi^{gr}_{\vec{P}}\left|\hat{H}\right|\Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle}{1 + \sum\limits_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}\neq 0} C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\left\langle\Psi^{gr}_{\vec{P}}\left|\Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle\right.},$$

$$C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} = \frac{E^{(0)}_{gr}\left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle - \left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle}{H_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}};\, \vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} - E^{(0)}_{gr}},$$

$$H_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}};\, \vec{P}_2,\, n_{1\vec{k}}} = \left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi_{\vec{P}_2,\, n_{1\vec{k}}} \right\rangle,\ E^{(0)}_{gr} = \left\langle \Psi^{gr}_{\vec{P}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle.$$

Подчеркнем, что все матричные элементы вычисляются с полным гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\vec{P}^2 - 2\sum_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \vec{k}\vec{P} + \left(\sum_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \vec{k} \right)^2 \right) + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} +$$

$$+ \frac{f}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \right).$$

В настоящей работе исследуется характер особенности энергии основного состояния $E^{(0)}_{gr}$ при малой константе связи. Для покоящейся частицы ($\vec{P} = 0$) получаем

$$E^{(0)}_{gr}(0,\, f) = -f^2 \frac{\left(-4 + \sqrt{2}\right)^2}{32\pi},\ \gamma = \frac{\sqrt{3\pi}}{2}\left(4 - \sqrt{2}\right).$$

Вычисляя энергию системы при малом $\vec{P} \neq 0$, находим эффективную массу системы:

$$E^{(0)}_{gr}\left(\vec{P},\, f\right) \approx E^{(0)}_{gr}(0,\, f) + \frac{P^2}{2}\left[1 - \frac{f^2}{9\pi^2} \frac{17 - \sqrt{2}}{21} \right],$$

$$m^{(0)}_{\text{eff}} = 1 + \frac{f^2}{9\pi^2} \frac{17 - \sqrt{2}}{21}.$$

Таким образом, при использовании неасимптотического базиса масса и энергия системы в нулевом приближении не содержат ультрафиолетовых расходимостей.

Энергия и эффективная масса во второй итерации

Вычисление энергии для покоящейся частицы ($\vec{P} = 0$) во второй итерации связано с учетом промежуточных однофононных состояний, что приводит к следующему выражению:

$$E^{(2)}(0,\, f) = \frac{U}{D},$$

где

$$U = E^{(0)}_{gr} + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varphi^2_{\vec{k}} \varphi^2_0} \left[-u_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(\frac{k^2}{2} + k \right) - \frac{f}{\sqrt{2V}} \frac{\varphi_{\vec{k}} \varphi_0}{\sqrt{k}} - v_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr} \right) \right] \times$$

$$\times \left[u_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(\frac{k^2}{2} + k \right) + \frac{f}{\sqrt{2V}} \frac{\varphi_{\vec{k}} \varphi_0}{\sqrt{k}} + u_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} \right) - E^{(0)}_{gr} u_{\vec{k}} \varphi^2_0 \right] \times$$

$$\times \left[\frac{k^2}{2} + k + f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr} \right]^{(-1)},$$

$$D = 1 + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varphi^2_{\vec{k}} \varphi^2_0} \frac{\left[-u_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(\frac{k^2}{2} + k \right) - \frac{f}{\sqrt{2V}} \frac{\varphi_{\vec{k}} \varphi_0}{\sqrt{k}} - u_{\vec{k}} \varphi^2_{\vec{k}} \left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr} \right) \right] u_{\vec{k}} \left(\varphi^2_{\vec{k}} - \varphi^2_0 \right)}{\frac{k^2}{2} + k + f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr}},$$

$$T_{\vec{k}} = \vec{k}\vec{T}_{\vec{k}}^{(1)} + T_{\vec{k}}^{(2)} + T_{\vec{k}}^{(3)},$$

$$\vec{T}_{\vec{k}}^{(1)} = \frac{\vec{k}}{k^2}\frac{\gamma^2}{32\pi^2}\frac{4k - e^{\frac{2k^2}{3\gamma^2}}\sqrt{6\pi}\gamma\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right)}{k},$$

$$T_{\vec{k}}^{(2)} = \frac{\gamma^2}{96\pi^2}\frac{\sqrt{6\pi}\gamma e^{\frac{2k^2}{3\gamma^2}}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right) + 6\pi\,\mathrm{erfi}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right)}{k},$$

$$T_{\vec{k}}^{(3)} = -\frac{\gamma^2}{4\pi}\frac{\mathrm{erfi}\left(\frac{k}{\sqrt{3}\gamma}\right)}{k},$$

$$S_{\vec{k}} \approx \frac{5^{\frac{1}{2}}\gamma^2}{4(2\pi)^3 3^5}e^{\frac{4k^2}{5\gamma^2}}\frac{\frac{2k^2}{15\gamma^2} - 1}{\left(1 + \frac{4k^2}{45\gamma^2}\right)^3}.$$

Здесь $\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-\tau^2}d\tau$ – функция ошибок; $\mathrm{erfi}(x) = -i\,\mathrm{erf}(ix)$ – функция ошибок от мнимого аргумента.

В пределе слабой связи величина U определяется двумя сходящимися суммами:

$$U \approx E_{gr}^{(0)} + \sum_{\vec{k}<\vec{k}_0}\frac{-\left(u_{\vec{k}}\frac{\varphi_{\vec{k}}}{\varphi_0}\left(\frac{k^2}{2}+k\right) + \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{1}{\sqrt{k}}\right)^2}{\frac{k^2}{2}+k} + \sum_{\vec{k}>\vec{k}_0}\frac{\left(-\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}}\right)\left(-E_{gr}^{(0)}u_{\vec{k}}\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2 f^2 T_{\vec{k}}}. \quad (13)$$

Точка k_0 является решением следующего уравнения:

$$\frac{k^2}{2} + kf^2T_{\vec{k}} - E_{gr}^{(0)} = 0 \Rightarrow k_0 \sim \gamma\sqrt{3|\ln f|}.$$

Хорошо определенное и сходящееся выражение получается и для величины D:

$$D \approx 1 + \sum_{\vec{k}<\vec{k}_0}\frac{-\left(u_{\vec{k}}\frac{\varphi_{\vec{k}}^2}{\varphi_0^2}\left(\frac{k^2}{2}+k\right) + \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}}{\varphi_0\sqrt{k}}\right)u_{\vec{k}}\left(\varphi_{\vec{k}}^2 - \varphi_0^2\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2\left(\frac{k^2}{2}+k\right)} +$$

$$+ \sum_{\vec{k}>\vec{k}_0}\frac{\left(\frac{-f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}}\right)u_{\vec{k}}\left(\frac{\varphi_{\vec{k}}^2}{\varphi_0^2} - 1\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2 f^2 T_{\vec{k}}}. \quad (14)$$

Детали вычислений более подробно описаны в работе [16].

Подставляя значения $\varphi_{\vec{k}}$ и $u_{\vec{k}}$ из формул (11) и (12) в уравнения (13) и (14), находим следующие приближенные аналитические формулы для U и D:

$$U \approx E_{gr}^{(0)} - \left[\frac{f^2\gamma}{24\pi^2}\left(\sqrt{6\pi}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{3/2}k_0}{\gamma}\right) + \gamma - \gamma e^{-\frac{3k_0^2}{2\gamma^2}}\right) - \frac{f^2\gamma}{2\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}}}\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{3}k_0}{2\gamma}\right)\right] -$$

$$- \frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{k_0}{2}+1\right) + E_{gr}^{(0)}\frac{12\sqrt{6\pi}}{5\gamma\pi}e^{-\frac{5k_0^2}{12\gamma^2}},$$

$$D \approx 1 + \frac{f^2}{12\pi^2}\left(1 - e^{-\frac{3k_0^2}{2\gamma^2}}\right) - f^2 h\left(\frac{k_0}{\gamma}\right) - \frac{144\sqrt{6\pi}}{25\gamma\pi}\left(1 + \frac{5}{12}\frac{k_0^2}{\gamma^2}\right)e^{-\frac{5k_0^2}{12\gamma^2}},$$

$$h(x) = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^x \frac{\tau d\tau}{1+\frac{\tau}{2}} e^{-\frac{3\tau^2}{4}}.$$

При малой константе связи $D \approx 1$, и вторая итерация для энергии основного состояния дает следующий результат:

$$E^{(2)}(0,\ f) \approx U \approx -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{k_0}{2}+1\right) = -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{\gamma\sqrt{3|\ln f|}}{2}+1\right),\ f \ll 1, \tag{15}$$

который показывает, что энергия имеет логарифмическую особенность в пределе малой константы связи и, как следствие, ее нельзя разложить в степенной ряд по f.

Выражение (15) по форме совпадает с результатом, полученным по теории возмущений (4). Существенное отличие между ними состоит в том, что импульс обрезания является параметром, связанным с внутренним свойством системы. Таким образом, энергия основного состояния не является аналитической функцией при $f = 0$, по этой причине применение теории возмущений к рассматриваемой модели приводит к расходящимся интегралам.

Чтобы получить перенормированную массу в итерации второго порядка, мы должны вычислить вторую итерацию для энергии движущейся частицы ($\vec{P} \neq 0$). В случае малых f имеем

$$E^{(2)}\left(\vec{P},\ f\right) = E^{(2)}(0,\ f) + \frac{P^2}{2} - \frac{f^2}{2V}\sum_{\vec{k}<\vec{k}_0}\frac{\left(\vec{P}\vec{k}\right)^2}{k\left(\frac{k^2}{2}+k\right)^3}.$$

Тогда перенормированная масса соответствует выражению

$$m_{\text{eff}}^{(2)} \approx 1 + \frac{f^2}{6\pi^2}.$$

Как и следовало ожидать, этот результат совпадает с выражением, полученным в рамках стандартной теории возмущений, в которой эффективная масса не содержит расходящихся интегралов.

Заключение

В настоящей работе построена итерационная схема для описания системы, которая включает частицу, взаимодействующую со скалярным квантовым полем. Показано, что ультрафиолетовая расходимость, возникающая при вычислении энергии данной системы в рамках теории возмущений, устраняется при использовании базисного набора неасимптотических волновых функций. При этом эффективный импульс обрезания, который определяет сходимость интегралов, зависит от параметров самой системы. Причиной расходимости при использовании теории возмущений является логарифмическая особенность энергии системы при малой константе связи.

Библиографические ссылки

1. Dyson FJ. The *S* matrix in quantum electrodynamics. *Physical Review.* 1949;75(11):1736–1755. DOI: 10.1103/PhysRev.75.1736.

2. Gell-Mann M, Low FE. Quantum electrodynamics at small distances. *Physical Review.* 1954;95(5):1300–1312. DOI: 10.1103/PhysRev.95.1300.

3. 't Hooft G. Renormalization of massless Yang – Mills fields. *Nuclear Physics B.* 1971;33(1):173–199. DOI: 10.1016/0550-3213(71)90395-6.

4. 't Hooft G, Veltman M. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nuclear Physics B.* 1972;44(1):189–213. DOI: 10.1016/0550-3213(72)90279-9.

5. Feynman RP. The development of the space-time view of quantum electrodynamics. *Science.* 1966;153(3737):699–708. DOI: 10.1126/science.153.3737.699.

6. Kibble TWB. Coherent soft-photon states and infrared divergences. II. Mass-shell singularities of Green's functions. *Physical Review.* 1968;173(5):1527–1535. DOI: 10.1103/PhysRev.173.1527.

7. Fröhlich H. Electrons in lattice fields. *Advances in Physics.* 1954;3(11):325–361. DOI: 10.1080/00018735400101213.
8. Gerlach B, Löwen H. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not? *Reviews of Modern Physics.* 1991;63(1):63–90. DOI: 10.1103/RevModPhys.63.63.
9. Mitra TK, Chatterjee A, Mukhopadhyay S. Polarons. *Physics Reports.* 1987;153(2–3):91–207. DOI: 10.1016/0370-1573(87)90087-1.
10. Feynman RP. Slow electrons in a polar crystal. *Physical Review.* 1955;97(3):660–665. DOI: 10.1103/PhysRev.97.660.
11. Spohn H. Effective mass of the polaron: a functional integral approach. *Annals of Physics.* 1987;175(2):278–318. DOI: 10.1016/0003-4916(87)90211-9.
12. Feranchuk ID, Fisher SI, Komarov LI. Analysis of the polaron problem on the basis of the operator method. *Journal of Physics C: Solid State Physics.* 1984;17(24):4309–4318. DOI: 10.1088/0022-3719/17/24/012.
13. Feranchuk ID, Komarov LI. The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A.* 1982;88(2):211–214. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90229-8.
14. Леонов АВ. О сходимости итерационной схемы операторного метода для описания собственных состояний квантовой модели Раби. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2018;3:74–80.
15. Леонов АВ, Феранчук ИД. Аналитическая диагонализация гамильтониана квантовой модели Раби в кулоновской калибровке. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2022;1:44–51. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-1-44-51.
16. Skoromnik OD, Feranchuk ID, Lu DV, Keitel CH. Regularization of ultraviolet divergence for a particle interacting with a scalar quantum field. *Physical Review D.* 2015;92(12):125019. DOI: 10.1103/PhysRevD.92.125019.

References

1. Dyson FJ. The *S* matrix in quantum electrodynamics. *Physical Review.* 1949;75(11):1736–1755. DOI: 10.1103/PhysRev.75.1736.
2. Gell-Mann M, Low FE. Quantum electrodynamics at small distances. *Physical Review.* 1954;95(5):1300–1312. DOI: 10.1103/PhysRev.95.1300.
3. 't Hooft G. Renormalization of massless Yang – Mills fields. *Nuclear Physics B.* 1971;33(1):173–199. DOI: 10.1016/0550-3213(71)90395-6.
4. 't Hooft G, Veltman M. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nuclear Physics B.* 1972;44(1):189–213. DOI: 10.1016/0550-3213(72)90279-9.
5. Feynman RP. The development of the space-time view of quantum electrodynamics. *Science.* 1966;153(3737):699–708. DOI: 10.1126/science.153.3737.699.
6. Kibble TWB. Coherent soft-photon states and infrared divergences. II. Mass-shell singularities of Green's functions. *Physical Review.* 1968;173(5):1527–1535. DOI: 10.1103/PhysRev.173.1527.
7. Fröhlich H. Electrons in lattice fields. *Advances in Physics.* 1954;3(11):325–361. DOI: 10.1080/00018735400101213.
8. Gerlach B, Löwen H. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not? *Reviews of Modern Physics.* 1991;63(1):63–90. DOI: 10.1103/RevModPhys.63.63.
9. Mitra TK, Chatterjee A, Mukhopadhyay S. Polarons. *Physics Reports.* 1987;153(2–3):91–207. DOI: 10.1016/0370-1573(87)90087-1.
10. Feynman RP. Slow electrons in a polar crystal. *Physical Review.* 1955;97(3):660–665. DOI: 10.1103/PhysRev.97.660.
11. Spohn H. Effective mass of the polaron: a functional integral approach. *Annals of Physics.* 1987;175(2):278–318. DOI: 10.1016/0003-4916(87)90211-9.
12. Feranchuk ID, Fisher SI, Komarov LI. Analysis of the polaron problem on the basis of the operator method. *Journal of Physics C: Solid State Physics.* 1984;17(24):4309–4318. DOI: 10.1088/0022-3719/17/24/012.
13. Feranchuk ID, Komarov LI. The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A.* 1982;88(2):211–214. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90229-8.
14. Leonau AU. Investigating the convergence of the iteration scheme of operator method for description of eigenstates of the quantum Rabi model. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2018;3:74–80. Russian.
15. Leonau AU, Feranchuk ID. Analytical diagonalisation of the Hamiltonian of the quantum Rabi model in the Coulomb gauge. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2022;1:44–51. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-1-44-51.
16. Skoromnik OD, Feranchuk ID, Lu DV, Keitel CH. Regularization of ultraviolet divergence for a particle interacting with a scalar quantum field. *Physical Review D.* 2015;92(12):125019. DOI: 10.1103/PhysRevD.92.125019.

Получена 26.09.2022 / исправлена 11.10.2022 / принята 20.10.2022.
Received 26.09.2022 / revised 11.10.2022 / accepted 20.10.2022.

Физика конденсированного состояния

Condensed state physics

УДК 538.911

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ СИСТЕМЫ V – Nb – Ta – Ti, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ КРИПТОНА

В. В. УГЛОВ[1)]***, С. В. ЗЛОЦКИЙ***[1)]***, М. М. БЕЛОВ***[1)]***, А. Е. РЫСКУЛОВ***[2)]***,***
И. А. ИВАНОВ[2)]***, А. Е. КУРАХМЕДОВ***[2)]***, Д. А. МУСТАФИН***[2)]***, Э. Д. САПАР***[2)]***, КЕ ДЖИН***[3)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, ул. Ибрагимова, 1, 050032, г. Астана, Казахстан*
[3)]*Пекинский технологический институт, ул. Южная, 5, Чжунгуаньцунь, 100811, г. Пекин, Китай*

Образец цитирования:
Углов ВВ, Злоцкий СВ, Белов ММ, Рыскулов АЕ, Иванов ИА, Курахмедов АЕ, Мустафин ДА, Сапар ЭД, Ке Джин. Структурно-фазовые изменения в концентрированных твердых растворах системы V – Nb – Ta – Ti, облученных ионами криптона. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:14–24 (на англ.).
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-14-24

For citation:
Uglov VV, Zlotsky SV, Belov MM, Ryskulov AE, Ivanov IA, Kurakhmedov AE, Mustafin DA, Sapar AD, Ke Jin. Structural and phase states on concentrated solid solution of the V – Nb – Ta – Ti system irradiated by krypton ions. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:14–24.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-14-24

Авторы:
Владимир Васильевич Углов – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физики твердого тела физического факультета.
Сергей Владимирович Злоцкий – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры физики твердого тела физического факультета.
Михаил Михайлович Белов – студент физического факультета. Научный руководитель – В. В. Углов.
Азамат Еркнулы Рыскулов – кандидат физико-математических наук; инженер службы управления циклотрона ДЦ-60.
Игорь Александрович Иванов – кандидат физико-математических наук; начальник циклотрона ДЦ-60.
Алишер Ерметович Курахмедов – начальник службы управления циклотрона ДЦ-60.
Даулет Айтмагомбетович Мустафин – начальник службы управления циклотрона ДЦ-60.
Эсет Деулетулы Сапар – инженер службы высокочастотных систем и источника электронного циклотронного резонанса циклотрона ДЦ-60.
Ке Джин – доктор наук (материаловедение и инженерия); профессор.

Authors:
Vladimir V. Uglov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of solid state physics, faculty of physics.
uglov@bsu.by
Sergey V. Zlotsky, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of solid state physics, faculty of physics.
zlotski@bsu.by
Mikhail M. Belov, student at the faculty of physics.
mb17023@gmail.com
Azamat E. Ryskulov, PhD (physics and mathematics); engineer at the management service of the DC-60 cyclotron.
ryskulov_nbd@mail.ru
Igor A. Ivanov, PhD (physics and mathematics); head at the DC-60 cyclotron.
igor.ivanov.inp@gmail.com
Alisher E. Kurakhmedov, head of the management service of the DC-60 cyclotron.
Daulet A. Mustafin, head of the management service of the DC-60 cyclotron.
Aset D. Sapar, engineer of the high frequency system and electron cyclotron resonance source service of the DC-60 cyclotron.
Ke Jin, PhD (materials science and engineering); professor.
jinke@bit.edu.cn

Приведены результаты влияния облучения при комнатной температуре низкоэнергетическими ионами криптона (энергия 280 кэВ и флюенс $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$) на структурно-фазовое состояние многокомпонентных твердых растворов на основе системы V – Nb – Ta – Ti. Методами сканирующей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа было установлено, что сформированные бинарные, тройные и четверные сплавы системы V – Nb – Ta – Ti являются равнокомпозиционными однофазными твердыми растворами, имеют однородное распределение элементов в приповерхностном слое и обладают сжимающими микро- и макронапряжениями, рассчитанными методами Холдера – Вагнера и $\sin^2\psi$. При облучении ионами криптона сплавов системы V – Nb – Ta – Ti существенных изменений в структурно-фазовом состоянии не выявлено. Распада твердого раствора и нарушения равнокомпозиционности и однородности распределения элементов в приповерхностном слое не происходит. Облучение ионами криптона приводит к изменению уровня микро- и макронапряжений для всех сплавов системы V – Nb – Ta – Ti.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы; ВЭС; многокомпонентные твердые растворы; облучение; радиационные дефекты; ионы криптона; остаточные напряжения.

STRUCTURAL AND PHASE STATES ON CONCENTRATED SOLID SOLUTION OF THE V − Nb − Ta − Ti SYSTEM IRRADIATED BY KRYPTON IONS

V. V. UGLOV [a], ***S. V. ZLOTSKY*** [a], ***M. M. BELOV*** [a], ***A. E. RYSKULOV*** [b], ***I. A. IVANOV*** [b], ***A. E. KURAKHMEDOV*** [b], ***D. A. MUSTAFIN*** [b], ***A. D. SAPAR*** [b], ***KE JIN*** [c]

[a] *Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b] *Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, 1 Ibragimova Street, Astana 050032, Kazakhstan*
[c] *Beijing Institute of Technology, 5 South Street, Zhongguancun, Beijing 100811, China*
Corresponding author: V. V. Uglov (uglov@bsu.by)

The results of the effect of irradiation at room temperature by low-energy krypton ions with an energy of 280 keV and a fluence of $5 \cdot 10^{15}$ cm^{-2} on the structural-phase state of multicomponent solid solutions based on the V – Nb – Ta – Ti system are presented. By scanning electron microscopy and X-ray diffraction analysis, it was found that the formed binary, triple and quadruple alloys of the V – Nb – Ta – Ti system are equiatomic single-phase solid solutions, have a homogeneous distribution of elements in the near-surface layer and have compressive micro- and macrostresses calculated by Halder – Wagner and $\sin^2\psi$ methods. The conducted studies have shown that no significant changes in the structural-phase state were detected when the alloys of the V – Nb – Ta – Ti system were irradiated by krypton ions. There is no decay of the solid solution and disturbance of the equiatomic and uniformity of the distribution of elements in the near-surface layer. Irradiation by krypton ions leads to a change in the level of micro- and macrostresses for all alloys of the V – Nb – Ta – Ti system.

Keywords: high-entropy alloys; HEA; multicomponent solid solutions; irradiation; radiation defects; krypton ions; residual stress.

Introduction

Recently, nuclear power has been one of the most efficient sources of electricity [1]. With the development of technological progress, the need to increase the efficiency of nuclear reactors is also growing. Thus, the development of new generation IV nuclear reactors requires the use of materials with high mechanical properties at elevated temperatures and resistance to radiation exposure (when interacting with nuclear reaction products) [2].

Currently known austenitic steels are not suitable as new reactor materials due to their strong radiation swelling, and in the case of ferritic-martensitic steels, creep resistance and embrittlement at irradiation temperatures above 550 °C remain unresolved problems [3–5]. Therefore, the issue of developing new radiation-resistant materials is currently relevant for the world's research laboratories.

High-entropy alloys (HEA) based on a single-phase solid solution and a large number of basic elements in equimolar or almost equimolar ratios are promising for obtaining radiation-resistant materials for nuclear power [6]. The HEA includes alloys consisting of five or more elements with a concentration from 5 to 30 at. %.

It is believed that the maximisation of the configuration entropy of the HEA contributes to the formation of a single-phase disordered solid solution instead of the precipitation of complex intermetallic phases, as a result of which the alloy has a simple structure with improved properties compared to traditional alloys [7–9]. Numerous studies have shown that HEA have a high elastic limit, fatigue strength, thermal and corrosion resistance, creep resistance, radiation resistance [7; 10]. The properties of these alloys are associated with four main features: high entropy, greater deformation of the crystal lattice compared to traditional metals and alloys, multi-element composition and delayed diffusion [10]. A high degree of chemical disorder and lattice distortion in HEA increase the scattering of electrons and phonons, which leads to a decrease in thermal and electrical conductivity. The consequence of this is a slowing down of energy dissipation during the collision cascade and an increase in the duration of the thermal burst, which increases recombination between vacancies and interstitials [11–13]. In addition, the energies of formation and migration of vacancies and interstitial atoms have a wider energy distribution, which also increases the recombination of defects [14–16]. Due to the complexity of the composition, impurity-defect clusters formed by the interaction of point defects move along a chaotic trajectory, unlike directional movement in simple metals. This leads to an increase in the number of internode clusters in the area enriched with vacancies, which increases the recombination of defects [17].

However, at the moment, most of the researches of radiation damage of HEA were aimed at studies of face centred cubic structure HEA based on transition metals (Co – Cr – Fe – Mn – Ni). High-entropy alloys based on refractory elements of the 4, 5, 6 alloy group show considerable potential for structural applications [18]. Thus, according to the literature, the main elements included in the composition of refractory materials are molybdenum and tantalum due to their excellent high-temperature strength and titanium due to its high ductility [19]. Research of alloys based on the NbTaV, where X is Ti, W, Mo, shown that these alloys have high strength, ductility and oxidation resistance [20; 21]. The alloy TiVNbTa shows excellent compressive mechanical properties at room temperature (σ_y = 1273 MPa) and elevated temperature (σ_y decreases to 688 MPa when the temperature reaches 900 °C) [22]. Alloys based on the Ti – V – Cr – Zr – Nb system have also considered as high temperature, structural materials which exhibit low densities and high hardness [23]. Therefore, refractory HEAs (which contain Ti, Zr, Hf, Ta, V, Nb, W, and Cr) are one type of contender because they display exceptional high melting points, ductility, and strength at elevated temperatures [24–26].

The purpose of this work is to study the structural and phase state of binary, triple and quadruple systems of concentrated solid solutions based on the V – Nb – Ta – Ti system irradiated by low-energy krypton ions.

Materials and experimental details

Concentrated solid solutions based on the V – Nb – Ta – Ti system, specifically V, VNb, VNbTa, VNbTaTi were manufactured at the Beijing Institute of Technology. Samples were synthesised using high purity metals (>99.9 %) by arc melting and casting in a copper cell, followed by homogenisation. Then vacuum annealing was carried out for 24 and 72 h at the temperature of 1150 °C followed up cold rolling up to 85 % reduction in thickness.

The samples were irradiated at a DC-60 heavy ion accelerator located in Astana (Kazakhstan). The implantation was performed at room temperature with krypton ions, since krypton is one of the fission products of uranium. The energy Kr^{14+} ions were 280 keV and irradiation fluence was $5 \cdot 10^{15}$ cm^{-2}.

Changes in the structure and phase composition after irradiation were evaluated by X-ray diffraction analysis on a Ultima IV diffractometer (*Rigaku*, Japan) in the geometry of a parallel beam using copper radiation (λ = 0.154 18 nm). To study only the surface layer implanted with krypton, samples were taken at a fixed small angle of incidence of X-rays (1°) [27]. In this geometry, the penetration depths of X-rays for V, VNb, VNbTa, VNbTaTi alloys were 284; 146; 72 and 62 nm, respectively [27]. To exclude the influence of the texture of the alloys, the survey was carried out with a constant rotation of the sample at a speed of 30 rps. The effect of irradiation on the structure of the samples was studied by changes in macrostresses ($\sin^2\psi$ method) and microstresses (Halder – Wagner method) [28; 29].

The distribution of elements in the near-surface layer and its morphology were studied using Rutherford backscattering spectroscopy (RBS) and proton induced X-ray emission (PIXE) on a DC-60 accelerator, scanning electron microscopy (SEM) and energy dispersive X-ray spectrometry (EDX) on a scanning electron microscope LEO-1455VP (*Carl Zeiss*, Germany). Rutherford backscattering spectroscopy was conducted using an accelerated $^{14}N^{2+}$ beam with an energy of 1 MeV per nucleon.

The calculation of energy losses was carried out in the *SRIM-2013* program using the Kinchin – Pease model [30]. Figure 1 shows the distribution profiles of implanted Kr^{14+} ions and the results of modelling radiation damage (measured in displacement per atom, dpa). The maximum range of krypton ions was about 200 nm with the maximum damage for vanadium at a depth of 80 nm. The highest value of the damaging dose is 12.6 dpa for vanadium and 13.5 dpa for VNbTaTi. The concentration of implanted Kr^{14+} ions does not exceed 1 %.

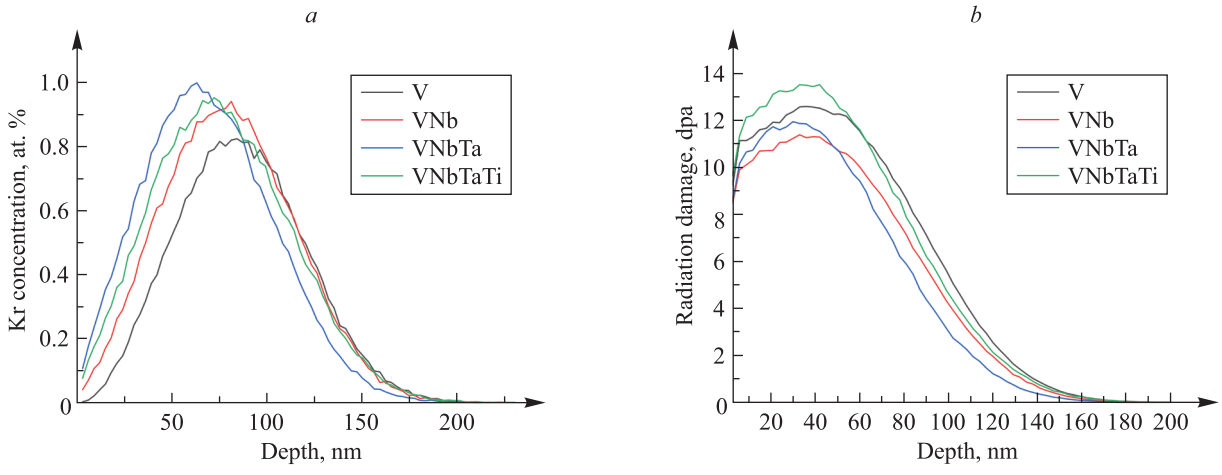


Fig. 1. Profiles of the distribution of implanted Kr^{14+} ion (*a*) and the damaging dose (*b*) in samples V, VNb, VNbTa, VNbTaTi by depth

Results and discussions

Table 1 shows the results of the elemental composition analysis calculated by the PIXE and EDX methods. As can be seen from the table for binary, triple and quadruple systems, an equiatomic (within an error of 5–6 %) distribution of elements over the depth was confirmed by the EDX method, and the equiatomic and homogeneous distribution of elements over the surface was confirmed by the PIXE method.

Table 1

Results of the elemental composition in the initial samples of the V – Nb – Ta – Ti system calculated by the PIXE and EDX methods

Sample	Chemical element	Concentration, at. %	
		PIXE method	EDX method
V	V	100.0	100.0
VNb	V	50.0	49.5
	Nb	50.0	50.5
VNbTa	V	32.0	33.9
	Nb	33.0	34.2
	Ta	35.0	31.9
VNbTaTi	V	24.5	23.6
	Nb	25.5	26.1
	Ta	26.0	25.9
	Ti	24.0	24.5

Analysis of images of samples by the SEM method showed the uniformity of the surface structure of the samples V, VNb, VNbTa and VNbTaTi (fig. 2). The results of the study of the distribution of elements revealed a homogeneous distribution (within an error of 5–6 %) of elements over the surface of these samples (fig. 3). Small deviations from the uniformity of the distribution of elements are probably associated with the grain structure of materials.

According to the literature data, the equiatomic composition of multicomponent solid solutions may indicate the formation of single-phase solid solutions [8]. The study carried out by X-ray diffraction analysis confirms this assumption (fig. 4).

The general appearance of the X-ray diffraction pattern of non-irradiated binary, triple, and quadruple alloys is characterised by a slight asymmetry of the diffraction lines which is due to the possible heterogeneity of the structure due to the local heterogeneity of the alloy elements with different atomic radii of the elements and typical for multicomponent high-entropy alloys. As can be seen from fig. 4, all samples are single-phase solid solutions with a body-centered cubic lattice. The lattice parameter for samples V, VNb, VNbTa, VNbTaTi increases with increasing complexity of the composition of the systems and is 0.3027; 0.3177; 0.3227; 0.3234 nm, respectively. The growth of the lattice parameter is associated with an increase in the atomic radius of the elements in the composition.

Diffractograms of V, VNb, VNbTa and VNbTaTi samples irradiated by krypton ions show that the phase composition does not change (no decay of solid solutions has been detected). However, there is a more pronounced asymmetry of peaks and their displacement towards smaller angles compared to the original diffractograms, which indicates deformation of the crystal lattice in the near-surface region caused by irradiation (fig. 5).

Irradiation does not lead to a significant change of the equiatomic distribution of elements, as evidenced by the results of EDX and PIXE (table 2). According to the results of RBS, krypton is observed only in pure vanadium and both its concentration and depth agree with the results obtained in the program *SRIM-2013*. Krypton was not detected on the other alloys, possibly due to the low concentration and close atomic numbers of krypton and neobium.

Table 2

Results of the elemental composition in irradiated samples of the V – Nb – Ta – Ti system calculated by the PIXE and EDX methods

Sample	Chemical element	Concentration, at. %	
		PIXE method	EDX method
V	V	100.0 99.2*	100.0
VNb	V	50.0	49.7
	Nb	50.0	50.3
VNbTa	V	29.0	36.3
	Nb	35.0	31.2
	Ta	36.0	32.6
VNbTaTi	V	21.0	25.2
	Nb	29.0	25.4
	Ta	29.0	24.3
	Ti	21.0	25.1

*At depth of 90 nm the highest concentration of krypton ions (0.8 at. %) is observed.

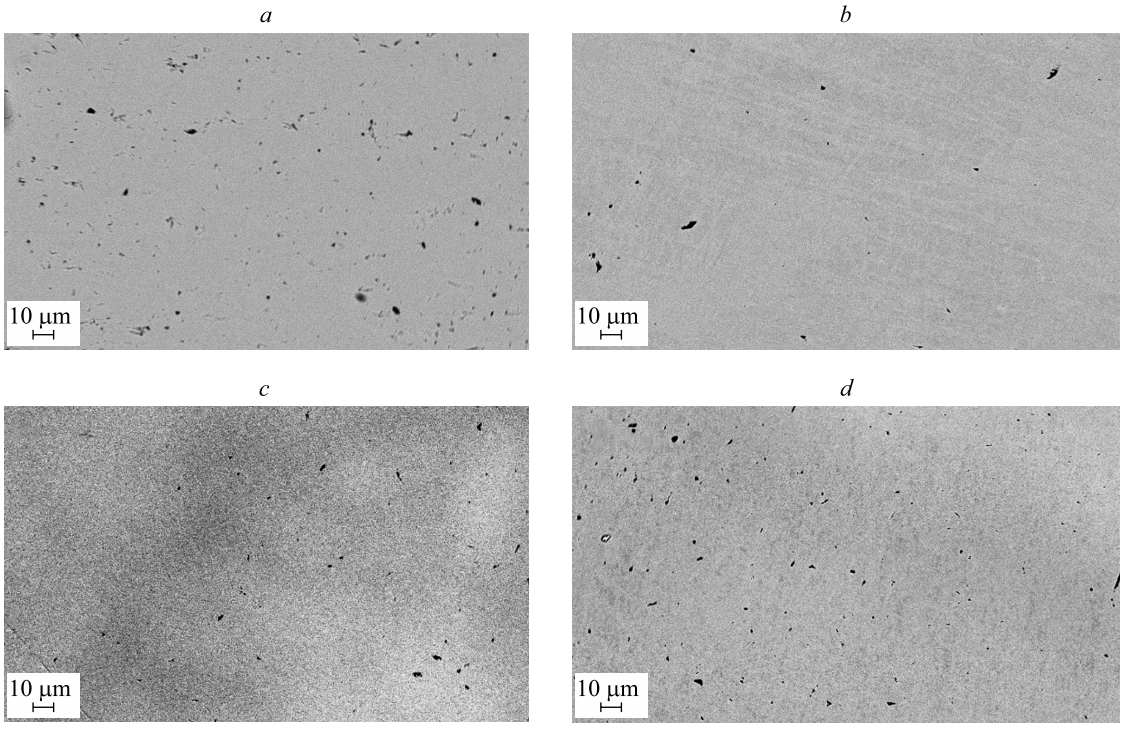


Fig. 2. Surface morphology in the initial samples surface V (*a*), VNb (*b*), VNbTa (*c*), VNbTaTi (*d*)

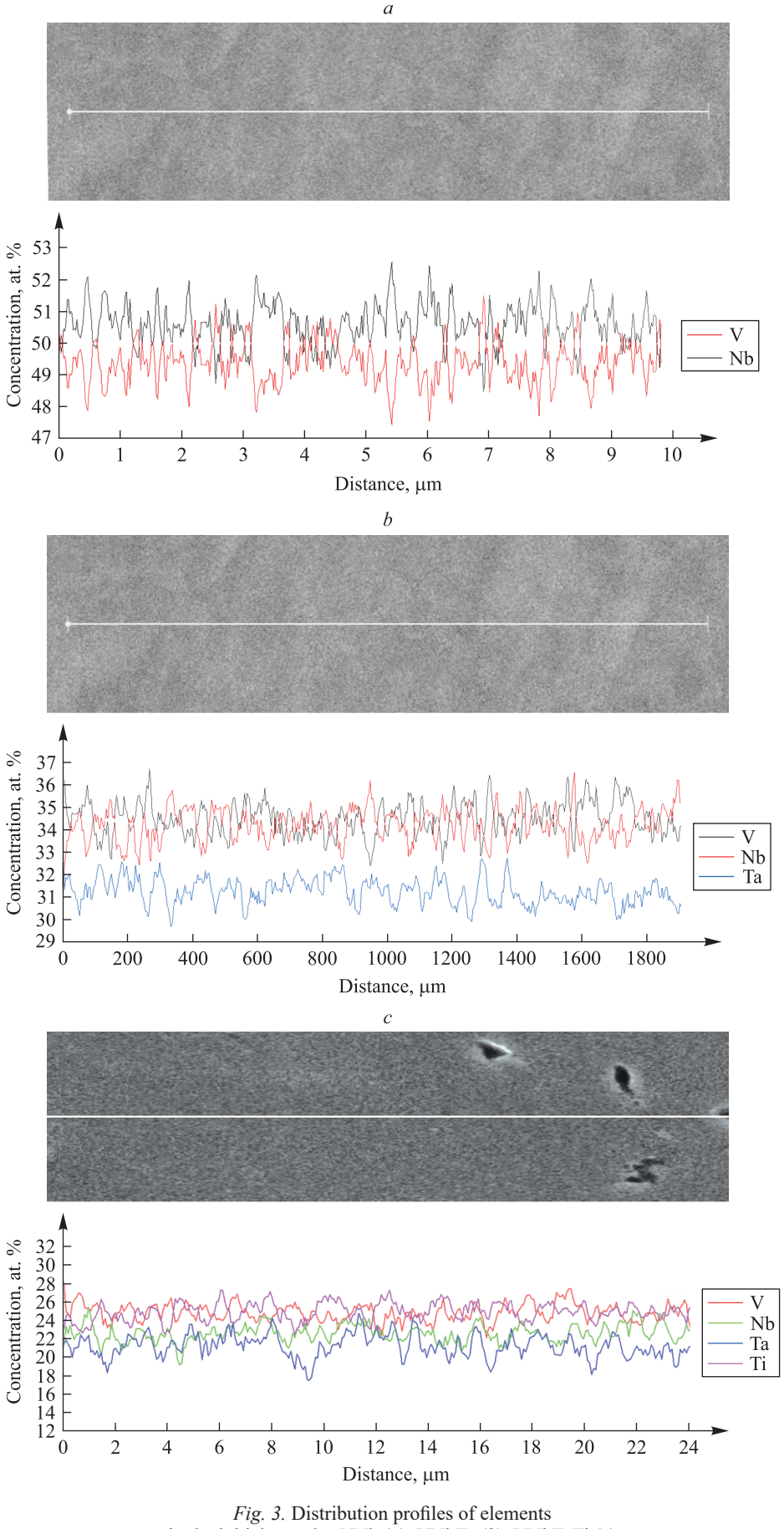


Fig. 3. Distribution profiles of elements
in the initial samples VNb (*a*), VNbTa (*b*), VNbTaTi (*c*)

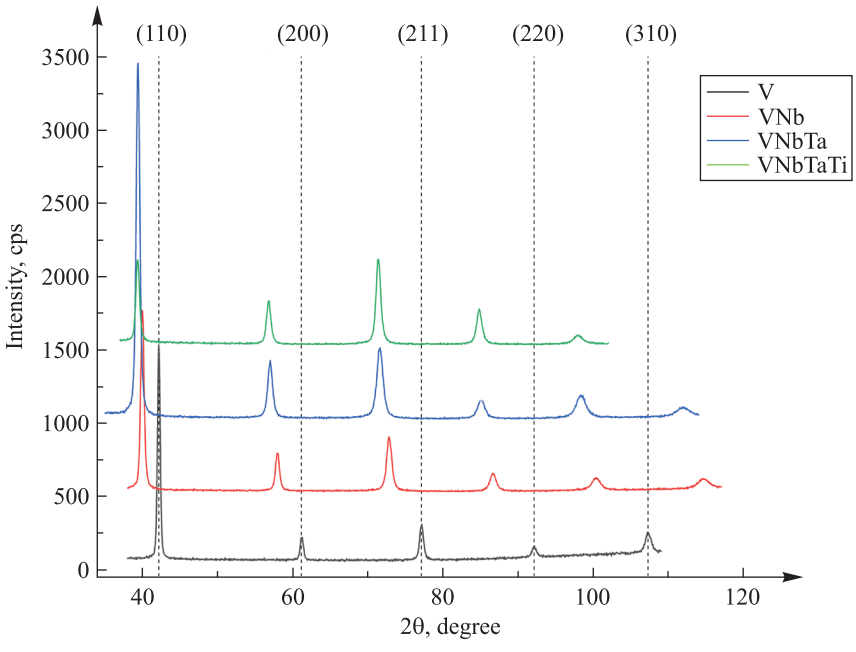


Fig. 4. X-ray diffraction pattern of the initial samples of the V – Nb – Ta – Ti system

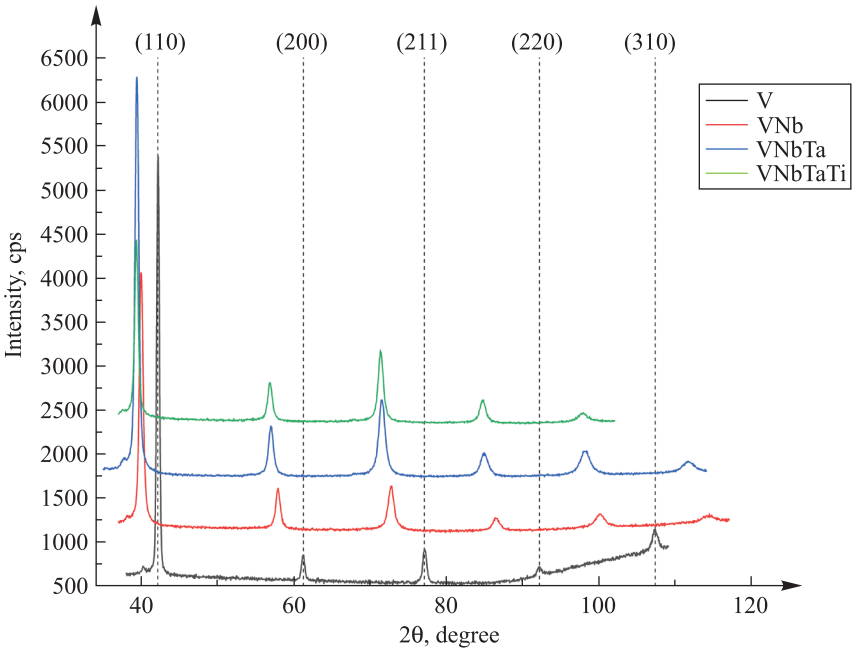


Fig. 5. X-ray diffraction pattern of samples of the V – Nb – Ta – Ti system irradiated by Kr^{14+} ions with an energy of 280 keV

In addition, after irradiation, there is no segregation of elements on the surface, as can be seen in the results of the SEM (fig. 6). As well as in the initial samples, a homogeneous distribution of elements over the surface is observed (fig. 7).

To quantify the effect of radiation damage on the structure of samples, changes in micro- and macrostresses relative to non-irradiated samples were calculated. Orientation (110) was used to determine macrostresses. The obtained dependences were approximated by a linear function to obtain stress values.

Figure 8 shows the values of the received stress. Compressive stresses prevail in all initial samples. The addition of niobium and tantalum in VNb and VNbTa samples leads to an increase in the level of compressive stresses, which is associated with a large atomic radius of these elements compared to vanadium. In the VNbTaTi alloy, due to the presence of Ti, which has a lower atomic radius, and also reduces the modulus of elasticity of the alloy, a lower level of compressive stresses is observed. Irradiation by krypton ions leads to a decrease in macrostresses, which can be explained by several reasons. Probably difference in atomic size between the elements leads to the reduction of electron and phonon mean free paths, which can affect the formation energy and migration barriers of defects in the material [31]. The atomic size difference of the elements in the solid solutions also contributes to an increase in atomic scattering and a decrease in the focused movement of interstitials along the close-packed direction, which prevents interstitials from moving quickly out of the region with a high concentration of vacancies. This promotes defect recombination in these alloys. Besides, lattice distortion can also reduce defect mobility therefore many of the interstitial clusters were stationary and remained in the region where defects were formed, resulting in a higher rate of defect recombination [32; 33]. As a result, a large number of interstitial clusters of small size are formed, which causes tensile stresses and leads to a decrease in the overall level of compressive stresses [34]. In contrast, an increase in compressive stresses is observed in microstresses, which may be due to radiation-stimulated diffusion of lighter elements to the boundaries of the coherent scattering region [35]. However, it is not possible to assess which of the elements is more stable at the moment. It is also hard to say with certainty that there is a dependence of stresses on the complexity of the composition.

