ИЗВЕСТИЯ КАБАРДИНО-БАЛКАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

PROCEEDINGS OF THE KABARDINO-BALKARIAN STATE UNIVERSITY

ТОМ XVI, № 3, 2026

Учредитель: Кабардино-Балкарский государственный
университет им. Х.М. Бербекова (КБГУ)

Главный редактор **С.Ю. ХАШИРОВА**
Первый зам. главного редактора **А.П. САВИНЦЕВ**
Зам. главного редактора **А.М. КАРМОКОВ**
Зам. главного редактора **Г.Б. ШУСТОВ**
Ответственный секретарь **И.В. ДОЛБИН**

Редакционная коллегия

Ашхотов О.Г., Берлин А.А., Борукаев Т.А., Дедков Г.В., Дышеков А.А., Киреев В.В., Кушхов Х.Б., Ломоносов И.В., Ляхов Н.З., Мазуров В.Д., Махнев А.А., Музафаров А.М., Сухинов А.И., Хоконов М.Х., Хохлов А.Р.

Зарегистрировано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций. Реестровая запись *от 15.08.2019 г. ПИ N ФС 77-76623.*

Подписной индекс в Каталоге «Пресса России» ф 43720.

Журнал включен в Перечень рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций.

Доступ к рефератам статей журнала осуществляется на сайте научной электронной библиотеки «eLIBRARY.RU» (http://elibrary.ru).

ISSN 2221-7789

Адрес редакции: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173,
Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова

Телефоны: (88662) 722313
E-mail: rio@kbsu.ru, http://izvestia.kbsu.ru

© Редакционно-издательское оформление,
Кабардино-Балкарский государственный
университет им. Х.М. Бербекова, 2026

Founder: Kabardino-Balkarian State University (KBSU)

Editor in chief **S.Yu. KHASHIROVA**
The 1st Deputy Editor **A.P. SAVINTSEV**
Deputy Editor **A.M. KARMOKOV**
Deputy Editor **G.B. SHUSTOV**
Executive secretary **I.V. DOLBIN**

Editorial board

Ashkhotov O.G., Berlin A.A., Borukaev T.A., Dedkov V.G., Dyshekov A.A., Kireev V.V., Kushkhov Kh.B., Lomonosov I.V., Lyakhov N.Z., Mazurov V.D., Makhnev A.A., Muzafarov A.M., Sukhinov A.I., Khokonov M.Kh., Khokhlov A.R.

Registered by the Federal Service for Supervision of Communications, Information Technology and Mass Media. Registre entry dated 15.08.2019. PI No. FS 77-76623

Subscription index in the catalog «Russian Press» F 43720

Access to abstracts of articles of the magazine is carried out on the Scientific Electronic Library Online «eLIBRARY.RU» (http://elibrary.ru).

ISSN 2221-7789

Editorial address: Kabardino-Balkarian State University, Chernyshevsky st., 173, Nalchik, 360004

Phone number: (88662)722313
E-mail: rio@kbsu.ru, http://izvestia.kbsu.ru

© Editorial and publishing design,
Kabardino-Balkarian State University, 2026

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Ахкубеков А.А., Ахкубекова С.Н., Узденов Э.М. Методы синтеза интерметаллидов и обоснование механизма их зарождения и роста …… 5

Долбин И.И., Долбин И.В., Кочетков А.С. Влияние геометрии углеродных нанотрубок на молекулярные характеристики полимерной матрицы нанокомпозитов ……... 10

Жирикова З.М., Алоев В.З. Исследование влияния анизотропии поверхности органических волокон на фрикционный износ композитов на основе полиарилата …….. 18

Канаметов А.А. Ван-дер-ваальсово взаимодействие цилиндрических тел со стенками плоской щели ……...……...…….….. 24

Кинкович А.С., Молоканова О.О., Молоканова О.А. Влияние температурно-временных параметров термической обработки на жесткость полипропиленовых пленок …….. 29

Кинкович А.С., Молоканов Г.О., Молоканова О.А. Повышение деформационно-прочностных характеристик полипропиленовых пленок методом изотермической выдержки. 33