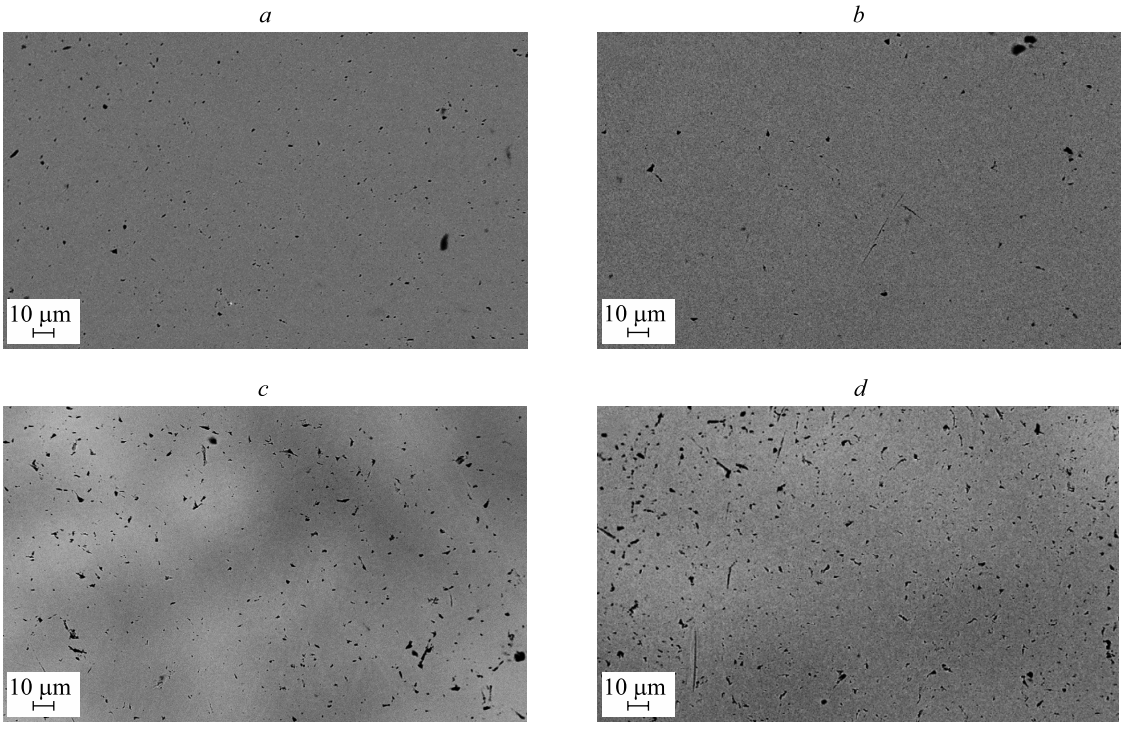


Fig. 6. Surface morphology in the samples surface
V (*a*), VNb (*b*), VNbTa (*c*), VNbTaTi (*d*) irradiated by Kr^{14+} ions with an energy of 280 keV

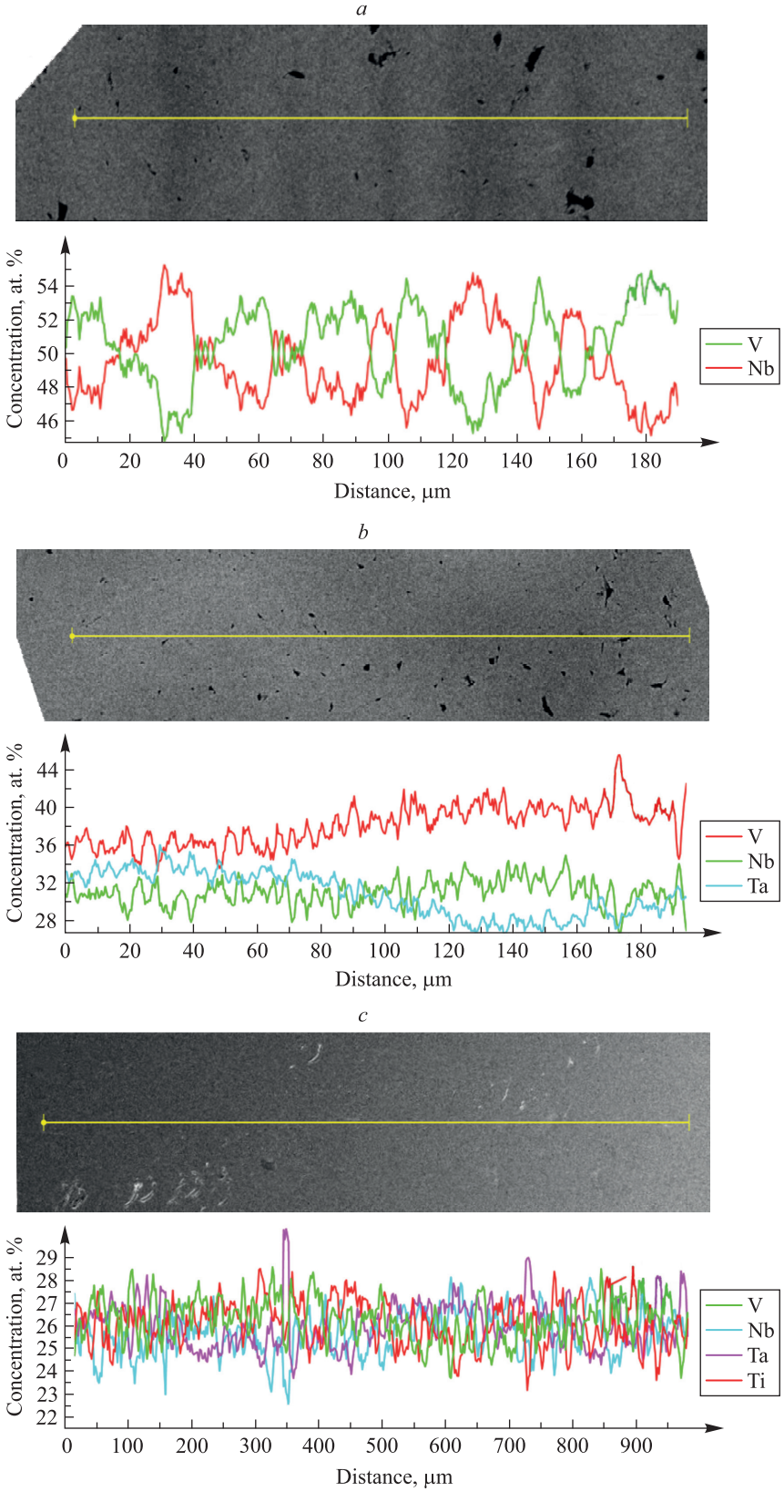


Fig. 7. Distribution profiles of elements in the samples VNb (*a*), VNbTa (*b*), VNbTaTi (*c*) irradiated with Kr^{14+} ions by an energy of 280 keV

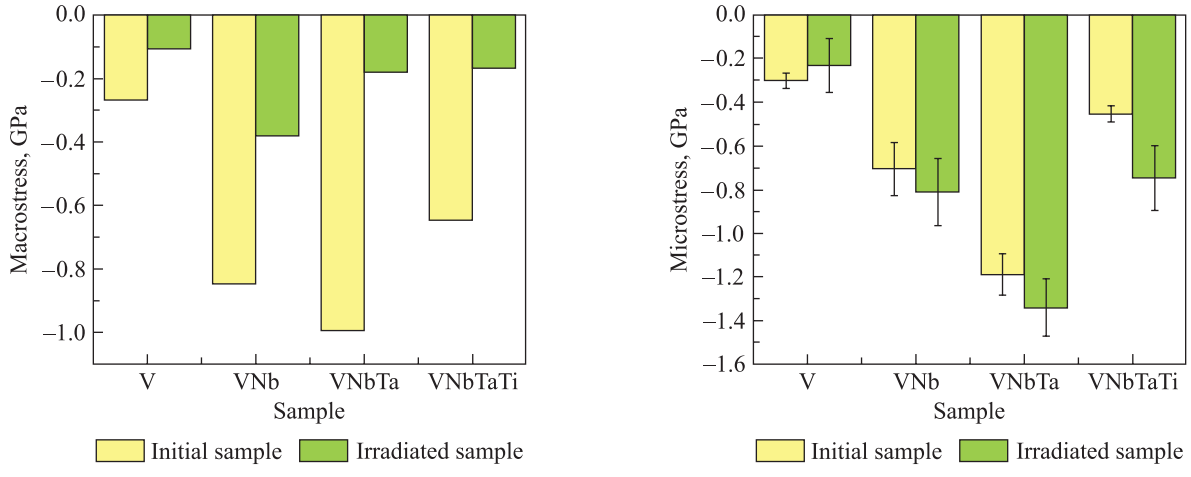


Fig. 8. Values of macrostresses (*a*) and microstresses (*b*) depending on the complexity of the composition of the V – Nb – Ta – Ti system for the initial and irradiated samples

Conclusions

Equiatomic single-phase binary, triple and quadruple solid solutions based on the V – Nb – Ta – Ti system with a body-centered cubic lattice were obtained by arc melting with subsequent homogenisation. Compressive stresses were detected in all initial materials. The addition of Nb and Ta to the alloy leads to an increase in the level of compressive stresses, while the addition of Ti leads to their decrease.

The phase composition and structure of the near-surface layer of binary, triple and quadruple solid solutions based on the V – Nb – Ta – Ti system are resistant to irradiation by krypton ions with an energy of 280 keV and a fluence of $5 \cdot 10^{15}$ cm^{-2}. Irradiation by krypton ions leads to the formation of tensile stresses of the first kind. There is an increase in microstresses in multicomponent solid solutions, which may be due to the radiation-stimulated diffusion of lighter elements to the boundaries of the coherent scattering region, which leads to an increase in microstresses due to the dimensional factor.

References

1. Armstrong RC, Wolfram C, de Jong KP, Gross R, Lewis NS, Boardman B, et al. The frontiers of energy. *Nature Energy.* 2016;1(1):15020. DOI: 10.1038/nenergy.2015.20.

2. Zinkle SJ, Busby JT. Structural materials for fission and fusion energy. *Materials Today.* 2009;12(11):12–19. DOI: 10.1016/S1369-7021(09)70294-9.

3. Henry J, Maloy SA. Irradiation-resistant ferritic and martensitic steels as core materials for generation IV nuclear reactors. In: *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors.* Sawston: Woodhead Publishing; 2017. p. 329–355. DOI: 10.1016/B978-0-08-100906-2.00009-4.

4. Murty KL, Charit I. Structural materials for gen-IV nuclear reactors: challenges and opportunities. *Journal of Nuclear Materials.* 2008;383(1–2):189–195. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2008.08.044.

5. Zinkle SJ, Terrani KA, Snead LL. Motivation for utilizing new high-performance advanced materials in nuclear energy systems. *Current Opinion in Solid State and Materials Science.* 2016;20(6):401–410. DOI: 10.1016/j.cossms.2016.10.004.

6. Jin K, Bei H. Single-phase concentrated solid-solution alloys: bridging intrinsic transport properties and irradiation resistance. *Frontiers in Materials.* 2018;5(26):1–11. DOI: 10.3389/fmats.2018.00026.

7. Yeh JW, Chen YL, Lin SJ, Chen SK. High-entropy alloys – a new era of exploitation. *Materials Science Forum.* 2007;560:1–9. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.560.1.

8. Tsai M-H, Yeh J-W. High-entropy alloys: a critical review. *Materials Research Letters.* 2014;2(3):107–123. DOI: 10.1080/21663831.2014.912690.

9. Yeh JW. Recent progress in high-entropy alloys. *Annales de Chimie Science des Materiaux.* 2006;31(6):633–648.

10. Miracle DB, Senkov ON. A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia.* 2017;122:448–511. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.08.081.

11. Sellami N, Debelle A, Ullah MW, Christen HM, Keum JK, Bei H, et al. Effect of electronic energy dissipation on strain relaxation in irradiated concentrated solid solution alloys. *Current Opinion in Solid State and Materials Science.* 2019;23(2):107–115. DOI: 10.1016/j.cossms.2019.02.002.

12. Jin K, Mu S, An K, Porter WD, Samolyuk GD, Stocks GM, et al. Thermophysical properties of Ni-containing single-phase concentrated solid solution alloys. *Materials and Design.* 2017;117:185–192. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.12.079.

13. Zarkadoula E, Samolyuk G, Weber WJ. Effects of electron-phonon coupling and electronic thermal conductivity in high energy molecular dynamics simulations of irradiation cascades in nickel. *Computational Materials Science.* 2019;162:156–161. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.02.039.

14. Zhao S, Egami T, Stocks GM, Zhang Y. Effect of d electrons on defect properties in equiatomic NiCoCr and NiCoFeCr concentrated solid solution alloys. *Physical Review Materials.* 2018;2(1):013602. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.013602.

15. Zhao S, Osetsky Y, Barashev AV, Zhang Y. Frenkel defect recombination in Ni and Ni-containing concentrated solid – solution alloys. *Acta Materialia.* 2019;173:184–194. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.04.060.

16. Lu C, Niu L, Chen N, Jin K, Yang T, Xiu P, et al. Enhancing radiation tolerance by controlling defect mobility and migration pathways in multicomponent single-phase alloys. *Nature Communications.* 2016;7(1):13564. DOI: 10.1038/ncomms13564.

17. Lu C, Yang T, Niu L, Peng Q, Jin K, Crespillo ML, et al. Interstitial migration behavior and defect evolution in ion irradiated pure nickel and Ni – *x*Fe binary alloys. *Journal of Nuclear Materials.* 2018;509:237–244. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.07.006.

18. Senkov ON, Miracle DB, Chaput KJ, Couzinie J-P. Development and exploration of refractory high entropy alloys – a review. *Journal of Materials Research.* 2018;33(19):3092–3128. DOI: 10.1557/jmr.2018.153.

19. Gao MC, Doğan ÖN, King P, Rollett AD, Widom M. The first-principles design of ductile refractory alloys. *JOM.* 2008;60(7): 61–65. DOI: 10.1007/s11837-008-0092-1.

20. Yao HW, Qiao JW, Gao MC, Hawk JA, Ma SG, Zhou HF, et al. NbTaV-(Ti,W) refractory high-entropy alloys: experiments and modeling. *Materials Science and Engineering.* 2016;674:203–211. DOI: 10.1016/j.msea.2016.07.102.

21. Yao HW, Qiao JW, Hawk JA, Zhou HF, Chen MW, Gao MC. Mechanical properties of refractory high-entropy alloys: experiments and modeling. *Journal of Alloys and Compounds.* 2017;696:1139–1150. DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.11.188.

22. Lee C, Song G, Gao MC, Feng R, Chen P, Brechtl J, et al. Lattice distortion in a strong and ductile refractory high-entropy alloy. *Acta Materialia.* 2018;160:158–172. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.08.053.

23. Senkov ON, Senkova SV, Woodward C, Miracle DB. Low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr – Nb – Ti – V – Zr system: microstructure and phase analysis. *Acta Materialia.* 2013;61(5):1545–1557. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.11.032.

24. Senkov ON, Wilks GB, Miracle DB, Chuang CP, Liaw PK. Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics.* 2010;18(9):1758–1765. DOI: 10.1016/j.intermet.2010.05.014.

25. Diao HY, Feng R, Dahmen KA, Liaw PK. Fundamental deformation behavior in high-entropy alloys: an overview. *Current Opinion in Solid State and Materials Science.* 2017;21(5):252–266. DOI: 10.1016/j.cossms.2017.08.003.

26. Ye YF, Wang Q, Lu J, Liu CT, Yang Y. High-entropy alloy: challenges and prospects. *Materials Today.* 2016;19(6):349–362. DOI: 10.1016/j.mattod.2015.11.026.

27. Birkholz M. *Thin film analysis by X-ray scattering.* Weinheim: Wiley-VCH; 2005. 378 p.

28. Nath D, Singh F, Das R. X-ray diffraction analysis by Williamson – Hall, Halder – Wagner and size-strain plot methods of CdSe nanoparticles- a comparative study. *Materials Chemistry and Physics.* 2020;239:122021. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.122021.

29. Prevey PS. X-ray diffraction residual stress techniques. *Materials Characterization.* 1986;10:380–392.

30. Ziegler JF, Ziegler MD, Biersack JP. SRIM – the stopping and range of ions in matter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* 2010;268(11–12):1818–1823. DOI: 10.1016/j.nimb.2010.02.091.

31. Zhang Y, Stocks GM, Jin K, Lu C, Bei H, Sales BC, et al. Influence of chemical disorder on energy dissipation and defect evolution in concentrated solid solution alloys. *Nature Communications.* 2015;6:8736. DOI: 10.1038/ncomms9736.

32. Wakai E, Ezawa J, Imamura T, Takenaka T, Tanabe T, Oshima R. Effect of solute atoms on swelling in Ni alloys and pure Ni under He^+ ion irradiation. *Journal of Nuclear Materials.* 2002;307–311(part 1):367–373. DOI: 10.1016/S0022-3115(02)01192-3.

33. Lu C, Niu L, Chen N, Jin K, Yang T, Xiu P, et al. Enhancing radiation tolerance by controlling defect mobility and migration pathways in multicomponent single-phase alloys. *Nature Communications.* 2016;7:13564. DOI: 10.1038/ncomms13564.

34. Ullah MW, Zhang Y, Sellami N, Debelle A, Bei H, Weber WJ. Evolution of irradiation-induced strain in an equiatomic NiFe alloy. *Scripta Materialia.* 2017;140:35–39. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2017.06.042.

35. Kiran Kumar NAP, Li C, Leonard KJ, Bei H, Zinkle SJ. Microstructural stability and mechanical behavior of FeNiMnCr high entropy alloy under ion irradiation. *Acta Materialia.* 2016;113:230–244. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.05.007.

Received 19.11.2022 / revised 02.01.2023 / accepted 05.01.2023.

УДК 539.21

МОДИФИКАЦИЯ СОСТАВА, СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ СИСТЕМЫ (Ti, Cu)N/Al – 12 ат. % Si, ОБРАБОТАННОЙ КОМПРЕССИОННЫМИ ПЛАЗМЕННЫМИ ПОТОКАМИ

***Н. Н. ЧЕРЕНДА*[1)], *С. А. ТОЛКАЧЕВ*[1)], *В. М. АСТАШИНСКИЙ*[2)], *А. М. КУЗЬМИЦКИЙ*[2)]**

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск, Беларусь*

Исследованы изменения состава, структуры и свойств поверхностного слоя системы (Ti, Cu)N/Al – 12 ат. % Si, обработанной компрессионными плазменными потоками. Использованы следующие методы исследования: растровая электронная микроскопия, энергодисперсионный микроанализ, рентгеноструктурный анализ, измерение микротвердости и коэффициента трения. В результате роста плотности энергии, поглощенной поверхностью образцов при плазменном воздействии, в диапазоне 26–40 Дж/см^2 наблюдаются увеличение степени растворения материала покрытия в поверхностном слое алюминиевого сплава и уменьшение в нем концентрации титана и меди. Снижение концентрации легирующих элементов связано с ростом толщины расплавленного слоя и интенсивности эрозии при плазменном воздействии. В диапазоне плотности поглощенной энергии 35–40 Дж/см^2 установлено формирование гомогенного поверхностного слоя толщиной 25–45 мкм с дисперсной структурой, состоящего из элементов подложки и покрытия и содержащего пересыщенный твердый раствор на основе алюминия и поверхностную пленку нитрида алюминия. Воздействие плазмы приводит к увеличению микротвердости поверхности на 25 % по сравнению с исходным сплавом. Наименьшее значение коэффициента трения наблюдается у образца, обработанного при плотности поглощенной энергии 30 Дж/см^2.

Ключевые слова: эвтектический силумин; нитридное покрытие; компрессионные плазменные потоки; сканирующая электронная микроскопия; рентгеноструктурный анализ; микротвердость; шероховатость; коэффициент трения.

Образец цитирования:
Черенда НН, Толкачев СА, Асташинский ВМ, Кузьмицкий АМ. Модификация состава, структуры и механических свойств поверхностного слоя системы (Ti, Cu)N/Al – 12 ат. % Si, обработанной компрессионными плазменными потоками. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:25–33 (на англ.).
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-25-33

For citation:
Cherenda NN, Tolkachov SA, Astashynski VM, Kuzmitski AM. Modification of composition, structure and mechanical properties of the surface layer of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy system treated by compression plasma flows. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:25–33.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-25-33

Авторы:
Николай Николаевич Черенда – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физики твердого тела физического факультета.
Степан Андреевич Толкачев – студент физического факультета. Научный руководитель – Н. Н. Черенда.
Валентин Миронович Асташинский – член-корреспондент НАН Беларуси, доктор физико-математических наук; заведующий отделением физики плазмы и плазменных технологий.
Антон Михайлович Кузьмицкий – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории физики плазменных ускорителей.

Authors:
Nikolai N. Cherenda, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of solid-state physics, faculty of physics.
cherenda@bsu.by
https://orcid.org/0000-0002-2394-5117
Stepan A. Tolkachov, student at the faculty of physics.
steptolk2000@gmail.com
Valentin M. Astashynski, corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, doctor of science (physics and mathematics); head of the department of plasma physics and plasma technologies.
ast@hmti.ac.by
https://orcid.org/0000-0001-5297-602X
Anton M. Kuzmitski, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of plasma accelerators physics.
antey@hmti.ac.by

CC BY NC

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2023;1:25–33
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2023;1:25–33

MODIFICATION OF COMPOSITION, STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF THE SURFACE LAYER OF (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si ALLOY SYSTEM TREATED BY COMPRESSION PLASMA FLOWS

N. N. CHERENDA[a], *S. A. TOLKACHOV*[a], *V. M. ASTASHYNSKI*[b], *A. M. KUZMITSKI*[b]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute, National Academy of Sciences of Belarus, 15 P. Broŭki Street, Minsk 220072, Belarus*

Corresponding author: N. N. Cherenda (cherenda@bsu.by)

Changes in composition, structure and properties of the surface layer of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy treated by compression plasma flows were investigated. Scanning electron microscopy, energy dispersive analysis, X-ray diffraction, microhardness and friction coefficient measurements were used as investigation techniques. Increase of the energy density absorbed by the samples surface in the region of 26–40 J/cm^2 during plasma impact leads to the growth of coating material dissolution degree in the surface layer of aluminum alloy and diminishing of titanium and copper content in it. Decrease of alloying elements concentration is explained by the growth of melted layer thickness and erosion intensity during plasma impact. The formation of a surface homogeneous layer with dispersed structure and thickness of 25–45 μm, consisting of substrate and coating elements was observed in the region of the absorbed energy density 35–40 J/cm^2. A supersaturated solid solution based on aluminum is formed, as well as a surface film of aluminum nitride. Plasma impact leads to an increase in the microhardness of the surface up to 25 % compared to the initial alloy. A sample processed at an absorbed energy density of 30 J/cm^2 has the lowest friction coefficient.

Keywords: eutectic silumin; nitride coating; compression plasma flows; scanning electron microscopy; X-ray structure analysis; microhardness; roughness; friction coefficient.

Introduction

Silumins – aluminum and silicon alloys, have good casting properties, high corrosion resistance, low specific mass, low coefficient of thermal expansion along with the cheapness and the possibility of using recycling products in their fabrication. These alloys are used in such areas of industry as aviation, rocket and automotive production, manufacturing of household products for mass use. However, silumins have unsatisfactory tribological and strength characteristics, which hinders the use of these materials in appropriate applications [1; 2].

A promising way to improve the properties of the surface layer of materials is exposure to laser, electron, ion and plasma flows, including compression plasma flows (CPF) [1; 3]. Modern magnetoplasma installations allow the formation of plasma flows with a discharge duration of the order of hundreds of microseconds while maintaining high plasma parameters, that leads to the formation of modified layers with a thickness of tens of micrometers and high performance characteristics [1; 4]. Plasma treatment of materials with preliminary deposited coatings allows alloying the surface layer of the material with coating elements, to synthesise hardening phases, to disperse its structure, which, as a rule, lead to an improvement in mechanical and tribological characteristics [1; 4].

The treatment of the coating – substrate system by high-energy particle beams also allows increasing the adhesion of the coating and significantly affecting the tribological properties. Earlier it was shown that the impact of high-current electron beam on the system (Ti, Cu)N – eutectic silumin leads to partial fusion of the hard coating into the silumin surface layer and, as a consequence, providing increase of coating wear resistance and decrease of friction coefficient [1]. Investigation of composition, structure and mechanical properties of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy surface layer treated by CPF with different energy absorbed by the surface layer is the objective of this work.

Materials and research methods

Deposition of (Ti, Cu)N coating on silumin alloy substrate (12 wt. % Si, 0.7 wt. % Fe, 0.5 wt. % Mn, 0.6 wt. % Cu, 0.3 wt. % Zn, 0.6 wt. % Ni, 0.6 wt. % Mg; Al – balance) was carried out by vacuum-arc technique using Ti – Cu cathode. The thickness of the coating (Ti, Cu)N was ~1 μm. Concentration of Ti and Cu in the coating was about 49 and 1 at. %, respectively. The samples were processed by three CPF pulses with a duration of 100 μs at the distance 8–14 cm between the sample and the cathode, which led to a change in the energy density absorbed by the surface layer of the sample in the range of 26–40 J/cm^2 per pulse. Nitrogen was used as the plasma generating gas, when the pressure in the vacuum chamber was 400 Pa.

X-ray diffraction analysis was carried out on a diffractometer Ultima IV (*Rigaku*, Japan) using monochromatised copper radiation (λ = 0.154 178 nm; K_{α_1}). The analysis of the surface morphology was performed using

a scanning electron microscope LEO-1455VP (*Carl Zeiss*, Germany) having an accelerating voltage of 20 kV. The elemental composition of the samples was determined by energy dispersive X-ray microanalysis using an detector (*Oxford Instruments*, United Kingdom) coupled to a scanning electron microscope (relative error of concentration is more or equal 10 %). Microhardness was measured by the Vickers method on a 402MVD installation (*Wilson Instruments*, United Kingdom) with a load of 0.1 N. The surface roughness was measured using a profilometer MarSurf SD26 (Germany). Tribological tests were carried out on a tribometer TAU-1M at a load of 0.2 N under dry friction conditions, the indenter was made of VK8 alloy.

Results and discussion

The interaction of compression plasma flows with the coating – substrate system is accompanied by melting of the coating and the surface layer of substrate material (when the required surface temperature is reached, provided by the treatment modes), erosion of the surface layer, liquid-phase mixing of the melt as a result of the development of hydrodynamic instabilities and subsequent crystallisation under ultrafast cooling conditions [1; 4]. An increase in the absorbed energy density leads to an increase in the lifetime of the melt and consequently more homogeneous distribution of elements in it due to the increase of convective flows action duration. The change in the energy density absorbed by the surface due to the large difference in the melting temperatures of the coating (Ti, Cu)N and the substrate (Al – Si) allows to choose the treatment regime in which the substrate is mainly melting. In this regime, one should expect the effect described in [1] – fusion of the hard coating into the substrate and improvement of tribological characteristics of the material.

The analysis of the surface morphology (fig. 1, *a* and *b*) showed that the impact of CPF with an absorbed energy density of 26 J/cm^2 on the surface of the samples already leads to partial fusion of the coating into the substrate material. When the absorbed energy density increases to 30 J/cm^2, no coating material is observed on the surface (fig. 1, *c*). One can see that plasma impact leads to the formation of cracks and pores at the surface of the samples (fig. 1, *b* and *c*).

Besides that the findings showed that the surface of the treated samples was covered by a discontinuous nitride film (fig. 2). The formation of nitrides on the surface of materials can be caused by the interaction of atoms in the residual atmosphere of the vacuum chamber with surface atoms at the stage of the surface layer cooling [5].

Energy dispersion microanalysis carried out on the surface of the samples in the layer with a thickness of ~1 μm showed that the concentration of coating elements, in particular Ti, decreases with the growth of absorbed energy density (table 1). An increase in the thickness of the melt and the redistribution of the coating elements into deeper layers leading to a decrease in the average concentration of elements over the whole layer can be one of the reasons of this effect [4].

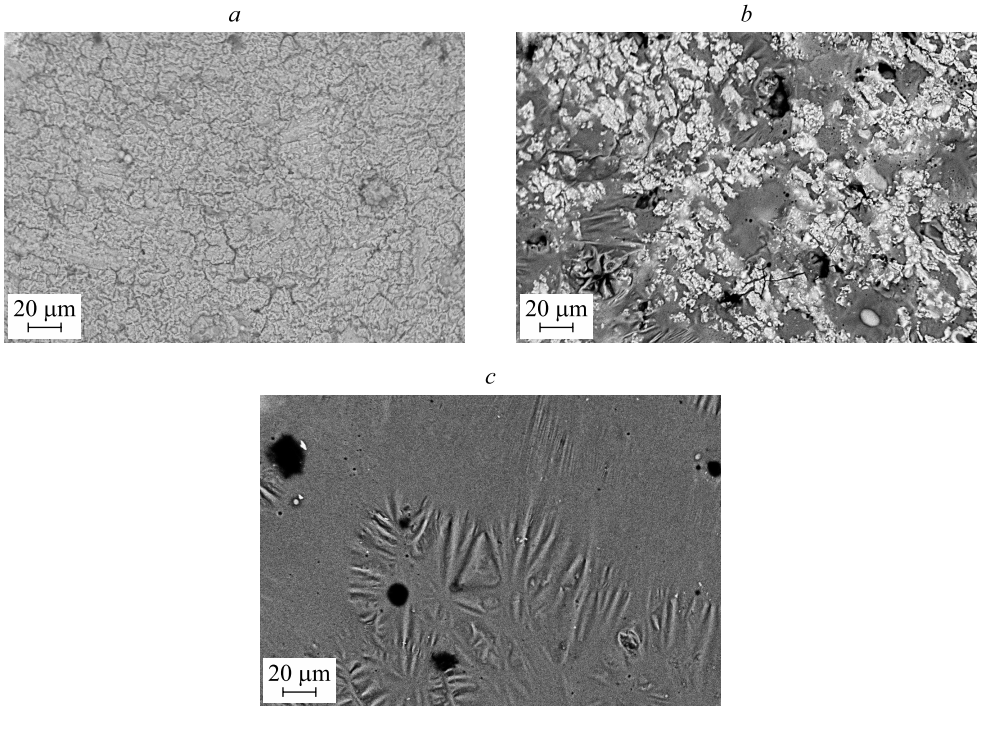


Fig. 1. Morphology of the surface of the initial coated sample (*a*) and samples treated with CPF at 26 J/cm^2 (*b*), 30 J/cm^2 (*c*)

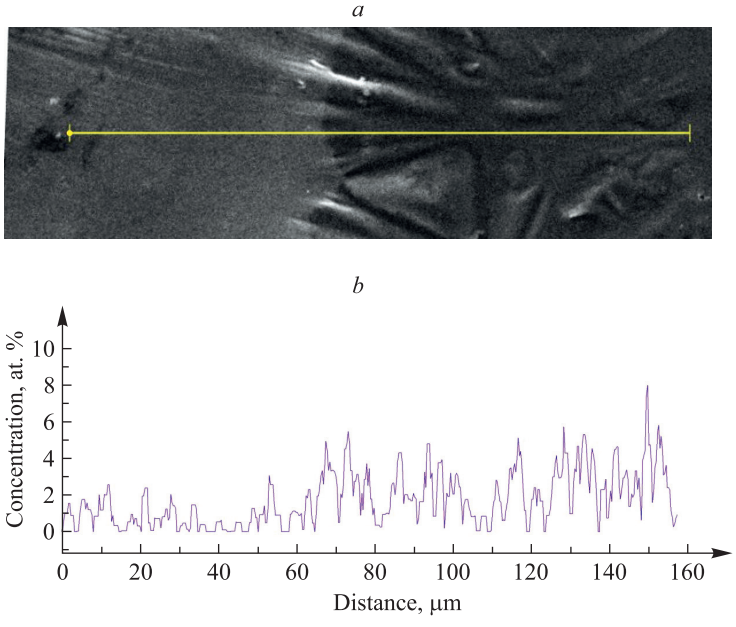


Fig. 2. Surface morphology (*a*) and nitrogen distribution along the line (*b*) for a sample treated with CPF at 30 J/cm^2

Table 1

Dependence of the titanium concentration in the surface layer on the absorbed energy density

Density of energy absorbed by surface layer, J/cm^2	26	30	35	40
Titanium concentration in the analysed layer, at. %	8.2	1.2	1.0	0.1

Surface erosion during plasma impact also contributes to a decrease in the coating elements concentration in the surface layer. It was found that the mass removed from the surface of the samples as a result of plasma treatment was changed in the range of 1.4–172.0 μg/mm^2 depending on the absorbed energy density in the range 26–40 J/cm^2. Plasma impact with samples surface leads to melting of the surface layer. Traces of the melt are observed on the lateral surface of the samples, which suggests that the main mechanism of erosion is the hydrodynamic motion of the melt from the center to the edges of the sample. The plasma stream interacts with the target and spreads over the surface in radial directions that provides the melt ejection out of the sample [6–8]. The plasma flow also causes the development of various hydrodynamic instabilities at the plasma-melt boundary and the formation of droplets, which can be ejected from the melt [9]. Evaporation and boiling of the material can also be causes of mass loss [6; 7].

Concentration of silumin alloying elements (Cu, Ni, Mg, Fe) increases at the surface with the growth of absorbed energy density (table 2). Such behaviour is related to the melting of alloy intermetallides at the surface layer with a thickness of several tens of micrometers as well as the redistribution doped elements in alloy over the entire thickness of the melt leading to an increase in the average concentration of elements in the layer analysed by the energy dispersion detector. Some increase of copper concentration could be associated with fragmentation of (Ti, Cu)N coating in the melted surface layer during plasma treatment.

Table 2

The concentration of elements in Al – 12 at. % Si sample and (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si sample after CPF treatment at 30 J/cm^2, at. %

Sample	Chemical element			
	Cu	Ni	Mg	Fe
Al – 12 at. % Si alloy sample	0.3	0.3	0.5	0.2
(Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si sample treated by CPF	0.7	0.5	0.6	0.3

Analysis of the cross-section of the Al – 12 at. % Si alloy initial sample showed the presence of aluminum grains, Al – Si eutectic, intermetallides formed by alloying elements and primary silicon crystals with sizes from units to tens of micrometers. During coating deposition part of the titanium atoms diffused 3–4 μm deep into the substrate due to the heating of the sample surface by accelerated titanium ions (fig. 3).

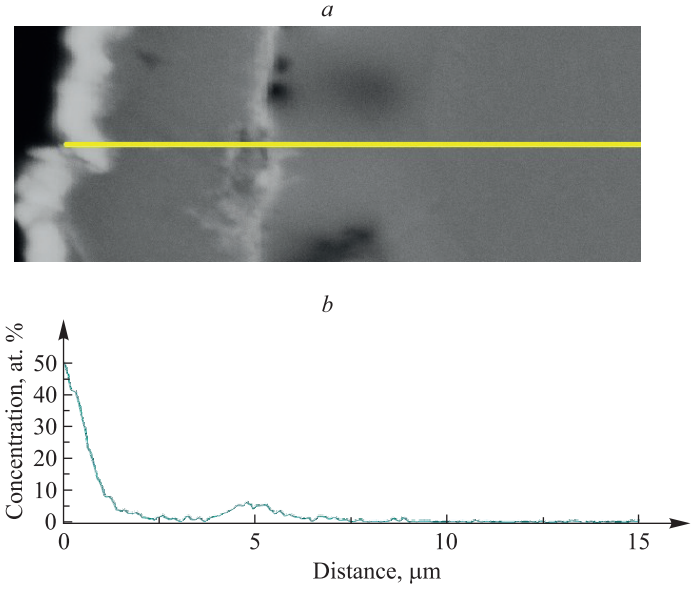


Fig. 3. Cross-section morphology (*a*) and the distribution of titanium (*b*) along the depth of the (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy sample

After CPF impact on (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy system the formation of a mixed layer is observed (fig. 4, *a* and *b*), the thickness of which depends on the density of the absorbed energy. The thickness of a mixed layer was 19 and 45 μm after CPF treatment at 26 and 40 J/cm^2, respectively. Mixed layer has dispersed cellular structure, which is caused by high cooling rates of the melt. The bulk of the mixed layer contains separate inclusions of undissolved primary silicon crystals up to several micrometers in size (fig. 4, *c*) and intermetallides containing aluminum, copper, nickel, magnesium and iron atoms. Dendritic structures are observed at the boundaries between the melted and non-melted layers formed during crystallisation on undissolved inclusions of silicon and intermetallides (fig. 5). These inclusions play role of the heterogeneous crystallisation centers at the cooling stage of the surface layer.

The X-ray diffraction analysis showed that the analysed layer of the coated sample contains aluminum, silicon, titanium nitride and titanium phases (fig. 5). No copper diffraction lines are seen on diffraction patterns. Due to the low concentration of copper detected by energy dispersive microanalysis one can suggest that copper atoms can take part in formation of δ-(Ti, Cu)N solid solution. Besides that copper can form fine inclusions in the coating, which are indistinguishable by X-ray diffraction analysis. CPF treatment leads to a decrease in the intensity of TiN and Ti diffraction peaks indicating a decrease in the volume fraction of these phases in the analysed layer. This effect increases with the growth of the absorbed energy density that correlates with the results of scanning electron microscopy.

Diffraction patterns show a broadening and decrease in the intensity of silicon lines with an increase in the density of absorbed energy. Such behaviour is caused by crystallisation of the melted surface layer of samples in conditions of high cooling rate, which leads to dispersion of silicon crystallites. In addition, silicon atoms can take part in formation of supersaturated aluminum-based solid solution. The latter is confirmed by the shift of aluminum lines on X-ray diffraction patterns towards large angles.

The lattice parameters of aluminum-based solid solution and its dependence on the absorbed energy density were determined by analysing Al (311) diffraction line (fig. 6). The decrease in the lattice parameter after treatment at 26 and 30 J/cm^2 is associated with the penetration of silicon atoms with a smaller radius into the aluminum crystalline lattice. A further increase in the lattice parameter can be caused by the integration of alloying elements with a bigger atomic radius into the solid solution due to intermetallides dissolution in the melt under plasma impact.

Diffraction patterns of plasma-treated samples also show aluminum nitride diffraction peak of low intensity that correlates with the results of scanning electron microscopy (see fig. 2).

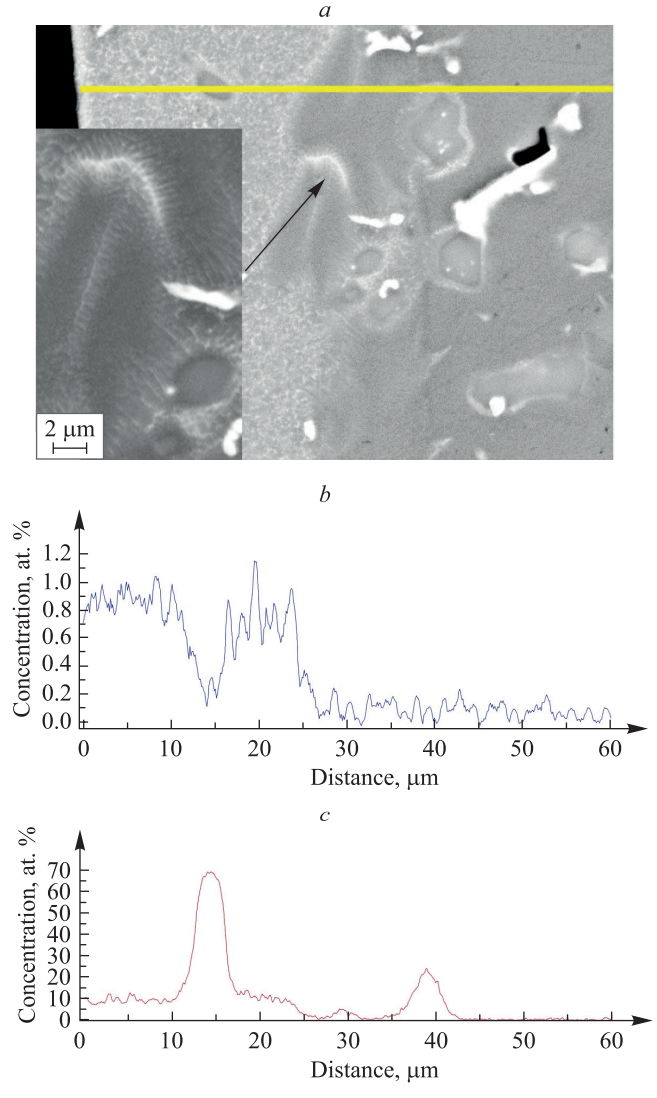


Fig. 4. Cross-section morphology (*a*), distribution of titanium (*b*) and silicon (*c*) along the depth of the surface layer in a sample treated with CPF at 35 J/cm^2

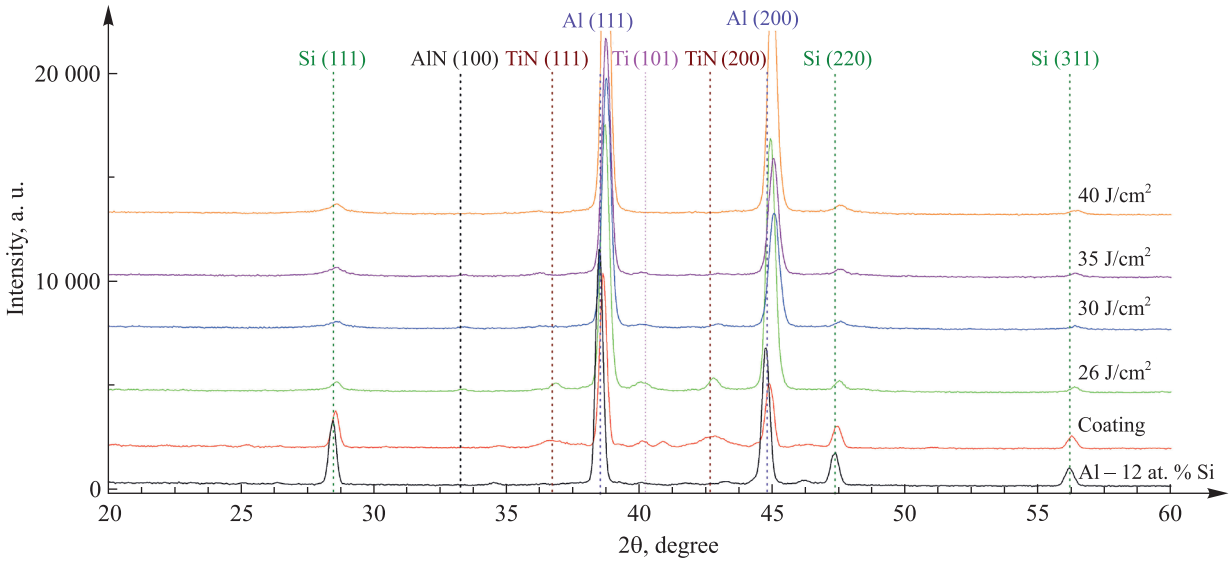


Fig. 5. Diffraction patterns of Al – 12 at. % Si alloy, (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy samples and (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy samples treated at different absorbed energy density

Investigations carried out earlier showed that CPF impact on the titanium – silumin system led to the formation of $(Al, Si)_3Ti$ intermetallides as well [1]. However $(Al, Si)_3Ti$ phase was not found in current experiment. This phenomenon can be explained by higher value of binding energy of the TiN compound. Thus CPF impact on (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy system leads mainly to fragmentation of coating instead of it dissolution in the melt. As a result formation of a composite surface layer containing dispersed (Ti, Cu)N inclusions inside Al – 12 at. % Si alloy structure can be expected. This supposition is confirmed by XRD data in fig. 5 where δ-TiN based phase is observed in the analysed layer in the whole range of treatment regimes.

A changes in the surface layer structure of investigated samples leads to an improving of their mechanical and tribological characteristics. The microhardness of the surface layer increased from (1.2 ± 0.1) GPa for the initial Al – 12 at. % Si alloy to (1.3 ± 0.2) GPa after treatment at 26 J/cm^2 and to (1.5 ± 0.1) GPa after treatment at 40 J/cm^2. The formation of aluminum nitride and a supersaturated aluminum-based solid solution enforced with (Ti, Cu)N inclusions, structure refinement are the possible reasons for the surface layer microhardness increase.

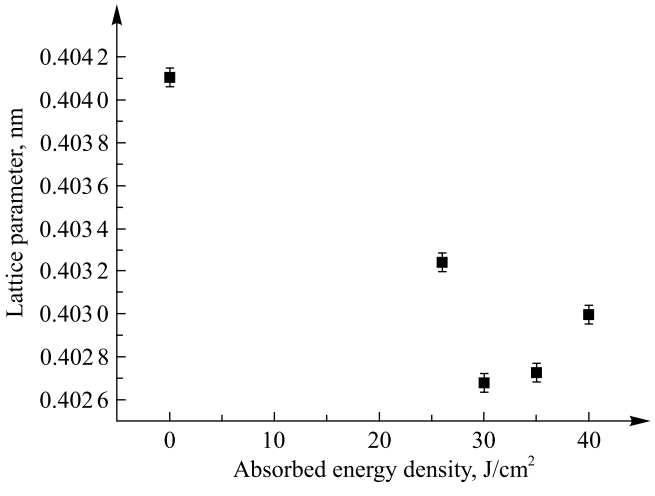


Fig. 6. Dependence of the aluminum-based solid solution lattice parameter on the absorbed energy density

The dependences of the friction coefficient on the indenter siding distance before and after plasma treatment with different absorbed energy density are shown in fig. 7. Minimal value of friction coefficient is observed for the sample treated at 30 J/cm^2 (except of the area corresponding to the beginning of the sliding distance). Maximum value of friction coefficient is observed after treatment at 40 J/cm^2.

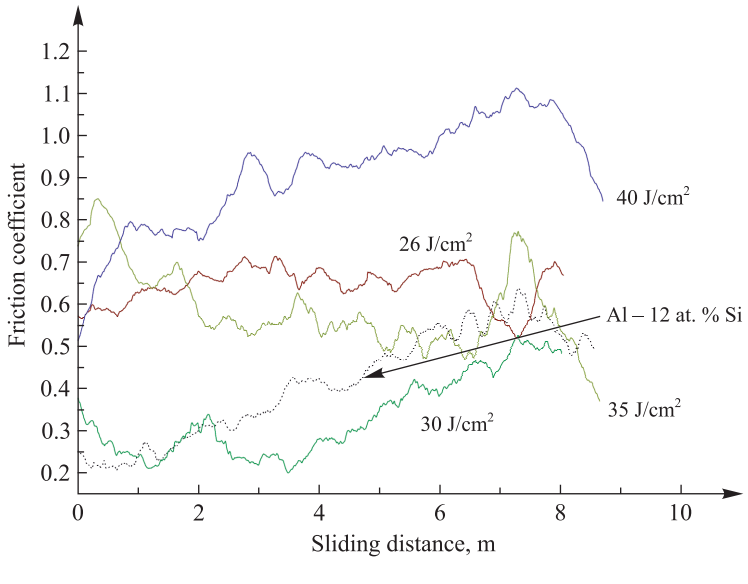


Fig. 7. Dependence of the friction coefficient on the indenter sliding distance for the sample of Al – 12 at. % Si alloy and samples of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si treated by CPF with different absorbed energy density

One can see that there is no direct correlation between the microhardness of the surface layer and the friction coefficient. At the same time, the friction coefficient value is depended on many factors including strength characteristics, roughness, etc. Therefore, an additional analysis of the surface roughness was conducted (table 3).

Table 3

The R_a value (arithmetic average roughness) of the Al – 12 at. % Si alloy and samples of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy processed by CPF with different absorbed energy density, μm

Al – 12 at. % Si alloy sample	(Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy sample treated by CPF			
	at 26 J/cm^2	at 30 J/cm^2	at 35 J/cm^2	at 40 J/cm^2
4.3	6.2	4.0	3.3	6.2

As can be seen from the results obtained, the lowest roughness is observed for samples treated with CPF in the range of energy density 30–35 J/cm^2 that could effect on the friction coefficient behaviour.

Conclusions

The findings showed that treatment of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy system by compression plasma flows with an energy density absorbed by the surface in the range of 26–40 J/cm^2 leads to formation of silumin surface layer with a thickness of 19–45 μm containing (Ti, Cu)N inclusions. The concentration of titanium in the surface layer decreases from 8.2 to 0.1 at. % with the growth of energy density that is explained by an increase of the thickness of the melted layer and growth of the intensity of surface erosion during plasma impact. An AlN film is formed at the surface of the material as a result of the interaction of the surface atoms with the residual atmosphere in the vacuum chamber.

The mixed layer is characterised by a finely dispersed cellular structure. Partial dissolution of silicon and intermetallic compounds crystallites occurs in this layer, which leads to the incorporation of silicon atoms and alloying elements into the aluminum crystal lattice. The lattice parameter of an aluminum-based solid solution shows a non-monotonic dependence on the absorbed energy density.

CPF treatment with an absorbed energy density of 40 J/cm^2 leads to an increase in microhardness from 1.2 GPa (Al – 12 at. % Si alloy) to 1.5 GPa. Minimal value of friction coefficient (lower than that of Al – 12 at. % Si alloy) is observed for the sample treated at 30 J/cm^2.

Библиографические ссылки

1. Петрикова ЕА, Ласковнев АП, Иванов ЮФ. *Модификация структуры и свойств эвтектического силумина электронно-ионно-плазменной обработкой.* Минск: Беларуская навука; 2013. 286 с.

2. Белов НА, Савченко СВ, Хван АВ. *Фазовый состав и структура силуминов.* Москва: Издательство МИСиС; 2001. 283 с.

3. Шиманский ВИ, Евдокимовс А, Черенда НН, Асташинский ВМ, Петрикова ЕА. Структурно-фазовое состояние заэвтектического силуминового сплава Al – 20Si после воздействия компрессионными плазменными потоками. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2021;2:25–33. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-2-25-33.

4. Углов ВВ, Черенда НН, Анищик ВМ, Асташинский ВМ, Квасов НТ. *Модификация материалов компрессионными плазменными потоками.* Минск: БГУ; 2013. 248 с.

5. Cherenda NN, Shimanskii VI, Uglov VV, Astashinskii VM, Ukhov VA. Nitriding of steel and titanium surface layers under the action of compression plasma flows. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2012;6(2):319–325. DOI: 10.1134/S1027451012040088.

6. Cherenda NN, Laskovnev AP, Basalai AV, Uglov VV, Astashynski VM, Kuzmitski AM. Erosion of materials under the effect of compression plasma flows. *Inorganic Materials: Applied Research.* 2015;6(2):114–120. DOI: 10.1134/S2075113315020070.

7. Черенда НН, Лейви АЯ, Углов ВВ, Асташинский ВМ, Кузьмицкий АМ, Яловец АП и др. Механизмы эрозии поверхности металлов при воздействии компрессионных плазменных потоков. *Известия вузов. Физика.* 2015;58(9, часть 3):159–163.

8. Tereshin VI, Garkusha IE, Bandura AN, Byrka OV, Chebotareva VV, Makhlaja VA, et al. Influence of plasma pressure gradient on melt layer macroscopic erosion of metal targets in disruption simulation experiments. *Journal of Nuclear Materials.* 2003; 313–316:685–689. DOI: 10.1016/S0022-3115(02)01361-2.

9. Bazylev B, Janeschitz G, Landman I, Loarte A, Klimov NS, Podkovyrov VL, et al. Experimental and theoretical investigation of droplet emission from tungsten melt layer. *Fusion Engineering and Design.* 2009;84(2–6):441–445. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2008.12.123.

References

1. Petrikova EA, Laskovnev AP, Ivanov YuF. *Modifikatsiya struktury i svoistv evtekticheskogo silumina elektronno-ionno-plazmennoi obrabotkoi* [Modification of the structure and properties of eutectic silumin by electron-ion-plasma treatment]. Minsk: Belaruskaya navuka; 2013. 286 p. Russian.

2. Belov NA, Savchenko SV, Khvan AV. *Fazovyi sostav i struktura siluminov* [Phase composition and structure of silumins]. Moscow: Izdatel'stvo MISiS; 2001. 283 p. Russian.

3. Shymanski VI, Jevdokimovs A, Cherenda NN, Astashynski VM, Petrikova EA. Structure and phase composition of hypereutectic silumin alloy Al – 20Si after compression plasma flows impact. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2021;2:25–33. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-2-25-33.

4. Uglov VV, Cherenda NN, Anishchik VM, Astashinskii VM, Kvasov NT. *Modifikatsiya materialov kompressionnymi plazmennymi potokami* [Modification of materials by compression plasma flows]. Minsk: Belarusian State University; 2013. 248 p. Russian.

5. Cherenda NN, Shimanskii VI, Uglov VV, Astashinskii VM, Ukhov VA. Nitriding of steel and titanium surface layers under the action of compression plasma flows. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2012;6(2):319–325. DOI: 10.1134/S1027451012040088.

6. Cherenda NN, Laskovnev AP, Basalai AV, Uglov VV, Astashynski VM, Kuzmitski AM. Erosion of materials under the effect of compression plasma flows. *Inorganic Materials: Applied Research.* 2015;6(2):114–120. DOI: 10.1134/S2075113315020070.

7. Cherenda NN, Leyvi AYa, Uglov VV, Astashynski VM, Kuzmitski AM, Yalovets AP, et al. Mechanisms of metals surface erosion under compression plasma flow impact. *Izvestiya vuzov. Fizika.* 2015;58(9, part 3):159–163. Russian.

8. Tereshin VI, Garkusha IE, Bandura AN, Byrka OV, Chebotareva VV, Makhlaja VA, et al. Influence of plasma pressure gradient on melt layer macroscopic erosion of metal targets in disruption simulation experiments. *Journal of Nuclear Materials.* 2003; 313–316:685–689. DOI: 10.1016/S0022-3115(02)01361-2.

9. Bazylev B, Janeschitz G, Landman I, Loarte A, Klimov NS, Podkovyrov VL, et al. Experimental and theoretical investigation of droplet emission from tungsten melt layer. *Fusion Engineering and Design.* 2009;84(2–6):441–445. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2008.12.123.

Received 11.10.2022 / revised 28.10.2022 / accepted 15.11.2022.

УДК 669.234.017.3:669.788

МОРФОЛОГИЯ ПРОДУКТОВ ГИДРИДНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В РАЙОНЕ КУПОЛА ДВУХФАЗНОЙ ОБЛАСТИ СИСТЕМЫ Pd – H

Г. И. ЖИРОВ[1)]

[1)]*Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости, 65, 220013, г. Минск, Беларусь*

Изложены результаты систематического исследования развития гидридных фазовых превращений в районе купола двухфазной области термодинамически открытой системы Pd – H. Инициация прямого гидридного фазового превращения произведена путем повышения давления водорода. Обсуждены морфологические особенности протекания прямых гидридных фазовых превращений. Показано, что фазово-структурная и морфологическая специфика развития гидридных превращений $\alpha \rightarrow \beta$ определяется характерными особенностями возникающих водородных напряжений: при инициации путем повышения давления водорода на начальных этапах главную роль играют водородные концентрационные напряжения. Результаты экспериментов свидетельствуют, что по мере приближения температуры гидридного превращения $\alpha \rightarrow \beta$ к точке $T_{кр}$ и увеличения скорости подачи водорода вклад механизма зарождения и роста новой фазы в превращение постепенно уменьшается и исчезает, а вклад механизма роста выделений β-фазы от острых краев выделившихся зерен увеличивается. Рассмотрено влияние водородных концентрационных и водородных фазовых напряжений на морфологию продуктов фазового превращения. Анализ результатов проведен исходя из представлений о диффузионно-кооперативной природе гидридных фазовых превращений.

Ключевые слова: гидридное фазовое превращение; система Pd – H; гидрид палладия; морфология продуктов превращения; водородная обработка; водородные концентрационные напряжения; водородные фазовые напряжения.

MORPHOLOGY OF THE PRODUCTS OF HYDRIDE TRANSFORMATIONS IN THE CUPOLA TWO-PHASE REGION OF THE Pd – H SYSTEM

G. I. ZHIROV[a]

[a]*Belarusian National Technical University, 65 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220013, Belarus*

In this paper, we present the results of a systematic study of the development of hydride phase transformations in the cupola two-phase region of thermodynamically open Pd – H system. The direct hydride phase transformation was initiated by increasing the hydrogen pressure. The morphological features of the course of direct hydride phase transformations are discussed. It is shown that the phase-structural and morphological peculiarities of the development of hydride $\alpha \rightarrow \beta$ transformations is determined by the characteristic features of the emerging hydrogen stresses: when initiating by

Образец цитирования:
Жиров ГИ. Морфология продуктов гидридных превращений в районе купола двухфазной области системы Pd – H. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:34–42.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-34-42

For citation:
Zhirov GI. Morphology of the products of hydride transformations in the cupola two-phase region of the Pd – H system. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:34–42. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-34-42

Автор:
Григорий Иванович Жиров – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры технической физики факультета информационных технологий и робототехники.

Author:
Gregory I. Zhirov, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of technical physics, faculty of information technology and robotics.
hytro-hydro@mail.ru

increasing the hydrogen pressure at the initial stages, the hydrogen concentration stresses play the main role. The results of the experiments showed that as the temperature of the hydride $\alpha \rightarrow \beta$ transformation approaches the point T_{cr} and the hydrogen supply rate increases, the contribution of the nucleation and growth mechanism of a new phase to the transformation gradually decreases and disappears. And the contribution of the growth mechanism of β phase precipitations from the sharp edges of the precipitated grains increases. The discussion considers the influence of hydrogen concentration and hydrogen phase stresses on the morphology of the products of phase transformation. The analysis of the results was carried out from the concept of the diffusion-cooperative nature of hydride phase transformations.

Keywords: hydride phase transformation; Pd – H system; palladium hydride; morphology of the products of transformation; hydrogen treatment; hydrogen concentration stresses; hydrogen phase stresses.

Введение

В физике твердого тела и физике металлов общеизвестным фактом является то, что в результате внешнего воздействия в полиморфных материалах реализуются фазовые превращения (мартенситные, бейнитные, диффузионные, превращения смешанного типа и т. д.) [1–4].

В термодинамически открытых системах фазовые переходы могут быть вызваны как изменением температуры, так и изменением давления. Одним из видов фазовых превращений, индуцированных водородом в системах Me – H [5], являются гидридные превращения, которые имеют особую диффузионно-кооперативную природу [6–8]. Сущность этой природы [6] заключается в том, что в неравновесных условиях в системах Me – H имеют место взаимозависимые и взаимообусловленные синергетические перестройки водородной подсистемы и металлической матрицы (кристаллической решетки), осуществляемые принципиально разными способами. Водородная подсистема перестраивается диффузионным путем, а кристаллическая решетка – по кооперативному мартенситоподобному механизму.

Важной отличительной чертой гидридных (диффузионно-кооперативных) фазовых превращений является то, что в их развитии огромную роль играют возникновение, перераспределение и релаксация внутренних водородных напряжений [5; 6]. В настоящее время известны два типа водородных напряжений [6]:

- водородные фазовые (ВФ) напряжения, обусловленные разностью удельных объемов превращающихся фаз и бездиффузионным механизмом перестройки их кристаллических решеток [9];
- водородные концентрационные (ВК) напряжения, возникающие в металле при наличии градиентов концентрации водорода.

Фундаментальная особенность гидридных превращений заключается в том, что поля упругих напряжений и поля концентрации водорода взаимосвязаны и взаимообусловлены. Они синергетически реагируют на все изменения внешних параметров и на ход развития гидридного превращения [6].

Материалы и методы исследования

Материалом для исследований служил палладий чистотой 99,98 %, который содержал следующие микропримеси: Pt (0,009 %), Rh (0,002 %), Fe (0,002 %), Ir, Au, Ni, In, Si (не более 0,000 1 %).

Из указанного материала была изготовлена проволока диаметром 0,5 мм. В состоянии поставки палладий имел следующие механические характеристики: предел прочности – 297 Н/мм^2; условный предел текучести – 224 Н/мм^2; относительное удлинение – 1,1 %.

Проволочные образцы палладия длиной 23 мм и диаметром 0,5 мм предварительно изгибали П-образно. Затем их отжигали в вакууме (~1 Па) при температуре 1000 °С в течение 1 ч и охлаждали вместе с печью до комнатной температуры. Величина зерна палладия после отжига составляла 150 мкм.

На верхней части образцов готовили металлографические шлифы по методике, сводящей к минимуму наклеп в приповерхностных слоях образца. Для этого П-образный образец зажимали двумя пластиковыми пластинами в мини-струбцине. Затем поверхность образца шлифовали на фотобумаге с использованием мелкодисперсной алмазной пасты. В процессе шлифования верхняя часть образца стачивалась на глубину 0,1–0,2 мм, в среднем площадь шлифа составляла около 0,45 × 2,60 мм. Окончательное полирование осуществляли на влажной бархатной ткани. После полировки шлиф извлекали из струбцины и монтировали в рабочую камеру водородно-вакуумной установки ВВУ-2, которая подробно описана в работе [10]. Данная установка позволяет реализовать на одном образце две методики изучения процессов, протекающих на поверхности и в объеме палладиевого образца в ходе водородной обработки, т. е. одновременно исследовать изменения поверхностного рельефа по методике оптической видеомикроскопии и кинетику протекающих в объеме образца процессов по методике измерения электросопротивления.

Схемы водородных обработок представлены на рис. 1.

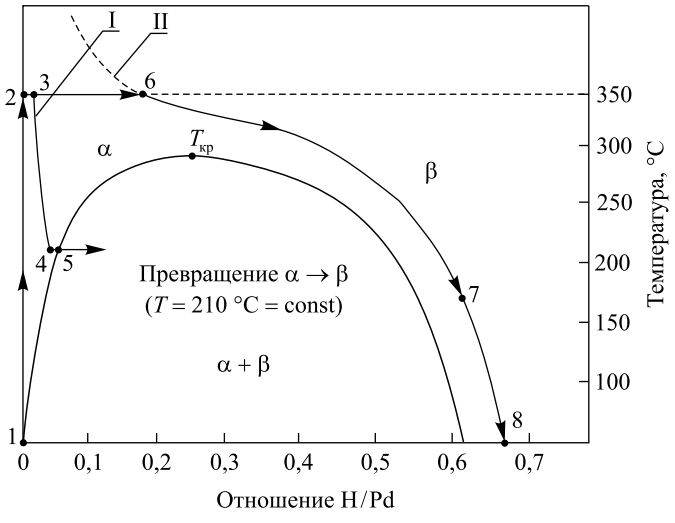


Рис. 1. Схемы водородных обработок палладия
для получения исходных отожженных сплавов палладий – водород и инициации
в них индуцированных водородом фазово-структурных превращений:
I – изобара 0,6 МПа; II – изобара 2,3 МПа

Fig. 1. Schemes of hydrogen treatment of palladium to obtain initial annealed
palladium – hydrogen alloys and initiate hydrogen-induced phase-structural transformations:
I – isobar 0.6 MPa; II – isobar 2.3 MPa

Эксперименты были проведены в следующем порядке. Образец помещали в рабочую камеру установки ВВУ-2, которую затем вакуумировали и нагревали до температуры 350 °C (см. рис. 1, точка 2). После этого в рабочую камеру напускали газообразный водород со скоростью 0,1–0,2 МПа/мин до давления 0,6 МПа (см. рис. 1, точка 3). Процесс сорбции водорода образцом контролировали по изменению электросопротивления, которое пропорционально концентрации водорода в образце. Далее осуществляли выдержку образца в течение 30 мин до полной стабилизации его удельного электросопротивления, что свидетельствовало об окончании процесса поглощения водорода. Важно, что указанные условия (T = 350 °C, P_{H_2} = 0,6 МПа) соответствуют условиям однофазной (α-фаза) области системы Pd – H [11]. После выдержки образец охлаждали со скоростью 2–3 °C/мин, сохраняя постоянное давление. При этом фигуративная точка образца переходила к двухфазной (α + β)-области со стороны α-области. Если охлаждение проводить в условиях, близких к равновесным, со скоростью 2–3 °C/мин [9], то фигуративная точка образца, согласно работе [11], движется практически по изобаре 0,6 МПа, а поверхность шлифа, как показали ранее проведенные эксперименты [9], остается плоской и практически полностью неизменной. Достигнув температуры 210 °C (см. рис. 1, точка 4), проводили выдержку до полной стабилизации удельного электросопротивления. При этой же температуре далее осуществляли насыщение образца водородом путем повышения его давления до значения критической равновесной точки на бинодали системы Pd – H (см. рис. 1, точка 5) со стороны α-области (табл. 1).

Инициацию прямых гидридных превращений производили путем повышения давления водорода. Условия инициации данных превращений приведены в табл. 1. Также в ней представлены значения критических точек на бинодали, которые соответствуют условиям эксперимента.

Таблица 1

Условия инициации прямых гидридных фазовых превращений в сплавах α-PdH_{max} путем повышения давления водорода

Table 1

Conditions for initiating direct hydride phase transformations in α-PdH_{max} alloys by increasing the hydrogen pressure

№ п/п	Начальные условия экспериментов			Параметры повышения давления			Длительность превращения (τ), с
	$T_{кр}$, °C	$P_{H_2, кр}$, МПа	Состав сплава PdH_x	Средняя скорость напуска водорода, МПа/мин	ΔP_{H_2}, МПа	$P_{H_2, max}$, МПа	
1	230	0,68	$PdH_{0,1}$	1,1	0,15	0,83	25
2	250	1,00	$PdH_{0,12}$	1,6	0,15	1,15	–
3	270	1,40	$PdH_{0,17}$	2,0	0,15	1,55	–

В каждой серии экспериментов отрабатывали методику достаточно сильного водородного воздействия и находили параметры, при которых в сплавах PdH_x обеспечивается развитие ожидаемых фазово-структурных превращений. Во многих случаях для достижения поставленной цели требовалось существенно «ужесточить» параметры водородной обработки: быстро изменять температуру обработки и (или) существенно повышать давление газообразного водорода.

Таблица 2

Экспериментальные параметры водородных обработок, обеспечивающих получение отожженных сплавов палладий – водород

Table 2

Experimental parameters of hydrogen treatments providing production of annealed palladium – hydrogen alloys

Изменяемая величина	Интервал значений
Скорость нагрева (охлаждения) в вакууме, °С/мин	5–7 (3–5)
Скорость нагрева (охлаждения) в водороде, °С/мин	2–4 (2–3)
Скорость напуска (эвакуации) водорода, МПа/мин	0,1–0,2 (0,05–0,10)
Среднее время выдержки в вакууме, мин	Около 10
Среднее время выдержки в водороде, мин	Не менее 10

При проведении пилотных экспериментов и отработке методики в настоящей работе впервые установлено, что важным фактором водородного воздействия на металл является не только собственно повышение давления водорода, но и сопряженное с ним увеличение скорости подачи водорода $\left(\frac{\Delta P_{H_2}}{\Delta\tau}\right)$ (табл. 2). В некоторых экспериментах $\frac{\Delta P_{H_2}}{\Delta\tau}$ приходилось поднимать до предельных возможностей установки ВВУ-2. Такой способ резкого насыщения металла водородом для краткости мы называем «водородным ударом», что аналогично термину «тепловой удар», используемому в теории упругости [12; 13].

Результаты экспериментов

Эксперимент № 1. На рис. 2 представлены результаты изучения изменений поверхности шлифа сплава $PdH_{0,1}$ при $T = 230$ °С = const. Как видно из табл. 2, для инициации изменений поверхности скорость подачи водорода пришлось увеличить до 1,1 МПа/мин.

Из сравнения фотографий, приведенных на рис. 2, *а* и *б*, следует, что изменения поверхности сплава начинались со сдвига зерен. Как было описано в работе [9], при этом наблюдалось переформирование зеренной структуры и имело место временное выпучивание отдельных зерен (см. рис. 2, *в* и *г*). Далее происходило некоторое выравнивание зерен. В конечном виде (см. рис. 2, *д*) шлиф представляет собой достаточно гладкую поверхность лишь со слабыми проявлениями границ зерен.

Как видно из табл. 2, прямое гидридное превращение с полным переходом в β-область в указанных условиях развивается достаточно быстро и полностью заканчивается на поверхности за 25 с. При этом классический механизм зарождения и роста новой фазы, наблюдавшийся в предыдущих экспериментах, в данном случае не работает.

Эксперименты № 2 и 3. Описанный в эксперименте № 1 механизм изменения поверхности сплава $PdH_{0,1}$ еще более ярко проявляется в экспериментах № 2 и 3, выполненных при $T = 250$ °С и $T = 270$ °С соответственно, т. е. при температурах, весьма близких к $T_{кр} = 292$ °С. В этих условиях эксперименты пришлось проводить с еще более высокой средней скоростью подачи водорода (1,6 и 2,0 МПа/мин соответственно). На рис. 3 представлены результаты экспериментов для сплава $PdH_{0,12}$, а на рис. 4 – для сплава $PdH_{0,17}$.

Как видно из рис. 3, *а – в*, и рис. 4, *а – г*, основные изменения поверхности шлифа заключались лишь в проявлении границ зерен металла. Необходимо отметить, что, как и в эксперименте № 1, в процессе сдвига имела место некоторая «игра» зерен относительно друг друга. В конце концов происходило общее сглаживание выделившихся зерен. Однако в целом конечный сдвиг зерен был необратимым и оставался таковым при охлаждении до нормальных условий (см. рис. 3, *в*, и рис. 4, *д*).

В заключение необходимо подчеркнуть, что в результате экспериментов № 2 и 3, как это фиксировалось по изменению электросопротивления, система Pd – H переходила в β-область. Иными словами, гидридные превращения развивались в согласии с диаграммой состояния Pd – H, но без характерных признаков механизма зарождения и роста новой фазы на поверхности сплавов палладий – водород.

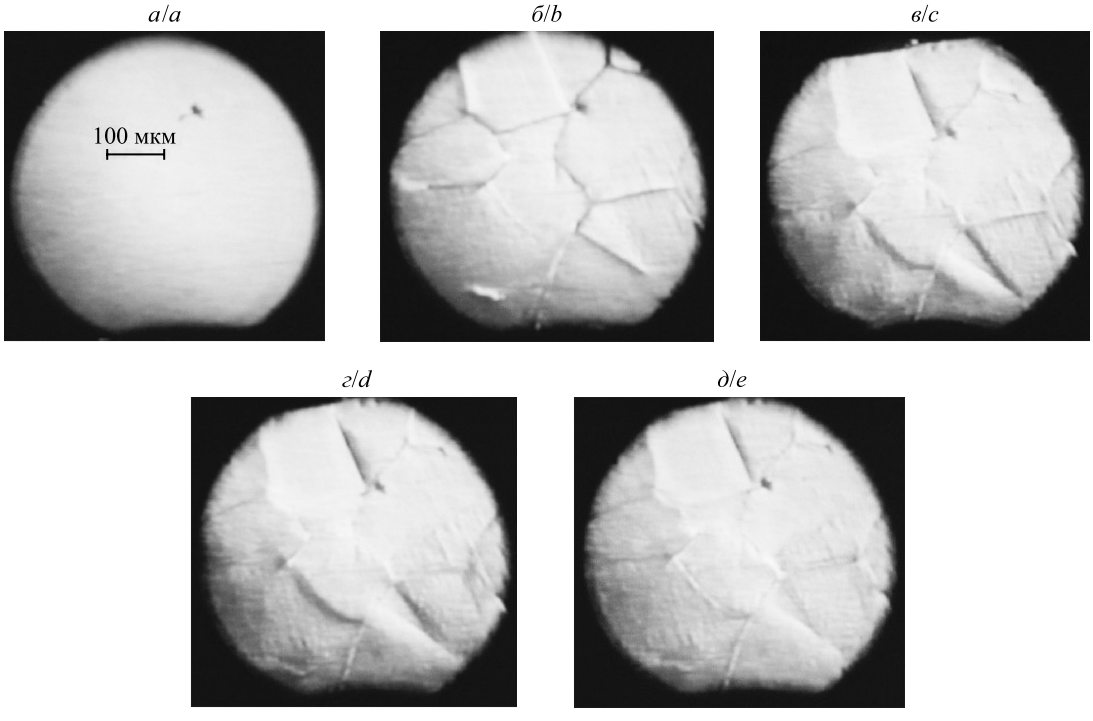


Рис. 2. Изменения полированной поверхности сплава $PdH_{0,1}$, вызванные инициацией прямого гидридного фазового превращения $\alpha \rightarrow \beta$ путем повышения давления при $T = 230$ °C = const. Время от начала приповерхностных изменений: *а* – 0 с; *б* – 1 с; *в* – 4 с; *г* – 11 с; *д* – 25 с

Fig. 2. Changes in the polished surface of the $PdH_{0.1}$ alloy caused by the initiation of a direct $\alpha \rightarrow \beta$ hydride phase transformation by increasing pressure at $T = 230$ °C = const. Time from the beginning of near-surface changes: *a* – 0 s; *b* – 1 s; *c* – 4 s; *d* – 11 s, *e* – 25 s

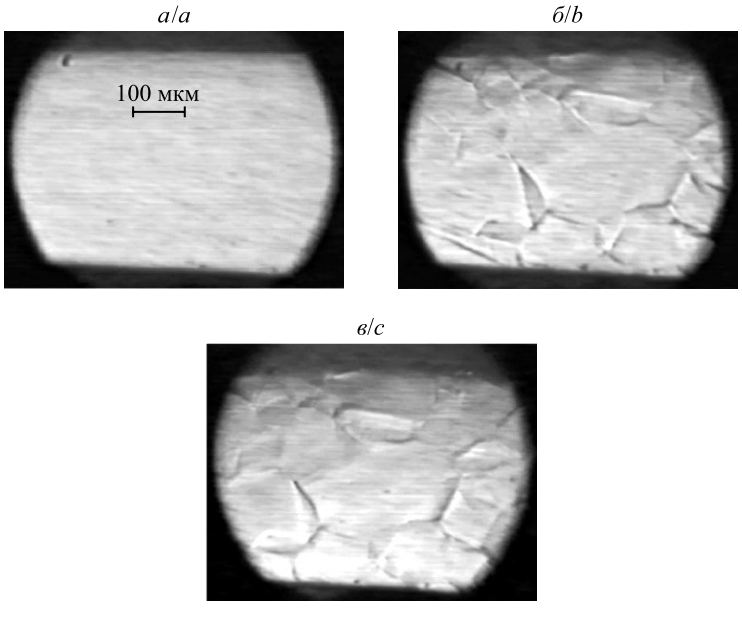


Рис. 3. Изменения полированной поверхности сплава $PdH_{0,12}$, инициированные повышением давления при $T = 250$ °C = const. Время от начала приповерхностных изменений: *а* – 0 с; *б* – 1 с; *в* – 7 с

Fig. 3. Changes in the polished surface of the $PdH_{0.12}$ alloy initiated by an increase in pressure at $T = 250$ °C = const. Time from the beginning of near-surface changes: *a* – 0 s; *b* – 1 s; *c* – 7 s

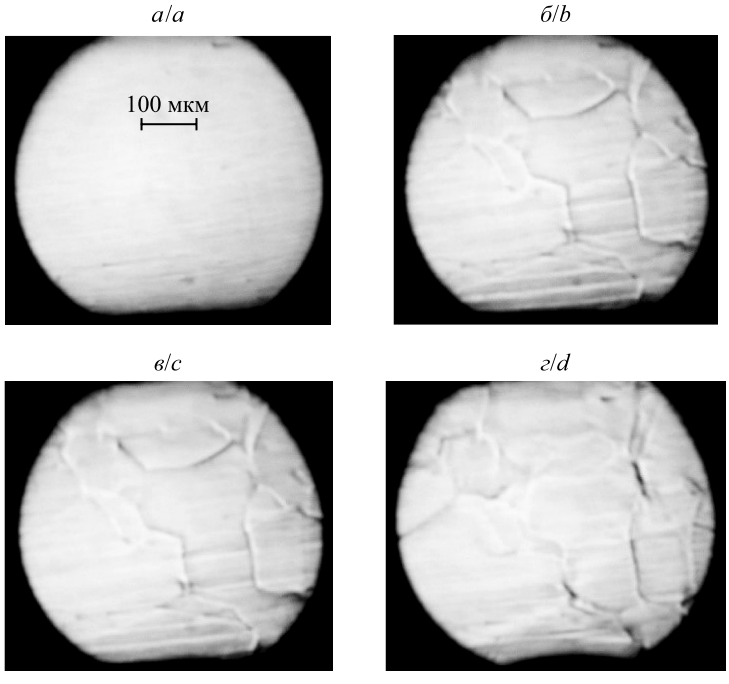


Рис. 4. Изменения полированной поверхности сплава $PdH_{0,17}$,
инициированные повышением давления при $T = 270$ °C = const.
Время от начала приповерхностных изменений: *а* – 0 с; *б* – 1 с; *в* – 2 с; *г* – 5 с

Fig. 4. Changes in the polished surface of the $PdH_{0.17}$ alloy
initiated by an increase in pressure at $T = 270$ °C = const.
Time from the beginning of near-surface changes: *a* – 0 s; *b* – 1 s; *c* – 2 s; *d* – 5 s

Обсуждение результатов

Как отмечено выше, в полиморфных твердых телах фазовые переходы могут быть вызваны как изменением температуры (обычно при нормальном давлении), так и повышением давления.

Однако в силу различных причин, и главным образом ввиду сложности проведения эксперимента со сверхвысоким давлением (иначе эффекты малы) [14], сложившиеся представления о природе и возможных структурных механизмах фазовых превращений в металлах (прежде всего в сталях и сплавах на основе железа, титана и других полиморфных металлов) преимущественно были сформированы на основе экспериментов, когда фазовые превращения в полиморфных материалах вызываются охлаждением или нагревом с различными скоростями и в разных практических условиях. В результате такого воздействия, как уже было сказано во введении, в полиморфных материалах реализуются мартенситные, бейнитные, диффузионные превращения, а также превращения смешанного типа и т. д. [15].

Эксперименты, описанные в данной работе, открывают возможность для выявления некоторых конкретных особенностей гидридных фазовых превращений в системах Ме – Н при их термодинамической открытости и обмене с внешней средой не только энергией, но и веществом (водородом).

До начала водородного воздействия путем повышения давления водорода в исходных сплавах отсутствуют как ВК-напряжения, так и ВФ-напряжения (нет ни градиентов концентрации водорода, ни выделений β-фазы). В результате повышения давления водорода возникает термодинамическая движущая сила, инициирующая поглощение сплавом водорода и развитие гидридного превращения $\alpha \rightarrow \beta$. Очевидно, что такой способ водородного воздействия практически сразу вызывает появление градиентов концентрации водорода в масштабах всей поверхности образца, что обусловливает развитие восходящей диффузии водорода из глубины образца к его поверхности. Это приводит к немедленному возникновению и перманентному переформированию сложной системы ВК-напряжений в масштабах всего образца. Особенности и последствия такого способа водородного воздействия на металл («водородный удар») уже обсуждались в работе [9], когда дополнительное насыщение палладия водородом проводили в однофазной α-области ($T > T_{кр}$), что вызывало сдвиг зерен в приповерхностных слоях сплавов палладий – водород.

В рассматриваемых условиях (по сравнению с теми условиями, которые были описаны в работе [9]) ситуация весьма сильно осложняется: всякое насыщение водородом приповерхностного слоя исходного сплава PdH_x вызывает необходимость развития в этом слое гидридного фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$. Как

показали выполненные эксперименты, в случае повышения давления водорода при относительно низких температурах на первых этапах превращение реализуется по механизму зарождения и роста новой фазы. При этом имеет место зарождение весьма ограниченного числа центров β-фазы (как правило, один – два зародыша), которые затем растут и образуют массивные выделения β-фазы. Естественно, что зарождение и рост выделений β-фазы вызывают появление ВФ-напряжений, которые по сравнению с уже «работающими» ВК-напряжениями, по-видимому, играют второстепенную роль.

С повышением температуры указанные морфологические особенности в целом сохраняются, но теперь их можно экспериментально вызывать, если все более и более увеличивать скорость напуска водорода при исходных «водородных ударах» (см. табл. 1). Необходимость такого «ужесточения» водородного воздействия в целом понятна и обусловлена необходимостью удерживать (на начальном этапе воздействия) высокие значения ВК-напряжений. Действительно, с ростом температуры ВК-напряжения снижаются из-за уменьшения разности концентраций водорода (Δx) в фазах α_{max}-PdH_x и β_{min}-$PdH_{x+\Delta x}$, что наглядно видно из рис. 5, где представлена зависимость Δx от температуры, построенная по данным работ [16–18]. По этой причине усиление водородного воздействия теперь экспериментально достигается путем более быстрого исходного подъема концентрации водорода в приповерхностном слое палладия и, соответственно, развития восходящей диффузии водорода.

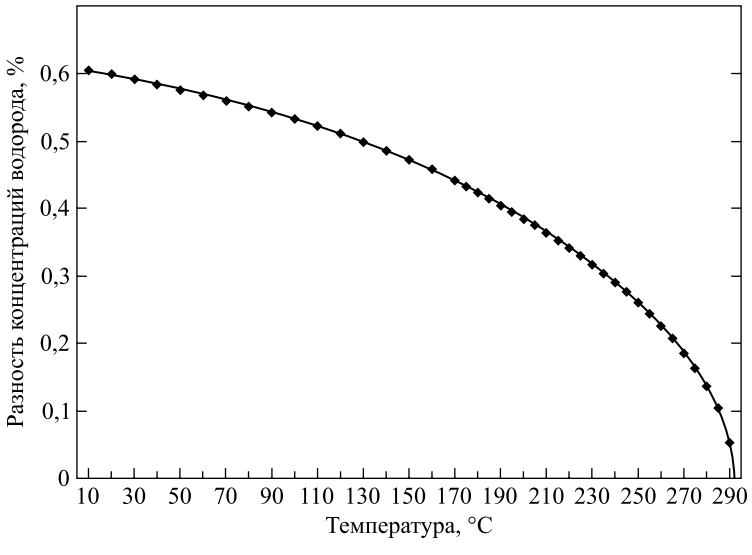


Рис. 5. Зависимость разности концентраций водорода в превращающихся фазах α_{max}-PdH_x и β_{min}-$PdH_{x+\Delta x}$ от температуры при изотермических гидридных превращениях

Fig. 5. Temperature dependence of the difference in hydrogen concentrations in the transforming phases α_{max}-PdH_x and β_{min}-$PdH_{x+\Delta x}$ during isothermal hydride transformations

В целом особенность проведенных экспериментов состоит в том, что в каждом из реализованных способов инициации гидридных фазовых превращений на начальном этапе водородного воздействия доминировала какая-то одна система водородных напряжений, а именно либо ВФ-напряжения, либо ВК-напряжения. Это и определяло специфику поведения системы Pd – H при переходах $\alpha \rightarrow (\alpha + \beta) \rightarrow \beta$ в конкретных условиях экспериментов.

Естественно, что при температурах, близких к точке $T_{кр} = 292$ °C, ВК- и ВФ-напряжения ослабевают настолько, что полированная поверхность палладия уже не претерпевает никаких изменений при переходе фигуративной точки системы из α-области в β-область [19].

Выполненные в данной работе эксперименты выявили новые важные структурно-морфологические особенности гидридных превращений при их инициации в районе купола двухфазной (α + β)-области системы Pd – H. Естественно было предположить, что описанные в публикации [20] водородофазовый наклеп и сопровождающие его структурные изменения палладия будут иметь свои особенности, если гидридные фазовые превращения осуществлять в условиях, принятых в настоящей работе.

Заключение

Систематически изучены *in situ* с видеозаписью и покадровым анализом гидридные фазовые превращения в приповерхностных слоях сплавов палладий – водород в районе купола двухфазной области и установлены их структурно-морфологические особенности в зависимости от используемых способов

инициации превращений и условий их осуществления (по отношению к критической температуре системы Pd – H).

Экспериментально установлено, что гидридные фазовые превращения $\alpha \rightarrow \beta$ в сплавах, инициированные повышением давления газообразного водорода, подчиняются следующим фазово-структурным закономерностям.

1. При указанном способе инициации гидридные фазовые превращения $\alpha \rightarrow \beta$ реализуются по смешанному механизму. Зарождение и рост массивных выделений β-фазы сопровождаются сдвигом зерен с последующим ростом выделений β-фазы от острых краев выделившихся зерен.

2. По мере приближения температуры гидридного превращения $\alpha \rightarrow \beta$ к точке $T_{кр}$ и увеличения мощности «водородных ударов» вклад механизма зарождения и роста новой фазы в превращение постепенно уменьшается и исчезает, а вклад механизма роста выделений β-фазы от острых краев выделившихся зерен увеличивается.

Результаты экспериментов обсуждены исходя из представлений, что гидридные превращения по своей природе являются диффузионно-кооперативными фазовыми превращениями, а водородное воздействие вызывает в металле возникновение, перераспределение и релаксацию водородных (ВФ и ВК) напряжений. Высказана гипотеза, что фазово-структурная и морфологическая специфика развития гидридных превращений $\alpha \rightarrow \beta$ определяется характерными особенностями возникающих водородных напряжений: при инициации путем повышения давления водорода на начальных этапах главную роль играют ВК-напряжения.

Выполненные в данной работе эксперименты выявили новые важные структурно-морфологические особенности гидридных превращений при их инициации в районе купола двухфазной $(\alpha + \beta)$-области системы Pd – H.

Библиографические ссылки

1. Федотов АК. *Физическое материаловедение. Часть 2. Фазовые превращения в металлах и сплавах.* Минск: Вышэйшая школа; 2012. 446 с.

2. Попов АА, Жилякова МА, Зорина МА. *Фазовые и структурные превращения в металлических сплавах.* Екатеринбург: Издательство Уральского университета; 2018. 316 с.

3. Разумов ИК, Горностырев ЮН, Кацнельсон МИ. К теории фазовых превращений в железе и стали на основе первопринципных подходов. *Физика металлов и металловедение.* 2017;118(4):380–408.

4. Спивак ЛВ, Щепина НЕ. Калориметрические эффекты при структурно-фазовых превращениях в металлах и сплавах. *Физика металлов и металловедение.* 2020;121(10):1059–1087.

5. Ngene P, Longo A, Mooij L, Bras W, Dam B. Metal-hydrogen systems with an exceptionally large and tunable thermodynamic destabilization. *Nature Communications.* 2017;8:1846. DOI: 10.1038/s41467-017-02043-9.

6. Goltsov VA, editor. *Progress in hydrogen treatment of materials.* Donetsk: Kassiopeya; 2001. 543 p.

7. Карпенко ГВ, Крипякевич РИ. *Влияние водорода на свойства стали.* Москва: Металлургиздат; 1962. 197 с.

8. Склюев ПВ. *Водород и флокены в крупных поковках.* Москва: Машгиз; 1963. 188 с.

9. Жиров ГИ, Гольцова МВ. Сдвиг зерен в палладии и сплавах PdH_x при водородных ударах. *Физика металлов и металловедение.* 2002;94(3):66–71.

10. Гольцова МВ. Відеозапис зворотних гідридних перетворень в системі Pd – H. У: *Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Металургія. Випуск 40, том 2.* Донецьк: Донецький національний технічний університет; 2002. с. 99–104.

11. Вике Э, Бродовский Х. Водород в палладии и сплавах палладия. В: Алефельд Г, Фёлькль И, редакторы. *Водород в металлах. Том 2. Прикладные аспекты.* Москва: Мир; 1981. с. 91–189 (Проблемы прикладной физики).

12. Коваленко АД. *Основы термоупругости.* Киев: Наукова думка; 1970. 307 с.

13. Тимошенко СП, Гудьер Дж. *Теория упругости.* Рейтман МИ, переводчик; Шапиро ГС, редактор. 2-е издание. Москва: Наука; 1979. 560 с.

14. Favier F, Walter EC, Zach MP, Benter T, Penner RM. Hydrogen sensors and switches from electrodeposited palladium mesowire arrays. *Science.* 2001;293(5538):2227–2231. DOI: 10.1126/science.10631.

15. Новиков ИИ. *Теория термической обработки металлов.* 4-е издание. Москва: Металлургия; 1986. 480 с.

16. Фромм Е, Гебхардт Е. *Газы и углерод в металлах.* Бурцев ВТ, переводчик; Линчевский БВ, редактор. Москва: Металлургия; 1980. 711 с.

17. Алефельд Г, Фёлькль И, редакторы. *Водород в металлах. Том 1. Основные свойства.* Москва: Мир; 1981. 476 с. (Проблемы прикладной физики).

18. Алефельд Г, Фёлькль И, редакторы. *Водород в металлах. Том 2. Прикладные аспекты.* Москва: Мир; 1981. 431 с. (Проблемы прикладной физики).

19. Гольцова МВ, Артеменко ЮА, Жиров ГИ. Гидридные превращения: природа, кинетика, морфология. *Альтернативная энергетика и экология (ISJAEE).* 2014;1:70–84.

20. Жиров ГИ. Водородофазовый наклеп палладия в результате обратного $\beta \rightarrow \alpha$ гидридного фазового превращения. *Альтернативная энергетика и экология (ISJAEE).* 2014;1:85–96.

References

1. Fedotov AK. *Fizicheskoe materialovedenie. Chast' 2. Fazovye prevrashcheniya v metallakh i splavakh* [Physical materials science. Part 2. Phase transformations in metals and alloys]. Minsk: Vyshjejshaja shkola; 2012. 446 p. Russian.

2. Popov AA, Zhilyakova MA, Zorina MA. *Fazovye i strukturnye prevrashcheniya v metallicheskikh splavakh* [Phase and structural transformations in metal alloys]. Ekaterinburg: Izdatel'stvo Ural'skogo universiteta; 2018. 316 p. Russian.

3. Razumov IK, Gornostyrev YuN, Katsnel'son MI. [On the theory of phase transformations in iron and steel based on first-principles approaches]. *Fizika metallov i metallovedenie.* 2017;118(4):380–408. Russian.

4. Spivak LV, Shchepina NE. [Calorimetric effects in structural-phase transformations in metals and alloys]. *Fizika metallov i metallovedenie.* 2020;121(10):1059–1087. Russian.

5. Ngene P, Longo A, Mooij L, Bras W, Dam B. Metal-hydrogen systems with an exceptionally large and tunable thermodynamic destabilization. *Nature Communications.* 2017;8:1846. DOI: 10.1038/s41467-017-02043-9.

6. Goltsov VA, editor. *Progress in hydrogen treatment of materials.* Donetsk: Kassiopeya; 2001. 543 p.

7. Karpenko GV, Kripyakevich RI. *Vliyanie vodoroda na svoistva stali* [Effect of hydrogen on steel properties]. Moscow: Metallurgizdat; 1962. 197 p. Russian.

8. Sklyuev PV. *Vodorod i flokeny v krupnykh pokovkakh* [Hydrogen and flocks in large forgings]. Moscow: Mashgiz; 1963. 188 p. Russian.

9. Zhirov GI, Goltsova MV. [Grain shift in palladium and PdH_x alloys under hydrogen impact]. *Fizika metallov i metallovedenie.* 2002;94(3):66–71. Russian.

10. Goltsova MV. [Video recording of inverse hydride transformations in the Pd – H system]. In: *Naukovi praci Donec'kogo nacional'nogo tehnichnogo universytetu. Serija: Metalurgija. Vypusk 40, tom 2* [Scientific works of the Donetsk National Technical University. Series: Metallurgy. Issue 40, volume 2]. Donetsk: Donetsk National Technical University; 2002. p. 99–104. Ukrainian.

11. Wicke E, Brodowsky H. Hydrogen in palladium and palladium alloys. In: Alefeld G, Völkl J, editors. *Hydrogen in metals II. Application-oriented properties.* Berlin: Springer-Verlag; 1978. p. 73–156 (Topics in applied physics; volume 29).

Russian edition: Wicke E, Brodowsky H. Vodorod v palladii i splavakh palladiya. In: Alefeld G, Völkl J, editors. *Vodorod v metallakh. Tom 2. Prikladnye aspekty.* Moscow: Mir; 1981. p. 91–189 (Problemy prikladnoi fiziki).

12. Kovalenko AD. *Osnovy termouprugosti* [Fundamentals of thermoelasticity]. Kyiv: Naukova dumka; 1970. 307 p. Russian.

13. Timoshenko SP, Goodier JN. *Theory of elasticity.* 3rd edition. New York: McGraw-Hill Book Company; 1970. 608 p.

Russian edition: Timoshenko SP, Goodier J. *Teoriya uprugosti.* Reitman MI, translator; Shapiro GS, editor. 2nd edition. Moscow: Nauka; 1979. 560 p.

14. Favier F, Walter EC, Zach MP, Benter T, Penner RM. Hydrogen sensors and switches from electrodeposited palladium mesowire arrays. *Science.* 2001;293(5538):2227−2231. DOI: 10.1126/science.10631.

15. Novikov II. *Teoriya termicheskoi obrabotki metallov* [Theory of heat treatment of metals]. 4th edition. Moscow: Metallurgiya; 1986. 480 p. Russian.

16. Fromm E, Gebhardt E, Herausgeber. *Gase und Kohlenstoff in Metallen.* Berlin: Springer-Verlag; 1976. XX, 748 S. (Reine und angewandte Metallkunde in Einzeldarstellungen; Band 26).

Russian edition: Fromm E, Gebkhardt E. *Gazy i uglerod v metallakh.* Burtsev VT, translator; Linchevskii BV, editor. Moscow: Metallurgiya; 1980. 711 p.

17. Alefeld G, Völkl J, editors. *Hydrogen in metals I. Basic properties.* Berlin: Springer-Verlag; 1978. XVI, 428 p. (Topics in applied physics; volume 28).

Russian edition: Alefeld G, Völkl J, editors. *Vodorod v metallakh. Tom 1. Osnovnye svoistva.* Moscow: Mir; 1981. 476 p. (Problemy prikladnoi fiziki).

18. Alefeld G, Völkl J, editors. *Hydrogen in metals II. Application-oriented properties.* Berlin: Springer-Verlag; 1978. XXII, 390 p. (Topics in applied physics; volume 29).

Russian edition: Alefeld G, Völkl J, editors. *Vodorod v metallakh. Tom 2. Prikladnye aspekty.* Moscow: Mir; 1981. 431 p. (Problemy prikladnoi fiziki).

19. Goltsova MV, Artemenko YuA, Zhirov GI. Hydride transformations: nature, kinetics, morphology. *Alternative Energy and Ecology (ISJAEE).* 2014;1:70–84. Russian.

20. Zhirov GI. Hydrogen phase naklep of palladium in result of reverse hydride $\beta \rightarrow \alpha$ phase transformation. *Alternative Energy and Ecology (ISJAEE).* 2014;1:85–96. Russian.

Получена 23.11.2022 / исправлена 27.12.2022 / принята 27.12.2022.
Received 23.11.2022 / revised 27.12.2022 / accepted 27.12.2022.

Физика ядра и элементарных частиц

Atomic nucleus and elementary particle physics

УДК 539.12.01

РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОСЛАБОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА БАЗЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОГО РАССЕЯНИЯ

Ю. Н. ЧУДНОВА[1)]***, Т. В. ШИШКИНА***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Рассмотрены программы исследований на линейных коллайдерах нового поколения. На основе диаграммной техники Фейнмана выполнен аналитический лоренц-инвариантный расчет амплитуд и квадратов матричных элементов процесса рождения мюон-антимюонной пары в результате аннигиляции электронов и позитронов высоких энергий. Показано, что учет слабого взаимодействия при расчете данного процесса необходим уже в низшем порядке теории возмущений. Выполнен численный анализ дифференциальных и полных сечений процесса, а также асимметрии рассеяния частиц вперед-назад с учетом ширины распада массивного нейтрального калибровочного бозона для различных энергий взаимодействия и углов обрезания. Проведен анализ применимости ультрарелятивистского приближения. Обнаружено, что оно эффективно описывает сечения процесса при энергиях, достижимых на линейных коллайдерах нового поколения. Проанализированы перспективы использования процесса рождения пары фермионов при аннигиляции электронов и позитронов как для изучения параметров и структуры Стандартной модели электрослабого взаимодействия, так и для развития альтернативных неминимальных калибровочных моделей.

Ключевые слова: линейные коллайдеры; Стандартная модель; электрон-позитронные столкновения; сечение рождения.

Образец цитирования:
Чуднова ЮН, Шишкина ТВ. Развитие теории электрослабого взаимодействия на базе процессов электрон-позитронного рассеяния. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:43–54.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-43-54

For citation:
Chudnova YN, Shishkina TV. Development of electroweak interaction theory based on electron-positron scattering. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:43–54. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-43-54

Авторы:
Юлия Николаевна Чуднова – студентка физического факультета. Научный руководитель – Т. В. Шишкина.
Татьяна Викентьевна Шишкина – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:
Yulia N. Chudnova, student at the faculty of physics.
yuliachudnova39@gmail.com
Tatiana V. Shishkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
shishkina.tatiana.v@gmail.com

CC BY NC

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2023;1:43–54
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2023;1:43–54

DEVELOPMENT OF ELECTROWEAK INTERACTION THEORY BASED ON ELECTRON-POSITRON SCATTERING

***Y. N. CHUDNOVA*[a], *T. V. SHISHKINA*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: Y. N. Chudnova (yuliachudnova39@gmail.com)

The programs of research on linear colliders of a new generation are considered. The analytical Lorentz invariant calculation of the amplitudes and squares of matrix elements of the process of the muon-antimuon pair generation as a result of the electron-positron annihilation at high energies is performed on the basis of Feynman diagram technique. It is shown that taking into account the weak interaction in the calculation of this process is necessary even in the lowest order of the perturbation theory. Numerical analysis of the differential and total cross sections of the process, as well as the forward-backward asymmetry, taking into account the decay width massive neutral gauge boson for various interaction energies and cutoff angles, is performed. The ultrarelativistic approximation has been examinedd. The last one effectively describes the cross sections of the process at energies of new generation linear colliders. The opportunity of fermions pair production as a result of electron-positron annihilation are analysed both for investigation the parameters and structure of the Standard Model of the electroweak interaction and for development of alternative non-minimal gauge models.

Keywords: linear colliders; Standard Model; electron-positron collisions; production cross section.

Введение

Исследования на линейных коллайдерах – одно из перспективных направлений экспериментальной физики высоких энергий [1–3]. Процессы столкновения лептонов позволяют провести прецизионные измерения, необходимые для проверки Стандартной модели и ее параметров. Рассматриваемый процесс – взаимодействие электрон-позитронной пары с образованием мюон-антимюонной пары – является электрослабым в низшем порядке теории возмущений, поэтому эффекты слабого взаимодействия вносят значительный вклад [4–9] в экспериментально измеряемые величины. Это определяет важность тщательного анализа указанного процесса на базе экспериментальных данных линейных ускорителей нового поколения. Изучение эффектов слабого взаимодействия обладает эвристическим потенциалом как для подтверждения Стандартной модели, так и для поиска возможных эффектов Новой физики. Для выработки адекватной стратегии серии экспериментов необходимы прецизионный расчет и предварительный теоретический анализ перспектив изучения данного процесса, важность которых демонстрируется тем, что эксперименты на электрон-позитронных пучках формируют первую программу исследований на линейных ускорителях и могут повлиять на осознание целей и последовательности дальнейших исследований.

Величина, которой достигают сечения в низшем порядке теории возмущений, свидетельствует о необходимости учета высших порядков, так как эти поправки будут значительны, следовательно, они могут быть сравнимы с эффектами слабого взаимодействия, по крайней мере в части кинематической области, что позволит исследовать тонкие эффекты калибровочной структуры. По этой причине прецизионные ковариантные расчеты основных эффектов [10–16], выполненные в низшем порядке теории возмущений, имеют первостепенное значение.

Точным аналитическим лоренц-инвариантным расчетам сечений процесса рождения мюон-антимюонной пары в электрон-позитронных столкновениях и посвящена настоящая статья.

Ковариантная кинематика процесса

В работе исследуется процесс

$$e^-(p_1) + e^+(p_2) \to \mu^-(p_1') + \mu^+(p_2'),$$

где p_i и p_i' – 4-импульсы начальных и конечных частиц соответственно.

Для описания данного процесса удобно использовать кинематические инварианты Мандельштама

$$s = (p_1 + p_2)^2 = (p_1' + p_2')^2,$$
$$t \equiv -Q^2 = (p_1 - p_1')^2 = (p_2 - p_2')^2,$$
$$u = (p_1 - p_2')^2 = (p_2 - p_1')^2.$$

Эти инварианты связаны следующим соотношением:

$$s + t + u = 2m_e^2 + 2m_\mu^2.$$

Естественным кинематическим ограничением является порог энергии рождения пары мюонов

$$s \geq \left(2m_\mu\right)^2.$$

В рамках экспериментов на линейных ускорителях процессы взаимодействия осуществляются на встречных пучках равных энергий. В связи с этим в качестве нековариантных кинематических переменных удобно использовать энергию взаимодействия и угол разлета вторичных частиц в системе центра масс, в которой суммарный 3-импульс начальных частиц равен нулю:

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_1' + \vec{p}_2' = 0.$$

В этой системе выражения для энергий и импульсов частиц будут включать в себя лишь зависимость от энергии взаимодействия $\sqrt{s}$:

$$\left|\vec{p}_1\right| = \left|\vec{p}_2\right| = \frac{\sqrt{\lambda\left(s,\, m_e^2,\, m_e^2\right)}}{2\sqrt{s}},$$

$$\left|\vec{p}_1'\right| = \left|\vec{p}_2'\right| = \frac{\sqrt{\lambda\left(s,\, m_\mu^2,\, m_\mu^2\right)}}{2\sqrt{s}},$$

$$p_1^0 = p_2^0 = p_1'^0 = p_2'^0 = \frac{\sqrt{s}}{2}.$$

Для краткости здесь введена функция Каллена (двухчастичная кинематическая функция)

$$\lambda\left(x,\, y,\, z\right) = \left(x - y - z\right)^2 - 4yz.$$

Из представленных выше соотношений легко получить выражение для связи инвариантов и углов рассеяния частиц. Например, выразим инвариант t в системе центра масс:

$$t = m_e^2 + m_\mu^2 - 2\left(p_2^0 p_2'^0 - \left|\vec{p}_2\right|\left|\vec{p}_2'\right|\cos\theta\right) =$$

$$= -\frac{1}{4}\left[\left(s - 4m_e^2\right) + \left(s - 4m_\mu^2\right) - \sqrt{s - 4m_e^2}\,\sqrt{s - 4m_\mu^2}\,\cos\theta\right],$$

где θ – угол отклонения конечных частиц относительно начальных частиц одного заряда.

Таким образом, осуществляется переход от нековариантных выражений к лоренц-инвариантным. Из последней формулы можно получить кинематические пределы изменения инварианта, подставив максимальное и минимальное значения $\cos\theta$.

Сечение процесса

Процесс $e^-e^+ \to \mu^-\mu^+$ в низшем порядке теории возмущений описывается двумя диаграммами, представленными на рис. 1. Диаграмма на рис. 1, *а*, описывает рассеяние, обусловленное электромагнитным взаимодействием, диаграмма на рис. 1, *б*, – рассеяние, обусловленное слабым взаимодействием.

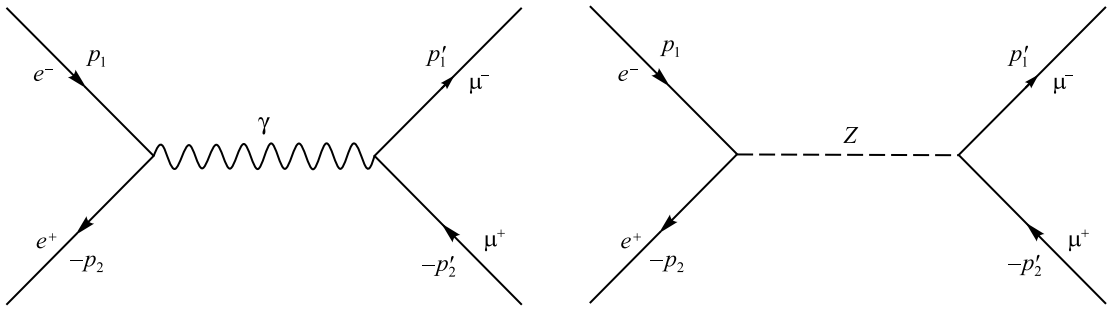


Рис. 1. Диаграммы процесса $e^-e^+ \to \mu^-\mu^+$ в борновском приближении
Fig. 1. Diagrams of the $e^-e^+ \to \mu^-\mu^+$ process in the Born approximation

Непосредственно из матричного элемента процесса выделим его амплитуду. Общий вид матричного элемента, соответствующего диаграмме процесса, можно представить следующим образом:

$$M = C_{\alpha\beta}\bar{u}\left(p_1'\right)\mathfrak{M}_\alpha u\left(-p_2'\right)\bar{u}\left(-p_2\right)\mathfrak{Q}_\beta u\left(p_1\right),$$

где $C_{\alpha\beta}$ – тензорная амплитуда процесса; $\mathfrak{M}_\alpha$, $\mathfrak{Q}_\beta$ – формфакторы вершин. Произведение двух таких амплитуд с учетом спинорной алгебры может быть переписано через следы произведения матриц:

$$M^{(1)}M^{(1)*} = C^{(1)}_{\alpha\beta}C^{(2)*}_{\mu\nu}\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{(1)}_\alpha\rho\left(p_1\right)\bar{\mathfrak{M}}^{(2)}_\mu\rho\left(-p_2\right)\right]\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{Q}^{(1)}_\beta\rho\left(p_1'\right)\bar{\mathfrak{Q}}^{(2)}_\nu\rho\left(-p_2'\right)\right],$$

где $\rho\left(p\right) = p_\alpha\gamma_\alpha + m \equiv \hat{p} + m$ – матрица плотности неполяризованной частицы с 4-вектором p и массой m.

Так же как и диаграммы Фейнмана, амплитуда может быть разделена на вклады, определяемые электромагнитным и слабым взаимодействиями:

$$M_{\mathrm{Born}} = M^{em} + M^{w}.$$

Выражение для дифференциального сечения процесса может быть записано в следующем виде:

$$d\sigma = \frac{1}{4\sqrt{\left(p_1p_2\right)^2 - m_1^2m_2^2}}\left|M\right|^2\left(2\pi\right)^{-2}d\Gamma,$$

где $\left|M\right|^2$ – квадрат модуля матричного элемента; $d\Gamma$ – элементарный объем фазового пространства, определяемый как

$$d\Gamma = \frac{d^3p_1'}{2p_1^0}\frac{d^3p_2'}{2p_2^0}\delta\left(p_1 + p_2 - p_1' - p_2'\right).$$

Для нахождения конкретного выражения для дифференциального сечения необходимо рассчитать квадрат модуля матричного элемента и после этого получить выражение в терминах используемых кинематических переменных.

Квадрат модуля матричного элемента будет определяться тремя слагаемыми:

$$\left|M\right|^2 = F^{EM} + F^{EW} + F^{W}.$$

Исходя из внутренней структуры амплитуды, квадрат модуля матричного элемента можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\left|M\right|^2 = {} & C^{em}_{\alpha\beta}C^{em*}_{\mu\nu}\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{em}_\alpha\rho\left(p_1\right)\mathfrak{M}^{em}_\mu\rho\left(-p_2\right)\right]\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{em}_\beta\rho\left(p_1'\right)\mathfrak{M}^{em}_\nu\rho\left(-p_2'\right)\right] + \\ & + 2\mathrm{Re}\left[\left[C^{w}_{\alpha\beta}C^{em*}_{\mu\nu}\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_\alpha\rho\left(p_1\right)\mathfrak{M}^{em}_\mu\rho\left(-p_2\right)\right]\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_\beta\rho\left(p_1'\right)\mathfrak{M}^{em}_\nu\rho\left(-p_2'\right)\right]\right]\right] + \\ & + C^{w}_{\alpha\beta}C^{w*}_{\mu\nu}\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_\alpha\rho\left(p_1\right)\mathfrak{M}^{w}_\mu\rho\left(-p_2\right)\right]\mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_\beta\rho\left(p_1'\right)\mathfrak{M}^{w}_\nu\rho\left(-p_2'\right)\right],\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\mathfrak{M}^{em}_\alpha = \mathfrak{Q}^{em}_\alpha = \bar{\mathfrak{M}}^{em}_\alpha = \bar{\mathfrak{Q}}^{em}_\alpha = \gamma_\alpha,\\ \mathfrak{M}^{w}_\alpha = \mathfrak{Q}^{w}_\alpha = \gamma_\alpha\left(g_V + g_A\gamma_5\right),\\ \bar{\mathfrak{M}}^{w}_\alpha = \bar{\mathfrak{Q}}^{w}_\alpha = \left(g_V + g_A\gamma_5\right)\gamma_\alpha,\end{aligned}$$

$$C^{em}_{\alpha\beta} = -\frac{ie^2g_{\alpha\beta}}{s},$$

$$C^{w}_{\alpha\beta} = -i\frac{g^2}{4\cos^2\theta_W}\frac{g_{\alpha\beta} - \dfrac{r_\alpha r_\beta}{M_Z^2}}{s - M_Z^2},$$

$$r_\alpha = \left(p_1 + p_2\right)_\alpha.$$

Определим вспомогательные тензорные функции $\mathbb{A}_{\alpha\beta}$, $\mathbb{B}_{\alpha\beta}$, $\mathbb{C}_{\alpha\beta}$, являющиеся результатом вычисления шпуров:

$$\mathbb{A}_{\alpha\beta}\left(k_1, k_2\right) = \mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{em}_\alpha\rho\left(k_1\right)\mathfrak{M}^{em}_\beta\rho\left(-k_2\right)\right] = 2\left(sg_{\alpha\beta} - 2k_{1\alpha}k_{2\beta} - 2k_{1\beta}k_{2\alpha}\right),$$

$$\mathbb{B}_{\alpha\beta}\left(k_1, k_2\right) = \mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_\alpha\rho\left(k_1\right)\mathfrak{M}^{em}_\beta\rho\left(-k_2\right)\right] = g_V\mathbb{A}_{\alpha\beta}\left(k_1, k_2\right) - 4ig_Ak_{1\mu}k_{2\nu}\varepsilon_{\alpha\beta\mu\nu},$$

$$\mathbb{C}_{\alpha\beta}(k_1, k_2) = \mathrm{Sp}\left[\mathfrak{M}^{w}_{\alpha}\rho(k_1)\mathfrak{M}^{w}_{\beta}\rho(-k_2)\right] = g_V^2\mathbb{A}_{\alpha\beta}(k_1, k_2) + g_A^2\mathbb{A}_{\alpha\beta}(k_1, -k_2).$$

С учетом введенных функций квадрат модуля матричного элемента можно представить в компактной форме:

$$|M|^2 = C^{em}_{\alpha\beta}C^{em*}_{\mu\nu}\mathbb{A}_{\alpha\mu}(p_1, p_2)\mathbb{A}_{\beta\nu}(p_1', p_2') +$$
$$+ 2\mathrm{Re}\left[\!\left[C^{w}_{\alpha\beta}C^{em*}_{\mu\nu}\mathbb{B}_{\alpha\mu}(p_1, p_2)\mathbb{B}_{\beta\nu}(p_1', p_2')\right]\!\right] +$$
$$+ C^{w}_{\alpha\beta}C^{w*}_{\mu\nu}\mathbb{C}_{\alpha\mu}(p_1, p_2)\mathbb{C}_{\beta\nu}(p_1', p_2').$$

Рассмотрим формфакторы, определяющие вклады частей суммарной амплитуды процесса в сечение. Для электромагнитного вклада имеем следующее выражение:

$$F^{EM} = 128\pi^2\alpha^2\left[\frac{m_e^2}{s} + \frac{\left(m_e^2 + m_\mu^2 - t\right)^2}{s^2} + \frac{m_\mu^2}{s} + \frac{\left(m_e^2 + m_\mu^2 - u\right)^2}{s^2}\right].$$

Отметим кроссинг-симметрию данного выражения. Аналогично для слагаемого, определяющего электрослабый вклад, получаем

$$F^{EW} = \frac{g_V^2}{2\sin^2\theta_W\cos^2\theta_W}\frac{s}{\left(s - M_Z^2\right)}F^{EM} - \frac{64\pi^2\alpha^2 g_A^2}{\sin\theta_W\cos\theta_W}\frac{t-u}{s - M_Z^2}.$$

Слабую часть вклада запишем следующим образом:

$$F^{W} = \frac{1}{\sin^4\theta_W\cos^4\theta_W}\left[G_{\mathrm{I}} + G_{\mathrm{II}} + G_{\mathrm{III}} + G_{\mathrm{IV}}\right],$$

где функции G_i могут быть представлены в виде

$$G_{\mathrm{I}} = \left(g_V^2 - g_A^2\right)^2\frac{s^2}{16\left(s - M_Z^2\right)^2}F^{EM} +$$
$$+ \frac{32\pi^2\alpha^2 g_A^2\left(g_V^2 - g_A^2\right)}{\left(s - M_Z^2\right)^2}\left(m_e^2\left(s + 2m_\mu^2\right) + m_\mu^2\left(s + 2m_e^2\right)\right) +$$
$$+ \frac{256\pi^2\alpha^2 g_A^4}{\left(s - M_Z^2\right)^2}m_e^2 m_\mu^2,$$

$$G_{\mathrm{II}} = G_{\mathrm{III}} = -\frac{64\pi^2\alpha^2 g_A^4}{\left(s - M_Z^2\right)^2}\frac{s}{M_Z^2}m_e^2 m_\mu^2,$$

$$G_{\mathrm{IV}} = \frac{64\pi^2\alpha^2 g_A^4}{\left(s - M_Z^2\right)^2}\frac{s^2}{M_Z^4}m_e^2 m_\mu^2.$$

Определим фазовый объем следующим образом:

$$\Gamma = \int\frac{d^3p_1'}{2p_1^0}\frac{d^3p_2'}{2p_2^0}\delta(p_1 + p_2 - p_1' - p_2').$$

Выразим его в терминах инвариантов:

$$\Gamma = \frac{\pi}{2}\int\frac{dt}{\sqrt{\lambda\left(s, m_e^2, m_e^2\right)}} = \frac{\pi}{2}\int\frac{dt}{\sqrt{s\left(s - 4m_e^2\right)}}.$$

Учет ширины распада Z-бозона необходим, поскольку в противном случае график сечения будет испытывать разрыв при энергии, равной порогу рождения массивного бозона. Для учета ширины распада Z-бозона выполним следующую замену:

$$M_Z^2 \to \left(M_Z - \frac{i}{2}\Gamma_Z \right)^2 \cong M_Z^2 - iM_Z\Gamma_Z,$$

где Γ_Z – ширина распада Z-бозона, причем $\Gamma_Z \ll M_Z$. В связи с этим перепишем пропагаторы, в которых ее наличие должно повлиять на расчет:

$$\frac{1}{\left(s - M_Z^2\right)^2} \to \mathrm{Re}\left[\!\!\left[\frac{1}{\left(s - M_Z^2 - iM_Z\Gamma_Z\right)^2} \right]\!\!\right] = \frac{1}{\left(s - M_Z^2\right)^2 + M_Z^2\Gamma_Z^2},$$

$$\frac{1}{s - M_Z^2} = \frac{s - M_Z^2}{\left(s - M_Z^2\right)^2} \to \frac{s - M_Z^2}{\left(s - M_Z^2\right)^2 + M_Z^2\Gamma_Z^2}.$$

Исходя из наличия тех или иных пропагаторов в различных вкладах в сечение, получим следующие преобразования для учета ширины распада Z-бозона:

$$F^{EW} \to \frac{\left(s - M_Z^2\right)^2}{\left(s - M_Z^2\right)^2 + M_Z^2\Gamma_Z^2} F^{EW},$$

$$F^{W} \to \frac{\left(s - M_Z^2\right)^2}{\left(s - M_Z^2\right)^2 + M_Z^2\Gamma_Z^2} F^{W}.$$

Полное сечение процесса. Асимметрия рассеяния вперед-назад

Полное сечение процесса легко получить посредством интегрирования дифференциального сечения по полному фазовому пространству:

$$\sigma(s) = \int_{t_{\min}}^{t_{\max}} d\sigma(s, t).$$

Учитывая введенную ранее в системе центра масс зависимость инварианта t от угла разлета частиц $t(\cos\theta)$, можно определить абсолютные кинематические пределы изменения этого инварианта:

$$t(+1) \geq t \geq t(-1).$$

В реальных экспериментах детектор представляет собой не цельную сферу, а сферу со «слепой зоной», в которой не происходит детектирования частиц. Ее размеры определяются так называемым углом обрезания $\Delta\theta$. Полное сечение с учетом угла обрезания принимает вид

$$\sigma(s) = \int_{t(-\cos\Delta\theta)}^{t(\cos\Delta\theta)} d\sigma(s, t).$$

В качестве дополнительной измеряемой величины введем асимметрию рассеяния частиц вперед-назад

$$A^{FB} = \frac{\sigma\left(\theta \leq \frac{\pi}{2}\right) - \sigma\left(\theta \geq \frac{\pi}{2}\right)}{\sigma\left(\theta \leq \frac{\pi}{2}\right) + \sigma\left(\theta \geq \frac{\pi}{2}\right)},$$

определяющую относительное количество процессов, произошедших с вылетом конечных мюонов в переднюю полусферу детектора, к количеству процессов, произошедших с вылетом мюонов в противоположном направлении.

Численный анализ

Используем полученные формулы дифференциального и полного сечений, а также асимметрии рассеяния вперед-назад для численного анализа наблюдаемых величин, которые можно построить по результатам экспериментов на коллайдерах.

Начнем с дифференциальных сечений, определяющих плотность вероятности прохождения процессов с заданными кинематическими характеристиками. На рис. 2 представлен график дифференциального сечения процесса в зависимости от лоренц-инвариантов (передачи импульса) при различных значениях энергии взаимодействия начальных частиц.

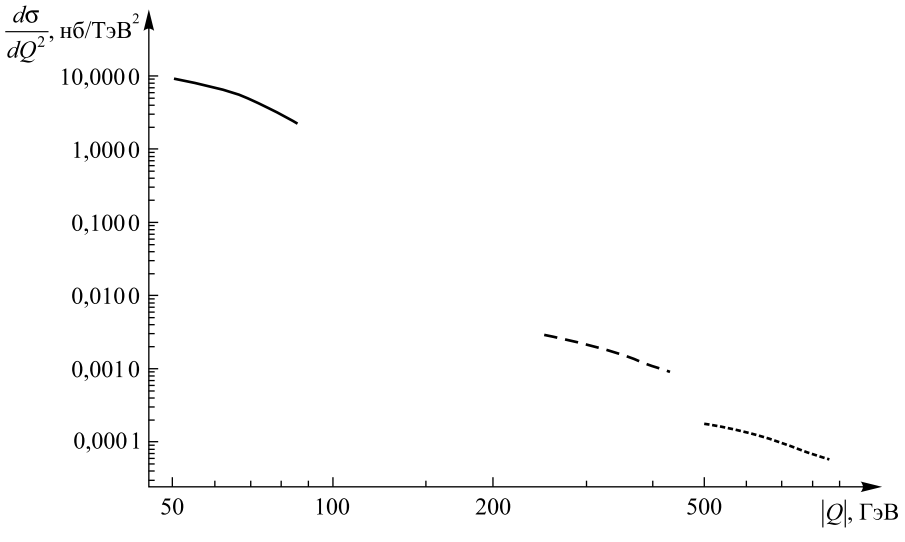


Рис. 2. Зависимость ковариантного дифференциального сечения рассеяния от передачи импульса для различных значений энергии взаимодействия. Сплошная линия соответствует энергии 100 ГэВ, штриховая – энергии 500 ГэВ, точечная – энергии 1 ТэВ

Fig. 2. The dependence of covariant differential cross section from momentum transfer for various interaction energies. The solid line corresponds to the energy of 100 GeV, the dashed line – to the energy of 500 GeV, the dotted line – to the energy of 1 TeV

Заметим, что при возрастании энергии взаимодействия сечение уменьшается на пять порядков, а графики смещаются влево (при этом пределы изменения $|Q|$ увеличиваются), причем при использовании логарифмической шкалы кинематическая область визуально не изменяется по ширине. Проявляется важная особенность дифференциального сечения: на границах кинематической области оно остается конечным, при этом величина дифференциального сечения при фиксированной энергии взаимодействия является монотонной функцией эффективной передачи энергии-импульса и уменьшается примерно на порядок с ростом $|Q|$.

Рассмотрим, каким образом учет различных совокупностей вкладов влияет на значение конечного дифференциального сечения. На рис. 3 представлена зависимость ковариантного дифференциального сечения от передачи импульса для различных совокупностей вкладов при энергии взаимодействия $\sqrt{s} = 100$ ГэВ. Как видно из рис. 3, слабое взаимодействие вносит значительный вклад в полное сечение.

Аналогичные дифференциальные сечения можно построить и в зависимости от нековариантных переменных в системе центра масс. На рис. 4 представлен график дифференциального сечения для тех же значений энергии взаимодействия (100 и 500 ГэВ, 1 ТэВ), но только в зависимости от угла разлета конечных частиц.

С учетом того что эксперимент на линейных ускорителях выполняется на встречных пучках, выбор системы центра масс является наиболее естественным. Здесь та же зависимость от энергии взаимодействия и примерно те же порядки уменьшения значений сечения при изменении энергии (на пять порядков). При этом с наибольшей вероятностью процесс осуществляется при минимальных углах отклонения.

Теперь перейдем к рассмотрению полного сечения обсуждаемого процесса. На рис. 5 и 6 представлены графики полного сечения с учетом только электромагнитного вклада, а также всех вкладов в древесном приближении и относительного электромагнитного вклада.

Введем величину, определяющую вклад иных слагаемых относительно электромагнитного вклада:

$$\Delta^{EM} = \frac{\delta - \delta^{EM}}{\delta^{EM}}.$$

Нетрудно заметить, что в области энергии, соответствующей порогу рождения Z-бозона (Z-пик), наблюдается пик сечения, достигающий 1 нб. Основной вклад в этот пик вносит именно канал, определяемый

обменом *Z*-бозоном. Убеждаемся еще раз, что учет данного вклада дает дополнительную информацию. При энергии около 90 ГэВ относительный вклад этого слагаемого в сечение достигает приблизительно 2000 % от электромагнитного вклада, при энергии 50 ГэВ составляет 1 %, а при энергии 150 ГэВ равняется 20 % и асимптотически стремится к значению примерно 13 %. Очевидно, что вклад слагаемого, определяемого слабым взаимодействием, существен лишь в малой области энергий (от 78 до 144 ГэВ), где он превышает 1 % от электромагнитного вклада. В остальной части диапазона энергий дополнительный вклад дает именно слагаемое, отражающее интерференцию электромагнитного и слабого взаимодействий.

Рассмотрим зависимость значения полного сечения от угла обрезания, представленную на рис. 7. За счет отсутствия особенностей на границах кинематической области наличие угла обрезания, равно как и его значение, оказывает несущественное влияние на сечение рождения мюон-антимюонной пары.

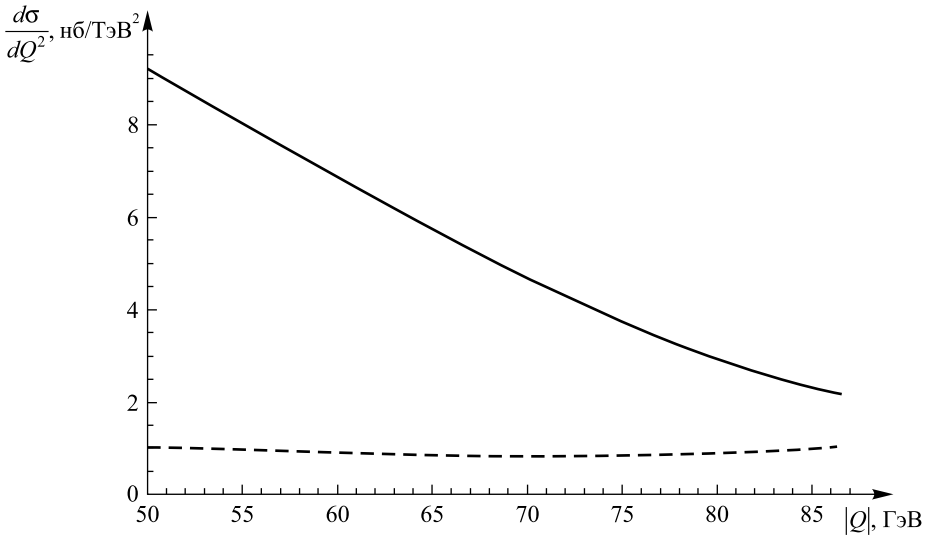


Рис. 3. Зависимость ковариантного дифференциального сечения рассеяния
от передачи импульса для различных совокупностей вкладов.
Сплошной линией показан полный вклад, штриховой – электромагнитный вклад

Fig. 3. The dependence of covariant differential cross section
from momentum transfer for different sets of contributions.
The solid line shows the total contribution, the dashed line – the electromagnetic contribution

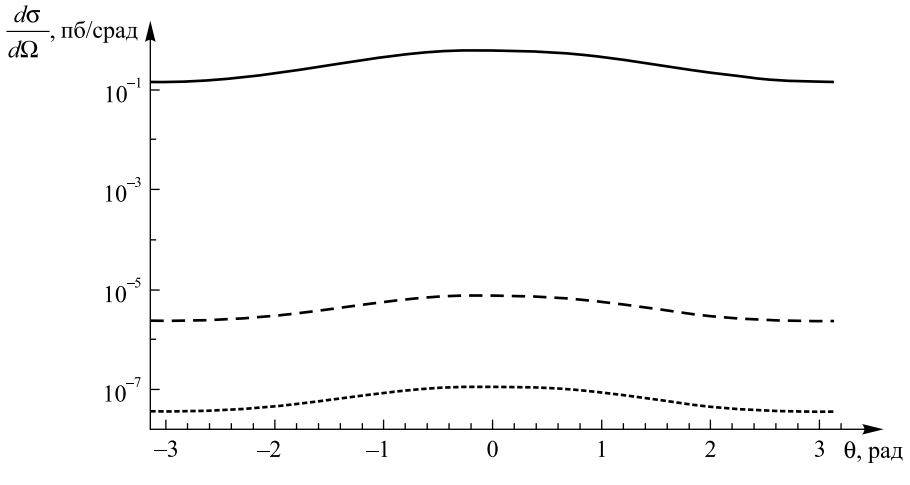


Рис. 4. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от угла рассеяния
в системе центра масс для различных значений энергии взаимодействия.
Сплошная линия соответствует энергии 100 ГэВ,
штриховая – энергии 500 ГэВ, точечная – энергии 1 ТэВ

Fig. 4. The dependence of the differential scattering cross section on the scattering angle
in the center-of-mass system for various values of the interaction energy.
The solid line corresponds to the energy of 100 GeV,
the dashed line – to the energy of 500 GeV, the dotted line – to the energy of 1 TeV

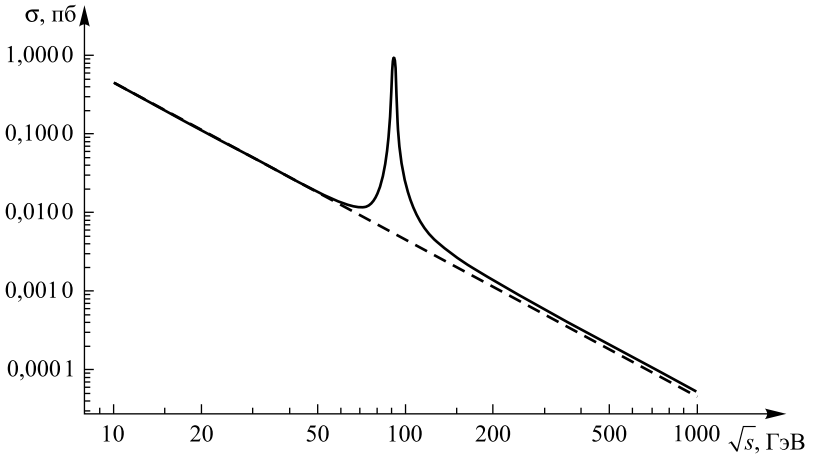


Рис. 5. Полное сечение процесса рассеяния для различных совокупностей вкладов. Сплошной линией показано сечение с учетом всех вкладов, штриховой – сечение с учетом только электромагнитного вклада

Fig. 5. The total cross section of the process for different sets of contributions. The solid line shows the cross section with all contributions taken into account, the dashed line – the cross section with only electromagnetic contribution taken into account

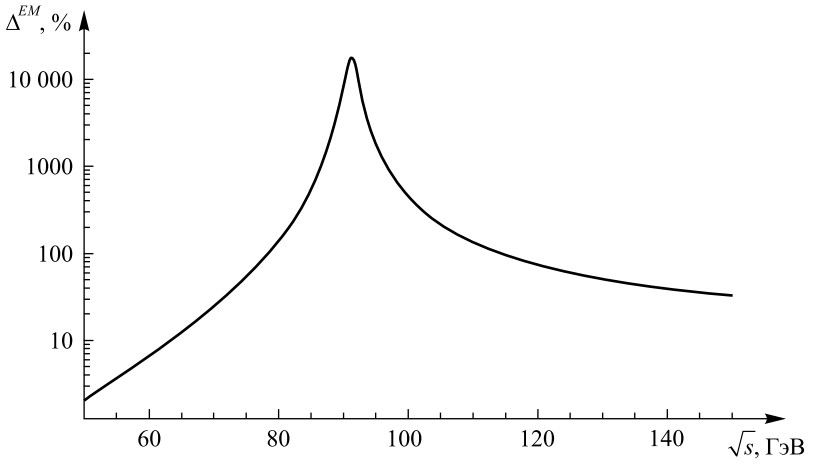


Рис. 6. Относительная разность полного и электромагнитного вкладов

Fig. 6. Relative difference between total and electromagnetic contributions

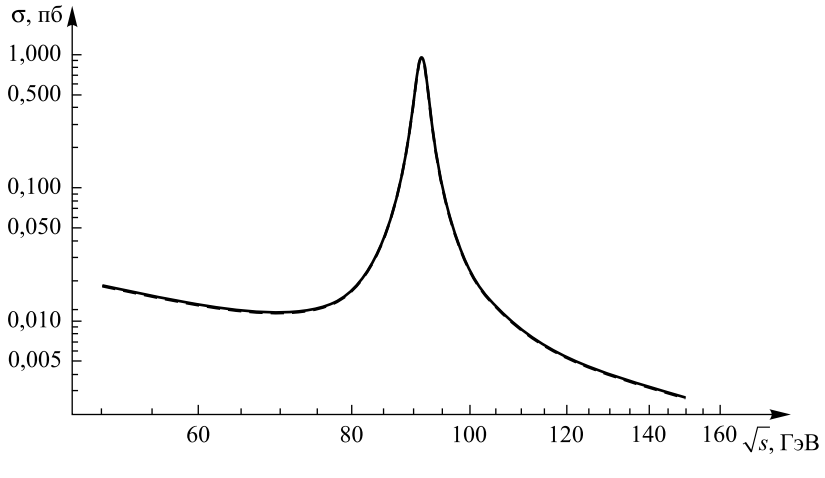


Рис. 7. Зависимость полного сечения от угла обрезания. Сплошной линии соответствует угол 0°, штриховой – угол 5°, точечной – угол 10°

Fig. 7. The dependence of the total cross section from the cut off angle. The solid line corresponds to the angle of 0°, the dashed line – to the angle of 5°, the dotted line – to the angle of 10°

Отдельного внимания заслуживает расчет сечений в ультрарелятивистском приближении в предположении, что массы частиц (электронов) пренебрежимо малы по сравнению с энергией взаимодействия ($m \ll \sqrt{s}$). В этом случае аналитическое выражение заметно упрощается. Это облегчает и ускоряет анализ, что важно при онлайн-обработке экспериментальной информации. На рис. 8 представлен график зависимости относительной разности точного выражения сечения в борновском приближении и выражения сечения в ультрарелятивистском приближении, определяемой как

$$\Delta^{UR} = \frac{\delta - \delta^{UR}}{\delta}.$$

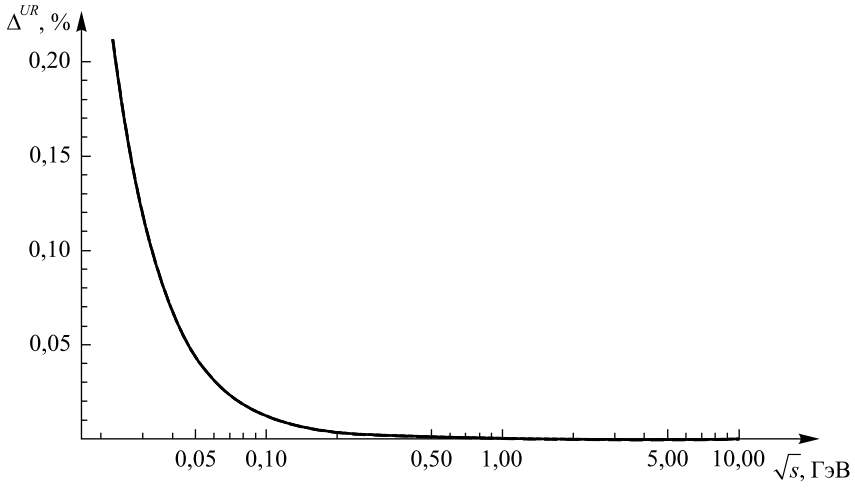


Рис. 8. Отличие сечения процесса, вычисленного
в ультрарелятивистском приближении, от его точного выражения в борновском приближении.
Сплошной линии соответствует угол 0°, штриховой – угол 5°, точечной – угол 10°

Fig. 8. The difference of the process cross section calculated
in the ultrarelativistic approximation from the exact one in the Born approximation.
The solid line corresponds to the angle of 0°, the dashed line – to the angle of 5°, the dotted line – to the angle of 10°

Максимальное отличие составляет 0,20 % на пороге энергии рождения мюон-антимюонной пары и резко падает ниже 0,01 % уже при энергии 0,1 ГэВ. Следовательно, ультрарелятивистское приближение хорошо работает, по крайней мере при анализе выражений, полученных в древесном приближении.

На рис. 9 представлен график зависимости асимметрии рассеяния частиц вперед-назад от угла обрезания.

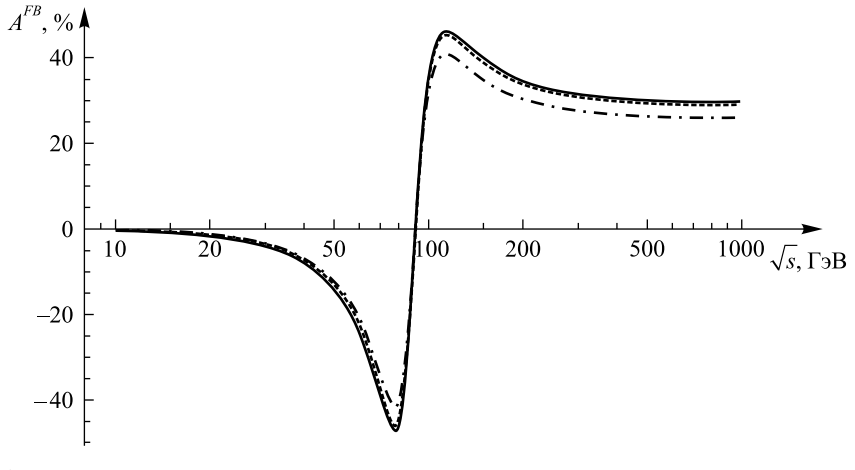


Рис. 9. Асимметрия рассеяния вперед-назад, характеризующая отношение количества процессов,
которые происходят с вылетом вторичных частиц в переднюю и заднюю полусферы детектора.
Сплошной линии соответствует угол 0°, штриховой – угол 5°,
точечной – угол 10°, штрихпунктирной – угол 20°

Fig. 9. Forward-backward scattering asymmetry as the characteristic the ratio the number of processes
that occur with the escape of secondary particles into the front and back hemispheres of the detector.
The solid line corresponds to the angle of 0°, the dashed line – to the angle of 5°,
the dotted line – to the angle of 10°, the dash-dotted line – to the angle of 20°

При энергии взаимодействия, равной энергии рождения Z-бозона, происходит смена знака величины асимметрии, при энергии взаимодействия, меньшей энергии рождения Z-бозона, преобладают процессы с большими углами отклонений, а при энергии взаимодействия, превышающей энергию рождения Z-бозона, – процессы, происходящие при минимальных углах отклонения вторичных частиц. На графике видны перегибы функции асимметрии, приводящие к наличию экстремальных значений асимметрии, достигающих по абсолютной величине 42 % при нулевом угле обрезания. При увеличении угла обрезания локализации экстремумов смещаются от точки нулевого значения асимметрии, которая остается неподвижной для любых $\Delta\theta$, а амплитудные значения уменьшаются. В случае возрастания энергии взаимодействия величина асимметрии асимптотически стремится к конечному положительному значению около 30 % при отсутствии обрезания.

Заключение

В работе выполнен расчет основного вклада в дифференциальное и полное сечения процесса $e^-e^+ \to \mu^-\mu^+$ в древесном приближении. Показана важность учета вклада слабого взаимодействия в полное сечение. Обнаружена высокая эффективность использования ультрарелятивистского приближения на всей исследованной кинематической области.

Проведен численный анализ дифференциальных и полных сечений процесса и асимметрии рассеяния частиц вперед-назад для различных энергий взаимодействия, а также углов обрезания.

Библиографические ссылки

1. Phinney N. ILC reference design report: accelerator executive summary. *ICFA Beam Dynamics Newsletter*. 2007;42:7–29.

2. Гинзбург ИФ. Фотонные коллайдеры и исследование фундаментальных взаимодействий. В: Бялко АВ, редактор. *Российская наука. Выстоять и возродиться.* Москва: Наука; 1997. с. 77–87.

3. Baer H, Barklow T, Fujii K, Gao Y, Hoang A, Kanemura S, et al., editors. *The International Linear Collider technical design report. Volume 2. Physics* [Internet]. [S. l.]: [s. n.]; 2013 [cited 2016 January 15]. 189 p. Available from: https://www.linearcollider.org/ILC/Publications/Technical-Design-Report.

4. Пескин МЕ, Шрёдер ДВ. *Введение в квантовую теорию поля.* Берков АВ, переводчик; Белавин АА, редактор. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика; 2001. 784 с.

5. Shishkina TV. Processes of lepton and boson birth in linear photon collider. In: Barkovsky LM, Feranchuk ID, Shnir YaM, editors. *Etudes on theoretical physics. Collection of works dedicated to 65th anniversary of the department of theoretical physics of Belarusian State University.* Singapore: World Scientific Publishing Company; 2004. p. 213–230.

6. Makarenko V, Mönig K, Shishkina T. Measuring the luminosity of a $\gamma\gamma$ collider with $\gamma\gamma \to l^+ l^- \gamma$ events. *The European Physical Journal C. Particles and Fields*. 2004;32(supplement 1):s143 – s150. DOI: 10.1140/epjcd/s2003-01-011-7.

7. Passarino G, Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model. *Nuclear Physics B*. 1979;160(1):151–207. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90234-7.

8. Berends FA, Kleiss R, Jadach S. Radiative corrections to muon pair and quark pair production in electron-positron collisions in the Z_0 region. *Nuclear Physics B*. 1982;202(1):63–88. DOI: 10.1016/0550-3213(82)90221-8.

9. Banerjee S, Pietrzyk B, Roney JM, Was Z. Tau and muon pair production cross sections in electron-positron annihilations at $\sqrt{s}$ = 10.58 GeV. *Physical Review D*. 2008;77(5):054012. DOI: 10.1103/PhysRevD.77.054012.

10. Bardin DYu, Shumeiko NM. On an exact calculation of the lowest-order electromagnetic correction to the point particle elastic scattering. *Nuclear Physics B*. 1977;127(2):242–258. DOI: 10.1016/0550-3213(77)90213-9.

11. Kuchto TV, Shumeiko NM. Radiative effects in deep inelastic scattering of polarized leptons by polarized nucleons. *Nuclear Physics B.* 1983;219(2):412–436. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90650-8.

12. Шишкина ТВ, Шумейко НМ. *Физика элементарных частиц.* Минск: БГУ; 2002. 112 с.

13. Shershan IA, Shishkina TV. Single gauge boson production in $e\gamma$-interaction as a modern tool for Standard Model test. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2018;21(2):199–205.

14. Shershan IA, Shishkina TV. Gauge boson production in high energy electron-photon collisions as a modern tool of searching effects beyond the Standard Model. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2019;22(1):98–103.

15. Shershan IA, Shishkina TV. Single gauge boson production in electron-photon collisions in the set of Standard Model extensions. In: Kuvshinov VI, Shaparau VA, editors. *Nonlinear dynamics and applications. Volume 25. Proceedings of the Twenty-six anniversary seminar NPCS'2019; 2019 May 21–24; Minsk, Belarus*. Minsk: Pravo i ekonomika; 2019. p. 225–230.

16. Ginzburg IF, Kotkin GL, Panfil SL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1984;219(1): 5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.

References

1. Phinney N. ILC reference design report: accelerator executive summary. *ICFA Beam Dynamics Newsletter*. 2007;42:7–29.

2. Ginzburg IF. [Photon colliders and the study of fundamental interactions]. In: Byalko AV, editor. *Rossiiskaya nauka. Vystoyat' i vozroditsya* [Russian science. Survive and be reborn]. Moscow: Nauka; 1997. p. 77–87. Russian.

3. Baer H, Barklow T, Fujii K, Gao Y, Hoang A, Kanemura S, et al., editors. *The International Linear Collider technical design report. Volume 2. Physics* [Internet]. [S. l.]: [s. n.]; 2013 [cited 2016 January 15]. 189 p. Available from: https://www.linearcollider.org/ILC/Publications/Technical-Design-Report.

4. Peskin ME, Schroeder DV. *An introduction to quantum field theory*. Reading: Addison-Wesley Publishing Company; 1995. 842 p.

Russian edition: Peskin ME, Schroeder DV. *Vvedenie v kvantovuyu teoriyu polya.* Berkov AV, translator; Belavin AA, editor. Izhevsk: Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika; 2001. 784 p.

5. Shishkina TV. Processes of lepton and boson birth in linear photon collider. In: Barkovsky LM, Feranchuk ID, Shnir YaM, editors. *Etudes on theoretical physics. Collection of works dedicated to 65th anniversary of the department of theoretical physics of Belarusian State University.* Singapore: World Scientific Publishing Company; 2004. p. 213–230.

6. Makarenko V, Mönig K, Shishkina T. Measuring the luminosity of a $\gamma\gamma$ collider with $\gamma\gamma \to l^+ l^- \gamma$ events. *The European Physical Journal C. Particles and Fields*. 2004;32(supplement 1):s143 – s150. DOI: 10.1140/epjcd/s2003-01-011-7.

7. Passarino G, Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model. *Nuclear Physics B*. 1979;160(1):151–207. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90234-7.

8. Berends FA, Kleiss R, Jadach S. Radiative corrections to muon pair and quark pair production in electron-positron collisions in the Z_0 region. *Nuclear Physics B*. 1982;202(1):63–88. DOI: 10.1016/0550-3213(82)90221-8.

9. Banerjee S, Pietrzyk B, Roney JM, Was Z. Tau and muon pair production cross sections in electron-positron annihilations at $\sqrt{s}$ = 10.58 GeV. *Physical Review D*. 2008;77(5):054012. DOI: 10.1103/PhysRevD.77.054012.

10. Bardin DYu, Shumeiko NM. On an exact calculation of the lowest-order electromagnetic correction to the point particle elastic scattering. *Nuclear Physics B*. 1977;127(2):242–258. DOI: 10.1016/0550-3213(77)90213-9.

11. Kuchto TV, Shumeiko NM. Radiative effects in deep inelastic scattering of polarized leptons by polarized nucleons. *Nuclear Physics B.* 1983;219(2):412–436. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90650-8.

12. Shishkina TV, Shumeiko NM. *Fizika elementarnykh chastits* [Physics of elementary particles]. Minsk: Belarusian State University; 2002. 112 p. Russian.

13. Shershan IA, Shishkina TV. Single gauge boson production in $e\gamma$-interaction as a modern tool for Standard Model test. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2018;21(2):199–205.

14. Shershan IA, Shishkina TV. Gauge boson production in high energy electron-photon collisions as a modern tool of searching effects beyond the Standard Model. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2019;22(1):98–103.

15. Shershan IA, Shishkina TV. Single gauge boson production in electron-photon collisions in the set of Standard Model extensions. In: Kuvshinov VI, Shaparau VA, editors. *Nonlinear dynamics and applications. Volume 25. Proceedings of the Twenty-six anniversary seminar NPCS'2019; 2019 May 21–24; Minsk, Belarus*. Minsk: Pravo i ekonomika; 2019. p. 225–230.

16. Ginzburg IF, Kotkin GL, Panfil SL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1984;219(1): 5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.

Получена 06.10.2022 / исправлена 20.11.2022 / принята 20.11.2022.
Received 06.10.2022 / revised 20.11.2022 / accepted 20.11.2022.

Наноматериалы и нанотехнологии

Nanomaterials and nanotechnologies

УДК 538.975;535.422:517.598

АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ И ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РАЗЛИЧНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА В ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИЛОЖЕНИЯХ

***С. А. МАКСИМЕНКО*[1)], *Т. А. КУЛАГОВА*[1)], *А. В. ОКОТРУБ*[2)], *В. И. СУСЛЯЕВ*[3)]**

[1)]*Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт неорганической химии им. А. В. Николаева, Сибирское отделение РАН, пр. Академика Лаврентьева, 3, 630090, г. Новосибирск, Россия*
[3)]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина, 36, 634050, г. Томск, Россия*

Образец цитирования:
Максименко СА, Кулагова ТА, Окотруб АВ, Сусляев ВИ. Актуальные задачи использования композиционных и гибридных материалов на основе различных форм углерода в электромагнитных и биомедицинских приложениях. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:55–69.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-55-69

For citation:
Maksimenko SA, Kulahava TA, Okotrub AV, Suslyaev VI. Actual problems of the usage of composite and hybrid materials based on different forms of nanocarbons in electromagnetic and biomedical applications. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:55–69. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-55-69

Авторы:
Сергей Афанасьевич Максименко – доктор физико-математических наук, профессор; директор.
Татьяна Александровна Кулагова – кандидат биологических наук, доцент; заведующий сектором биофизических исследований лаборатории наноэлектромагнетизма.
Александр Владимирович Окотруб – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий отделом химии функциональных материалов.
Валентин Иванович Сусляев – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры радиоэлектроники радиофизического факультета.

Authors:
Sergey A. Maksimenko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; director.
sergey.maksimenko@gmail.com
https://orcid.org/0000-0002-8271-0449
Tatyana A. Kulahava, PhD (biology), docent; head of the sector of biophysical research, laboratory of nanoelectromagnetics.
tatyana_kulagova@tut.by
https://orcid.org/0000-0002-1113-7323
Alexander V. Okotrub, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of chemistry of functional materials.
spectrum@niic.nsc.ru
https://orcid.org/0000-0001-9607-911X
Valentin I. Suslyaev, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of radioelectronics, faculty of radiophysics.
susl@mail.tsu.ru
https://orcid.org/0000-0003-0935-975X

CC BY NC

Представлен краткий обзор актуальных проблем прикладного электромагнетизма (беспроводная связь и защита информационных каналов от несанкционированного доступа, электромагнитная совместимость, биомедицина и др.), которые решаются за счет использования композиционных наноматериалов, в том числе на основе углеродных наноструктур. Подчеркнута важность прикладных разработок с применением механизмов тонкой настройки свойств углеродсодержащих структур, таких как функционализация, легирование, комплексообразование и гибридизация. Отмечена необходимость практического освоения новых методов создания композиционных и гибридных материалов с использованием 3D-печати, CVD и других химических технологий, а также новых видов композиционных материалов на основе пенообразных и губчатых структур, полых микроструктур и структур «ядро – оболочка» с разным химическим составом, градиентных структур. Обзор содержит широкий перечень ссылок на оригинальные и обзорные публикации последних лет по исследованию и применению композиционных материалов на основе различных форм углерода. Этот перечень может быть полезен как преподавателям соответствующих дисциплин, так и молодым ученым, выбирающим свое научное направление или уже нацеленным на решение конкретных проблем взаимодействия электромагнитного излучения с наноструктурами. Отмечено, что задача опережающего развития ряда отраслей современной индустрии, таких как коммуникационные и биомедицинские технологии, требует существенных интеллектуальных и финансовых инвестиций в фундаментальные и прикладные исследования, а также совершенствования образовательных технологий в данной области, в первую очередь на базе передовых научно-учебных экспериментальных установок и комплексов. Обзор составлен по результатам работы VI Белорусско-российского семинара-конференции «Углеродные наноструктуры, тонкие пленки и композиты: синтез, физико-химические свойства и применения».

Ключевые слова: наноэлектромагнетизм; миллиметровый и субмиллиметровый диапазоны длин волн; наноструктуры; наноуглерод; композиционные материалы; синтез углеродных наноструктур; научные мероприятия.

ACTUAL PROBLEMS OF THE USAGE OF COMPOSITE AND HYBRID MATERIALS BASED ON DIFFERENT FORMS OF NANOCARBONS IN ELECTROMAGNETIC AND BIOMEDICAL APPLICATIONS

***S. A. MAKSIMENKO*[a], *T. A. KULAHAVA*[a], *A. V. OKOTRUB*[b], *V. I. SUSLYAEV*[c]**

[a]*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,*
11 Babrujskaja Street, Minsk 220006, Belarus
[b]*Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,*
3 Akademika Lavrentieva Avenue, Novosibirsk 630090, Russia
[c]*National Research Tomsk State University, 36 Lenina Avenue, Tomsk 634050, Russia*

Corresponding author: S. A. Maksimenko (sergey.maksimenko@gmail.com)

A brief review of actual problems of present-day applied electromagnetism (wireless communication and information channels protection from unauthorised access, electromagnetic compatibility, biomedicine, etc.) which can be solved exploiting composite nanomaterials are presented. The importance has been outlined of applied developments exploiting different mechanisms of fine tuning of custom properties of carbon-based nanostructures, such as functionalisation, doping, complexing and hybridisation. The review stresses the necessity in practical implementation novel methods of composite and hybrid materials synthesis utilising 3D printing, modified CVD and other chemical technologies, as well as new types of composites such as foams and aerogels, sponges, hollow microstructures, core – shell structures with different chemical compositions, gradient structures. The review includes a wide list of references to recent original and review publications on nanocarbon based composite materials. This list can be helpful both for university lecturers, and young scientists ether choosing an ambition research topic or aimed at a concrete task in the field of electromagnetic wave interaction with nanostructures. It has been noted that the priority development rate of advanced industrial sectors, such as communication and biomedical technologies, requires essential intellectual and financial investments in fundamental and applied research and also enhancement of educational technologies, first of all – on the base of present-day experimental facilities and research-educational complexes. The review has been compiled on the basis of the results presented at the 6th Belarusian-Russian seminar-conference «Carbon nanostructures, thin films, and composites: synthesis, physical-chemical properties and applications».

Keywords: nanoelectromagnetics; millimeter and submillimeter wavelength ranges; nanostructures; nanocarbon; composite materials; carbon nanostructures synthesis; scientific events.

Современные тенденции развития прикладного наноэлектромагнетизма

Решение комплекса актуальных прикладных задач быстроразвивающихся отраслей современной индустрии, таких как электроника, беспроводная связь и защита информационных каналов, аэронавтика, биомедицина, энергетика и т. п., требует разработки и внедрения широкого класса новых наукоемких материалов. В большинстве случаев прогресс в этой области достигается за счет применения композиционных и (или) гибридных материалов, проявляющих свойства, несводимые к свойствам исходных составляющих. В частности, последние три десятилетия развития науки и технологии ознаменовались быстрым прогрессом в синтезе различных типов искусственных сред и материалов, обладающих наноразмерной структурированностью и открывающих не существовавшие ранее технологические возможности. Достаточно упомянуть современные технологии микроэлектроники, оперирующие на уровне размеров 5–10 нм [1], и технологии стандартов беспроводной связи 5G и 6G, которые практически полностью базируются на наноразмерной элементной базе и композиционных материалах [2–6], техническом освоении ранее малодоступных миллиметрового и субмиллиметрового диапазонов длин волн (или частотного диапазона 0,1–10,0 ТГц) [7]. Стандарты 5G и 6G обеспечивают передачу информации со скоростью мультигигабит в секунду и большей на порядки плотностью при существенно меньшем времени ожидания по сравнению с существующими стандартами мобильной связи [8; 9].

Важным стимулом освоения гига- и терагерцевого диапазонов частот является развитие методов спектроскопии органических молекул, обеспечивающих прогресс фармацевтических и биомедицинских разработок [10], а также неинвазивных технологий визуализации и анализа в медицине и сфере безопасности [11; 12]. Создание и внедрение быстродействующих высокочастотных радиоэлектронных средств с пониженными массогабаритными показателями и энергопотреблением открывают новые возможности для диагностических и лечебных целей в биомедицине [13] (включая контроль состояния крови [14; 15] и лечение кожных болезней [15; 16]), исследования произведений искусства [17; 18], детектирования газов и газовых смесей [19; 20]. При этом приходится иметь дело с отсутствием важных базовых элементов и обострением проблем электромагнитной совместимости (ЭМС) на макроуровне из-за таких факторов, как нарушение герметичности, возникновение несанкционированных обратных связей, возрастание электромагнитного фона до опасных пределов и т. п.

В условиях существенного повышения уровня интеграции электронных средств, когда характерные размеры элементов электрических цепей и межэлементные расстояния сравнимы с длиной волны де Бройля электронов в среде, остро встает проблема ЭМС элементов в субмикронных и наноразмерных интегральных схемах. Можно утверждать, что содержание основных принципов ЭМС применительно к наноэлектронике будет существенно отличаться от ее классической формулировки, используемой в макроскопической радиотехнике и являющейся обязательным элементом образования радиоинженера любого профиля. Кардинальное отличие проблемы ЭМС на наноуровне состоит в том, что функционирование наноразмерных элементов цепей базируется на законах квантовой физики и, соответственно, эти законы могут оказывать существенное влияние на интерференционное взаимодействие элементов [21; 22]. Возникают механизмы взаимодействия, которые не имеют аналогов в классической электродинамике. Поскольку современная теория ЭМС в СВЧ-диапазоне целиком основана на классической макроскопической электродинамике, то для более высоких частот применительно к наноструктурированным многоэлементным системам следует ожидать значительного пересмотра теоретических представлений [23]. Данная теория будет опираться на уравнения Максвелла одновременно с многочастичными квантовыми уравнениями движения. Результатом этого пересмотра будет набор рекомендаций по оптимальному с точки зрения ЭМС синтезу многоэлементных наноэлектронных систем и устройств. Решение обозначенных проблем невозможно без широкого класса новых наукоемких материалов. Таким образом, разработка элементной базы для указанных диапазонов и исследование операционных свойств таких элементов и устройств, обеспечивающих распространение и обработку высокочастотных электрических сигналов, выходят на передний план среди ключевых задач нанотехнологии.

Сложность освоения терагерцевого диапазона, где длина волны лежит в субмиллиметровой области, заключается в том, что эта частотная полоса является пограничной областью, в которой классические электронные и оптические технологии оказываются малопригодными. Действительно, сложно спроектировать и изготовить сосредоточенные элементы, характерные размеры которых сопоставимы с длиной волны или даже меньше ее. Кроме того, полые одномодовые волноводы и резонаторы становятся нереалистичными, поскольку для них потребуется технологически недоступная чистота поверхности, чтобы избежать потерь из-за рассеяния мод на ее нерегулярностях. И наоборот, классические оптические устройства выходят из строя на частотах ниже 10 ТГц из-за резкого увеличения преобразования энергии фотонов в тепловую энергию. По этой причине термин «терагерцевая щель» (*terahertz gap*) в настоящее

время используется для указания на тот факт, что по сравнению с хорошо зарекомендовавшими себя технологиями ВЧ- и СВЧ-диапазонов (электроника) и оптикой ближнего инфракрасного диапазона в данной области отсутствует или же недостаточно развит необходимый набор технических средств ее освоения (источники излучения, детекторы, антенны, межэлементные соединения и др.). В частности, для эффективного решения практических задач, связанных с ЭМС и защитой от воздействия электромагнитного излучения в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах, необходима разработка широкополосных радиопоглощающих покрытий на базе сред с низкой магнитной проницаемостью, но с высокой диэлектрической проницаемостью [6; 23–26].

Одной из важнейших проблем является осуществление электрического контакта наноразмерного устройства или же наноструктурированной среды с макроскопическим миром без деградации производительности и потери информации. Возникает задача интеграции нанотехнологий и коммуникационных технологий, что непосредственно приводит к формированию нового научного направления – наноэлектромагнетизма [27], охватывающего эффекты взаимодействия электромагнитного излучения с наноразмерными объектами и системами и объединяющего в себе хорошо развитые методы классической электродинамики и современные подходы физики конденсированного состояния. В связи с этим возникают новые постановки задач, а известные приемы и методы наполняются новым содержанием. Важно подчеркнуть, что в силу эффекта пространственного ограничения движения носителей заряда, присущего наноразмерным объектам, решение задач взаимодействия электромагнитных волн с такими объектами выходит за рамки классической электродинамики и требует привлечения современных методов физики твердого тела [27–29].

В качестве примера приведем результаты расчета проводимости углеродных нанотрубок (УНТ) в зависимости от радиуса (рис. 1) [28]. Графики демонстрируют экспериментально установленный факт изменения величины проводимости УНТ типа *zigzag* от полупроводниковой до металлической в зависимости от индекса киральности (радиуса), а также металлические свойства УНТ типа *armchair* при любых значениях этого индекса. Также видно, что с ростом радиуса проводимость нанотрубок стремится к проводимости графита. Частотная зависимость проводимости металлической УНТ типа *zigzag* с индексом киральности (m, 0) в частотной области внутризонных переходов определяется простым выражением [28], которое широко используется в работах по электромагнетизму УНТ:

$$\sigma_{zz}(\omega) = -i\frac{2\sqrt{3}e^2\gamma_0}{\pi m\hbar^2\left(\omega + \frac{i}{\tau}\right)}, \qquad (1)$$

где $\gamma_0 = 2{,}7$ эВ – интеграл перекрытия в уравнении Больцмана; τ – время релаксации. В случае УНТ типа *armchair* коэффициент $\sqrt{3}$ в выражении (1) заменяется на 1.

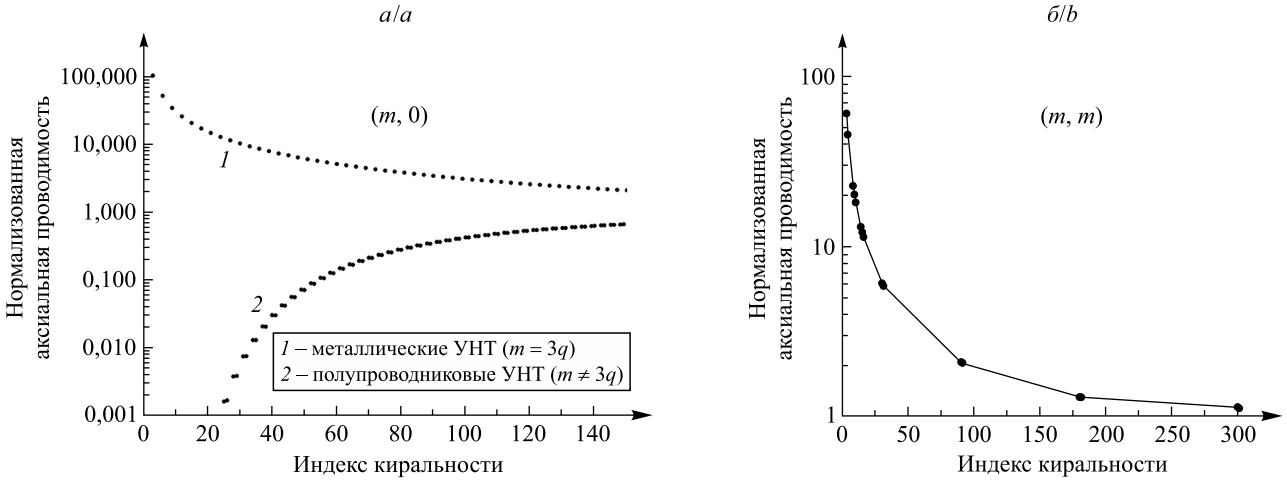


Рис. 1. Нормированная на проводимость графита аксиальная проводимость нанотрубок типа *zigzag* (*a*) и *armchair* (*b*).
Источник: [28]

Fig. 1. Axial conductivity of zigzag (*a*) and armchair (*b*) carbon nanotubes normalised to conductivity of graphite.
Source: [28]

В области межзонных переходов полуклассическая модель неприменима, и решение задачи о проводимости УНТ требует строгого квантово-механического рассмотрения. Выполненный в работе [28] анализ показал, что в этой области частотная зависимость проводимости УНТ проявляет сложную многопиковую структуру.

С точки зрения решения задач электродинамики УНТ главным является то, что разработанный авторами статьи [28] метод позволяет вычислять проводимость УНТ различного типа в широком диапазоне частот и тем самым делает возможным использование эффективных граничных условий для решения таких задач. Другими словами, в наномире возникает неразрывная связь уравнений Максвелла и уравнения Шрёдингера, и наноэлектромагнетизм является методологической базой для решения задач электродинамики наноструктур. Выполненные в Институте ядерных проблем БГУ исследования охватывают широкий класс эффектов переноса и линейной электродинамики УНТ [27–35] и композитов на их основе [36–41], генерации электромагнитных волн в УНТ и графене [42; 43]. Следует отметить, что вклад группы ученых Института ядерных проблем БГУ в развитие наноэлектромагнетизма признан во всем мире. В качестве примера можно упомянуть публикацию [44], в которой разрабатываемый подход назван белорусским методом.

Особый интерес для решения широкого круга прикладных задач управления электромагнитным излучением и его контроля представляют наноуглеродные композиты [45] и структурированные на размерах длины волны материальные системы – метаматериалы [46]. Практическая задача создания таких композиционных материалов с программируемыми свойствами приводит к формированию новых научно-технологических направлений, в основе которых лежат технологии синтеза различных форм углеродных наноматериалов (графен, УНТ, фуллерены, углерод луковичной структуры, углеродные квантовые точки, пиролитический углерод и т. п.) [47]. Отметим, что в Институте неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН на протяжении многих лет проводятся исследования в области создания углеродных материалов. Здесь разработаны методы химической модификации наноструктур, получены гибридные материалы с полупроводниковыми квантовыми точками, металлическими частицами, анизотропные композиционные наноструктуры в полимерных и керамических матрицах и многое другое [48–55].

Развиваются методы характеризации углеродных наноструктур, методы диспергирования агломерированных частиц и методы создания тонких пленок и слоистых структур на их основе, синтез двух- и многофазных композитов и гибридных структур. Помимо задач материального обеспечения беспроводной связи, углеродные композиционные материалы находят применение при создании электромагнитных поглощающих и экранирующих материалов для задач ЭМС и электромагнитной защиты как в гражданских областях [45], так и в оборонной сфере [56; 57]. Следует подчеркнуть, что успех в создании новых перспективных материалов может быть достигнут только при условии серьезных финансовых и интеллектуальных инвестиций в фундаментальные исследования.

Примером важности фундаментального базиса для прикладных исследований может служить совместное российско-белорусское исследование разработанных в Институте неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН анизотропных композиционных материалов с использованием УНТ для элементов оптики СВЧ-диапазона и терагерцевого диапазона. В лаборатории физикохимии наноматериалов Института неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН разработаны CVD-методы синтеза массивов вертикально ориентированных многослойных УНТ длиной от 5 мкм до 5 мм и предложены способы придания нанотрубкам направленности в полимере [48; 49]. Проведены измерения угловой направленности отражения и пропускания СВЧ [49], терагерцевого [50; 51] и оптического [52] электромагнитного излучения, которые подтвердили высокую анизотропию оптических свойств во всех исследуемых диапазонах и ярко выраженный поляризационный эффект в терагерцевом диапазоне (рис. 2 и 3). Белорусские ученые предложили теоретическую модель, описывающую взаимодействие электромагнитного излучения с поверхностью материалов из УНТ, ориентированных горизонтально и перпендикулярно подложке [49; 50]. Формирование на подложке вертикальных УНТ позволило создать сверхлегкую метаповерхность с плотностью менее 0,4 г/см^3 [51].

Именно фундаментальные исследования в области биофизики и биомедицины послужили базой широкого внедрения наноструктурированных и гибридных углеродных материалов для целей тераностики опухолей, биофотоники и биосенсорики физико-химических параметров внутри- и внеклеточной среды [55; 58–60], а также для адресной доставки лекарственных веществ [61–64], избирательного термолиза больных клеток [65; 66], фотодинамической терапии [67; 68], фотоакустической визуализации и фототермоакустической терапии [69; 70]. На рис. 4 приведена схема эксперимента по индуцированной импульсным лазерным излучением фотоакустической деструкции клеток, накопивших одностенные УНТ. Клетки инкубировали с одностенными УНТ в течение 24 ч и затем проводили облучение. Кроме того, воздействию лазерного излучения подвергали клетки, к которым одностенные УНТ добавляли во внеклеточную среду непосредственно перед облучением, и интактные клетки (контроль). В поврежденных клетках регистрировали флуоресценцию йодида пропидиума. Результаты эксперимента опубликованы в работе [67].

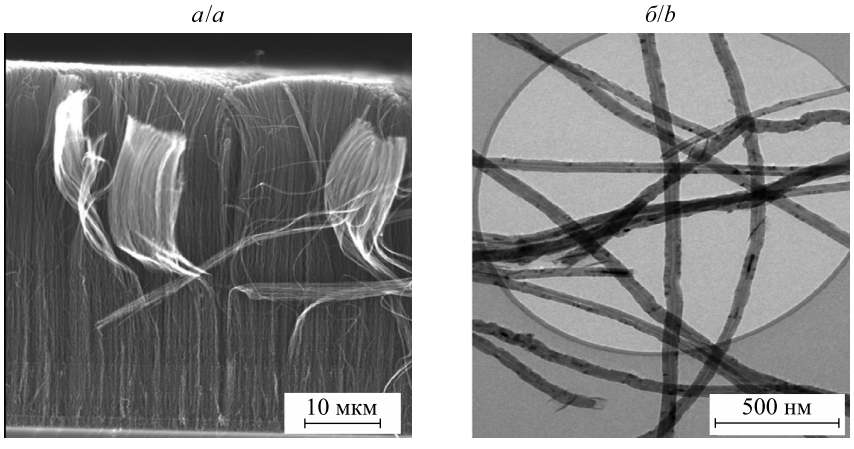


Рис. 2. Массив вертикально ориентированных многослойных УНТ. Изображения получены с помощью растрового микроскопа (*а*) и просвечивающего электронного микроскопа (*б*).
Источник: [48]

Fig. 2. Array of vertically oriented multiwalled carbon nanotubes. The pictures have been obtained using scanning microscope (*a*) and transmission electron microscope (*b*).
Source: [48]

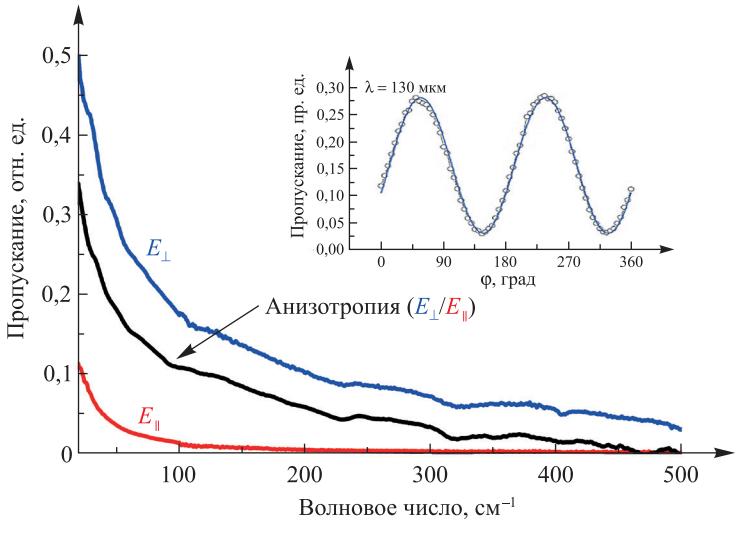


Рис. 3. Измерение анизотропии пропускания через пленку горизонтально направленных УНТ. На вставке представлена интенсивность прошедшего через анизотропный образец терагерцевого излучения с длиной волны 130 мкм, измеренная на новосибирском лазере на свободных электронах (пр. ед. – произвольные единицы)

Fig. 3. Anisotropy of the transmission through a film of in-plain oriented carbon nanotubes. The insert shows intensity of the 130 μm wavelength terahertz radiation transmitted through an anisotropic sample has been measured on the Novosibirsk free electron laser (пр. ед. – arbitrary units)

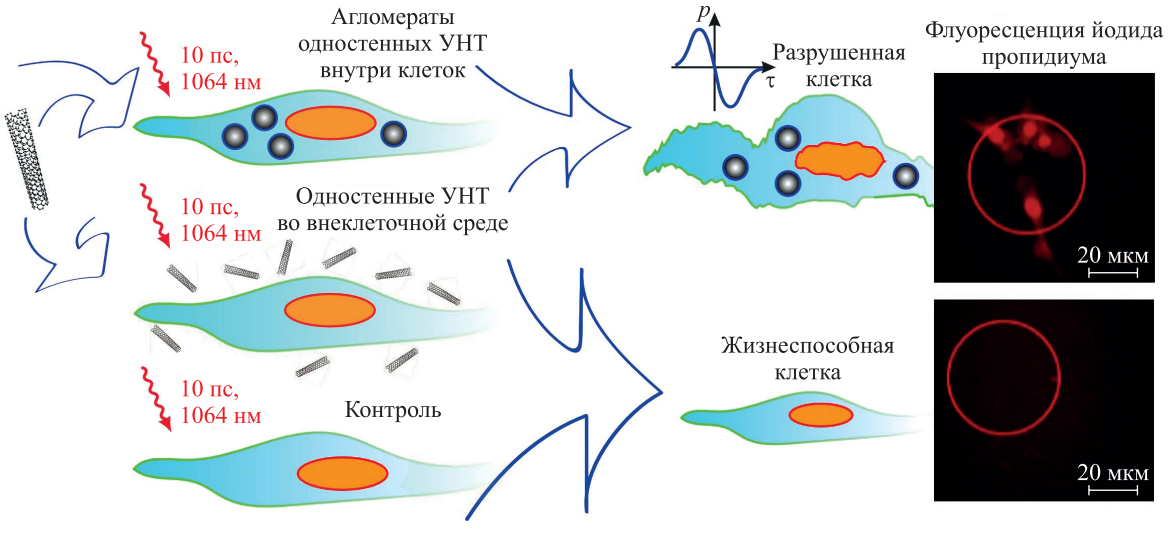


Рис. 4. Схема реализации эксперимента по фотоакустическому разрушению опухолевых клеток

Fig. 4. The scheme of the experiment on photoacoustic destruction of tumor cells

По сравнению с органическими красителями, полупроводниковыми квантовыми точками и наноматериалами на основе благородных металлов углеродные наноматериалы имеют более высокую фотостабильность, биосовместимость, низкую токсичность, настраиваемые поверхностные свойства [60; 71]. Объемные углеродсодержащие материалы широко используются при изготовлении эндопротезов и имплантатов [72].

Для эффективного решения задач ЭМС за счет применения композиционных материалов требуется обеспечить согласование импедансов на границе раздела со свободным пространством, что достигается путем использования слоистых [73] или градиентных [74] конструкций, создания метаповерхности [75] и включения наноразмерных магнитных частиц в состав активной фазы композита совместно с углеродными наноструктурами [76]. Многолетние исследования, проводимые в Национальном исследовательском Томском государственном университете с нанокристаллическими магнитными материалами [77–80], показали перспективность применения ферритов с гексагональной структурой [81; 82], которые имеют большие поля магнитной кристаллографической анизотропии и высокие значения естественного ферромагнитного резонанса. Детальный обзор ферритсодержащих поглощающих материалов представлен в работе [83].

Рассмотренные выше задачи послужили мотивацией и сформировали тематику ряда международных научно-практических мероприятий. Этому посвящен второй раздел данной статьи.

VI Белорусско-российский семинар-конференция «Углеродные наноструктуры, тонкие пленки и композиты: синтез, физико-химические свойства и применения»

Исходя из важности и научной новизны постановки вопроса о взаимодействии субмиллиметрового и миллиметрового электромагнитного излучения с наноструктурами и создании новых перспективных электромагнитных материалов, в Институте ядерных проблем БГУ были организованы три конференции под общим названием «Fundamental and Applied Nanoelectromagnetics» (2012, 2015, 2018). Их основной задачей являлось обеспечение платформы для взаимодействия ученых, специализирующихся на технологиях синтеза и применения наноструктур, с коллегами, работающими в области электромагнитной теории и прикладного электромагнетизма. Мероприятия прошли с большим успехом. По результатам конференций и под их влиянием организован специальный выпуск журнала «Journal of Nanophotonics» [84] и опубликована серия книг [85–87]. К сожалению, проведение конференций было остановлено из-за эпидемии COVID-19.

Параллельно с указанными конференциями в 2016 г. получила старт серия белорусско-российских семинаров-конференций по схожей тематике. Первый семинар состоялся в Институте ядерных проблем БГУ (2016), затем мероприятие принимали Институт неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН (2017), Сколковский институт науки и технологий (2018), Национальный исследовательский Томский государственный университет (2019, 2021).

С 2 по 5 ноября 2022 г. в БГУ проходил VI Белорусско-российский семинар-конференция «Углеродные наноструктуры, тонкие пленки и композиты: синтез, физико-химические свойства и применения» («БелРосНано-2022»). Организаторами мероприятия выступили Институт ядерных проблем БГУ и физический факультет БГУ, Национальный исследовательский Томский государственный университет. Активное участие в организации и проведении семинара также приняли сотрудники Института неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН.

Двойное название мероприятия (семинар-конференция) подчеркивает формат его проведения, обеспечивающий возможность дискуссии участников по всем рассматриваемым вопросам и достаточно широкий диапазон таких вопросов – от технологических аспектов синтеза углеродных структур до квантово-оптических эффектов в углеродных наноструктурах. Предшествующие семинары в большей степени были сфокусированы на вопросах взаимодействия углеродных наноструктур с электромагнитным излучением. В 2022 г. оргкомитет расширил тематику мероприятия в соответствии с запросами сегодняшнего дня как с точки зрения фундаментальных исследований углеродных наноструктур, так и с точки зрения решения насущных прикладных задач. Тематически структура семинара-конференции охватывала следующие направления (но не ограничивалась ими).

1. Синтез и диагностика углеродных наноструктур.
2. Электромагнитные свойства углеродных наноструктур.
3. Углеродные материалы в освоении гига- и терагерцевого диапазонов частот.
4. Гибридные углеродные материалы.
5. Магнитные наноматериалы.
6. Функциональные материалы для биомедицины.
7. Современные образовательные технологии в области обсуждаемых тематик.

Программа семинара включала 43 устных доклада (в том числе 9 приглашенных докладов) и 44 постера. В его работе приняли участие белорусские ученые из БГУ, Института ядерных проблем БГУ, Научно-исследовательского института физико-химических проблем БГУ, Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, Института физико-органической химии НАН Беларуси, Института физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Института тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, Научно-практического центра НАН Беларуси по материаловедению, а также их российские коллеги, представляющие Национальный исследовательский Томский государственный университет, Сколковский институт науки и технологий, Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН, Петербургский институт ядерной физики имени Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Санкт-Петербургский национальный исследовательский академический университет имени Ж. И. Алфёрова РАН, Институт катализа имени Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН, Институт неорганической химии имени А. В. Николаева Сибирского отделения РАН, Институт физики полупроводников имени А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, Северо-Восточный федеральный университет имени М. К. Аммосова, Институт физического материаловедения Сибирского отделения РАН.

Кроме того, 1 доклад был подготовлен научным работником из Пекинского института авиационных материалов.

На заключительном круглом столе представителями белорусских и российских участников обсужден ряд принципиальных вопросов. В ходе дискуссии были достигнуты следующие результаты.

1. Поддержано намерение участников укреплять научные связи в целях дальнейшего развития углеродной тематики и, в частности, исследований взаимодействия высокочастотного электромагнитного излучения с углеродными наноструктурами и материалами на их основе, а также с родственными двумерными образованиями, такими как силицен, гермацен, дихалькогениды металлов MoS2, WS2, MXenes и т. п. (см., например, [88; 89]). Достигнуты договоренности о разработке совместных научных проектов.

2. Подчеркнута важность прикладных разработок с использованием механизмов тонкой настройки свойств углеродсодержащих структур, таких как функционализация, легирование, комплексообразование и гибридизация. Отмечена необходимость практического освоения новых методов создания композиционных и гибридных материалов с использованием 3D-печати, CVD и других химических технологий, а также новых видов композиционных материалов на основе пенообразных и губчатых структур, полых микроструктур и структур «ядро – оболочка» с различным химическим составом, градиентных структур. Такие подходы могут значительно повысить характеристики поглощения электромагнитного излучения и обеспечить улучшенное согласование импедансов.

3. Отмечено, что быстроразвивающиеся отрасли современной индустрии, в которых находят применение композиционные и гибридные материалы на основе различных форм углерода, требуют развития компетенций научных сотрудников, обмена опытом и идеями, а также совершенствования и развития образовательных технологий в данной области. Положительную оценку в связи с этим получил разрабатываемый в настоящее

время в рамках государственной научно-технической программы совместный проект Института ядерных проблем БГУ и физического факультета БГУ по созданию научно-учебного лабораторного комплекса для синтеза графеноподобных и наноуглеродных материалов методом химического осаждения из газовой фазы.

4. Признано, что проведение научных мероприятий, подобных «БелРосНано-2022», способствует эффективной реализации актуальных задач использования композиционных и гибридных материалов на основе различных форм углерода и создает необходимые предпосылки для развития инновационной деятельности. Достигнуты договоренности о продолжении серии семинаров-конференций по изучению физико-химических и электромагнитных свойств углеродных наноматериалов. Обсуждены предложения по месту и датам проведения следующего, седьмого, семинара-конференции.

Заключение

Таким образом, представленные результаты конференции, а также обзор современных тенденций развития прикладного наноэлектромагнетизма убедительно показали актуальность тематики проведенного научного мероприятия и насущную необходимость интеллектуальных и финансовых инвестиций в решение поставленных задач. В настоящей статье авторы постарались продемонстрировать привлекательность данного направления как с точки зрения важности решения прикладных задач, так и в качестве поля для исследований фундаментальных проблем взаимодействия электромагнитного излучения с наноструктурами. По мнению авторов, круг заявленных вопросов предоставляет широкие возможности для магистрантов и аспирантов физических и химических специальностей российских и белорусских университетов.

Библиографические ссылки

1. *International Roadmap for Devices and Systems™: 2021 update. More Moore* [Internet]. [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2021 [cited 2022 September 10]. 32 p. Available from: https://irds.ieee.org/editions/2021/more-moore.

2. Hao H, Hui D, Lau D. Material advancement in technological development for the 5G wireless communications. *Nanotechnology Reviews.* 2020;9:683–699. DOI: 10.1515/ntrev-2020-0054.

3. Banafaa M, Shayea I, Din J, Azmi MH, Alashbi A, Daradkeh YI, et al. 6G mobile communication technology: requirements, targets, applications, challenges, advantages, and opportunities. *Alexandria Engineering Journal.* 2023;64:245–274. DOI: 10.1016/j.aej.2022.08.017.

4. Zhou Ye. Material foundation for future 5G technology. *Accounts of Materials Research*. 2021;2(5):306–310. DOI: 10.1021/accountsmr.0c00087.

5. Kanerva M, Lassila M, Gustafsson R, O'shea G, Aarikka-Stenroos L, Hemilä J. *Emerging 5G technologies affecting markets of composite materials* [Internet]. [S. l.]: Excel Composites; 2018 [cited 2020 October 7]. 7 p. (Exel white paper; EWVL1:1:2018-1). Available from: https://www.luxturrim5g.com/s/Exel_whitepaper_2018_1.pdf.

6. Srivastava SK, Manna K. Recent advancements in the electromagnetic interference shielding performance of nanostructured materials and their nanocomposites: a review. *Journal of Materials Chemistry A*. 2022;10(14):7431–7496. DOI: 10.1039/D1TA09522F.

7. Antes J, Kallfass I. Performance estimation for broadband multi-gigabit millimeter- and submillimeter-wave wireless communication links. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.* 2015;63(10):3288–3299. DOI: 10.1109/TMTT.2015.2467390.

8. Dangi R, Lalwani P, Choudhary G, You I, Pau G. Study and investigation on 5G technology: a systematic review. *Sensors.* 2022;22(1):26. DOI: 10.3390/s22010026.

9. Sharma T, Chehri A, Fortier P. Review of optical and wireless backhaul networks and emerging trends of next generation 5G and 6G technologies. *Transactions on Emerging Telecommunications Technologies*. 2021;32(3):e4155. DOI: 10.1002/ett.4155.

10. Davies AG, Burnett AD, Fan W, Linfield EH, Cunningham JE. Terahertz spectroscopy of explosives and drugs. *Materials Today*. 2008;11(3):18–26. DOI: 10.1016/S1369-7021(08)70016-6.

11. Lavrukhin DV, Yachmenev AE, Goncharov YuG, Zaytsev KI, Khabibullin RA, Buryakov AM, et al. Strain-induced InGaAs-based photoconductive terahertz antenna detector. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*. 2021;11(4):417–424. DOI: 10.1109/TTHZ.2021.3079977.

12. Tzydynzhapov G, Gusikhin P, Muravev V, Dremin A, Nefyodov Yu, Kukushkin I. New real-time subterahertz security body scanner. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*. 2020;41(6):632–641. DOI: 10.1007/s10762-020-00683-5.

13. Chen X, Lindley-Hatcher H, Stantchev RI, Wang J, Li K, Serrano AH, et al. Terahertz (THz) biophotonics technology: instrumentation, techniques, and biomedical applications. *Chemical Physics Reviews*. 2022;3(1):011311. DOI: 10.1063/5.0068979.

14. Röösli M, Dongus S, Jalilian H, Feychting M, Eyers J, Esu E, et al. The effects of radiofrequency electromagnetic fields exposure on tinnitus, migraine and non-specific symptoms in the general and working population: a protocol for a systematic review on human observational studies. *Environment International*. 2021;157:106852. DOI: 10.1016/j.envint.2021.106852.

15. Liu Shike, Deng Zhichao, Li Jianwei, Wang Jin, Huang Ningning, Cui Ruiming, et al. Measurement of the refractive index of whole blood and its components for a continuous spectral region. *Journal of Biomedical Optics*. 2019;24(3):035003. DOI: 10.1117/1.JBO.24.3.035003.

16. Betzalel N, Ben Ishai P, Einav S, Feldman Y. The AC conductivity of human sweat ducts as the dominant factor in the sub-THz reflection coefficient of skin. *Journal of Biophotonics*. 2021;14(7):e202100027. DOI: 10.1002/jbio.202100027.

17. Fukunaga K. *THz technology applied to cultural heritage in practice*. Tokyo: Springer Japan; 2016. 144 p. (Cultural heritage science). DOI: 10.1007/978-4-431-55885-9.

18. Koch Dandolo CL, Guillet J-P, Ma X, Fauquet F, Roux M, Mounaix P. Terahertz frequency modulated continuous wave imaging advanced data processing for art painting analysis. *Optics Express*. 2018;26(5):5358–5367. DOI: 10.1364/OE.26.005358.

19. Агранат МБ, Ильина ИВ, Ситников ДС. Применение терагерцевой спектроскопии для дистанционного экспресс-анализа газов. *Теплофизика высоких температур.* 2017;55(6):759–774. DOI: 10.7868/S0040364417060114.

20. Takida Y, Nawata K, Minamide H. Security screening system based on terahertz-wave spectroscopic gas detection. *Optics Express*. 2021;29(2):2529–2537. DOI: 10.1364/OE.413201.

21. Slepyan GYa, Boag A, Mordachev V, Sinkevich E, Maksimenko S, Kuzhir P, et al. Nanoscale electromagnetic compatibility: quantum coupling and matching in nanocircuits. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility.* 2015;57(6):1645–1654. DOI: 10.1109/TEMC.2015.2460678.

22. Slepyan G, Boag A, Mordachev V, Sinkevich E, Maksimenko S, Kuzhir P, et al. Anomalous electromagnetic coupling via entanglement at the nanoscale. *New Journal of Physics*. 2017;19(2):023014. DOI: 10.1088/1367-2630/19/2/023014.

23. Zhao W-S, Wang D-W, D'aloia AG, Chen W, Wang G, Yin W-Y. Recent progress of nano-electromagnetic compatibility (nano-EMC) in the emerging carbon nanoelectronics. *IEEE Electromagnetic Compatibility Magazine.* 2018;7(2):71–81. DOI: 10.1109/MEMC.2018.8410686.

24. Liu P, Cottrill AL, Kozawa D, Koman VB, Parviz DA, Liu T, et al. Emerging trends in 2D nanotechnology that are redefining our understanding of «Nanocomposites». *Nanotoday*. 2018;21:18–40. DOI: 10.1016/j.nantod.2018.04.012.

25. Zeng X, Cheng X, Yu R, Stucky GD. Electromagnetic microwave absorption theory and recent achievements in microwave absorbers. *Carbon.* 2020;168:606–623. DOI: 10.1016/j.carbon.2020.07.028.

26. Green M, Chen X. Recent progress of nanomaterials for microwave absorption. *Journal of Materiomics*. 2019;5(4):503–541. DOI: 10.1016/j.jmat.2019.07.003.

27. Maksimenko SA, Slepyan GYa. Nanoelectromagnetics of low-dimensional structures. In: Lakhtakia A, editor. *Nanometer structures: theory, modeling, and simulation*. Bellingham: SPIE Press; 2004. p. 145–206 (The handbook of nanotechnology).

28. Slepyan GYa, Maksimenko SA, Lakhtakia A, Yevtushenko OM, Gusakov AV. Electrodynamics of carbon nanotubes: dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation. *Physical Review B*. 1999;60(24):17136–17149. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.17136.

29. Максименко СА, Слепян ГЯ. Электродинамика углеродных нанотрубок. *Радиотехника и электроника.* 2002;47(3):261–280.

30. Slepyan GYa, Shuba MV, Maksimenko SA, Lakhtakia A. Theory of optical scattering by achiral carbon nanotubes and their potential as optical nanoantennas. *Physical Review B*. 2006;73(19):195416. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.195416.

31. Shuba MV, Slepyan GYa, Maksimenko SA, Thomsen C, Lakhtakia A. Theory of multiwall carbon nanotubes as waveguides and antennas in the infrared and the visible regimes. *Physical Review B*. 2009;79(15):155403. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.155403.

32. Batrakov K, Kuzhir P, Maksimenko S, Paddubskaya A, Voronovich S, Lambin P, et al. Flexible transparent graphene/polymer multilayers for efficient electromagnetic field absorption. *Scientific Reports*. 2014;4:7191. DOI: 10.1038/srep07191.

33. Batrakov K, Kuzhir P, Maksimenko S, Volynets N, Voronovich S, Paddubskaya A, et al. Enhanced microwave-to-terahertz absorption in graphene. *Applied Physics Letters*. 2016;108(12):123101. DOI: 10.1063/1.4944531.

34. Shuba MV, Paddubskaya AG, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Flahaut E, Fierro V, et al. Short-length carbon nanotubes as building blocks for high dielectric constant materials in the terahertz range. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017;50(8):08LT01. DOI: 10.1088/1361-6463/aa5628.

35. Melnikov AV, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Slepyan GYa, Boag A, Pulci O, et al. Scattering of electromagnetic waves by two crossing metallic single-walled carbon nanotubes of finite length. *Physical Review B*. 2021;103(7):075438. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.075438.

36. Slepyan GYa, Shuba MV, Maksimenko SA, Thomsen C, Lakhtakia A. Terahertz conductivity peak in composite materials containing carbon nanotubes: theory and interpretation of experiment. *Physical Review B*. 2010;81(20):205423. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.205423.

37. Shuba MV, Paddubskaya AG, Plyushch AO, Kuzhir PP, Slepyan GYa, Maksimenko SA, et al. Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes. *Physical Review B*. 2012;85(16):165435. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.165435.

38. Bychanok DS, Paddubskaya AG, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Brosseau C, Macutkevic J, et al. A study of random resistor-capacitor-diode networks to assess the electromagnetic properties of carbon nanotube filled polymers. *Applied Physics Letters*. 2013;103(24):243104. DOI: 10.1063/1.4847335.

39. Bellucci S, Bistarelli S, Cataldo A, Micciulla F, Kranauskaite I, Macutkevic J, et al. Broadband dielectric spectroscopy of composites filled with various carbon materials. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 2015;63(6):2024–2031. DOI: 10.1109/TMTT.2015.2418758.

40. Shuba MV, Yuko DI, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Kanygin MA, Okotrub AV, et al. How effectively do carbon nanotube inclusions contribute to the electromagnetic performance of a composite material? Estimation criteria from microwave and terahertz measurements. *Carbon*. 2018;129:688–694. DOI: 10.1016/j.carbon.2017.12.067.

41. Shuba MV, Yuko D, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Ksenevich VK, Lim S-H, et al. Electromagnetic and optical responses of a composite material comprising individual single-walled carbon-nanotubes with a polymer coating. *Scientific Reports*. 2020;10:9361. DOI: 10.1038/s41598-020-66247-8.

42. Batrakov KG, Maksimenko SA, Kuzhir PP, Thomsen C. Carbon nanotube as a Cherenkov-type light emitter and free electron laser. *Physical Review B*. 2009;79(12):125408. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.125408.

43. Batrakov K, Maksimenko S. Graphene layered systems as a terahertz source with tuned frequency. *Physical Review B*. 2017;95(20):205408. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.205408.

44. Rutherglen C, Burke P. Nanoelectromagnetics: circuit and electromagnetic properties of carbon nanotubes. *Small*. 2009;5(8):884–906. DOI: 10.1002/smll.200800527.

45. Chung DDL. *Carbon composites. Composites with carbon fibers, nanofibers, and nanotubes*. 2nd edition. Amsterdam: Elsevier; 2017. 682 p. DOI: 10.1016/C2014-0-02567-1.

46. Capolino F, Khajavikhan M, Alù A. Metastructures: from physics to application. *Applied Physics Letters*. 2022;120(6):060401. DOI: 10.1063/5.0084696.

47. Backes C, Abdelkader AM, Alonso C, Andrieux-Ledier A, Arenal R, Azpeitia J, et al. Production and processing of graphene and related materials. *2D Materials*. 2020;7(2):022001. DOI: 10.1088/2053-1583/ab1e0a.

48. Okotrub AV, Kubarev VV, Kanygin MA, Sedelnikova OV, Bulusheva LG. Transmission of terahertz radiation by anisotropic MWCNT/polystyrene composite films. *Physica Status Solidi B.* 2011;248(11):2568–2571. DOI: 10.1002/pssb.201100128.

49. Быченок ДС, Каныгин МА, Окотруб АВ, Шуба МВ, Поддубская ОГ, Плющ АО и др. Анизотропия электромагнитных свойств полимерных композитов на основе многослойных углеродных нанотрубок в гигагерцевом диапазоне частот. *Письма в ЖЭТФ.* 2011;93(10):669–673.

50. Bychanok DS, Shuba MV, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Kubarev VV, Kanygin MA, et al. Anisotropic electromagnetic properties of polymer composites containing oriented multiwall carbon nanotubes in respect to terahertz polarizer applications. *Journal of Applied Physics.* 2013;114(11):114304. DOI: 10.1063/1.4821773.

51. Gorokhov GV, Bychanok DS, Kuzhir PP, Gorodetskiy DV, Kurenya AG, Sedelnikova OV, et al. Creation of metasurface from vertically aligned carbon nanotubes as versatile platform for ultra-light THz components. *Nanotechnology.* 2020;31(25):255703. DOI: 10.1088/1361-6528/ab7efa.

52. Arutyunyan NR, Kanygin MA, Pozharov AS, Kubarev VV, Bulusheva LG, Okotrub AV, et al. Light polarizer in visible and THz range based on single-wall carbon nanotubes embedded into poly(methyl methacrylate) film. *Laser Physics Letters*. 2016;13(6):065901. DOI: 10.1088/1612-2011/13/6/065901.

53. Okotrub AV, Asanov IP, Larionov SV, Kudashov AG, Leonova TG, Bulusheva LG. Growth of CdS nanoparticles on the aligned carbon nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2010;12(36):10871–10875. DOI: 10.1039/C000189A.

54. Bulusheva LG, Fedoseeva YuV, Kurenya AG, Vyalikh DV, Okotrub AV. Role of defects in carbon nanotube walls in deposition of CdS nanoparticles from a chemical bath. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2015;119(46):25898–25906. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b07549.

55. Fedoseeva YuV, Bulusheva LG, Okotrub AV, Kanygin MA, Gorodetskiy DV, Asanov IP, et al. Field emission luminescence of nanodiamonds deposited on the aligned carbon nanotube array. *Scientific Reports*. 2015;5:9379. DOI: 10.1038/srep09379.

56. Harussani MM, Sapuan SM, Nadeem G, Rafin T, Kirubaanand W. Recent applications of carbon-based composites in defence industry: a review. *Defense Technology*. 2022;18(8):1281–1300. DOI: 10.1016/j.dt.2022.03.006.

57. Przybył W, Januszko A, Radek N, Szczepaniak M, Bogdanowicz KA, Plebankiewicz I, et al. Microwave absorption properties of carbonyl iron-based paint coatings for military applications. *Defence Technology*. Forthcoming 2023. DOI: 10.1016/j.dt.2022.06.013.

58. Liu Jianping, Zhang Run, Xu Zhi Ping. Nanoparticle-based nanomedicines to promote cancer immunotherapy: recent advances and future directions. *Small*. 2019;15(32):1900262. DOI: 10.1002/smll.201900262.

59. Gautam M, Thapa RK, Poudel BK, Gupta B, Ruttala HB, Nguyen HT, et al. Aerosol technique-based carbon-encapsulated hollow mesoporous silica nanoparticles for synergistic chemo-photothermal therapy. *Acta Biomaterialia.* 2019;88:448–461. DOI: 10.1016/j.actbio.2019.02.029.

60. Kościk I, Jankowski D, Jagusiak A. Carbon nanomaterials for theranostic use. *C – Journal of Carbon Research.* 2022;8(1):3. DOI: 10.3390/c8010003.

61. Goenka S, Sant V, Sant S. Graphene-based nanomaterials for drug delivery and tissue engineering. *Journal of Controlled Release.* 2014;173:75–88. DOI: 10.1016/j.jconrel.2013.10.017.

62. Nair A, Haponiuk JT, Thomas S, Gopi S. Natural carbon-based quantum dots and their applications in drug delivery: a review. *Biomedicine & Pharmacotherapy*. 2020;132:110834. DOI: 10.1016/j.biopha.2020.110834.

63. Омельянчук ЛВ, Гурова ОА, Окотруб АВ. Генотоксическое действие неорганических наночастиц на клетку. *Российские нанотехнологии.* 2014;9(3–4):90–97.

64. Gurova OA, Dubatolova TD, Shlyakhova EV, Omelyanchuk LV, Okotrub AV. Hyperthermal effect of infrared irradiation on aqueous dispersion of carbon nanotubes and their penetration into *Drosophila melanogaster* larvae. *Physica Status Solidi B.* 2018;255(1):1700264. DOI: 10.1002/pssb.201700264.

65. Burlaka A, Lukin S, Prylutska S, Remeniak O, Prylutskyy Yu, Shuba M, et al. Hyperthermic effect of multi-walled carbon nanotubes stimulated with near infrared irradiation for anticancer therapy: *in vitro* studies. *Experimental Oncology*. 2010;32(1):48–50.

66. Farzin L, Saber R, Sadjadi S, Mohagheghpour E, Sheini A. Nanomaterials-based hyperthermia: a literature review from concept to applications in chemistry and biomedicine. *Journal of Thermal Biology.* 2022;104:103201. DOI: 10.1016/j.jtherbio.2022.103201.

67. Sundaram P, Abrahamse H. Phototherapy combined with carbon nanomaterials (1D and 2D) and their applications in cancer therapy. *Materials.* 2020;13(21):4830. DOI: 10.3390/ma13214830.

68. Wang Lei, Shi Jinjin, Liu Ruiyuan, Liu Yan, Zhang Jing, Yu Xiaoyuan, et al. Photodynamic effect of functionalized single-walled carbon nanotubes: a potential sensitizer for photodynamic therapy. *Nanoscale*. 2014;6(9):4642–4651. DOI: 10.1039/C3NR06835H.

69. Lan M, Guo L, Zhao S, Zhang Z, Jia Q, Yan L, et al. Carbon dots as multifunctional phototheranostic agents for photoacoustic/fluorescence imaging and photothermal/photodynamic synergistic cancer therapy. *Advanced Therapeutics*. 2018;1(6):1800077. DOI: 10.1002/adtp.201800077.

70. Golubewa L, Timoshchenko I, Romanov O, Karpicz R, Kulahava T, Rutkauskas D, et al. Single-walled carbon nanotubes as a photo-thermo-acoustic cancer theranostic agent: theory and proof of the concept experiment. *Scientific Reports*. 2020;10:22174. DOI: 10.1038/s41598-020-79238-6.

71. Chung S, Revia RA, Zhang M. Graphene quantum dots and their applications in bioimaging, biosensing, and therapy. *Advanced Materials*. 2021;33(22):1904362. DOI: 10.1002/adma.201904362.

72. Su S, Kang PM. Systemic review of biodegradable nanomaterials in nanomedicine. *Nanomaterials.* 2020;10(4):656. DOI: 10.3390/nano10040656.

73. Cozzolino F, Marra F, Fortunato M, Bellagamba I, Pesce N, Tamburrano A, et al. New sensing and radar absorbing laminate combining structural damage detection and electromagnetic wave absorption properties. *Sensors.* 2022;22(21):8470. DOI: 10.3390/s22218470.

74. Luo Feng, Liu Dongqing, Cao Taishan, Cheng Haifeng, Kuang Jiacai, Deng Yingjun, et al. Study on broadband microwave absorbing performance of gradient porous structure. *Advanced Composites and Hybrid Materials.* 2021;4(3):591–601. DOI: 10.1007/s42114-021-00275-4.

75. Du Junsa, Zhang Pin, Qiu Leilei, Gao Xiaohui, Huang Shengxiang, He Longhui, et al. Chaos patterned metasurface absorber with multi-peak and broadband. *Journal of Applied Physics*. 2021;130(16):165101. DOI: 10.1063/5.0065004.

76. Kazakova MA, Semikolenova NV, Korovin EYu, Zhuravlev VA, Selyutin AG, Velikanov DA, et al. Co/multi-walled carbon nanotubes/polyethylene composites for microwave absorption: tuning the effectiveness of electromagnetic shielding by varying the components ratio. *Composites Science and Technology*. 2021;207:108731. DOI: 10.1016/j.compscitech.2021.108731.

77. Найден ЕП, Сусляев ВИ, Бир АВ, Политов МВ. Спектры магнитной проницаемости наноразмерных порошков гексаферритов. *Журнал структурной химии.* 2004;45(7):102–105.

78. Zhuravlev VA, Suslyaev VI. Analysis of the microwave magnetic permeability spectra of ferrites with hexagonal structure. *Russian Physics Journal*. 2006;49(9):1032–1037. DOI: 10.1007/s11182-006-0220-8.

79. Zhuravlev VA, Suslyaev VI. Analysis and correction of the magnetic permeability spectra of $Ba_3Co_2Fe_{24}O_{41}$ hexaferrite by using Cramers – Kronig relations. *Russian Physics Journal*. 2006;49(8):840–846. DOI: 10.1007/s11182-006-0183-9.

80. Naiden EP, Zhuravlev VA, Suslyaev VI, Minin RV, Itin VI, Korovin EYu. Structure parameters and magnetic properties of Me_2W[1] cobalt-containing hexaferrite systems synthesized by the SHS method. *Russian Physics Journal*. 2011;53(9):974–982. DOI: 10.1007/s11182-011-9519-1.

81. Minin RV, Zhuravlev VA, Lapshin OV, Itin VI, Svetlichnyi VA. Nanocrystalline cobalt ferrite powders by spray solution combustion synthesis. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*. 2020;29(1):1–9. DOI: 10.3103/S1061386220010070.

82. Zhuravlev VA, Wagner DV, Dotsenko OA, Kareva KV, Zhuravlyova EV, Chervinskaya AS, et al. Static and dynamic magnetic properties of polycrystalline hexaferrites of the $Ba_2Ni_{2-x}Cu_xFe_{12}O_{22}$ system. *Electronics.* 2022;11(17):2759. DOI: 10.3390/electronics11172759.

83. Aherrao DS, Singh C, Srivastava AK. Review of ferrite-based microwave-absorbing materials: origin, synthesis, morphological effects, dielectric/magnetic properties, composites, absorption mechanisms, and optimization. *Journal of Applied Physics*. 2022; 132(24):240701. DOI: 10.1063/5.0123263.

84. Maksimenko SA. Special section guest editor: fundamental and applied nanoelectromagnetics. *Journal of Nanophotonics*. 2012; 6(1):061799. DOI: 10.1117/1.JNP.6.061799.

85. Maffucci A, Maksimenko SA, editors. *Fundamental and applied nanoelectromagnetics*. Dordrecht: Springer; 2016. 290 p. (NATO science for peace and security series B: physics and biophysics). DOI: 10.1007/978-94-017-7478-9.

86. Maffucci A, Maksimenko S, Svirko Yu, editors. *Carbon-based nanoelectromagnetics*. Amsterdam: Elsevier; 2019. 255 p. (Andrews DL, editor. Nanophotonics series).

87. Maffucci A, Maksimenko SA, editors. *Fundamental and applied nanoelectromagnetics II: THz circuits, materials, devices.* Dordrecht: Springer; 2019. 214 p. (NATO science for peace and security series B: physics and biophysics). DOI: 10.1007/978-94-024-1687-9.

88. Zhao Jijun, Liu Hongsheng, Yu Zhiming, Quhe Ruge, Zhou Si, Wang Yangyang, et al. Rise of silicene: a competitive 2D material. *Progress in Materials Science*. 2016;83:24–151. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2016.04.001.

89. Gogotsi Yu, Anasori B. The rise of MXenes. *ACS Nano*. 2019;13(8):8491–8494. DOI: 10.1021/acsnano.9b06394.

References

1. *International Roadmap for Devices and Systems™: 2021 update. More Moore* [Internet]. [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2021 [cited 2022 September 10]. 32 p. Available from: https://irds.ieee.org/editions/2021/more-moore.

2. Hao H, Hui D, Lau D. Material advancement in technological development for the 5G wireless communications. *Nanotechnology Reviews.* 2020;9:683–699. DOI: 10.1515/ntrev-2020-0054.

3. Banafaa M, Shayea I, Din J, Azmi MH, Alashbi A, Daradkeh YI, et al. 6G mobile communication technology: requirements, targets, applications, challenges, advantages, and opportunities. *Alexandria Engineering Journal.* 2023;64:245–274. DOI: 10.1016/j.aej.2022.08.017.

4. Zhou Ye. Material foundation for future 5G technology. *Accounts of Materials Research*. 2021;2(5):306–310. DOI: 10.1021/accountsmr.0c00087.

5. Kanerva M, Lassila M, Gustafsson R, O'shea G, Aarikka-Stenroos L, Hemilä J. *Emerging 5G technologies affecting markets of composite materials* [Internet]. [S. l.]: Excel Composites; 2018 [cited 2020 October 7]. 7 p. (Exel white paper; EWVL1:1:2018-1). Available from: https://www.luxturrim5g.com/s/Exel_whitepaper_2018_1.pdf.

6. Srivastava SK, Manna K. Recent advancements in the electromagnetic interference shielding performance of nanostructured materials and their nanocomposites: a review. *Journal of Materials Chemistry A*. 2022;10(14):7431–7496. DOI: 10.1039/D1TA09522F.

7. Antes J, Kallfass I. Performance estimation for broadband multi-gigabit millimeter- and submillimeter-wave wireless communication links. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.* 2015;63(10):3288–3299. DOI: 10.1109/TMTT.2015.2467390.

8. Dangi R, Lalwani P, Choudhary G, You I, Pau G. Study and investigation on 5G technology: a systematic review. *Sensors.* 2022; 22(1):26. DOI: 10.3390/s22010026.

9. Sharma T, Chehri A, Fortier P. Review of optical and wireless backhaul networks and emerging trends of next generation 5G and 6G technologies. *Transactions on Emerging Telecommunications Technologies*. 2021;32(3):e4155. DOI: 10.1002/ett.4155.

10. Davies AG, Burnett AD, Fan W, Linfield EH, Cunningham JE. Terahertz spectroscopy of explosives and drugs. *Materials Today*. 2008;11(3):18–26. DOI: 10.1016/S1369-7021(08)70016-6.

11. Lavrukhin DV, Yachmenev AE, Goncharov YuG, Zaytsev KI, Khabibullin RA, Buryakov AM, et al. Strain-induced InGaAs-based photoconductive terahertz antenna detector. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*. 2021;11(4):417–424. DOI: 10.1109/TTHZ.2021.3079977.

12. Tzydynzhapov G, Gusikhin P, Muravev V, Dremin A, Nefyodov Yu, Kukushkin I. New real-time subterahertz security body scanner. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*. 2020;41(6):632–641. DOI: 10.1007/s10762-020-00683-5.

13. Chen X, Lindley-Hatcher H, Stantchev RI, Wang J, Li K, Serrano AH, et al. Terahertz (THz) biophotonics technology: instrumentation, techniques, and biomedical applications. *Chemical Physics Reviews*. 2022;3(1):011311. DOI: 10.1063/5.0068979.

14. Röösli M, Dongus S, Jalilian H, Feychting M, Eyers J, Esu E, et al. The effects of radiofrequency electromagnetic fields exposure on tinnitus, migraine and non-specific symptoms in the general and working population: a protocol for a systematic review on human observational studies. *Environment International*. 2021;157:106852. DOI: 10.1016/j.envint.2021.106852.

15. Liu Shike, Deng Zhichao, Li Jianwei, Wang Jin, Huang Ningning, Cui Ruiming, et al. Measurement of the refractive index of whole blood and its components for a continuous spectral region. *Journal of Biomedical Optics*. 2019;24(3):035003. DOI: 10.1117/1.JBO.24.3.035003.

16. Betzalel N, Ben Ishai P, Einav S, Feldman Y. The AC conductivity of human sweat ducts as the dominant factor in the sub-THz reflection coefficient of skin. *Journal of Biophotonics*. 2021;14(7):e202100027. DOI: 10.1002/jbio.202100027.

17. Fukunaga K. *THz technology applied to cultural heritage in practice*. Tokyo: Springer Japan; 2016. 144 p. (Cultural heritage science). DOI: 10.1007/978-4-431-55885-9.

18. Koch Dandolo CL, Guillet J-P, Ma X, Fauquet F, Roux M, Mounaix P. Terahertz frequency modulated continuous wave imaging advanced data processing for art painting analysis. *Optics Express*. 2018;26(5):5358–5367. DOI: 10.1364/OE.26.005358.

19. Agranat MB, Il'ina IV, Sitnikov DS. [Application of terahertz spectroscopy for remote express analysis of gases]. *Teplofizika vysokikh temperatur.* 2017;55(6):759–774. Russian. DOI: 10.7868/S0040364417060114.

20. Takida Y, Nawata K, Minamide H. Security screening system based on terahertz-wave spectroscopic gas detection. *Optics Express*. 2021;29(2):2529–2537. DOI: 10.1364/OE.413201.

21. Slepyan GYa, Boag A, Mordachev V, Sinkevich E, Maksimenko S, Kuzhir P, et al. Nanoscale electromagnetic compatibility: quantum coupling and matching in nanocircuits. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility.* 2015;57(6):1645–1654. DOI: 10.1109/TEMC.2015.2460678.

22. Slepyan G, Boag A, Mordachev V, Sinkevich E, Maksimenko S, Kuzhir P, et al. Anomalous electromagnetic coupling via entanglement at the nanoscale. *New Journal of Physics*. 2017;19(2):023014. DOI: 10.1088/1367-2630/19/2/023014.

23. Zhao W-S, Wang D-W, D'aloia AG, Chen W, Wang G, Yin W-Y. Recent progress of nano-electromagnetic compatibility (nano-EMC) in the emerging carbon nanoelectronics. *IEEE Electromagnetic Compatibility Magazine.* 2018;7(2):71–81. DOI: 10.1109/MEMC.2018.8410686.

24. Liu P, Cottrill AL, Kozawa D, Koman VB, Parviz DA, Liu T, et al. Emerging trends in 2D nanotechnology that are redefining our understanding of «Nanocomposites». *Nanotoday*. 2018;21:18–40. DOI: 10.1016/j.nantod.2018.04.012.

25. Zeng X, Cheng X, Yu R, Stucky GD. Electromagnetic microwave absorption theory and recent achievements in microwave absorbers. *Carbon.* 2020;168:606–623. DOI: 10.1016/j.carbon.2020.07.028.

26. Green M, Chen X. Recent progress of nanomaterials for microwave absorption. *Journal of Materiomics*. 2019;5(4):503–541. DOI: 10.1016/j.jmat.2019.07.003.

27. Maksimenko SA, Slepyan GYa. Nanoelectromagnetics of low-dimensional structures. In: Lakhtakia A, editor. *Nanometer structures: theory, modeling, and simulation*. Bellingham: SPIE Press; 2004. p. 145–206 (The handbook of nanotechnology).

28. Slepyan GYa, Maksimenko SA, Lakhtakia A, Yevtushenko OM, Gusakov AV. Electrodynamics of carbon nanotubes: dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation. *Physical Review B*. 1999;60(24):17136–17149. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.17136.

29. Maksimenko SA, Slepyan GYa. [Electrodynamics of carbon nanotubes]. *Radiotekhnika i elektronika.* 2002;47(3):261–280. Russian.

30. Slepyan GYa, Shuba MV, Maksimenko SA, Lakhtakia A. Theory of optical scattering by achiral carbon nanotubes and their potential as optical nanoantennas. *Physical Review B*. 2006;73(19):195416. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.195416.

31. Shuba MV, Slepyan GYa, Maksimenko SA, Thomsen C, Lakhtakia A. Theory of multiwall carbon nanotubes as waveguides and antennas in the infrared and the visible regimes. *Physical Review B*. 2009;79(15):155403. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.155403.

32. Batrakov K, Kuzhir P, Maksimenko S, Paddubskaya A, Voronovich S, Lambin P, et al. Flexible transparent graphene/polymer multilayers for efficient electromagnetic field absorption. *Scientific Reports*. 2014;4:7191. DOI: 10.1038/srep07191.

33. Batrakov K, Kuzhir P, Maksimenko S, Volynets N, Voronovich S, Paddubskaya A, et al. Enhanced microwave-to-terahertz absorption in graphene. *Applied Physics Letters*. 2016;108(12):123101. DOI: 10.1063/1.4944531.

34. Shuba MV, Paddubskaya AG, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Flahaut E, Fierro V, et al. Short-length carbon nanotubes as building blocks for high dielectric constant materials in the terahertz range. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017;50(8):08LT01. DOI: 10.1088/1361-6463/aa5628.

35. Melnikov AV, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Slepyan GYa, Boag A, Pulci O, et al. Scattering of electromagnetic waves by two crossing metallic single-walled carbon nanotubes of finite length. *Physical Review B*. 2021;103(7):075438. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.075438.

36. Slepyan GYa, Shuba MV, Maksimenko SA, Thomsen C, Lakhtakia A. Terahertz conductivity peak in composite materials containing carbon nanotubes: theory and interpretation of experiment. *Physical Review B*. 2010;81(20):205423. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.205423.

37. Shuba MV, Paddubskaya AG, Plyushch AO, Kuzhir PP, Slepyan GYa, Maksimenko SA, et al. Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes. *Physical Review B*. 2012;85(16):165435. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.165435.

38. Bychanok DS, Paddubskaya AG, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Brosseau C, Macutkevic J, et al. A study of random resistor-capacitor-diode networks to assess the electromagnetic properties of carbon nanotube filled polymers. *Applied Physics Letters*. 2013;103(24):243104. DOI: 10.1063/1.4847335.

39. Bellucci S, Bistarelli S, Cataldo A, Micciulla F, Kranauskaite I, Macutkevic J, et al. Broadband dielectric spectroscopy of composites filled with various carbon materials. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 2015;63(6):2024–2031. DOI: 10.1109/TMTT.2015.2418758.

40. Shuba MV, Yuko DI, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Kanygin MA, Okotrub AV, et al. How effectively do carbon nanotube inclusions contribute to the electromagnetic performance of a composite material? Estimation criteria from microwave and terahertz measurements. *Carbon*. 2018;129:688–694. DOI: 10.1016/j.carbon.2017.12.067.

41. Shuba MV, Yuko D, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Ksenevich VK, Lim S-H, et al. Electromagnetic and optical responses of a composite material comprising individual single-walled carbon-nanotubes with a polymer coating. *Scientific Reports*. 2020;10:9361. DOI: 10.1038/s41598-020-66247-8.

42. Batrakov KG, Maksimenko SA, Kuzhir PP, Thomsen C. Carbon nanotube as a Cherenkov-type light emitter and free electron laser. *Physical Review B*. 2009;79(12):125408. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.125408.

43. Batrakov K, Maksimenko S. Graphene layered systems as a terahertz source with tuned frequency. *Physical Review B*. 2017;95(20):205408. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.205408.

44. Rutherglen C, Burke P. Nanoelectromagnetics: circuit and electromagnetic properties of carbon nanotubes. *Small*. 2009;5(8):884–906. DOI: 10.1002/smll.200800527.

45. Chung DDL. *Carbon composites. Composites with carbon fibers, nanofibers, and nanotubes*. 2nd edition. Amsterdam: Elsevier; 2017. 682 p. DOI: 10.1016/C2014-0-02567-1.

46. Capolino F, Khajavikhan M, Alù A. Metastructures: from physics to application. *Applied Physics Letters*. 2022;120(6):060401. DOI: 10.1063/5.0084696.

47. Backes C, Abdelkader AM, Alonso C, Andrieux-Ledier A, Arenal R, Azpeitia J, et al. Production and processing of graphene and related materials. *2D Materials*. 2020;7(2):022001. DOI: 10.1088/2053-1583/ab1e0a.

48. Okotrub AV, Kubarev VV, Kanygin MA, Sedelnikova OV, Bulusheva LG. Transmission of terahertz radiation by anisotropic MWCNT/polystyrene composite films. *Physica Status Solidi B.* 2011;248(11):2568–2571. DOI: 10.1002/pssb.201100128.

49. Bychanok DS, Kanygin MA, Okotrub AV, Shuba MV, Paddubskaya AG, Plyushch AO, et al. [Anisotropy of the electromagnetic properties of polymer composites based on multiwall carbon nanotubes in the gigahertz frequency range]. *Pis'ma v ZhETF*. 2011;93(10):669–673. Russian.

50. Bychanok DS, Shuba MV, Kuzhir PP, Maksimenko SA, Kubarev VV, Kanygin MA, et al. Anisotropic electromagnetic properties of polymer composites containing oriented multiwall carbon nanotubes in respect to terahertz polarizer applications. *Journal of Applied Physics.* 2013;114(11):114304. DOI: 10.1063/1.4821773.

51. Gorokhov GV, Bychanok DS, Kuzhir PP, Gorodetskiy DV, Kurenya AG, Sedelnikova OV, et al. Creation of metasurface from vertically aligned carbon nanotubes as versatile platform for ultra-light THz components. *Nanotechnology.* 2020;31(25):255703. DOI: 10.1088/1361-6528/ab7efa.

52. Arutyunyan NR, Kanygin MA, Pozharov AS, Kubarev VV, Bulusheva LG, Okotrub AV, et al. Light polarizer in visible and THz range based on single-wall carbon nanotubes embedded into poly(methyl methacrylate) film. *Laser Physics Letters*. 2016;13(6):065901. DOI: 10.1088/1612-2011/13/6/065901.

53. Okotrub AV, Asanov IP, Larionov SV, Kudashov AG, Leonova TG, Bulusheva LG. Growth of CdS nanoparticles on the aligned carbon nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2010;12(36):10871–10875. DOI: 10.1039/C000189A.

54. Bulusheva LG, Fedoseeva YuV, Kurenya AG, Vyalikh DV, Okotrub AV. Role of defects in carbon nanotube walls in deposition of CdS nanoparticles from a chemical bath. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2015;119(46):25898–25906. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b07549.

55. Fedoseeva YuV, Bulusheva LG, Okotrub AV, Kanygin MA, Gorodetskiy DV, Asanov IP, et al. Field emission luminescence of nanodiamonds deposited on the aligned carbon nanotube array. *Scientific Reports*. 2015;5:9379. DOI: 10.1038/srep09379.

56. Harussani MM, Sapuan SM, Nadeem G, Rafin T, Kirubaanand W. Recent applications of carbon-based composites in defence industry: a review. *Defense Technology*. 2022;18(8):1281–1300. DOI: 10.1016/j.dt.2022.03.006.

57. Przybył W, Januszko A, Radek N, Szczepaniak M, Bogdanowicz KA, Plebankiewicz I, et al. Microwave absorption properties of carbonyl iron-based paint coatings for military applications. *Defence Technology*. Forthcoming 2023. DOI: 10.1016/j.dt.2022.06.013.

58. Liu Jianping, Zhang Run, Xu Zhi Ping. Nanoparticle-based nanomedicines to promote cancer immunotherapy: recent advances and future directions. *Small*. 2019;15(32):1900262. DOI: 10.1002/smll.201900262.

59. Gautam M, Thapa RK, Poudel BK, Gupta B, Ruttala HB, Nguyen HT, et al. Aerosol technique-based carbon-encapsulated hollow mesoporous silica nanoparticles for synergistic chemo-photothermal therapy. *Acta Biomaterialia.* 2019;88:448–461. DOI: 10.1016/j.actbio.2019.02.029.

60. Kościk I, Jankowski D, Jagusiak A. Carbon nanomaterials for theranostic use. *C – Journal of Carbon Research.* 2022;8(1):3. DOI: 10.3390/c8010003.

61. Goenka S, Sant V, Sant S. Graphene-based nanomaterials for drug delivery and tissue engineering. *Journal of Controlled Release.* 2014;173:75–88. DOI: 10.1016/j.jconrel.2013.10.017.

62. Nair A, Haponiuk JT, Thomas S, Gopi S. Natural carbon-based quantum dots and their applications in drug delivery: a review. *Biomedicine & Pharmacotherapy*. 2020;132:110834. DOI: 10.1016/j.biopha.2020.110834.

63. Omel'yanchuk LV, Gurova OA, Okotrub AV. [Genotoxic effect of inorganic nanoparticles on the cell]. *Rossiiskie nanotekhnologii*. 2014;9(3–4):90–97. Russian.

64. Gurova OA, Dubatolova TD, Shlyakhova EV, Omelyanchuk LV, Okotrub AV. Hyperthermal effect of infrared irradiation on aqueous dispersion of carbon nanotubes and their penetration into *Drosophila melanogaster* larvae. *Physica Status Solidi B.* 2018;255(1):1700264. DOI: 10.1002/pssb.201700264.

65. Burlaka A, Lukin S, Prylutska S, Remeniak O, Prylutskyy Yu, Shuba M, et al. Hyperthermic effect of multi-walled carbon nanotubes stimulated with near infrared irradiation for anticancer therapy: *in vitro* studies. *Experimental Oncology*. 2010;32(1):48–50.

66. Farzin L, Saber R, Sadjadi S, Mohagheghpour E, Sheini A. Nanomaterials-based hyperthermia: a literature review from concept to applications in chemistry and biomedicine. *Journal of Thermal Biology.* 2022;104:103201. DOI: 10.1016/j.jtherbio.2022.103201.

67. Sundaram P, Abrahamse H. Phototherapy combined with carbon nanomaterials (1D and 2D) and their applications in cancer therapy. *Materials.* 2020;13(21):4830. DOI: 10.3390/ma13214830.

68. Wang Lei, Shi Jinjin, Liu Ruiyuan, Liu Yan, Zhang Jing, Yu Xiaoyuan, et al. Photodynamic effect of functionalized single-walled carbon nanotubes: a potential sensitizer for photodynamic therapy. *Nanoscale*. 2014;6(9):4642–4651. DOI: 10.1039/C3NR06835H.

69. Lan M, Guo L, Zhao S, Zhang Z, Jia Q, Yan L, et al. Carbon dots as multifunctional phototheranostic agents for photoacoustic/fluorescence imaging and photothermal/photodynamic synergistic cancer therapy. *Advanced Therapeutics*. 2018;1(6):1800077. DOI: 10.1002/adtp.201800077.

70. Golubewa L, Timoshchenko I, Romanov O, Karpicz R, Kulahava T, Rutkauskas D, et al. Single-walled carbon nanotubes as a photo-thermo-acoustic cancer theranostic agent: theory and proof of the concept experiment. *Scientific Reports*. 2020;10:22174. DOI: 10.1038/s41598-020-79238-6.

71. Chung S, Revia RA, Zhang M. Graphene quantum dots and their applications in bioimaging, biosensing, and therapy. *Advanced Materials*. 2021;33(22):1904362. DOI: 10.1002/adma.201904362.

72. Su S, Kang PM. Systemic review of biodegradable nanomaterials in nanomedicine. *Nanomaterials.* 2020;10(4):656. DOI: 10.3390/nano10040656.

73. Cozzolino F, Marra F, Fortunato M, Bellagamba I, Pesce N, Tamburrano A, et al. New sensing and radar absorbing laminate combining structural damage detection and electromagnetic wave absorption properties. *Sensors.* 2022;22(21):8470. DOI: 10.3390/s22218470.

74. Luo Feng, Liu Dongqing, Cao Taishan, Cheng Haifeng, Kuang Jiacai, Deng Yingjun, et al. Study on broadband microwave absorbing performance of gradient porous structure. *Advanced Composites and Hybrid Materials.* 2021;4(3):591–601. DOI: 10.1007/s42114-021-00275-4.

75. Du Junsa, Zhang Pin, Qiu Leilei, Gao Xiaohui, Huang Shengxiang, He Longhui, et al. Chaos patterned metasurface absorber with multi-peak and broadband. *Journal of Applied Physics*. 2021;130(16):165101. DOI: 10.1063/5.0065004.

76. Kazakova MA, Semikolenova NV, Korovin EYu, Zhuravlev VA, Selyutin AG, Velikanov DA, et al. Co/multi-walled carbon nanotubes / polyethylene composites for microwave absorption: tuning the effectiveness of electromagnetic shielding by varying the components ratio. *Composites Science and Technology*. 2021;207:108731. DOI: 10.1016/j.compscitech.2021.108731.

77. Naiden EP, Suslyaev VI, Bir AV, Politov MV. [Magnetic permeability spectra of nanosized hexaferrite powders]. *Zhurnal strukturnoi khimii*. 2004;45(7):102–105. Russian.

78. Zhuravlev VA, Suslyaev VI. Analysis of the microwave magnetic permeability spectra of ferrites with hexagonal structure. *Russian Physics Journal*. 2006;49(9):1032–1037. DOI: 10.1007/s11182-006-0220-8.

79. Zhuravlev VA, Suslyaev VI. Analysis and correction of the magnetic permeability spectra of $Ba_3Co_2Fe_{24}O_{41}$ hexaferrite by using Cramers – Kronig relations. *Russian Physics Journal*. 2006;49(8):840–846. DOI: 10.1007/s11182-006-0183-9.

80. Naiden EP, Zhuravlev VA, Suslyaev VI, Minin RV, Itin VI, Korovin EYu. Structure parameters and magnetic properties of Me_2W[1] cobalt-containing hexaferrite systems synthesized by the SHS method. *Russian Physics Journal*. 2011;53(9):974–982. DOI: 10.1007/s11182-011-9519-1.

81. Minin RV, Zhuravlev VA, Lapshin OV, Itin VI, Svetlichnyi VA. Nanocrystalline cobalt ferrite powders by spray solution combustion synthesis. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*. 2020;29(1):1–9. DOI: 10.3103/S1061386220010070.

82. Zhuravlev VA, Wagner DV, Dotsenko OA, Kareva KV, Zhuravlyova EV, Chervinskaya AS, et al. Static and dynamic magnetic properties of polycrystalline hexaferrites of the $Ba_2Ni_{2-x}Cu_xFe_{12}O_{22}$ system. *Electronics.* 2022;11(17):2759. DOI: 10.3390/electronics11172759.

83. Aherrao DS, Singh C, Srivastava AK. Review of ferrite-based microwave-absorbing materials: origin, synthesis, morphological effects, dielectric/magnetic properties, composites, absorption mechanisms, and optimization. *Journal of Applied Physics*. 2022; 132(24):240701. DOI: 10.1063/5.0123263.

84. Maksimenko SA. Special section guest editor: fundamental and applied nanoelectromagnetics. *Journal of Nanophotonics*. 2012; 6(1):061799. DOI: 10.1117/1.JNP.6.061799.

85. Maffucci A, Maksimenko SA, editors. *Fundamental and applied nanoelectromagnetics*. Dordrecht: Springer; 2016. 290 p. (NATO science for peace and security series B: physics and biophysics). DOI: 10.1007/978-94-017-7478-9.

86. Maffucci A, Maksimenko S, Svirko Yu, editors. *Carbon-based nanoelectromagnetics*. Amsterdam: Elsevier; 2019. 255 p. (Andrews DL, editor. Nanophotonics series).

87. Maffucci A, Maksimenko SA, editors. *Fundamental and applied nanoelectromagnetics II: THz circuits, materials, devices.* Dordrecht: Springer; 2019. 214 p. (NATO science for peace and security series B: physics and biophysics). DOI: 10.1007/978-94-024-1687-9.

88. Zhao Jijun, Liu Hongsheng, Yu Zhiming, Quhe Ruge, Zhou Si, Wang Yangyang, et al. Rise of silicene: a competitive 2D material. *Progress in Materials Science*. 2016;83:24–151. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2016.04.001.

89. Gogotsi Yu, Anasori B. The rise of MXenes. *ACS Nano*. 2019;13(8):8491–8494. DOI: 10.1021/acsnano.9b06394.

Получена 20.12.2022 / принята 20.01.2023.
Received 20.12.2022 / accepted 20.01.2023.

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2023;1:70–77
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2023;1:70–77

УДК 538.91, 538.935, 539.232

ПРЫЖКОВЫЙ ТРАНСПОРТ В НАНОГРАНУЛИРОВАННЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПЛЕНКАХ ИЗ НАНОЧАСТИЦ СПЛАВА FeCoZr, ОСАЖДЕННЫХ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МАТРИЦЫ AL_2O_3 И PZT

А. В. ЛАРЬКИН[1)]***, А. К. ФЕДОТОВ***[2)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, г. Минск, Беларусь*

Представлены результаты изучения характеристик прыжкового переноса электронов в наногранулированных композиционных пленках $(Fe_{0,45}Co_{0,45}Zr_{0,10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ и $(Fe_{0,45}Co_{0,45}Zr_{0,10})_x(PZT)_{1-x}$ с концентрацией металлосодержащих гранул в диапазоне $0,3 < x < 0,8$. Пленки толщиной 2–7 мкм получены методом ионно-лучевого распыления составных мишеней в среде чистого аргона или в смеси $Ar - O_2$, после чего они подвергались ступенчатому отжигу на воздухе в диапазоне температур 398–873 К с шагом 25 К в течение 15 мин. Осаждение композитов в смеси аргон – кислород либо отжиг на воздухе приводили к формированию наночастиц со структурой «ядро – оболочка», где оболочка состояла из собственных оксидов железа и кобальта (FeO, Fe_3O_4, Fe_2O_3, CoO). С точки зрения поведения адмиттанса в зависимости от концентрации, частоты и температуры $\sigma(x, \omega, T)$ в таких нанокомпозитах обнаружены два критических значения концентрации металлических элементов (x) – порог касания (x_{c1}) наночастиц оболочками и порог формирования сплошного проводящего кластера (x_{c2}) из ядер наночастиц (в отличие от понятия «порог перколяции» (x_c) в теории бинарных металлодиэлектрических композитов). Значения x_{c1} показывают концентрацию металлических элементов, при которой наночастицы внутри диэлектрической матрицы начинают соприкасаться друг с другом оболочками и образуют сплошной кластер «ядро – оболочка» с высокой электрической проводимостью между электродами в композитном образце. Поскольку проводимость такого кластера всегда меньше, чем проводимость только металлических наночастиц (как в бинарных нанокомпозитах), то необходимо ввести другую пороговую концентрацию (x_{c2}), при которой металлические ядра наночастиц начинают соприкасаться друг с другом. Определено, что по мере приближения к порогу касания x_{c1} характерное время жизни электронов τ на наночастицах с оболочками полупроводникового типа (FeO, Fe_3O_4) увеличивается с 0,1 до 400,0 мкс. Это приводит к положительному фазовому сдвигу θ между приложенным напряжением и током в пленках, называемому эффектом отрицательной емкости. При этом энергетические характеристики ΔE_1 и ΔE_2, определяемые из температурных зависимостей $\sigma(T)$, снижаются до значений, меньших энергии фонона kT, – от 300 до 1 мэВ. В случае преобладания вокруг наночастиц собственных оксидов железа диэлектрического типа (Fe_2O_3) возрастания τ и снижения ΔE_i не происходит, что приводит к обычному емкостному поведению нанокомпозитов с отрицательным сдвигом фазы θ между током и напряжением.

Ключевые слова: наногранулированные композиты; наночастицы; структура «ядро – оболочка»; прыжковый перенос; эффект отрицательной емкости.

Образец цитирования:
Ларькин АВ, Федотов АК. Прыжковый транспорт в наногранулированных композиционных пленках из наночастиц сплава FeCoZr, осажденных в диэлектрические матрицы Al_2O_3 и PZT. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:70–77 (на англ.).
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-70-77

For citation:
Larkin AV, Fedotov AK. Hopping transport in nanogranular composite films of FeCoZr alloy nanoparticles deposited into Al_2O_3 and PZT dielectric matrices. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:70–77.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-70-77

Авторы:
Андрей Викторович Ларькин – старший преподаватель кафедры энергофизики физического факультета.
Александр Кириллович Федотов – доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник лаборатории физики перспективных материалов.

Authors:
Andrei V. Larkin, senior lecturer at the department of energy physics, faculty of physics.
larkinav@bsu.by
https://orcid.org/0000-0003-1011-0804
Alexander K. Fedotov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher at the laboratory of physics of advanced materials.
fedotov@bsu.by
https://orcid.org/0000-0002-7008-847X

HOPPING TRANSPORT IN NANOGRANULAR COMPOSITE FILMS OF FeCoZr ALLOY NANOPARTICLES DEPOSITED INTO AL_2O_3 AND PZT DIELECTRIC MATRICES

***A. V. LARKIN*[a], *A. K. FEDOTOV*[b]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 11 Babrujskaja Street, Minsk 220006, Belarus*

Corresponding author: A. V. Larkin (larkinav@bsu.by)

The paper presents the study of hopping carrier transport parameters (characteristic times and energies) in nanogranular composite films $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ with a concentration of metal-containing nanoparticles inside of insulator matrix in the range $0.3 < x < 0.8$. Films of 2–7 μm thick were obtained by ion-beam sputtering of composite targets in pure argon gas or in Ar – O_2 mixture, after which they were subjected to stepwise post-annealing in air in the temperature range of 398–873 K with the 25 K steps for 15 min. Deposition of the films in the argon – oxygen gas mixture or their post-annealing led to the formation of metal-containing nanoparticles with core – shell structure, where the covering shell contained own iron and cobalt oxides (FeO, Fe_3O_4, Fe_2O_3, CoO). It was shown that the behaviour of concentration, frequency and temperature dependences of specific admittance $\sigma(x, \omega, T)$ is controlled by two critical values of nanoparticles' concentrations – touching threshold (x_{c1}) and conducting cluster formation threshold (x_{c2}) (in contrast to a single percolation threshold (x_c) in the theory for binary metal-dielectric composites). The x_{c1} is the concentration when some of nanoparticles inside the dielectric matrix begin to touch each other by shells to form continuous core – shell cluster with high current conductivity between electrodes in the composite sample. Since the conductivity of such a core-shell cluster is always less than the conductivity of only metallic nanoparticles, as in binary composites, we introduce another threshold concentration x_{c2} when the metallic cores of nanoparticles begin to touch each other. We observed that, when composite film approaches the x_{c1} threshold, the characteristic lifetime τ of electrons, extracted from $\sigma(x, \omega, T)$ dependences, on nanoparticles covered with the semiconducting-like shells of native oxides (FeO or Fe_3O_4) increases from 0.1 to 400.0 μs. For this case, we observed a positive phase shift θ between the applied voltage and current in the films, called the negative capacitance effect. At the same time, energy characteristics ΔE_1 and ΔE_2 extracting from $\sigma(T)$ dependences were decreased down to values less than phonon energy kT – from 300 to 1 meV. In the case of the predominance of native oxide of iron with insulating properties (Fe_2O_3) around the nanoparticles, there is no increase in τ and a decrease in ΔE_i. In this case the usual capacitive-like behaviour of nanocomposites with a negative phase shift θ between current and voltage is observed.

Keywords: nanogranular composites; core – shell nanoparticles; hopping transport; negative capacitance effect.

Introduction

Recently, in material science, much attention has been paid to the search for new methods to supply more rapid diagnostics of heterogeneous multifunctional nanomaterials and nanostructures with highly complicated phase structure [1]. The behaviour of physical characteristics in such systems directly depends on their morphology, including phase structure and sizes of homogeneities. Among the wide range of their functional characteristics, which are actively used already in modern engineering, the metal-dielectric nanocomposite materials make it possible, among other things, to use them as wireless elements with inductive-like behaviour. This area of application is based on the so-called negative capacitance effect (NCE) [2], when the delay by phase of electric current from the applied voltage occurs. This effect is observed in some nanostructured materials [3], including metal-dielectric films [4], consisting of a mixture of conductive nanoparticles in non-conductive (insulating) matrixes. This effect is due to the violation of the electrical neutrality of neighboring (closely spaced) highly conductive nanoparticles and the polarisation of the matrix surrounding them as a result of electron tunneling (hopping) between nanoparticles under the action of electric field and electron collisions with phonons, which depends both on temperature and on the intensity of the alternating electric field. As was shown earlier [5], the existence of such a NCE in a wide range of temperatures, including room temperatures, and frequencies depends both on the morphology of metal-dielectric nanostructures (composition, shape and size distribution of conducting and dielectric phases) and on the presence of additional phases arising during synthesis or subsequent heat treatments of these materials.

The paper studies the hopping carrier parameters (characteristic times and energies) transport in alternating current regime in nanogranular composite films $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ with the concentrations of the metal-containing FeCoZr alloy $0.3 < x < 0.8$ randomly embedded into dielectric matrix.

Experimental part

The objects of the study were composite nanogranular films 2–7 μm thick deposited by the method of ion-beam sputtering of targets and subjected to stepwise 15 min post-annealings in air in the temperature range of 398–873 K with a step of 25 K [6]. For deposition, we used composite targets, which contained cast metallic $Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10}$ alloy base with dimensions of 270 × 70 × 14 mm and dielectric strips of Al_2O_3 or PZT of the same size located on its surface at different distances from each other. The distance between the dielectric strips changed monotonically from 3 to 24 mm from one to another sides of metallic base. Such construction of the target made it possible to obtain, in one technological cycle, composite films on the glass-ceramic substrate with a gradient of metal-containing phase (in form of nanoparticles) content x from 0.3 on one side of the substrate to 0.8 on its another side [7]. In case of Al_2O_3 matrix deposition was carried out both in Ar (with pressure $P_{Ar} = 6.0 \cdot 10^{-2}$ Pa) and in Ar – O_2 mixture (with partial pressure $P_{O_2} = 4.3 \cdot 10^{-3}$ Pa) while in case of PZT matrix we used only Ar – O_2 atmosphere (at $P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa or $P_{O_2} = 3.0 \cdot 10^{-3}$ Pa).

To analyse the morphology of nanocomposite film, as well as to determine their thickness and chemical composition, a LEO-1455VP scanning microscope (*Carl Zeiss*, Germany) with an attachment for energy dispersive analysis was used. Analysis of the phase composition of the samples before and after annealing was carried out using Mössbauer spectroscopy, electron and X-ray diffraction, and also the X-ray absorption edge methods [8; 9].

To study electric properties of the samples we used an admittance spectroscopy in the temperature range of 77–350 K and alternating current frequencies of 100 Hz – 5 MHz. The admittance was measured by a 4-probe method using a 3532 LCR HiTESTER meter (*Hioki*, Japan). The samples with 10 × 2 mm size were supplied with silver paste electric contacts [10]. The temperature was measured with a thermocouple using an Agilent 34970A multimeter (*Agilent Technologies*, USA). The error of these measurements was no more than 4 %.

Results and discussion

This paper analyses the temperature and frequency dependences of the real part of the specific admittance $\sigma(f, T)$ and phase shift angles $\theta(f, T)$ between current and applied voltage in films $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$. The description of $\sigma(f, T)$ curves, including those described in earlier works [10; 11], was carried out on the basis of the improved model of hopping conductivity in a weak electric field (which energy was less than thermal energy of vibrating lattice kT) [12]. This model describes the real part of the admittance by the relation

$$\sigma(f, T) = \sigma_0(f, T) f^{\alpha(f)} \quad (1)$$

with sigmoid-like σ-curves. Here the exponent α, which determines the probability of jumps p between nanoparticles, depends on the frequency as against the known Mott model [13].

Note that in the model being described, an electron jump from one neutral nanoparticle I to another one II can occur in one of two ways: either by tunneling through a barrier or by hopping over the barrier between wells created by a dielectric matrix layer separating nanoparticles of the metallic phase [12]. In both cases, after every jump between wells I and well II, a pair of positively and negatively charged nanoparticles appears creating an electric dipole. The formation of a dipole after the capture of an electron by a nanoparticle influences the dielectric permittivity around dipoles [14] and leads to an increase in the characteristic lifetime τ of an electron on it. This, respectively, results in a delay of the next jump (back on well I or forward on well III) only under the action of a weak electric field, when imparted energy is insufficient for the jump without the help of the additional action of a suitable lattice vibration. Such behaviour of the electron means that it ceases to follow the change in the sign of the alternating electric field, which means that the current is lagging in phase relative to the applied alternating voltage. This delay time can be estimated from the frequency $f_{min} \sim \frac{1}{\tau}$, where f_{min} is the value of frequency above which the electric current lags behind the applied voltage in phase. At the same time, for the frequencies $f > f_{min}$ the phase delay of the next jump from well II back to well I is equal to $2\pi f\tau$, those may become more than 2π, which creates the possibility of a positive phase shift, i. e. NCE.

According to [12], the probability p and the characteristic lifetime τ on $Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10}$ nanoparticles (as hopping centers) between electron jumps can be estimated from the relations [10; 11]:

$$p = \frac{\sigma_L}{\sigma_H}, \quad (2)$$

$$\tau = \frac{1}{2\pi f_{max}}, \quad (3)$$

where the values σ_L and σ_H in fig. 1, *a*, correspond to the low and high frequency plateaus parallel to the frequency axis on the sigmoid-like $\sigma(f)$ dependence, and f_{max} is the maximum of the corresponding dependence $\alpha(f)$ in the ratio (1). Also the $\sigma(T)$ dependence in equation (1) at a constant frequency in the studied temperature range is described by the model of hopping conduction with the constant energy characteristic ΔE:

$$\sigma(T) = \sigma_0(f) e^{-\frac{\Delta E}{kT}}. \quad (4)$$

The values of ΔE_i are determined from the slope of the straight-line sections of Arrhenius dependences (see the equation (4)) (fig. 1, *b*). An examples of the experimental $\sigma(f, T)$ and $\alpha(f)$ dependences are represented in fig. 1. The $\alpha(f)$ dependences in fig. 1, *b*, were determined by the geometric differentiation of the $\sigma(f)$ curves. These dependences allowed the estimating the σ_L, σ_H, $\alpha(f)$, f_{max} and ΔE parameters introduced in equations (1)–(3).

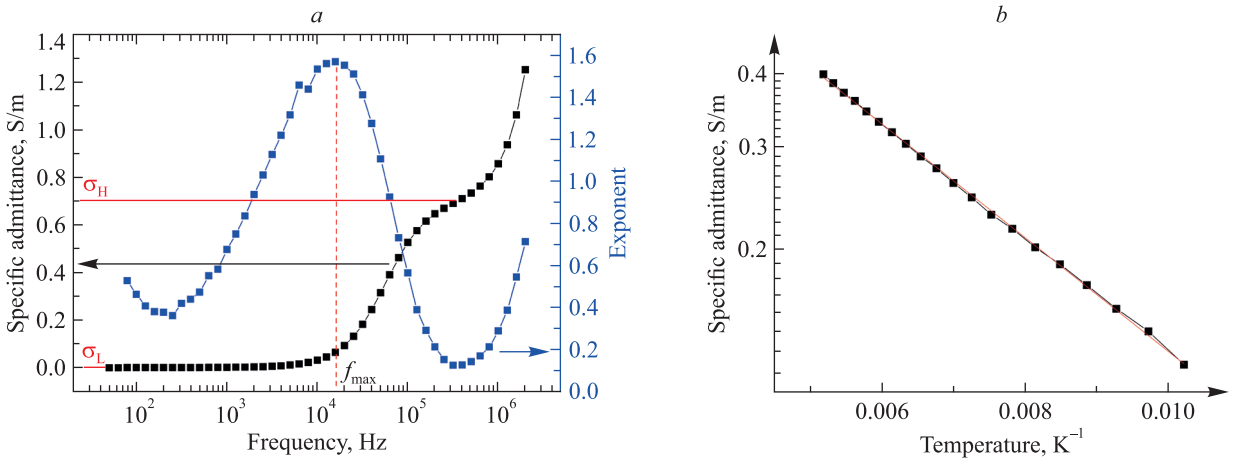


Fig. 1. Examples of the frequency dependence of the real part of the specific admittance $\sigma(f)$ and the exponent $\alpha(f)$ in relation (1) for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.52}(PZT)_{0.48}$ film deposited in Ar – O_2 mixture under $P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa and $T = 223$ K (*a*) and Arrhenius curves for $f = 500$ Hz in the region of low T for the film $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.31}(Al_2O_3)_{0.69}$ deposited in an Ar and annealed at $T_{an} = 623$ K (*b*)

Note an important feature of our results – the presence of 2-sigmoid-like character of $\sigma(f)$ dependences (and, correspondingly, the 2-peaks in $\alpha(f)$ dependences according to the model [12]). This was not observed earlier by us, that indicates the impossibility of their study using classical percolation model due to 2-phase (heterogeneous) composition of the samples under consideration.

An analysis of the estimated model parameters of hopping carrier transport in real binary nanogranular composite films $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ deposited in pure argon have shown that the characteristic electron lifetime τ on nanoparticles decreases from 12.6 to 1.26 μs with temperature increase in the range 80 K < T < 303 K and for full range of x. In this case, the jump probability for binary structure of nanocomposite always corresponds to the ratio $p \ll 1$ for $x < x_c$, i. e. up to the percolation threshold (dielectric regime of conduction), and $p \to 1$ at $x > x_c$ (metallic regime). The value of the exponent α in relation (1) is close to 0.8 for Mott mechanism of conduction [13] only in composites below the percolation threshold x_c.

Low-temperature annealing at $T_{an} = 623$ K in air of $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ films leads to an increase in the characteristic electron lifetime τ (fig. 2, *a*, inset). Thus for $x = 0.31$ at $T = 303$ K, value of τ increases from 1.26 μs before annealing to 6.17 μs after annealing, which correlates with the formation of iron-based semiconductor oxide shells covering the nanoparticles cores. In addition, annealing leads to the shift of percolation threshold $x_c \approx 0.45$ to higher values of x (to 0.50) for threshold x_{c1} when highly-conductive cluster is formed due to touching of shells around nanoparticle cores. This behaviour corresponds to the activation nature of the admittance, in which the electron hopping probability p increases when phonon energy is higher due to temperature growing (fig. 2, *b*, inset). At the same time, for $x = 0.31$ and $T = 303$ K after annealing at $T_{an} = 623$ K, the value of the exponent α becomes equal to 0.16, which does not correspond to the value $\alpha = 0.8$ for the known Mott mechanism of conduction on alternating current [13].

As follows from the analysis, in $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ nanocomposites deposited in Ar – O_2 mixture, the electron lifetime on nanoparticles increases in comparison with composites deposited in pure Ar. This is due to the formation of semiconducting FeO and Fe_3O_4 oxide shells around metallic cores during deposition,

which also introduces significant changes in the behaviour of $\sigma(x)$ curves. Instead of one critical value (percolation threshold x_c) in Ar deposited metal-dielectric films, the addition of oxygen to the vacuum chamber atmosphere is accompanied by the appearance of two critical values of nanoparticles' concentrations – touching threshold (x_{c1}) and conducting cluster formation threshold (x_{c2}) (in contrast to a single percolation threshold x_c in the theory for binary metal-dielectric composites [15]). The x_{c1} is the concentration when some of nanoparticles inside the dielectric matrix begin to touch each other by shells to form continuous core – shell cluster with high current conductivity between electrodes in the composite sample. Since the conductivity of such a core – shell cluster is always less than the conductivity of only metallic nanoparticles, as in binary composites, we introduce another threshold concentration x_{c2} when the metallic cores of nanoparticles begin to touch each other because the amount of oxygen becomes insufficient to form native oxides (FeO, Fe_3O_4, Fe_2O_3, CoO) which are formed in the shell around the metal cores of the FeCoZr alloy in the sequence FeO → Fe_3O_4 → Fe_2O_3 and should prevent the direct contact between metallic cores.

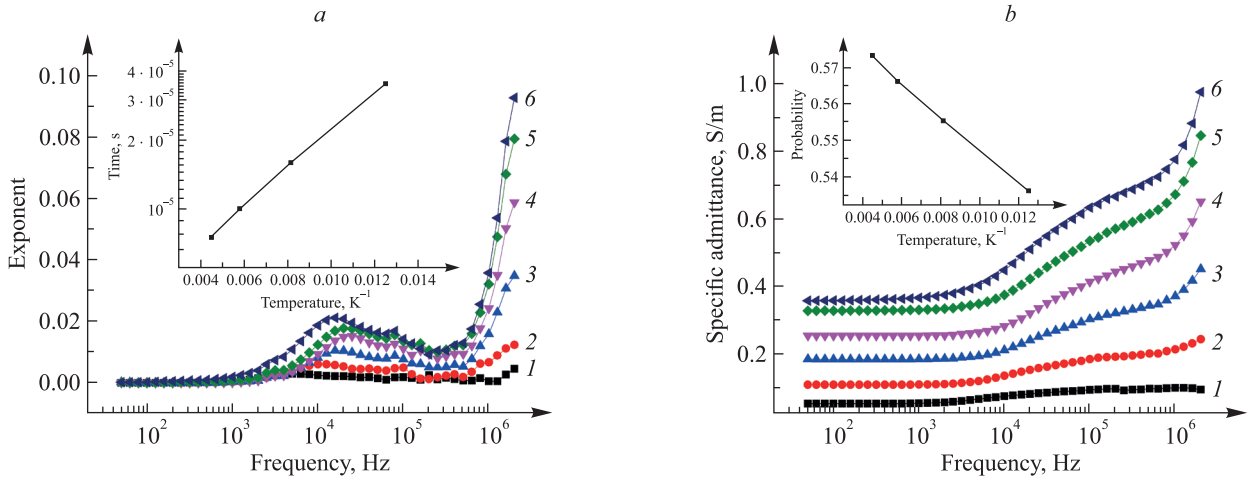


Fig. 2. Frequency dependences of the exponent $\alpha(f)$ in relation (1) (*a*) and the real part of the specific admittance $\sigma(f, T)$ (*b*) for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.31}(Al_2O_3)_{0.69}$ film deposited in an Ar and annealed at $T_{an} = 623$ K for various temperatures: 80 K (*1*), 123 K (*2*), 173 K (*3*), 223 K (*4*), 273 K (*5*), 303 K (*6*). The insets show the temperature dependences of the characteristic lifetime of an electron on nanoparticles (*a*) and the probability of jumping between them (*b*)

The formation of FeO and Fe_3O_4 semiconducting oxides at the initial stages of core formation increases the lifetime (up to $\tau \sim 10^{-4}$ s), which leads to a positive phase shift of current relative to bias voltage applied for concentrations $x < x_{c1}$.

Higher temperature post-annealing in air of $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ films (up to $T_{an} = 873$ K) leads to a further increase in the electron lifetime (fig. 3, *a*) compared to unannealed samples. This is due to additional oxidation of the metal cores with an increase in the proportion of semiconductor oxide phases FeO, Fe_3O_4 in nanoparticles, which further enhances the positive phase shift.

All nanocomposites of the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ type were deposited in Ar – O_2 mixtures. At low partial pressure of oxygen ($P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa) the characteristic lifetime of an electron on nanoparticles is about $\tau \sim 10^{-5}$ s, which is insufficient for the existence of the NCE in a wide range of temperatures and frequencies, since for these values of τ the necessary phase delay of the electric current from the applied voltage is not observed. The jump probability in this type of nanocomposites is much lower than in $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ samples, which is associated with a low probability of dipole formation caused by a significantly higher permittivity of the PZT matrix and, as a consequence, an increase in the energy required for this process.

An increase in the oxygen pressure in the deposition atmosphere leads to an increase in τ values. For example, for $x = 0.64$ at $T = 223$ K, the value of τ increased from 6.57 μs (for the sample deposited at $P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa) to 79.8 μs (for a sample deposited at $P_{O_2} = 3.0 \cdot 10^{-3}$ Pa). We associate this effect with an increase in the proportion of native iron oxides, including semiconductor FeO and Fe_3O_4, around metal cores, which leads to an increase in the positive phase shift, that is most pronounced in the vicinity of x_{c1}.

Additional annealing in air leads to a slight change in the characteristic electron lifetime (fig. 3, *b*), which does not depend on the partial pressure of oxygen P_{O_2} and only reflects the growth of the amount (and the size)

of iron and cobalt oxide phases around metal cores, including dielectric ones, which is generally not affected the presence of the NCE in $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ nanocomposites, since their morphology is not changed. However, it leads to decrease the temperature range and metal content in which this effect is observed.

Analysis of the energy parameters of carrier transport, estimated on the basis of relation (4), for the case of $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ composites, have shown that, regardless the deposition conditions, the temperature dependences of $\sigma(f, T)$ in Arrhenius scale at each frequency have an activation character with two different energy characteristics corresponding to the slopes of Arrhenius straight lines: ΔE_1 in the range of low temperatures (mostly below 150 K) and ΔE_2 at high temperatures (mostly above 150 K) (fig. 4, *a*).

In this case for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ films deposited in pure Ar, ΔE_2 is always greater than ΔE_1 (for example, for $x = 0.31$ at $f = 1$ MHz, the values are $\Delta E_1 = 20.0$ meV and $\Delta E_2 = 39.5$ meV). The latter probably means that energetically less favourable jumps can be activated only at higher temperatures, where phonons' energies kT are higher. As was shown, for deposited in argon $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ composites, if the energy characteristics ΔE_1 and ΔE_2 lied in the range 15 meV $< \Delta E_i <$ 40 meV, the NCE was not observed at $x < x_c$.

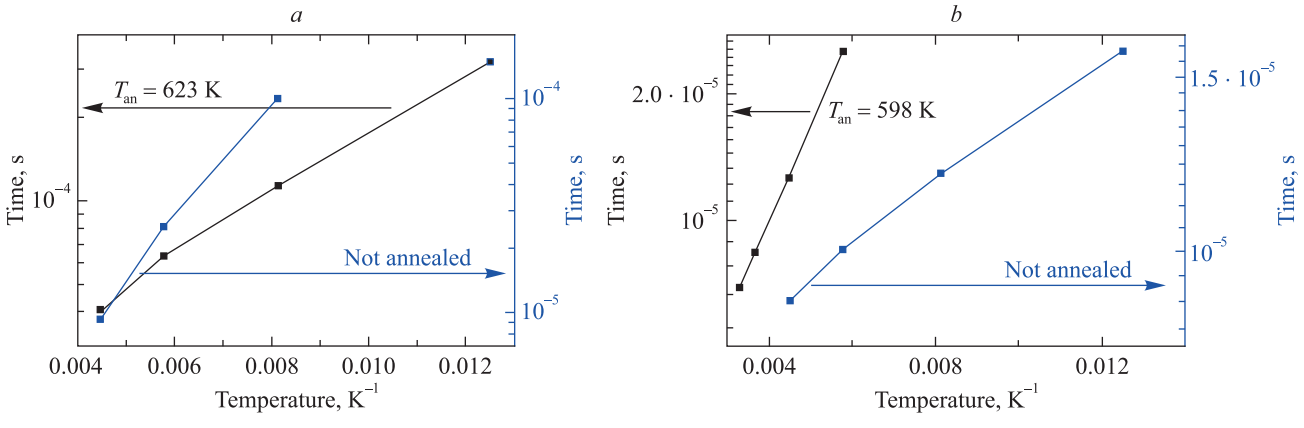


Fig. 3. Temperature dependences of the characteristic electron lifetime τ on nanoparticles before annealing (right ordinate axes) and in the case of annealing in air (left ordinate axes) for $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.38}(Al_2O_3)_{0.62}$ film deposited in Ar – O_2 mixture (T_{an} = 623 K) (*a*) and for $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.52}(PZT)_{0.48}$ film deposited in Ar – O_2 mixture at $P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa (T_{an} = 598 K) (*b*)

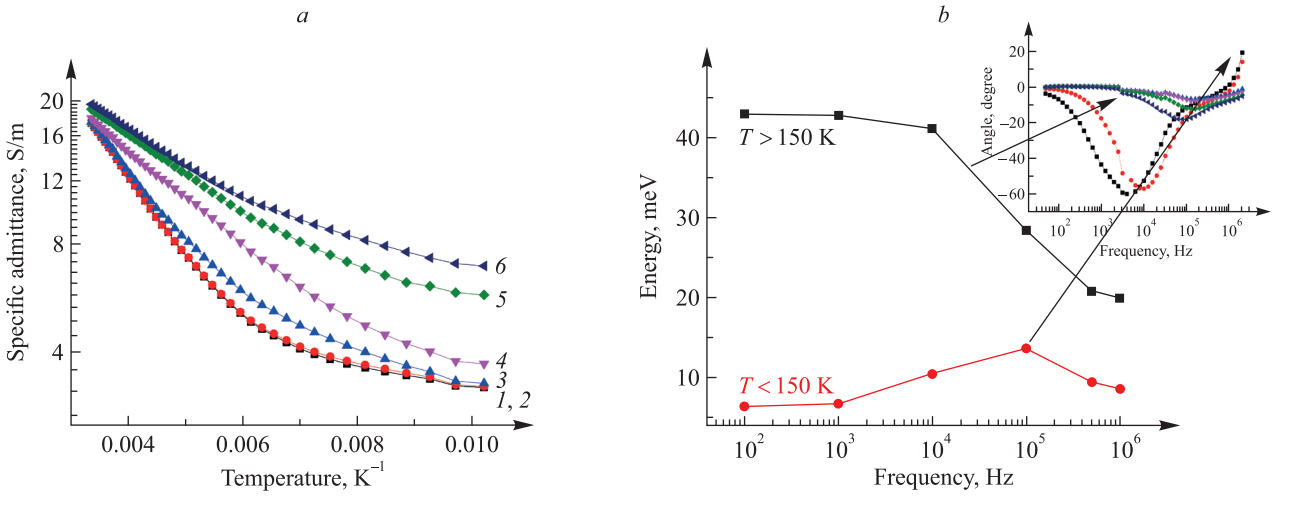


Fig. 4. Temperature dependences of the specific values of the real part of the admittance at different (*1* – 100 Hz, *2* – 1 kHz, *3* – 10 kHz, *4* – 100 kHz, *5* – 500 kHz, *6* – 1 MHz) alternating current frequencies (*a*) and frequency dependences of energy characteristics (*b*) in the region of high and low temperatures. The inset shows the frequency dependences of the phase shift angle in the temperature range of 80–303 K for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.50}(Al_2O_3)_{0.50}$ film deposited in an Ar – O_2 mixture

After annealing in air of this type of samples with $x < x_{c1}$, the energy characteristics slightly decrease compared to unannealed samples (for example, for $x = 0.31$ at $f = 500$ kHz, after annealing the value of ΔE_2 is lowered from 40.6 to 36.5 meV). However, we still do not observe significant contribution to the NCE. We should note that with further increase in oxygen content in the vacuum chamber atmosphere during $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ nanocomposites deposition, which is resulted in the enhancement of the NCE, the energy characteristics are always lowered (fig. 4, *b*).

Here we need to do an important clarification why the NCE is observed in samples with those x, T and f values when formally $\Delta E_i < kT$. In the framework of hopping conductivity model [12] to ensure phase delay of electrons (just resulting in NCE) hopping between potential wells is realised only under subjection of both electric field and phonon energies, i. e. in reality at $\Delta E_i \geq kT$.

As was shown earlier in [16], we observed close behaviour of the energy characteristics of composites $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ extracted from temperature dependences of active R_i and reactive R_{Ci}, R_{Li} elements in their equivalent substitution circuits.

Annealing in air of $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ nanocomposites deposited in an Ar – O_2 mixture at temperatures up to $T_{an} = 873$ K results to the increase the energy characteristics ΔE_i due to the growth of the dielectric oxide Fe_2O_3 contribution to the conductivity of the samples (fig. 5, *a*). However, in those regions of x where the NCE persists, the values of ΔE_i are still smaller than in regions where it is not observed (for example, after annealing at $T_{an} = 623$ K for composite with $x = 0.50$ at $f = 1$ MHz, we have that $\Delta E_1 = 15.0$ meV is less than $\Delta E_2 = 31.4$ meV in the region of low and high temperatures, respectively). It is important to note that after high temperature annealing the region of x, where positive phase shift (with inductive-like behaviour of nanocomposites) expands, so that the energy characteristics ΔE_i decrease over the entire range of x studied.

In $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ nanocomposites deposited in Ar – O_2 mixture at various oxygen partial pressures, the relationship between the phase shift angles θ and the energy characteristics ΔE_i is similar to the previous case (fig. 5, *b*): when the NCE occurs, the energy characteristics are also always less than in the region where it is absent.

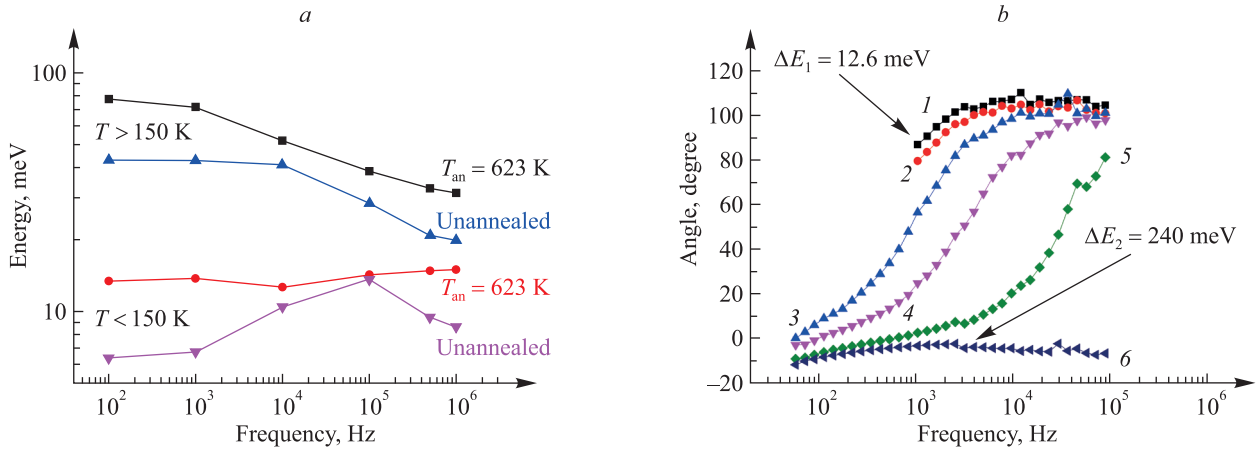


Fig. 5. Frequency dependences of the energy characteristics in the region of high and low temperatures for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.50}(Al_2O_3)_{0.50}$ film deposited in an Ar – O_2 mixture (without annealing and at $T_{an} = 623$ K) (*a*) and the phase angle for the $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_{0.52}(PZT)_{0.48}$ film deposited in an Ar – O_2 mixture at $P_{O_2} = 3.0 \cdot 10^{-3}$ Pa at different temperatures (*1* – 80 K, *2* – 123 K, *3* – 173 K, *4* – 223 K, *5* – 273 K, *6* – 303 K) with the corresponding energy characteristics (*b*)

Annealing of this type nanocomposites in air up to $T_{an} = 598$ K does not significantly affect the nature of the temperature dependences of the admittance, since their morphology does not change after this heat treatment (for example, in the samples with $x = 0.52$ deposited at $P_{O_2} = 2.0 \cdot 10^{-3}$ Pa, the energy characteristics ΔE_2 at $f = 1$ kHz were 151 meV in the case of annealing at $T_{an} = 598$ K and 154 meV before it).

Conclusions

There were estimated the model parameters of hopping carrier transport (electron lifetime on nanoparticles τ, energy characteristics ΔE_i and hopping probability p, etc.) in nanogranular $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ and $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(PZT)_{1-x}$ composite films with different morphology of nanoparticles. It is shown that τ,

ΔE_i and p values significantly depend on the amount, composition and type of native iron oxide phases formed around $Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10}$ alloy cores in the sequence $FeO \rightarrow Fe_3O_4 \rightarrow Fe_2O_3$ regardless of the oxidation method (during deposition or after post-annealing in air). It was found that in the vicinity of the touching threshold x_{c1} the appearance of the negative capacitance effect is observed if the predominance of semiconductor-type iron oxides (FeO, Fe_3O_4) in shells around the nanoparticles cores occurs leading to τ increase (from 0.1 to 400.0 μs) and ΔE_i decrease to values less than kT (from 300 to 1 meV). At the same time, if around cores of nanoparticles dielectric-type native oxide (Fe_2O_3) is prevailed, with the insulating properties close to dielectric matrix, it doesn't cause a sufficient increase in τ and a decrease in ΔE_i leading to the usual capacitive-like behaviour of admittance showing negative phase shift.

References

1. Mourdikoudis S, Pallares RM, Thanh NTK. Characterization techniques for nanoparticles: comparison and complementarity upon studying nanoparticle properties. *Nanoscale.* 2018;10(27):12871–12934. DOI: 10.1039/C8NR02278J.

2. Parravicini GB, Stella A, Ungureanu MC, Kofman R. Low-frequency negative capacitance effect in systems of metallic nanoparticles embedded in dielectric matrix. *Applied Physics Letters.* 2004;85(2):302–304. DOI: 10.1063/1.1772872.

3. Bhattacharjee S, Banerjee A, Mazumder N, Chanda K, Sarkara S, Chattopadhyay KK. Negative capacitance switching in size-modulated Fe_3O_4 nanoparticles with spontaneous non-stoichiometry: confronting its generalized origin in non-ferroelectric materials. *Nanoscale.* 2020;12(3):1528–1540. DOI: 10.1039/C9NR07902E.

4. Zhukowski P, Koltunowicz TN, Wegierek P, Fedotova JA, Fedotov AK, Larkin AV. Formation of noncoil-like inductance in nanocomposites $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ manufactured by ion-beam sputtering of complex targets in Ar + O_2 atmosphere. *Acta Physica Polonica A.* 2011;120:43–45. DOI: 10.12693/APhysPolA.120.43.

5. Koltunowicz TN, Fedotova JA, Zhukowski P, Saad A, Fedotov A, Kasiuk JV, et al. Negative capacitance in (FeCoZr)–(PZT) nanocomposite films. *Journal of Physics D: Applied Physics.* 2013;46(12):125304. DOI: 10.1088/0022-3727/46/12/125304.

6. Zhukovski P, Koltunowicz T, Fedotova J, Larkin A. An effect of annealing on electric properties of nanocomposites $(CoFeZr)_x(Al_2O_3)_{1-x}$ produced by magnetron sputtering in the atmosphere of argon and oxygen beyond the percolation threshold. *Przegląd Elektrotechniczny.* 2010;86(7):157–159.

7. Saad AM, Mazanik AV, Kalinin YuE, Fedotova JA, Fedotov AK, Wrotek S, et al. Structure and electrical properties of CoFeZr-aluminium oxide nanocomposite films. *Reviews on Advanced Materials Science.* 2004;8(2):152–157.

8. Fedotova J, Kasiuk J, Przewoznik J, Kapusta Cz, Svito I, Kalinin Yu, Sitnikov A. Effect of oxide shells on the magnetic and magnetotransport characteristics of oxidized FeCoZr nanogranules in Al_2O_3. *Journal of Alloys and Compounds.* 2011;509(41):9869–9875. DOI: 10.1016/j.jallcom.2011.07.066.

9. Kasiuk JV, Fedotova JA, Marszalek M, Karczmarska A, Mitura-Nowak M, Kalinin YuE, et al. Effect of oxygen pressure on phase composition and magnetic structure of FeCoZr – $Pb(ZrTi)O_3$ nanocomposites. *Physics of the Solid State.* 2012;54(1):178–184. DOI: 10.1134/S1063783412010179.

10. Zukowski P, Koltunowicz T, Partyka J, Fedotova YuA, Larkin A. Electrical properties of nanostructures $(CoFeZr)_x + (Al_2O_3)_{1-x}$ with use of alternating current. *Vacuum.* 2009;83(supplement 1):S275–S279. DOI: 10.1016/j.vacuum.2009.01.081.

11. Koltunowicz TN, Zhukowski P, Fedotova VV, Saad AM, Fedotov AK. Hopping conductance in nanocomposites $(Fe_{0.45}Co_{0.45}Zr_{0.10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ manufactured by ion-beam sputtering of complex target in Ar + O_2 ambient gas. *Acta Physica Polonica A.* 2011;120(1):39–42. DOI: 10.12693/APhysPolA.120.39.

12. Zukowski P, Koltunowicz T, Partyka J, Wegierek P, Kolasik M, Larkin A, et al. A model of hopping recharging and its verification for nanostructures formed by the ion techniques. *Przegląd Elektrotechniczny.* 2008;84(3):247–249.

13. Mott NF, Davis EA. *Electronic processes in non-crystalline materials.* Oxford: Clarendon Press; 1979. 590 p.

14. Svito IA, Fedotov AK, Saad A, Zukowski P, Koltunowicz TN. Influence of oxide matrix on electron transport in $(FeCoZr)_x(Al_2O_3)_{1-x}$ nanocomposite films. *Journal of Alloys and Compounds.* 2017;699:818–823. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.01.043.

15. Irzhak VI. Percolation threshold in polymer nanocomposites. *Colloid Journal.* 2021;83(1):64–69. DOI: 10.1134/S1061933X21010063.

16. Larkin AV, Fedotov AK. Equivalent circuits of FeCoZr-alloy nanoparticles deposited into Al_2O_3 and PZT dielectric matrices nanogranular composite films. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2022;3:104–112. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-3-104-112.

Received 16.07.2022 / revised 08.12.2022 / accepted 08.12.2022.

Оптика и спектроскопия

Optics and spectroscopy

УДК 533.9.082, 533.922, 533.924, 621.373.8

АНАЛИЗ СОСТАВА ПОКРЫТИЙ СТАРИННЫХ ХРУПКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ С ПОМОЩЬЮ ДВУХИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЕКТРОМЕТРА

К. Ф. ЕРМАЛИЦКАЯ[1)]***, П. А. ИВАНОВА***[1)]***, Я. И. МАТЮШ***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Исследованы возможности использования лазерной атомно-эмиссионной спектроскопии для элементного анализа многокомпонентных металлических артефактов железного века. Большое внимание уделено влиянию грязи, патины, ржавчины, окалины на процесс лазерной абляции и, как следствие, на относительную интенсивность спектральных линий. Предложен метод оценки толщины молекулярных соединений на поверхности металлических изделий для последующего исключения соответствующих спектральных данных из результатов элементного анализа. Установлено, что относительная интенсивность спектральных линий для современного образца будет значительно (до 30 %) выше, чем для артефакта, который длительное время находился под землей. Таким образом, количественный анализ с использованием градуировочных кривых, построенных на основе данных для современных стандартных образцов, даст неверные результаты. При этом переход от одноимпульсной лазерной абляции к двухимпульсной, приводящий к многократному увеличению относительной интенсивности спектральных линий, очень важен, так как позволяет значительно повысить чувствительность анализа и снизить ошибку.

Ключевые слова: лазерная атомно-эмиссионная спектроскопия; элементный анализ артефактов; сдвоенные лазерные импульсы; лазерная абляция.

Образец цитирования:
Ермалицкая КФ, Иванова ПА, Матюш ЯИ. Анализ состава покрытий старинных хрупких металлических образцов с помощью двухимпульсного лазерного спектрометра. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:78–84 (на англ.).
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-78-84

For citation:
Ermalitskaia KF, Ivanova PA, Matyush YaI. Elemental analysis of obsolete brittle metal samples using a two-pulse laser spectrometer. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023; 1:78–84.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-78-84

Авторы:
Ксения Федоровна Ермалицкая – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.
Полина Александровна Иванова – студентка физического факультета. Научный руководитель – К. Ф. Ермалицкая.
Яна Игоревна Матюш – студентка физического факультета. Научный руководитель – К. Ф. Ермалицкая.

Authors:
Ksenia F. Ermalitskaia, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
ermalitskaia@gmail.com
https://orcid.org/0000-0002-2134-6938
Polina A. Ivanova, student at the faculty of physics.
Yana I. Matyush, student at the faculty of physics.

ELEMENTAL ANALYSIS OF OBSOLETE BRITTLE METAL SAMPLES USING A TWO-PULSE LASER SPECTROMETER

***K. F. ERMALITSKAIA*[a], *P. A. IVANOVA*[a], *Ya. I. MATYUSH*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: K. F. Ermalitskaia (ermalitskaia@gmail.com)

The possibilities of using laser induced breakdown spectroscopy for elemental analysis of multicomponent metal iron age artefacts are studied. Much attention is paid to the influence of dirt, patina, rust, scale on the process of laser ablation, and, as a result, on the relative intensity of spectral lines. A method is proposed to estimate the thickness of molecular compounds on the surface of metal artifacts to subsequently exclude the corresponding spectral data from the analysis results. It has been found that during laser ablation of pure metal samples at fixed radiation parameters, the relative intensity of spectral lines during ablation of a modern sample can significantly (up to 30 %) exceed the intensity for an old sample that has been underground for a long time. Thus, a quantitative analysis using calibration curves, built on the basis of modern standard samples, will lead to incorrect results. In this case, the transition from single-pulse to double-pulse laser ablation, which leads to a multiple increase in the relative intensity of spectral lines, is very important, since it allows one to significantly increase the sensitivity of the analysis and reduce the error.

Keywords: laser induced breakdown spectroscopy; elemental analysis of artifacts; double laser pulses; laser ablation.

Introduction

Laser induced breakdown spectroscopy (LIBS) is one of the most common methods of low-destructive elemental analysis. It is widely used in industry, research of biological objects, minerals, medicines, explosives, artifacts, etc. [1; 2]. The popularity of this method is associated with a number of advantages: small amounts of substance required for analysis, lack of preliminary chemical and mechanical surface preparation, low sample destruction (crater diameter 100 μm, layer thickness 3–5 μm), the possibility of studying in the air, simultaneous determination of the concentration of all elements, including those that are difficult to detect by other methods, the possibility of remote analysis of samples, including those under water. Despite the ability to analyse almost any sample using the LIBS method, this method is most often used to study metals and multicomponent alloys. In addition to modern industrial products and raw materials for them, LIBS has been used for several decades to analyse ancient objects and artifacts, where it successfully competes with such a popular approach as X-ray fluorescence analysis [3–5]. Despite the fact that the latter is completely non-destructive, it does not make it possible to study the change in concentration with depth.

During the LIBS of objects from archaeological excavations, the authors of publications practically do not pay attention to preparing the surface for analysis. Indeed, practically in all software of LIBS spectrometers it is possible to set a certain number of laser prepulses that will evaporate the substance, while the spectra will not be recorded. After such cleaning of the sample from contamination, patina, rust, the object is analysed, in the same way as in the case of modern industrial samples. However, the question remains how to accurately determine the number of prepulses needed to completely remove all contamination from the surface and get to the material of the original sample. If there are not enough prepulses, the resulting spectrum used to determine the concentration may contain data related to contamination or compounds on the surface.

Too large (about 100) number of pulses leads to the fact that the ablation plasma will spread inside a rather deep cylindrical crater, settling on its walls. As a result, the intensity of the recorded signal will decrease, and hence the sensitivity of the analysis.

Another important issue is often left out of the number of articles on LIBS artifacts. Metal multicomponent products made several centuries, and sometimes millennia ago, can differ significantly in properties and structure from modern products. So, in the times of the bronze and iron ages, the masters could not control the quality of the raw materials used, the required parameters of the technological process, such as, for example, temperature, speed and uniformity of crystallisation. As a result, even in an outwardly homogeneous ancient sample, the concentration of elements at different points can differ significantly. The further fate of the artifact also has a significant effect on the concentration of elements in the sample (especially in its surface layers with a depth of less than 100 μm). So, for example, jewelry during the iron age was often made from Roman or Arabic coins, which could either be heated or subjected to strong mechanical stress to change the image on the surface. Further, there was a possibility that jewelry, coins or weapons would be sent with the owner after his death to the funeral pyre, which was not uncommon in the first millennium of our era. Thus, the initially inhomogeneous product for several hours, and sometimes days, was exposed to high temperatures, sufficient

to melt lead and tin, but insufficient for iron. In our time, ancient artifacts fall into the hands of spectroscopists, not only covered with scale, but also having a significant gradient in the concentrations of elements in depth. Another circumstance that leads to a change in the concentration of elements in alloys is their long-term (several centuries) residence in various types of soil or in water. Additional factor influencing the change in the concentration of elements is the aggressive impact of agricultural chemistry in the 20th century. A significant number of artifacts were found in the fields used at a depth of a couple of tens of centimeters.

The combined effect of all the above circumstances can lead to the fact that the metal artifact will have a porous (bread-like) texture, rather than a dense, characteristic for modern products. Such results were obtained by the author in the study of coins of the Gnivan treasure [6]. It was found that the weight of some samples (Lvov and Krakow coins of Jagiello, partly Prague pennies) is significantly lower than expected. At the same time, light coins are characterised by a dull, «cardboard» sound when they hit a hard surface, in contrast to their full-weight «counterparts», for which a metallic ringing is clearly audible. At the same time, light coins are characterised by increased fragility, the edges of the breaks are white, which indicates the loss of plasticity by silver. Visual inspection showed that samples with cracks as a result of a strong impact of the stamp were more susceptible to corrosion, weight loss and increased brittleness. Two-pulse laser microanalysis made it possible to determine that lighter and more brittle samples contain pores 0.5–2.0 μm in size. When exposed to laser pulses these points in the volume of the samples under study a significant drop in the intensity of the spectral lines of silver is observed, and a drop in the intensity of the spectral lines of copper is absolutely synchronous with it.

However, laser ablation of porous samples differs from ablation of metals, and it is quite likely that the registered analytical signal in the analysis of a modern item and an ancient object similar in composition may differ. Then the generally accepted approaches to quantitative analysis (construction of calibration graphs based on the data of standard samples of alloys and a calibration-free method based on the assumption of local thermodynamic equilibrium) can lead to a significant distortion of the results.

The purpose of this study was to evaluate the possibilities of using LIBS to analyse artifacts covered with scale, patina, and rust, to develop a method for determining the thickness of these coatings on the surface of products, and to compare spectral data obtained by ablation of modern and old multicomponent alloys.

Materials and methods

The experiment was carried with the help of LAEMS (laser atomic emission multichannel spectrometer) developed and manufactured in the Belarusian State University at the department of laser physics and spectroscopy of the physics faculty and the spectroscopy laboratory of the A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems. A solid-state laser with semiconductor pumping is used as a source of excitation. The use of semiconductor pumping instead of pulse lamp pumping allows to increase the system resources and stability of output characteristics significantly [7].

The laser consists of two radiator and provides the generation of double pulses with the following characteristics: the duration of pulses is 15 ns, pulse energy variation range is 0–100 mJ, the range of variation of the delay duration between double laser pulses is 1–100 ns, pulse pair repetition rate is up to 10 Hz. The other analytical characteristics of the laser include spectral range (190–800 nm), spectral resolution (0.5 nm), the diameter of the laser beam on a sample surface (50 μm), dimensions of the analysed samples (200 × 200 × 200 mm), positioning accuracy on a sample surface (100 μm), the number of chemical elements to be determined (50). The sample is placed on a table moved along the beam using a linear low-profile positioned platform (manual movement), and in two directions perpendicular to the beam using linear motorised positioned platforms, which provides the possibility of computer-controlled scanning of the sample surface.

To register plasma spectra, spectrometers with registration on a CCD ruler are used: based on the SDH-1 polychromator (the spectral range is 190–800 nm, the resolution is 0.1 nm with a width of the simultaneously recorded spectral range of 130 nm) and a lattice spectrometer of the original design.

Main parameters of LAEMS:

- plasma excitation source – two-pulse diode-pumped Nd : YAG laser with pulse repetition frequency 10 Hz and wavelength 1064 nm;
- pulse duration 10 ns;
- interpulse interval (Δt) 0–100 μs (step 1 μs);
- range of analysed wavelengths 260–760 nm;
- laser pulse energy (E_{imp}) 10–100 mJ.

The specialised software of the LAEMS spectrometer allows you to set the following parameters:

- mode of single (time shift between pulses is 0 μs, i. e. both pulses act on the surface of the sample simultaneously) and dual laser pulses (the time interval between pulses can vary from 1 to 100 μs with a step of 1 μs).

It should be noted that when using LAEMS, the transition from single to double laser pulses occurs without changing the total energy and radiation power;

• number of pulses per point, while you can additionally set the number of pre-firing pulses – pulses that affect the surface before the main ones, but the spectrum from them is not recorded. The use of pre-firing pulses is necessary when examining samples whose surface is covered with visible impurities, oxides, rust, patina;

• energy of dual laser pulses and their repetition rate.

The software allows you to move the subject table with a fixed sample in two planes (up-down, left-right). Also the microscope mode in conjunction with LED illumination and an aiming laser allows you to accurately determine the method of laser radiation exposure to a sample, which is necessary when examining finished industrial products, art objects and artefacts, jewelry, samples whose dimensions are not exceed a few millimeters. The destruction of the sample surface was monitored using a Linnik MII-4 microinterferometer (*LOMO*, Russia).

The objects of the study were 200 specimens of artifacts (from the collections of the Museum of Historical Faculty of the Belarusian State University, the collections of the Institute of History of the National Academy of Sciences of Belarus, the National Historical Museum of the Republic of Belarus, and private collections) found on the territory of Belarus during archaeological excavations dating back to the 5th century BC – 15th century AD. The objects under study belonged to different time periods, but they were united by the fact that they had been underground for a long time and were covered with a significant layer of patina, scale, rust and other compounds and impurities, which made it impossible to visually determine the colour of the original compound (white, yellow metal, copper-based alloys). Photos of some of the studied old samples covered with patina, rust, scale are shown in fig. 1.



Fig. 1. Photos of some of the studied old samples covered with patina, rust, scale

Results and discussion

At the first stage of the study, a qualitative analysis of the samples was carried out: elements were determined, analytical lines were selected (two for each element). It was found that some of the artifacts consist of pure metals – copper, lead, tin. These samples were combined into a separate group in order to compare laser ablation of modern and ancient products that have been exposed to long-term exposure to natural conditions and soils. A complete list of elements found in the studied samples includes silver, copper, zinc, tin, lead, iron. Modern standard samples corresponding to the composition of artifacts were selected.

The optimal parameters of laser radiation, providing maximum spectral line intensity, were determined during laser ablation of modern samples (the energy of laser pulses was 100 mJ, the time interval between double laser pulses was from 7 to 12 μs (depending on the metal)). It should be noted that the transition from the single-pulse mode ($\Delta t = 0$ μs; two laser pulses simultaneously act on the surface) to the double-pulse mode leads to a multiple increase in the analytical signal (up to 10 times). Similar measurements were carried out for

artifacts, in the absence of samples of pure metals, ablation of alloys was carried out, where the content of the element under study was maximum close to 100 % (80–98 %). The values of the optimal interpulse interval for two-pulse laser ablation of metals, as well as the magnitude of the increase in the analytical signal are given in table 1.

Table 1

The optimal interpulse interval, providing maximum spectral line intensity, for two-pulse laser ablation of metals and the magnitude of the increase in the analytical signal

Sample	Chemical element					
	Silver	Copper	Iron	Tin	Lead	Zinc
Optimal interpulse interval, providing maximum analytical signal, μs						
Ancient	8	10	10	6	6	9
Modern	9	11	12	8	7	10
The magnitude of the increase in the analytical signal						
Ancient	6–7	6–7	5–6	6–7	7–8	6–7
Modern	7–8	7–8	6–7	9–10	9–10	8–9

It can be seen from the table 1 that the transition from single-pulse to double-pulse excitation leads to a smaller increase in the analytical signal for ancient samples. In addition, for all alloy components, the optimal value of the interpulse interval is lower in the case of artifacts, which may indicate a porous structure of the products, as a result of which less substance enters the plasma, the plasma is less dense, and therefore it is more efficient to additionally excite it at earlier stages of expansion. In favour of the hypothesis of the porous structure of ancient samples, the fact that in most cases the intensity of the spectral lines of artifacts is significantly lower (sometimes by almost 50 %) compared to modern samples can also testify. In this regard, when carrying out a quantitative analysis of ancient samples that have been under the influence of moisture and soil for a long time, it is fundamental to use two-pulse LIBS. Otherwise, the analysis error will increase, especially when determining third elements and impurities. The optimal time interval between dual laser pulses, which provides the maximum sensitivity of LIBS for the analysis of metal artifacts, is 8 μs. In the case of modern samples, this interval is 10 μs.

The next stage of the study consisted in the development of a method for determining the thickness of scale, patina, rust and other contaminant compounds on the surface of the sample, it makes possible to set the number of prepulses during which the spectrum is not recorded. At first, a layer-by-layer qualitative elemental analysis of the samples was carried out on a LAEMS spectrometer: the spectra from each double laser pulse were recorded and the intensity dynamics of the spectral lines was compared. The transition from scale, patina and rust to uncontaminated metal in all cases led to a significant increase in the relative intensity of the spectral lines, with further ablation the analytical signal remained practically unchanged. At the second stage of the study, two-pulse laser ablation of the samples was carried out, and the number of pulses per point in each case corresponded to the ablation of only patina (10 pulses), scale (14 pulses) and rust (22 pulses), and did not affect the uncontaminated metal. The dimensions of the craters formed as a result of ablation were measured using a Linnik MII-4 microinterferometer. Similarly, craters, which are formed on the previously cleaned surfaces of copper, iron and brass, were measured. The measurement results are shown in table 2.

Table 2

Results of laser ablation of metal surfaces by double laser pulses

Parameters	Chemical element		
	Copper	Brass	Iron
Thickness of the metal layer evaporated by 1 double laser pulse, μm	3	3	2
Compound on the surface of the sample	Patina	Scale	Rust
Number of laser pulses for which complete ablation was performed	10	14	22
Thickness of the compound layer on the sample surface, μm	26	36	38
The thickness of the evaporated layer of the compound for 1 double laser pulse, μm	2.4	2.6	1.9

Undoubtedly, in each specific case, the thickness of the considered joints on the surface of the sample may differ. However, the data obtained will make it possible to approximately estimate the required number of pre-firing pulses. Of particular difficulty in the analysis are samples covered with scale as a result having spent a long time in a funeral pyre or fire. As the study showed, such samples do not have a sharp boundary between the connection on the surface and the original alloy of the product (fig. 2).

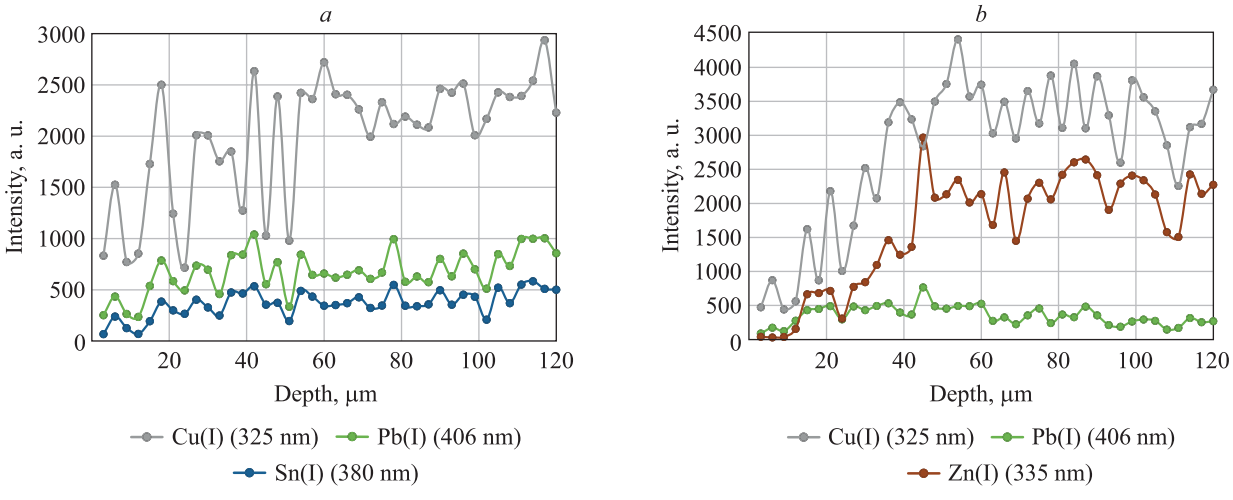


Fig. 2. Dependence of the relative intensity of the spectral lines of artifact components on the depth of laser ablation for a sample covered exclusively with patina (*a*) and scale (*b*)

The dependence of the relative intensity of the spectral lines of copper, lead and tin on the depth of laser ablation for a sample covered only with patina is shown in fig. 2, *a*. The coverage boundary in this case can be taken as 55 μm: after reaching this depth, the fluctuations in the relative intensity of the spectral lines become much smaller for all elements. In the case of scale (see fig. 2, *b*), the coating boundary can also be determined (42 μm). However, even after this depth, periodic changes in the analytical signal by almost 1.5 times are observed, which indicates the presence of pores and caverns 3–9 μm in size in this artifact.

In this regard, a number of limitations on quantitative analysis should be highlighted. So, when examining a sample covered only with patina, it is necessary to determine the thickness of this coating (usually 25–55 μm) in order to set the appropriate number of prepulses. However, the same number of prepulses must also be used in the ablation of standard samples when constructing calibration curves. Otherwise, the evaporation of the substance from the studied and standard samples will occur from different depths of the crater, which will affect the process of plasma propagation, and, as a result, the magnitude of the analytical signal. Unfortunately, the standard approach to analysis based on calibration curves is not suitable for scale-coated samples. Due to sharp jumps in intensity, and due to a lower analytical signal, a certain concentration of the components will be significantly lower than the real one, and the total concentration will be less than 100 %. In this case, non-calibration methods may turn out to be more effective, however the total analytical signal for several 10 pulses cannot be used, since averaging will lead to an increase in the analysis error.

It should be noted that the analysis of samples of fusible tin and lead that have been on fire is of difficulty. Even outwardly, these artifacts resemble a porous sponge, and not a metal product. The study of the dynamics of the intensity of the spectral lines of these elements in depth does not allow one to accurately determine the boundaries of the coverage. The dependence of the relative intensity of the spectral lines of tin and lead on the depth of laser ablation for a sample covered with a visible layer of scale is shown in fig. 3.

Separately, a group of artifacts made of iron-based alloys coated with a layer of rust was studied. This type of coating, unlike patina, is more heterogeneous even within the same sample, so it is necessary to create a technique that would allow to determine the approximate value of laser prepulses visually. For the study, three samples were selected with varying degrees of surface coverage with rust: sample 1 covered a visually thin layer of iron hydroxide with small gray spots, related to intact metal; sample 2 covered visually thick homogeneous layer of red-brown colour; sample 3 covered heterogeneous red-brown layer with a pronounced relief. The thickness of the rust for each sample was determined from the change in the relative intensity of the spectral lines of chromium, nickel, manganese, and iron during layer-by-layer two-pulse laser ablation. Upon reaching the intact alloy, the intensity of the spectral lines of all elements increased and became more stable (fluctuations did not exceed 3 %). The measurements carried out showed that the thickness of the iron hydroxide layer on the surface of the studied samples is 9–10 μm (sample 1), 22–23 μm (sample 2), 44–45 μm (sample 3). However, it should be noted that in

the sample 3, the thickness of rust, both visually and measured as a result of the experiment, differed significantly (from 40 to 61 μm). With an increase in the thickness of rust, its heterogeneity also increases: cavities appear in size from 2 μm with a rust thickness of 10 μm, up to 5 μm at a depth of 50 μm.

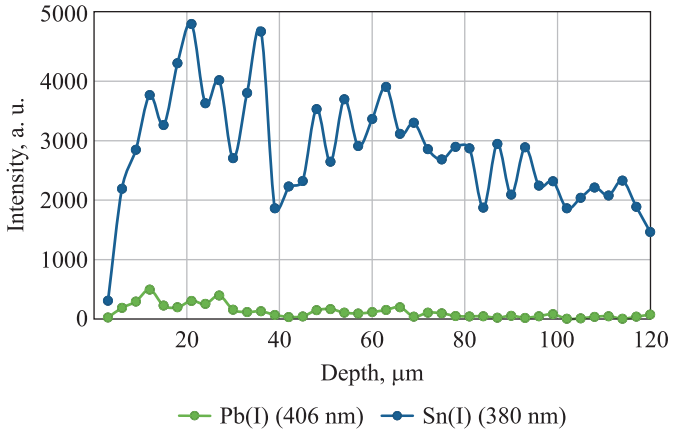


Fig. 3. The dependence of the relative intensity of the spectral lines of tin and lead on the depth of laser ablation for a product covered with a visible layer of scale

Based on the studies carried out, methods were developed for the quantitative analysis of artifacts dating back to the 3rd–4th centuries AD, found during excavations on the territory of the settlement of Domatovo near Turov. A significant layer of patina is visually noticeable on the surface of the samples, and scales are noticeable on the samples from the funeral pyres. The developed technique made it possible to determine the thickness of the joints on all samples (35–50 μm) and scale (40–52 μm). Taking into account the layer of compounds on the surface, the number of pre-firing pulses during the quantitative analysis of artifacts was 25.

Accurate determination of the thickness of the patina using two-pulse laser atomic emission spectroscopy allows us to draw a conclusion about the environment in which the ancient coin was located for a long time (a dry place, peat bog soils, clays, etc.). The results of the concentrations of the main elements were subsequently used by the staff of the Institute of History of the National Academy of Sciences of Belarus, the National Historical Museum of the Republic of Belarus, the Museum of Historical Faculty of the Belarusian State University to clarify and establish time limits for the origin of artifacts.

Conclusions

Double-pulse LIBS is the preferred method for the analysis of metal samples covered with patina, scale, rust, because it allows not only to clean the surface directly during the study, but also to estimate the thickness of the layer of these compounds. It was found that during laser ablation of scale and patina, the thickness of the evaporated layer is much lower than when exposed to the cleaned surface of metals, which is caused by the infusibility of these compounds. The process of laser ablation of rust is more complex, hydrated iron oxide and iron metahydroxide are porous materials. In addition, it is necessary to take into account the fact that the thickness of the rust, even in localised nearby surface areas, may differ.

References

1. Musazzi S, Perini U. *Laser-induced breakdown spectroscopy.* Berlin: Springer; 2014. 565 p. DOI: 10.1007/978-3-642-45085-3.

2. Galbács G. *Laser-induced breakdown spectroscopy in biological, forensic and materials sciences.* Berlin: Springer; 2022. 313 p.

3. Alberghina MF, Barraco R, Brai M, Schillaci T, Tranchina L. Integrated analytical methodologies for the study of corrosion processes in archaeological bronzes. *Spectrochimica Acta. Part B: Atomic Spectroscopy.* 2011;66(2):129–137. DOI: 10.1016/j.sab.2010.12.010.

4. Abdelhamid M, Grassini S, Angelini E, Ingo GM, Harith MA. Depth profiling of coated metallic artifacts adopting laser-induced breakdown spectrometry. *Spectrochimica Acta. Part B: Atomic Spectroscopy.* 2010;65(8):695–701. DOI: 10.1016/j.sab.2010.03.017.

5. Pitarch A, Queralt I, Alvarez-Perez A. Analysis of Catalonian silver coins from the Spanish war of independence period (1808–1814) by energy dispersive X-ray fluorescence. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* 2011;269(3):308–312. DOI: 10.1016/j.nimb.2010.11.045.

6. Huletski DV, Ermalitskaia KF. Laser microanalysis of corroded ancient silver-copper coins. *Vestnik BGU. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika.* 2016;2:21–25. Russian.

7. Voropay ES, Gulis IM, Tarasau DS, Ermalitskaia KF, Samtsov MP, Radko AE, et al. Laser atomic emission spectrometer with achromatic optical system. *Journal of Applied Spectroscopy.* 2021;88(3):603–609. DOI: 10.1007/s10812-021-01215-2.

Received 03.01.2023 / revised 20.01.2023 / accepted 20.01.2023.

Приборы и методы исследований

Research instruments and methods

УДК 004.932.2, 528.7, 528.8

ДИСТОРСИЯ ФОТОАППАРАТУРЫ КАК ФАКТОР УХУДШЕНИЯ КАЧЕСТВА СШИВКИ И ГЕОПРИВЯЗКИ РЕГИСТРИРУЕМЫХ С БОРТА МЕЖДУНАРОДНОЙ КОСМИЧЕСКОЙ СТАНЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕМЛИ

***А. А. ЛОМАКО*[1)], *Ю. С. ДАВИДОВИЧ*[1)], *И. В. РАССКАЗОВ*[2)]**

[1)]*Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Ракетно-космическая корпорация «Энергия» им. С. П. Королёва, ул. Ленина, 4а, 141070, г. Королёв, Россия*

Проведена оценка влияния дисторсии фотоаппаратуры, установленной на борту Международной космической станции, на результаты автоматического совмещения и автоматизированной геопривязки изображений поверхности Земли. Описаны использованный подход к коррекции дисторсии на изображениях и методы автоматической

Образец цитирования:
Ломако АА, Давидович ЮС, Рассказов ИВ. Дисторсия фотоаппаратуры как фактор ухудшения качества сшивки и геопривязки регистрируемых с борта Международной космической станции изображений поверхности Земли. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:85–94.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-85-94

For citation:
Lamaka AA, Davidovich YS, Rasskazov IV. Photographic equipment distortion as the quality degradation factor of the International Space Station onboard images of the Earth surface stitching and georeferencing. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:85–94. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-85-94

Авторы:
Алексей Андреевич Ломако – научный сотрудник лаборатории дистанционной фотометрии отдела аэрокосмических исследований.
Юрий Сергеевич Давидович – стажер младшего научного сотрудника лаборатории оптико-физических измерений отдела аэрокосмических исследований.
Игорь Владимирович Рассказов – инженер 1-й категории.

Authors:
Aliaksei A. Lamaka, researcher at the laboratory of remote photometry, department of aerospace research.
alekseylomako@gmail.com
https://orcid.org/0000-0002-8535-8882
Yury S. Davidovich, probationer of junior researcher at the laboratory of optical and physical measurment, department of aerospace research.
seg98001@gmail.com
https://orcid.org/0000-0002-8524-8683
Igor V. Rasskazov, engineer of the 1st category.
igor.rasskazov1@rsce.ru
https://orcid.org/0000-0001-9426-7854

CC BY NC

сшивки изображений с помощью библиотеки компьютерного зрения OpenCV, а также методы автоматизированной геопривязки изображений на основе их соотнесения с геопривязанными спутниковыми данными Sentinel-2 с применением программного комплекса *ArcGIS*. Представлены результаты оценки ошибок сшивки фотоизображений с проведением коррекции дисторсии и без нее при использовании различных алгоритмов выделения особых точек. Получены оценки невязок автоматизированной геопривязки при использовании различных методов растрового трансформирования данных, и выполнено сравнение результатов для изображений с коррекцией дисторсии и без нее. Показана необходимость проведения коррекции дисторсии для фотоизображений, получаемых с борта Международной космической станции.

Ключевые слова: компьютерное зрение; панорамное изображение; детекторы точек; дескрипторы точек; *ArcGIS*.

PHOTOGRAPHIC EQUIPMENT DISTORTION AS THE QUALITY DEGRADATION FACTOR OF THE INTERNATIONAL SPACE STATION ONBOARD IMAGES OF THE EARTH SURFACE STITCHING AND GEOREFERENCING

A. A. LAMAKA [a], ***Y. S. DAVIDOVICH*** [a], ***I. V. RASSKAZOV*** [b]

[a] *A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University, 7 Kurčatava Street, Minsk 220045, Belarus*
[b] *S. P. Korolev Rocket and Space Corporation «Energia», 4a Lenina Street, Korolev 141070, Russia*

Corresponding author: A. A. Lamaka (alekseylomako@gmail.com)

The work is devoted to assessing the influence of the photographic equipment installed on board of the International Space Station distortion effects on the results of the Earth's surface images recorded by this photographic equipment automatic alignment, as well as on the results of automated georeferencing. The used approach to distortion correction in images is described. The methods used for automatic image stitching using the OpenCV computer vision library, as well as methods for automated images georeferencing based on their correlation with Sentinel-2 geotagged satellite data using the *ArcGIS* software package, are described. The results of estimating the errors of photographic images stitching using various algoritms for highlighting singular points in images are presented with a comparison of data with and without distortion correction. The results of estimating the residuals of automated georeferencing using various methods of raster data transformation are presented with a comparison of the results for images with and without distortion correction. The need for distortion correction for photographic images obtained from the International Space Station is shown.

Keywords: computer vision; panoramic image; point detectors; point descriptors; *ArcGIS*.

Введение

Фотоизображения поверхности Земли, получаемые с помощью спутниковых систем, в современных условиях становятся основным источником данных, важных для жизнедеятельности человека. Так, системы космического базирования используются для выявления очагов природных пожаров, контроля пожарной опасности торфяных массивов, оценки последствий крупномасштабных чрезвычайных ситуаций [1], мониторинга топливно-энергетического комплекса [2], источников океанских кольцевых волн [3], ледяного покрова морей [4], зон затопления при паводках и многих других задач.

В рамках космического эксперимента «Ураган» на борту российского сегмента (РС) Международной космической станции (МКС) с 2019 г. работает созданная в Институте прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ по контракту с ПАО «Ракетно-космическая корпорация "Энергия" имени С. П. Королёва» система ориентации видеоспектральной аппаратуры (СОВА), основной задачей которой является автоматическое наведение поля зрения научной аппаратуры – видеоспектральной системы [5] и фотоаппаратов Nikon D5 с различными объективами – на объекты земной поверхности и их съемка [6]. Ориентирование поля зрения аппаратуры производится с помощью специального программного обеспечения СОВА, которое использует метод прогнозирования углов ориентации, учитывающий крены МКС [7]. Применение СОВА дает возможность получать связанные серии изображений поверхности Земли с метаданными, обеспечивающими предварительную грубую геопривязку изображений.

После регистрации фотоизображений или спектральных данных объектов поверхности Земли с использованием систем космического базирования производится их наземная обработка, в том числе атмосферная коррекция [8; 9] и геопривязка [10]. Для некоторых задач также выполняется сшивка нескольких изображений в мозаику.

Известно, что дисторсия фотосистем может оказывать существенное влияние на изображения, регистрируемые такими системами [11]. Так, например, для камер, устанавливаемых на беспилотные летательные аппараты, коррекция эффекта дисторсии позволяет снизить ошибку автоматического совмещения изображений на 12,5 % [12].

Искажения в изображениях, вызываемые дисторсией фотоаппаратуры высокого качества, часто незаметны для человеческого глаза. Сшивка и геопривязка получаемых с борта МКС изображений могут быть выполнены без предварительной коррекции дисторсии. Тем не менее коррекция обусловленных дисторсией искажений может повысить точность как сшивки, так и геопривязки данных изображений. Настоящее исследование посвящено оценке влияния дисторсии фотоаппаратуры на качество автоматического совмещения и автоматизированной геопривязки регистрируемых с борта МКС изображений поверхности Земли. Целями исследования были анализ необходимости проведения коррекции обусловленных дисторсией искажений в получаемых с борта МКС изображениях для решения обозначенных выше задач и поиск наилучших методов выделения и описания особых точек для автоматического совмещения изображений.

Материалы и методы исследования

Степень влияния дисторсии на результаты обработки изображений в настоящей работе оценивается для установленной на борту РС МКС фотоаппаратуры – камеры Nikon D5 с объективом AF-S Nikkor 200–400 мм. Наиболее часто используется конфигурация с фокусным расстоянием, равным 400 мм. Для аналогичной конфигурации оборудования проведен лабораторный эксперимент по определению коэффициентов радиальной и тангенциальной дисторсии с применением библиотеки компьютерного зрения OpenCV. В качестве калибровочной миры в этом эксперименте использовалась специальная шахматная доска (формат А4, размерность 12 × 8 квадратов), в белых квадратах которой расположены графические коды, позволяющие загородить бóльшую часть доски, сохранив возможность точно определить положение углов доски (ChArUco) [11].

Для анализа были выбраны два набора снимков – изображения территории штата Калифорния (США) и изображения территории Амурской области (Россия), зарегистрированные в декабре 2020 г. (всего 25 снимков). За счет различий представленной на снимках местности обеспечивалась разнородность данных для анализа: на изображениях территории штата Калифорния присутствует множество линейных объектов антропогенного происхождения, а на изображениях территории Амурской области преобладают природные объекты, имеющие нелинейную форму.

Для сшивки фотоизображений может использоваться широкий спектр алгоритмов. Наиболее распространенными на сегодняшний день являются методы, основанные на поиске особых точек с описанием их характеристик дескрипторами (как правило, дескриптор – это вектор, который определенным образом описывает особую точку и дает возможность сравнивать различные точки между собой [11]). Существует множество алгоритмов (детекторов), позволяющих выделять особые точки на изображениях. В настоящей работе применялись детекторы Star, или CenSurE (*center surround extremum*) [13]), BRISK (*binary robust invariant scalable keypoints*) [14] и ORB (*oriented FAST and rotated BRIEF*) [15]. Большинство детекторов обладают собственными вычислителями дескрипторов, однако в исследовании также был использован дополнительный вычислитель дескрипторов FREAK (*fast retina keypoint*) [16], так как в некоторых случаях его комбинация с другими методами работает лучше, чем эти методы индивидуально [12]. Кроме того, детектор Star не имеет собственного вычислителя дескрипторов. Для поиска совпадений особых точек на двух изображениях применялся метод сопоставления полным перебором с метрикой Хэмминга [11]. Дополнительная фильтрация совпадений проводилась с использованием авторского метода, основанного на анализе распределений значений смещения особых точек в совмещаемых изображениях [12].

Анализ качества сшивки снимков проводился по парам последовательно зарегистрированных пересекающихся изображений поверхности Земли. На каждом изображении из пары с помощью описанных выше детекторов выделялись 10 000 особых точек, по которым осуществлялось гомографическое преобразование одного из изображений (данные, получаемые с использованием СОВА, регистрируются под различными углами к поверхности Земли, что вызывает линейные геометрические искажения). После этого в трансформированном изображении снова выделялись особые точки, и по дескрипторам определялись совпадающие точки на трансформированном и нетрансформированном изображениях (рис. 1).

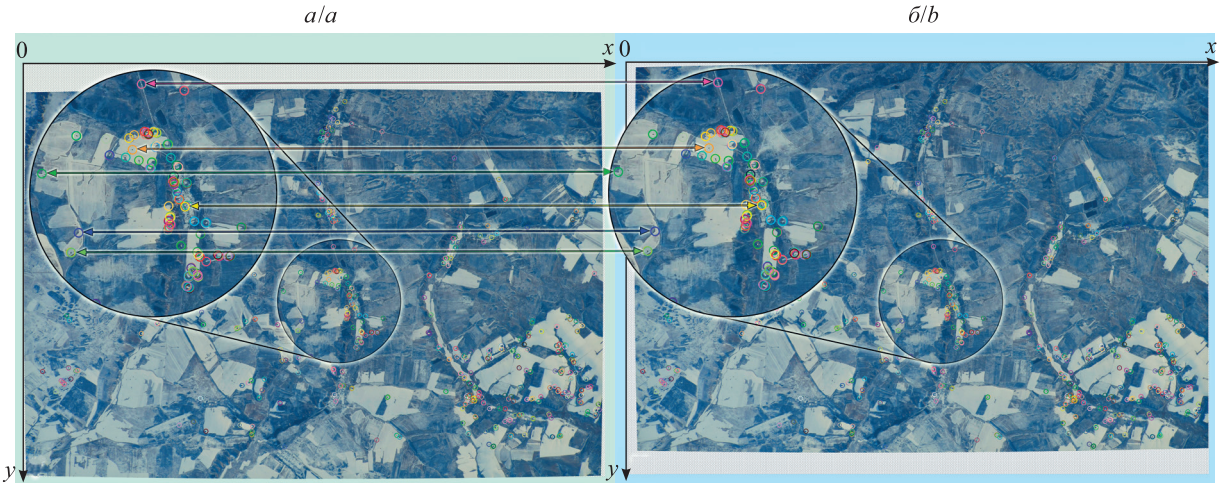


Рис. 1. Сопоставление двух изображений с выделением особых точек (детектором ORB):
а – нетрансформированное изображение; *б* – трансформированное изображение

Fig. 1. Comparison of two images with the search for keypoints (ORB detector):
a – untransformed image; *b* – transformed image

Таким образом, формировался список из пар особых точек. Далее для каждой из пар точек вычислялось расстояние в пикселях между ними при наложении изображений на одну и ту же координатную плоскость *xOy*. Среднеквадратичное значение такого расстояния для всех пар точек из списка принималось за ошибку комбинирования двух изображений.

В качестве основы для геопривязки фотоизображений, получаемых с борта МКС, использовались регистрируемые спутниковой системой Sentinel-2 (*developers.planet.com/docs/data/sentinel2l1c*) RGB-изображения формата GeoTIFF с проведенной цветокоррекцией для прикладных задач визуализации. Точность наведения СОВА с борта МКС на объекты поверхности Земли позволяет осуществлять поиск спутниковых данных для первичной грубой геопривязки по координатам объекта наведения. За счет высокой периодичности съемки Sentinel-2 одних и тех же территорий удалось выделить безоблачные изображения на даты, близкие к датам съемки с борта МКС. Конечная геопривязка изображений осуществлялась с помощью инструмента «Автоматическая пространственная привязка растра» программного комплекса *ArcGIS* (*desktop.arcgis.com*). В качестве методов смещения растровых данных использовались интерполирующие полиномы различных порядков, подгонка, сплайн-интерполяция, а также метод проективного преобразования [17].

Показателем для оценки качества геопривязки является общая среднеквадратическая ошибка, вычисляемая как квадратный корень из суммы квадратов ошибок всех связей между привязываемым изображением и снимком с известными координатами. Данное значение характеризует степень согласования трансформации между всеми опорными точками (связями). Таким образом, этот параметр не говорит о точности геопривязки, а только указывает на успешность трансформации одного изображения по отношению к другому изображению при заданных начальных условиях (выбранных опорных точках). Тем не менее, так как в настоящем исследовании опорные точки выбираются автоматически и в большинстве случаев являются идентичными для изображений с коррекцией дисторсии и без нее, описанный параметр невязки можно использовать для сравнительной оценки влияния дисторсии на результат геопривязки.

Результаты и их обсуждение

На основе исходных фотоизображений сформирован ряд данных, представляющий собой набор из 22 пар пересекающихся изображений размером 5568 × 3712 пк, которые были зарегистрированы с борта МКС камерой Nikon D5 с объективом AF-S Nikkor 200–400 мм (для всех изображений фокусное расстояние составляло 400 мм) с применением СОВА. Для изображений с коррекцией дисторсии и без нее определены ошибки комбинирования при использовании различных детекторов и вычислителей дескрипторов особых точек. Полученные результаты представлены на рис. 2.

Как видно из рис. 2, при применении всех рассмотренных детекторов и вычислителей дескрипторов изображения с коррекцией дисторсии демонстрируют лучшие результаты при сшивке, чем изображения без коррекции дисторсии, как по средним значениям ошибок, так и по разбросу этих значений. При использовании детектора BRISK с собственным вычислителем дескрипторов среднее значение ошибок комбинирования изображений без коррекции дисторсии превышает аналогичную величину для изображений с коррекцией дисторсии на 23 % (0,84 пк), при использовании детектора Star с вычислителем дескрипторов

FREAK – на 29 % (1,41 пк), при использовании детектора ORB с собственным вычислителем дескрипторов – на 38 % (1,08 пк), а при использовании детектора ORB с вычислителем дескрипторов FREAK – на 39 % (1,30 пк). Такое различие среднего значения ошибок можно считать существенным, что говорит о важности проведения коррекции дисторсии перед выполнением автоматического совмещения изображений.

Помимо влияния дисторсии на результаты комбинирования изображений, проведенное исследование позволяет оценить качество работы различных детекторов и вычислителей дескрипторов особых точек применительно к сшивке изображений земной поверхности, регистрируемых с борта МКС. Средние ошибки сшивки изображений с проведением коррекции дисторсии отличаются достаточно существенно. Так, средняя ошибка, полученная при использовании детектора и вычислителя дескрипторов BRISK, на 32 % (0,90 пк) превышает среднюю ошибку, полученную при использовании детектора и вычислителя дескрипторов ORB. Наименьшую среднюю ошибку сшивки регистрируемых с борта МКС изображений обеспечивает применение детектора ORB в совокупности с собственным вычислителем дескрипторов. Однако при использовании совместно с детектором ORB вычислителя дескрипторов FREAK разброс

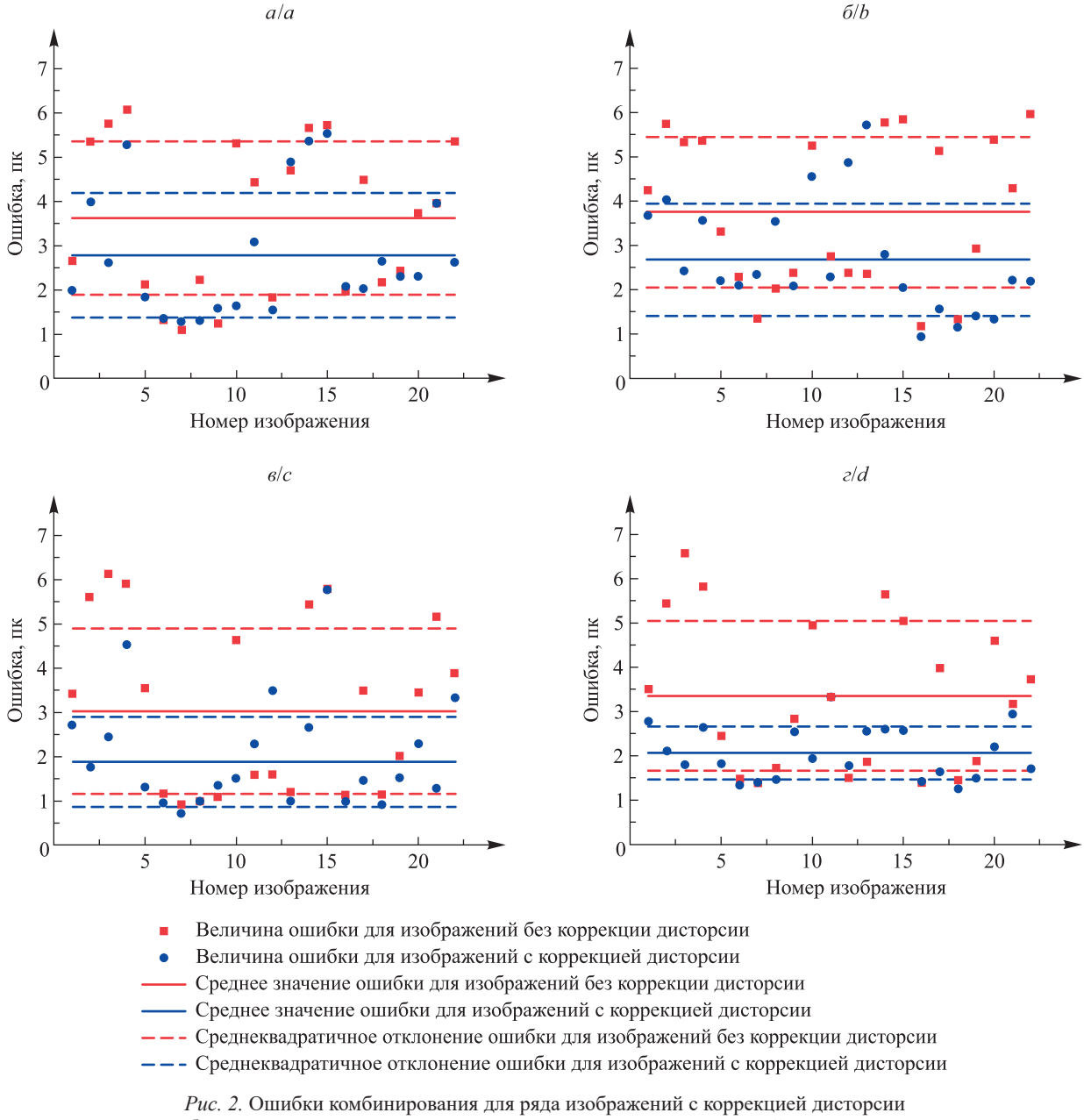


Рис. 2. Ошибки комбинирования для ряда изображений с коррекцией дисторсии и без нее при использовании различных детекторов и вычислителей дескрипторов:
а – BRISK; *б* – Star + FREAK; *в* – ORB; *г* – ORB + FREAK

Fig. 2. Combination errors for a number of images with and without distortion correction using different detectors and descriptor calculators:
a – BRISK; *b* – Star + FREAK; *c* – ORB; *d* – ORB + FREAK

значений ошибки уменьшается в 1,7 раза (на 0,40 пк) при увеличении среднего значения ошибки всего в 1,1 раза (на 0,18 пк). Средние ошибки сшивки изображений без проведения коррекции дисторсии отличаются менее значительно. Наибольшие различия (19 % (0,70 пк)) отмечены для детектора Star с вычислителем дескрипторов FREAK и детектора ORB с собственным вычислителем дескрипторов. На основании определенных величин ошибок можно сделать вывод, что в задаче сшивки изображений земной поверхности наилучшим из рассмотренных вариантов является комбинация детектора ORB с вычислителем дескрипторов FREAK.

Для геопривязки 25 изображений, полученных с борта МКС, использовались спутниковые изображения Sentinel-2, покрывающие всю область съемки объекта, координаты которого были заданы в космическом эксперименте на борту РС МКС при регистрации данных. Результаты определения невязок при автоматизированной геопривязке с применением программного комплекса *ArcGis* в зависимости от выбранного метода интерполяции при трансформировании изображений с коррекцией дисторсии и без нее представлены на рис. 3. Перед анализом полученных результатов выполнялась проверка на наличие выбросов по критерию Кохрена, в результате чего часть изображений была исключена из выборки.

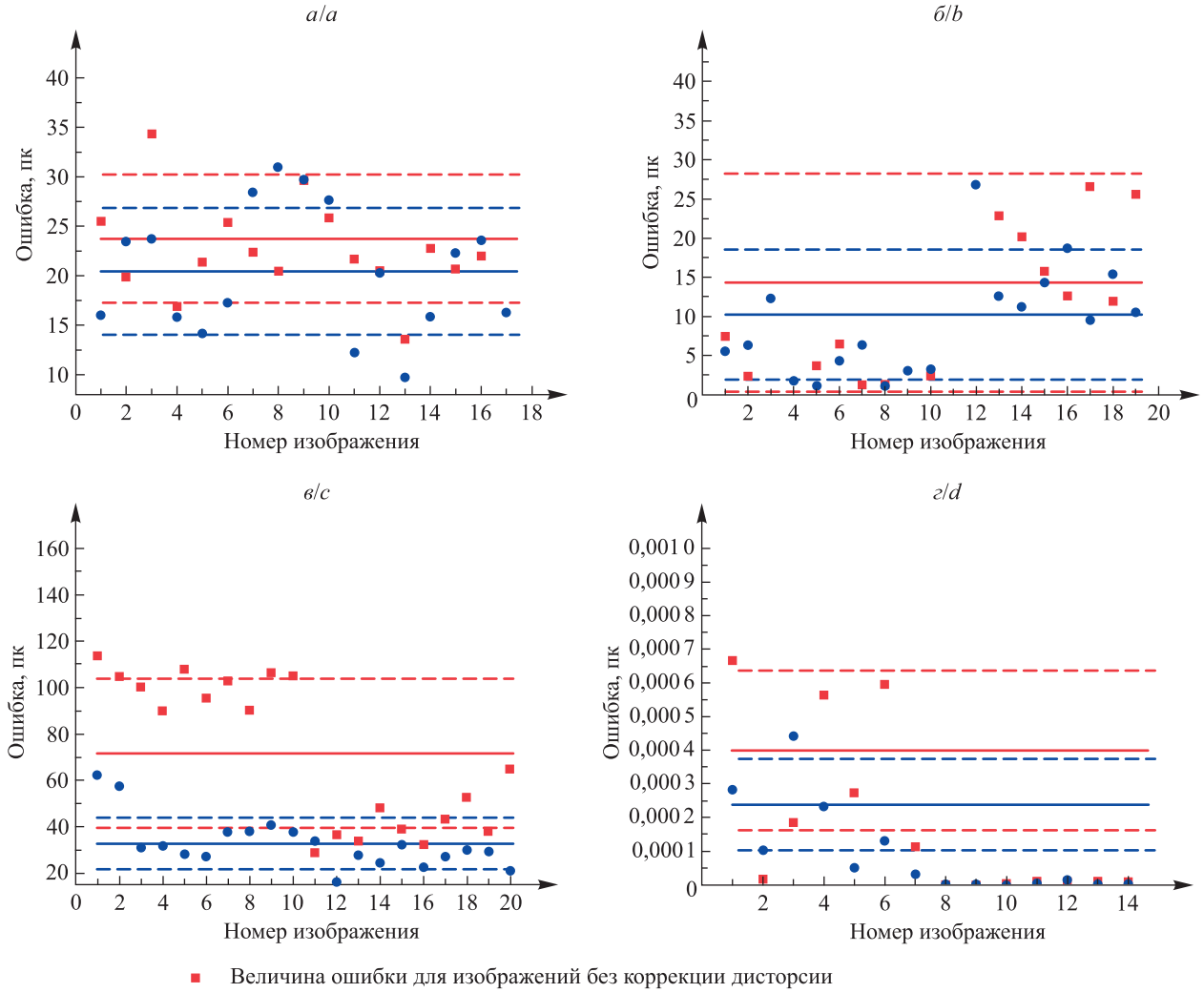


Рис. 3. Невязки геопривязки для ряда изображений с коррекцией дисторсии и без нее при использовании различных методов интерполяции:
а – полиномиальная интерполяция; *б* – подгонка;
в – проективное преобразование; *г* – сплайн-интерполяция

Fig. 3. Georeferencing residuals for a number of images with and without distortion correction using various interpolation methods:
a – polynomial interpolation; *b* – fitting; *c* – projective transformation; *d* – spline interpolation

Как видно из рис. 3, при использовании всех исследованных методов интерполяции коррекция дисторсии на изображениях уменьшает как среднее значение невязок, проявляющихся при автоматизированной геопривязке, так и разброс значений ошибки. Наибольшая разница (54 %) в среднем значении невязок для изображений с коррекцией дисторсии и без нее выявлена в случае применения проективного преобразования, наименьшая (14 %) – в случае применения полиномиальной интерполяции. При использовании подгонки эта разница составила 28 %, а при использовании сплайн-интерполяции – 40 %. Таким образом, дисторсия оказывает существенное влияние на результаты привязки, что говорит о необходимости проведения коррекции дисторсии на этапе предварительной обработки изображений.

Большинство методов автоматизированной геопривязки чувствительны к количеству опорных точек: как правило, чем выше количество опорных точек, тем точнее осуществляется геопривязка. Кроме того, скорость геопривязки с использованием описанного в работе метода на порядок ниже скорости автоматической сшивки изображений. То есть временные затраты на последовательную геопривязку ряда изображений будут в несколько раз превышать временные затраты на сшивку этого ряда изображений и последующую геопривязку комбинированного изображения. Исходя из данного факта, была предпринята попытка геопривязки мозаики из 5 изображений, полученных с борта МКС, к спутниковому изображению Sentinel-2 (рис. 4).

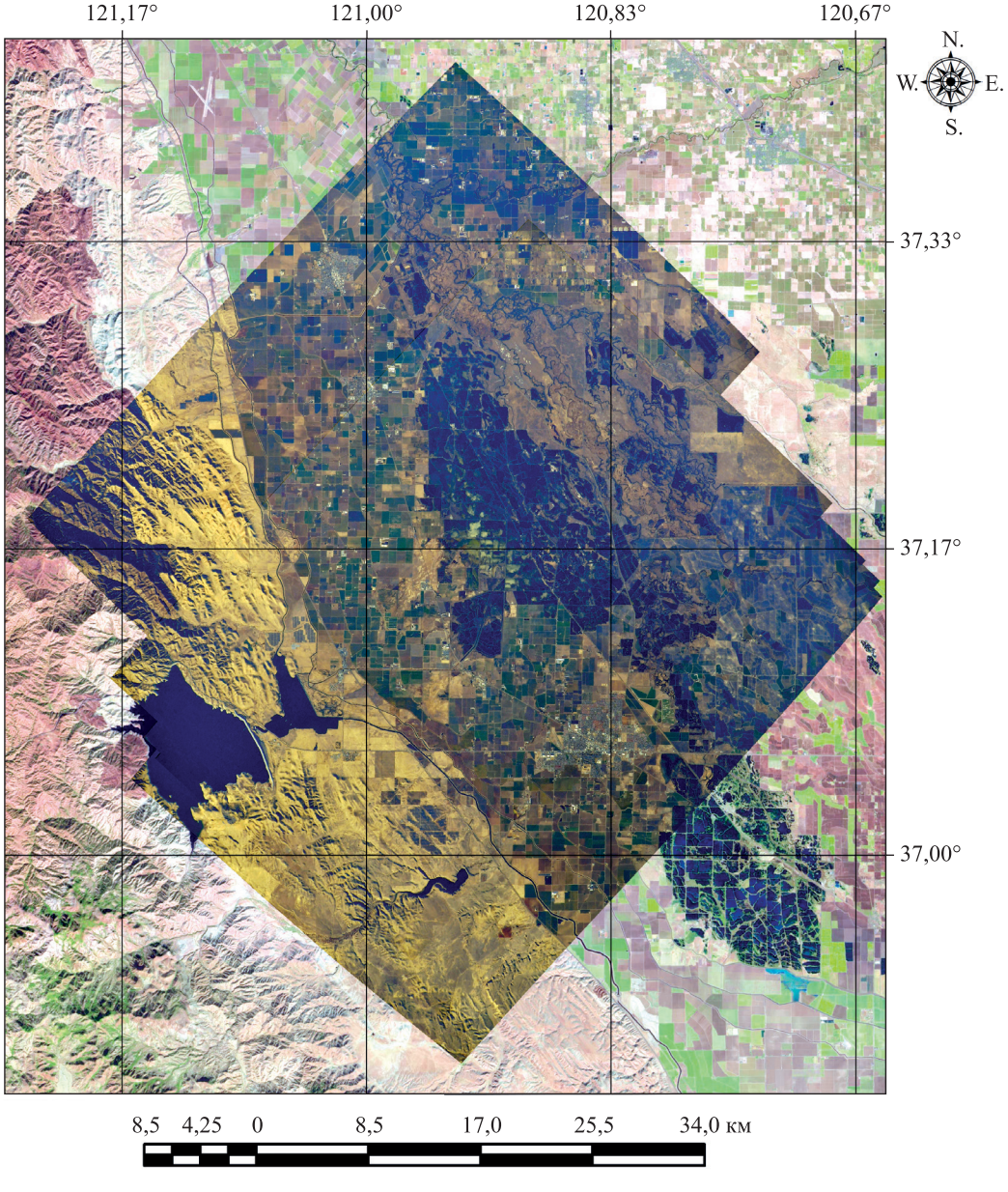


Рис. 4. Геопривязка комбинированного изображения
Fig. 4. Georeferencing of the composite image

Количество опорных точек для геопривязки, детектированных в автоматическом режиме, в комбинированном изображении превышало их количество в отдельных изображениях примерно в 2 раза. Невязки, вычисленные для комбинированного изображения, для всех рассмотренных методов трансформации оказались существенно выше средних значений, представленных на рис. 3, а в случае использования сплайн-интерполяции наблюдалось отклонение от среднего значения на 400 %. Причиной этому могут быть ошибки сшивки изображений на этапе формирования мозаики. Таким образом, предварительное формирование мозаики изображений не дает преимущества при необходимости дальнейшей геопривязки изображения, а, наоборот, вносит искажения, приводящие к увеличению средней величины ошибки геопривязки.

Заключение

Проведенное исследование показало, что дисторсия фотоаппаратуры оказывает существенное влияние на ошибки, которые проявляются при сшивке изображений, получаемых с борта МКС, методами на основе поиска особых точек. При использовании различных комбинаций детекторов и вычислителей дескрипторов особых точек разница в среднем значении ошибки сшивки для изображений с коррекцией дисторсии и без нее варьируется от 23 % (детектор и вычислитель дескрипторов BRISK) до 39 % (детектор ORB и вычислитель дескрипторов FREAK). Наилучшей комбинацией для сшивки изображений, получаемых с борта МКС, является совместное использование детектора ORB и вычислителя дескрипторов FREAK в силу одновременно невысокого среднего значения ошибки сшивки (2,01 пк) и наименьшего среднеквадратичного отклонения ошибки сшивки (0,60 пк).

Дисторсия фотоаппаратуры также оказывает большое влияние на автоматизированную геопривязку изображений, получаемых с борта МКС, к спутниковым изображениям Sentinel-2. При использовании различных методов трансформации изображений разница в среднем значении невязки для изображений с коррекцией дисторсии и без нее варьируется от 14 % (полиномиальная интерполяция) до 54 % (проективное преобразование).

Таким образом, влияние дисторсии на результаты сшивки и геопривязки изображений можно считать существенным, что свидетельствует о необходимости проведения коррекции дисторсии на этапе предварительной обработки изображений.

Автоматизированная геопривязка панорамного снимка, сшитого из ряда изображений, полученных с борта МКС, осуществляется с бóльшими значениями невязки, чем привязка отдельных изображений из данного ряда, несмотря на существенное увеличение количества опорных точек для привязки. Это говорит о целесообразности выполнения геопривязки отдельных изображений вместо выполнения геопривязки комбинированного изображения в случаях, когда точность привязки имеет более высокий приоритет, чем скорость обработки.

Библиографические ссылки

1. Сенюшкин НС, Суханов АВ, Шарина АВ. Особенности системы мониторинга и прогнозирования чрезвычайных ситуаций. *Молодой ученый.* 2010;11(1):120–122.

2. Беляев МЮ, Десинов ЛВ, Караваев ДЮ, Легостаев ВП. Использование съемки земной поверхности с МКС в интересах топливно-энергетического комплекса. *Известия Российской академии наук. Энергетика*. 2013;4:75–90.

3. Беляев МЮ, Виноградов ПВ, Десинов ЛВ, Кумакшев СА, Секерж-Зенькович СЯ. Идентификация по фотоснимкам из космоса источника океанских кольцевых волн вблизи острова Дарвин. *Известия Российской академии наук. Теория и системы управления.* 2011;1:70–83.

4. Кучма МО, Лотарева ЗН, Корнева ЛА, Шамилова ЮА. Применение нейронной сети для детектирования ледяного покрова Дальневосточных морей по данным прибора VIIRS космического аппарата NOAA-20. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2022;19(2):32–42. DOI: 10.21046/2070-7401-2022-19-2-32-42.

5. Беляев БИ, Беляев МЮ, Сармин ЭЭ, Гусев ВФ, Десинов ЛВ, Иванов ВА и др. Устройство и летные испытания научной аппаратуры «Видеоспектральная система» на борту российского сегмента МКС. *Космическая техника и технологии.* 2016; 2:70–79.

6. Беляев БИ, Беляев МЮ, Боровихин ПА, Голубев ЮВ, Ломако АА, Рязанцев ВВ и др. Система автоматической ориентации научной аппаратуры в эксперименте «Ураган» на Международной космической станции. *Космическая техника и технологии.* 2018;4:70–80.

7. Ломако АА, Станчик ВВ, Литвинович ГС, Бручковский ИИ, Беляев БИ, Беляев МЮ. Метод прогнозирования углов ориентации научной аппаратуры при съемке с борта Международной космической станции с использованием платформы наведения. *Доклады БГУИР.* 2021;19(2):22–30. DOI: 10.35596/1729-7648-2021-19-2-22-30.

8. Беляев МЮ, Беляев БИ, Иванов ДА, Катковский ЛВ, Мартинов АО, Рязанцев ВВ и др. Атмосферная коррекция данных, регистрируемых с борта МКС. Часть I. Методика для спектров. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2018;15(6):213–222. DOI: 10.21046/2070-7401-2018-15-6-213-222.

9. Беляев МЮ, Беляев БИ, Иванов ДА, Катковский ЛВ, Мартинов АО, Рязанцев ВВ и др. Атмосферная коррекции данных, регистрируемых с борта МКС. Часть II. Методика для изображений и результаты применения. *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2018;15(6):223–234. DOI: 10.21046/2070-7401-2018-15-6-223-234.

10. Бурцев МА, Волкова ЕЕ, Десинов СЛ, Кудякова СТ. Формирование архива геопривязанных данных МКС на базе ЦКП «ИКИ-Мониторинг» [Интернет]. В: *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. Тезисы 19-й Всероссийской открытой конференции с международным участием; 15–19 ноября 2021 г.; Москва, Россия.* Москва: Институт космических исследований Российской академии наук; 2021 [процитировано 22 ноября 2022 г.]. с. 79. Доступно по: http://conf.rse.geosmis.ru/thesisshow.aspx?page=197&thesis=8961.

11. Кэлер А, Брэдски Г. *Изучаем OpenCV 3.* Слинкин АА, переводчик; Мовчан ДА, редактор. Москва: ДМК Пресс; 2017. 826 с.

12. Ломако АА. Метод формирования панорамных изображений по мультиспектральным данным беспилотного летательного аппарата, учитывающий дисторсию камеры. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2022;2:60–69. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-2-60-69.

13. Agrawal M, Konolige K, Blas MR. CenSurE: center surround extremas for realtime feature detection and matching. In: Forsyth D, Torr P, Zisserman A, editors. *Computer vision – ECCV 2008. Proceedings of the 10th European conference on computer vision; 2008 October 12–18; Marseille, France. Part 4*. Berlin: Springer; 2008. p. 102–115 (Lecture notes in computer science; volume 5305). DOI: 10.1007/978-3-540-88693-8_8.

14. Leutenegger S, Chli M, Siegwart RY. BRISK: binary robust invariant scalable keypoints. In: *2011 International conference on computer vision; 2011 November 6–13; Barcelona, Spain.* [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2011. p. 2548–2555. DOI: 10.1109/ICCV.2011.6126542.

15. Rublee E, Rabaud V, Konolige K, Bradski G. ORB: an efficient alternative to SIFT or SURF. In: *2011 International conference on computer vision; 2011 November 6–13; Barcelona, Spain*. [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2011. p. 2564–2571. DOI: 10.1109/ICCV.2011.6126544.

16. Alahi A, Ortiz R, Vandergheynst P. FREAK: fast retina keypoint. In: *2012 IEEE conference on computer vision and pattern recognition; 2012 June 16–21; Providence, USA.* [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2012. p. 510–517. DOI: 10.1109/CVPR.2012.6247715.

17. ArcGIS Desktop [Internet]. Redlands: Esri; 2021 [cited 2022 November 23]. Available from: https://desktop.arcgis.com/ru/arcmap/latest/tools/data-management-toolbox/warp.htm.

References

1. Senyushkin NS, Sukhanov AV, Sharina AV. [Features of the system for monitoring and forecasting emergency situations]. *Molodoi uchenyi*. 2010;11(1):120–122. Russian.

2. Belyaev MYu, Desinov LV, Karavaev DYu, Legostaev VP. [The use of surveying the Earth's surface from the ISS in the interests of the fuel and energy complex]. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Energetika*. 2013;4:75–90. Russian.

3. Belyaev MYu, Vinogradov PV, Desinov LV, Kumakshev SA, Sekerzh-Zen'kovich SYa. [Identification of the source of oceanic ring waves near Darwin Island based on photographs from space]. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Teoriya i sistemy upravleniya*. 2011;1:70–83. Russian.

4. Kuchma MO, Lotareva ZN, Korneva LA, Shamilova YuA. Sea ice cover detection in the Russian Far Eastern seas using NOAA-20 VIIRS measurements and a neural network. *Current Problems in Remote Sensing of the Earth from Space*. 2022;19(2):32–42. Russian. DOI: 10.21046/2070-7401-2022-19-2-32-42.

5. Belyaev BI, Belyaev MYu, Sarmin EE, Gusev VF, Desinov LV, Ivanov VA, et al. Design and flight tests of science hardware «Video-spectral system» on board the Russian segment of the ISS. *Space Engineering and Technology*. 2016;2:70–79. Russian.

6. Belyaev BI, Belyaev MYu, Borovikhin PA, Golubev YuV, Lamaka AA, Riazantsev VV, et al. Automatic positioning system for science hardware in «Uragan» experiment on the ISS. *Space Engineering and Technology*. 2018;4:70–80. Russian.

7. Lamaka AA, Stanchyk VV, Litvinovich HS, Bruchkousky II, Belyaev BI, Belyaev MYu. Method for orientation angles forecasting of optical instruments from the International Space Station with orientation platform. *Doklady BGUIR*. 2021;19(2):22–30. Russian. DOI: 10.35596/1729-7648-2021-19-2-22-30.

8. Belyaev MYu, Belyaev BI, Ivanov DA, Katkovsky LV, Martinov AO, Riazantsev VV, et al. Atmospheric correction of data registered on board the ISS. Part I. Methodology for spectra. *Current Problems in Remote Sensing of the Earth from Space*. 2018;15(6): 213–222. DOI: 10.21046/2070-7401-2018-15-6-213-222. Russian.

9. Belyaev MYu, Belyaev BI, Ivanov DA, Katkovsky LV, Martinov AO, Riazantsev VV, et al. Atmospheric correction of data registered on board the ISS. Part II. Methodology for images and application results. *Current Problems in Remote Sensing of the Earth from Space*. 2018;15(6):223–234. DOI: 10.21046/2070-7401-2018-15-6-223-234. Russian.

10. Burtsev MA, Volkova EE, Desinov SL, Kudyakova ST. [Formation of the ISS georeferenced data archive on the basis of the Center for Collective Use «IKI-Monitoring»] [Internet]. In: *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa. Tezisy 19-i Vserossiiskoi otkrytoi konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem; 15–19 noyabrya 2021 g.; Moskva, Rossiya* [Current problems in remote sensing of the Earth from space. Abstracts of the 19th All-Russian open conference with international participation; 2021 November 15–19; Moscow, Russia]. Moscow: Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences; 2021 [cited 2022 November 22]. p. 79. Available from: http://conf.rse.geosmis.ru/thesisshow.aspx?page=197&thesis=8961. Russian.

11. Kaehler A, Bradski G. *Learning OpenCV 3*. Sebastopol: O'Reilly Media; 2016. 1024 p.

Russian edition: Kaehler A, Bradski G. *Izuchaem OpenCV 3*. Slinkin AA, translator; Movchan DA, editor. Moscow: DMK Press; 2017. 826 p.

12. Lamaka AA. Considering camera distortion panoramic images forming method for unmanned aerial vehicle multispectral data. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2022;2:60–69. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-2-60-69.

13. Agrawal M, Konolige K, Blas MR. CenSurE: center surround extremas for realtime feature detection and matching. In: Forsyth D, Torr P, Zisserman A, editors. *Computer vision – ECCV 2008. Proceedings of the 10th European conference on computer vision; 2008 October 12–18; Marseille, France. Part 4*. Berlin: Springer; 2008. p. 102–115 (Lecture notes in computer science; volume 5305). DOI: 10.1007/978-3-540-88693-8_8.

14. Leutenegger S, Chli M, Siegwart RY. BRISK: binary robust invariant scalable keypoints. In: *2011 International conference on computer vision; 2011 November 6–13; Barcelona, Spain.* [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2011. p. 2548–2555. DOI: 10.1109/ICCV.2011.6126542.

15. Rublee E, Rabaud V, Konolige K, Bradski G. ORB: an efficient alternative to SIFT or SURF. In: *2011 International conference on computer vision; 2011 November 6–13; Barcelona, Spain*. [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2011. p. 2564–2571. DOI: 10.1109/ICCV.2011.6126544.

16. Alahi A, Ortiz R, Vandergheynst P. FREAK: fast retina keypoint. In: *2012 IEEE conference on computer vision and pattern recognition; 2012 June 16–21; Providence, USA.* [S. l.]: Institute of Electrical and Electronics Engineers; 2012. p. 510–517. DOI: 10.1109/CVPR.2012.6247715.

17. ArcGIS Desktop [Internet]. Redlands: Esri; 2021 [cited 2022 November 23]. Available from: https://desktop.arcgis.com/en/arcmap/latest/tools/data-management-toolbox/warp.htm.

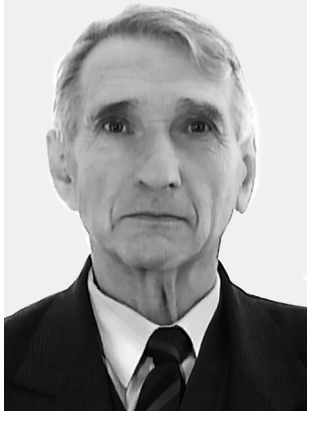
Получена 08.12.2022 / исправлена 09.01.2023 / принята 11.01.2023.
Received 08.12.2022 / revised 09.01.2023 / accepted 11.01.2023.

Юбилеи

Jubilees

Анатолий Иванович КОМЯК

Anatolii Ivanovich KOMYAK



20 ноября 2022 г. исполнилось 90 лет со дня рождения выдающегося ученого, заслуженного деятеля науки Республики Беларусь, доктора физико-математических наук, профессора Анатолия Ивановича Комяка.

А. И. Комяк родился 20 ноября 1932 г. в д. Первомайск Солигорского района Минской области. После окончания физико-математического факультета БГУ в 1956 г. сначала преподавал физику в средней школе Краснослободского района, затем работал в Институте физики и математики АН БССР. Научную и педагогическую деятельность в БГУ начал в 1962 г. на кафедре спектрального анализа в должности инженера, ассистента, а затем доцента (1968). С 1970 по 1973 г. заведовал кафедрой общей физики нефизических факультетов, с 1973 по 1978 г. – кафедрой биофизики, а с 1978 по 1997 г. – кафедрой спектрального анализа (сейчас кафедра лазерной физики и спектроскопии) физического факультета. В 1974 г. А. И. Комяк защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, в 1978 г. ему присвоено звание профессора.

Анатолий Иванович является известным специалистом в области атомной и молекулярной спектроскопии, в частности спектроскопии сложных молекулярных систем и комплексов в конденсированной фазе. Изучению спектрально-люминесцентных характеристик и природы центров свечения в кристаллах ураниловых соединений посвящена его кандидатская диссертация (1967). Исследования в области спектроскопии уранилов были инициированы академиком А. Н. Севченко и стали основополагающими в сфере научных интересов А. И. Комяка. Используя спектральные и люминесцентные методы, в том числе метод поляризованной люминесценции, он выполнил серию пионерских работ в области колебательных и электронных состояний в кристаллах ураниловых соединений. В результате было установлено, что за излучение и поглощение ураниловых соединений в видимой части спектра отвечают слабозапрещенные электрические дипольные переходы. Таким образом, дано объяснение ранее сложившемуся представлению о противоречии между электродипольной природой «флуоресцентной» серии оптических переходов и большим

CC BY NC

временем жизни возбужденного состояния иона уранила в конденсированных средах. На основе проведенных комплексных спектроскопических исследований влияния нейтральных лигандов на положение полос в спектрах люминесценции, поглощения и возбуждения растворов ураниловых соединений выявлена ранее неизвестная закономерность в зависимости положения полос спектров от донорной способности нейтральных лигандов. Получены уравнения для определения частоты чисто электронных переходов в комплексах уранила от значения суммарного донорного числа экваториального окружения иона уранила. Впервые установлены корреляции между значениями частот чисто электронных переходов и значениями суммарных донорных чисел экваториального окружения для различных координационных чисел по лиганду. Полученные результаты позволили сформировать единую точку зрения на природу «мультиплетной» структуры низкотемпературных спектров люминесценции и поглощения ураниловых соединений.

Наряду с изучением кристаллических соединений уранила А. И. Комяк уделял значительное внимание разработке методов и аппаратуры для обеспечения спектральных исследований процессов образования комплексов уранила в водных и органических растворах. Большой интерес он проявлял и к проблемам влияния межмолекулярных взаимодействий на спектроскопические характеристики растворов сложных органических соединений, в частности к исследованиям спектральных, кинетических и поляризационных эффектов, обусловленных неоднородным уширением уровней, явлениям в молекулярных системах с переносом энергии электронного возбуждения.

А. И. Комяком опубликовано более 300 научных работ, среди которых – монография по спектроскопии ураниловых соединений, широко известная специалистам, работающим в этой области, 3 учебных пособия по молекулярной спектроскопии и люминесценции, около 10 учебно-методических разработок по спецкурсам для студентов физического факультета. В числе его учеников – 15 кандидатов и 3 доктора наук.

На протяжении многих лет А. И. Комяк участвовал в работе ряда советов по защите диссертаций, выступал экспертом и оппонентом по диссертационным работам, рецензентом статей в профильных научных журналах. За успешную научно-производственную и педагогическую деятельность он был неоднократно награжден почетными грамотами БГУ, Министерства высшего и среднего специального образования БССР и СССР. За подготовку кадров высшей квалификации в 1996 г. А. И. Комяк удостоен почетного звания «Заслуженный деятель науки Республики Беларусь». В 2012 г. Советом БГУ ему присвоено почетное звание «Заслуженный работник Белорусского государственного университета».

После ухода на пенсию А. И. Комяк по-прежнему активно участвует в жизни кафедры лазерной физики и спектроскопии. Он принимает участие в научных семинарах, обсуждении диссертационных работ соискателей. В 2022 г. А. И. Комяком совместно с доцентом кафедры Л. С. Ляшенко издано пособие по решению задач по молекулярной спектроскопии. Своей активностью он подает пример отношения к делу преподавателям и сотрудникам кафедры и факультета.

Талант физика-экспериментатора, доброжелательность, отзывчивость, умение работать с молодежью в сочетании с активной жизненной позицией и большими педагогическими способностями снискали А. И. Комяку глубокое уважение, признание и авторитет. Коллеги, ученики и друзья горячо и сердечно поздравляют Анатолия Ивановича с юбилеем и от всей души желают ему долгих лет жизни, крепкого здоровья, счастья, благополучия.

АННОТАЦИИ ДЕПОНИРОВАННЫХ В БГУ РАБОТ
INDICATIVE ABSTRACTS OF THE PAPERS DEPOSITED IN BSU

УДК 531/534:519.6(075.8)

Журавков М. А. **Современные численные методы в механике** [Электронный ресурс] : курс лекций / М. А. Журавков ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2022. 132 с. : ил. Библиогр.: с. 117–130. Режим доступа: https://elib.bsu.by/handle/123456789/286556. Загл. с экрана. Деп. в БГУ 23.09.2022, № 08923092022.

В представленном курсе лекций выполнен краткий анализ, рассмотрены основные характеристики и особенности, преимущества и имеющиеся недостатки основных численных методов, используемых сегодня в различных разделах механики сплошных и дискретных сред.

Численные методы, используемые в механике, сгруппированы в несколько блоков. Наиболее крупные блоки – блок континуальных методов (методы, базирующиеся на основных законах и подходах механики сплошных сред) и блок дискретных методов (при деформировании среды допускается нарушение критерия сплошности). Имеются «гибридные» технологии – объединение перечисленных двух групп методов. Выполнен анализ наиболее известных представителей упомянутых групп методов.

Материал данного курса лекций представляет интерес для специалистов в области теоретической и прикладной механики, математического моделирования, численных методов и может быть рекомендован широкому кругу читателей, интересующихся применением современных численных методов в прикладных науках.

УДК 53(075.8)

Физика [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для белорус. и иностр. обучающихся Ин-та доп. образования и подготовит. курсов / БГУ ; сост.: С. В. Демидович, В. М. Молофеев. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2022. 94 с. : ил. Библиогр.: с. 93–94. Режим доступа: https://elib.bsu.by/handle/123456789/291428. Загл. с экрана. Деп. в БГУ 04.01.2023, № 000404012023.

Электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) по учебной дисциплине «Физика» предназначен для обучающихся подготовительных отделений и подготовительных курсов. В ЭУМК содержатся учебные программы для белорусских и иностранных граждан, осваивающих образовательные программы подготовки к поступлению в учреждения высшего образования Республики Беларусь, конспект теоретического материала, практический раздел, раздел контроля знаний и список литературы.

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Феранчук И. Д., Скоромник О. Д., Нгуен Куанг Шан. Устранение расходимости в задаче о частице в скалярном квантовом поле 4

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Углов В. В., Злоцкий С. В., Белов М. М., Рыскулов А. Е., Иванов И. А., Курахмедов А. Е., Мустафин Д. А., Сапар Э. Д., Ке Джин. Структурно-фазовые изменения в концентрированных твердых растворах системы V – Nb – Ta – Ti, облученных ионами криптона 14

Черенда Н. Н., Толкачев С. А., Асташинский В. М., Кузьмицкий А. М. Модификация состава, структуры и механических свойств поверхностного слоя системы (Ti, Cu)N/Al – 12 ат. % Si, обработанной компрессионными плазменными потоками 25

Жиров Г. И. Морфология продуктов гидридных превращений в районе купола двухфазной области системы Pd – H 34

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Чуднова Ю. Н., Шишкина Т. В. Развитие теории электрослабого взаимодействия на базе процессов электрон-позитронного рассеяния 43

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Максименко С. А., Кулагова Т. А., Окотруб А. В., Сусляев В. И. Актуальные задачи использования композиционных и гибридных материалов на основе различных форм углерода в электромагнитных и биомедицинских приложениях 55

Ларькин А. В., Федотов А. К. Прыжковый транспорт в наногранулированных композиционных пленках из наночастиц сплава FeCoZr, осажденных в диэлектрические матрицы Al_2O_3 и PZT 70

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Ермалицкая К. Ф., Иванова П. А., Матюш Я. И. Анализ состава покрытий старинных хрупких металлических образцов с помощью двухимпульсного лазерного спектрометра 78

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Ломако А. А., Давидович Ю. С., Рассказов И. В. Дисторсия фотоаппаратуры как фактор ухудшения качества сшивки и геопривязки регистрируемых с борта Международной космической станции изображений поверхности Земли 85

ЮБИЛЕИ

Анатолий Иванович Комяк 95

Аннотации депонированных в БГУ работ 97

CONTENTS

THEORETICAL PHYSICS

Feranchuk I. D., Skoromnik O. D., Nguyen Quang San. Elimination of divergence for the problem of a particle in a scalar quantum field 4

CONDENSED STATE PHYSICS

Uglov V. V., Zlotsky S. V., Belov M. M., Ryskulov A. E., Ivanov I. A., Kurakhmedov A. E., Mustafin D. A., Sapar A. D., Ke Jin. Structural and phase states on concentrated solid solution of the V – Nb – Ta – Ti system irradiated by krypton ions 14

Cherenda N. N., Tolkachov S. A., Astashynski V. M., Kuzmitski A. M. Modification of composition, structure and mechanical properties of the surface layer of (Ti, Cu)N/Al – 12 at. % Si alloy system treated by compression plasma flows 25

Zhirov G. I. Morphology of the products of hydride transformations in the cupola two-phase region of the Pd – H system 34

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

Chudnova Y. N., Shishkina T. V. Development of electroweak interaction theory based on electron-positron scattering 43

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGIES

Maksimenko S. A., Kulahava T. A., Okotrub A. V., Suslyaev V. I. Actual problems of the usage of composite and hybrid materials based on different forms of nanocarbons in electromagnetic and biomedical applications 55

Larkin A. V., Fedotov A. K. Hopping transport in nanogranular composite films of FeCoZr alloy nanoparticles deposited into Al_2O_3 and PZT dielectric matrices 70

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Ermalitskaia K. F., Ivanova P. A., Matyush Ya. I. Elemental analysis of obsolete brittle metal samples using a two-pulse laser spectrometer 78

RESEARCH INSTRUMENTS AND METHODS

Lamaka A. A., Davidovich Y. S., Rasskazov I. V. Photographic equipment distortion as the quality degradation factor of the International Space Station onboard images of the Earth surface stitching and georeferencing 85

JUBILEES

Anatolii Ivanovich Komyak 95

Indicative abstracts of the papers deposited in BSU 97

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по техническим (экспериментальная и прикладная физика; микро- и наноэлектроника) и физико-математическим наукам.

Журнал включен в библиографические базы данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), China National Knowledge Infrastructure.

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. № 1. 2023

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск.
Почтовый адрес: пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск.
Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by
URL: https://journals.bsu.by/index.php/physics

«Журнал Белорусского государственного университета. Физика» издается с января 1969 г. До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ. Серия 1, Физика. Математика. Информатика» (ISSN 1561-834X).

Редакторы *О. А. Семенец, М. А. Подголина*
Технический редактор *В. В. Пишкова*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 31.01.2023.
Тираж 110 экз. Заказ 34.

Республиканское унитарное предприятие «Издательский центр Белорусского государственного университета».
ЛП № 02330/117 от 14.04.2014.
Ул. Красноармейская, 6, 220030, г. Минск.

© БГУ, 2023

Journal of the Belarusian State University. Physics. No. 1. 2023

Founder:
Belarusian State University

Registered address: 4 Niezaliežnasci Ave., Minsk 220030.
Correspondence address: 4 Niezaliežnasci Ave., Minsk 220030.
Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by
URL: https://journals.bsu.by/index.php/physics

«Journal of the Belarusian State University. Physics» published since January, 1969.
Until 2017 named «Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika» (ISSN 1561-834X).

Editors *O. A. Semenets, M. A. Podgolina*
Technical editor *V. V. Pishkova*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 31.01.2023.
Edition 110 copies. Order number 34.

Republic Unitary Enterprise «Publishing Center of the Belarusian State University».
License for publishing No. 02330/117, 14 April, 2014.
6 Čyrvonaarmiejskaja Str., Minsk 220030.

© BSU, 2023