Кунижев Б.И., Савинцев А.П., Хаджиева М.Т., Жамбеков А.А. Экспериментальное исследование тепловых полей в полиметилметакрилате, как в модельном материале……. 38

Пшуков А.М., Кашежев А.З. Моделирование и калибровка цилиндрического Nd-содержащего жидкосцинтилляционного детектора с ФЭУ-39А …….…… 45

Пшуков А.М., Ханукаева Е.И. Проблемы сходимости самосогласованного поля при моделировании $CsPbBr_3$, легированного Nd, методом теории функционала плотности…… 50

Троян Е.Ф., Смирнов А.Г., Харьков С.Ю., Колобов А.В., Кармоков А.М., Молоканов О.А. Механизмы резистивного переключения в гетероструктурах на основе халькогенидов ……... 55

Хайманов С.А., Цидаева Н.И., Накусов А.Т. Основные параметры гидротермального синтеза, определяющие структуру и свойства редкоземельных ферритов – гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ …… 62

Черкесова Н.В., Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Здравомыслов Д.М. Отжиг ионно-имплантированных пленок кремния на изоляторе……...…… 67

ХИМИЯ

Борукаев Т.А., Хасанов В.В., Саламов А.Х., Тхакахов Р.Б. Влияние добавки $Mg(SbO_3)_2$ на горючесть и физико-механические свойства кабельного ПВХ-пластиката…… 71

Казанчева Л.А., Мирзоева А.А., Кумышева Ю.А., Сасиков Т.А. Комбинированные минеральные удобрения как один из факторов улучшения гидрологических и гидрохимических показателей водоемов……...……...……..... 78

Машуков Н.И., Шетов Р.А., Шустов Г.Б., Алтуева А.М., Хакяшева Э.В., Кяров А.А., Хасанов В.В. Некоторые методические аспекты ударных испытаний термопластов…… 83

Шокумова М.У., Беев А.А., Беева Д.А., Хаширова С.Ю., Хараева З.Ф., Хаширов А.А. Оценка гемолитической активности сополиэфиэфиркетона……...……..... 90

Шустов Г.Б., Машуков Н.И., Шетов Р.А., Балаева С.М., Хакяшева Э.В. Синтез и свойства жирноароматических блок-сополимеров с повышенной огнестойкостью на основе олигоэфиров……...……...……... 96

Требования к оформлению научной статьи, представляемой в журнал «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета» …… 101

CONTENTS

PHYSICS

Ahkubekov A.A., Ahkubekova S.N., Uzdenov E.M. Methods of synthesis of intermetallics and justification of mechanisms of nucleation and growth …….. 5

Dolbin I.I., Dolbin I.V., Kochetkov A.S. Influence of carbon nanotube geometry on the molecular characteristics of the polymer matrix in nanocomposites……. 10

Zhirikova Z.M., Aloev V.Z. Study of the effect of anisotropy of the surface of organic fibers on friction wear of polyarylate-based composites……. 18

Kanametov A.A. Van-der-waals interaction of cylindrical bodies with a flat walls of a gap …. 24

Kunizhev B.I., Savintsev A.P., Khadzhieva M.T., Zhambekov A.A. Experimental study of thermal in polymethylmethacrylate as model material …… 29

Kinkovich A.S., Molokanova O.O., Molokanova O.A. Effect of time temperature parameters of heat treatment on stiffness of polypropylene films ……. 33

Kinkovich A.S., Molokanov G.O., Molokanova O.A. Improvement of deformation-strength characteristics of polypropylene films by isothermal annealing…….. 38

Pshukov A.M., Kashezhev A.Z. Modeling and calibration of a cylindrical Nd-loaded liquid-scintillator detector with an FEU-39A photomultiplier……. 45

Pshukov A.M., Khanukaeva E.I. Problems of self-consistent field convergence in density functional theory modeling of Nd-doped $CsPbBr_3$ …….. 50

Troyan E.F., Smirnov A.G., Kharkov S.Yu., Kolobov A.V., Karmokov A.M., Molokanov O.A. Mechanisms of resistive switching in chalcogenide heterojunctions…….. 55

Khaymanov S.A., Tsidaeva N.I., Nakusov A.T. The main parameters of hydrothermal synthesis that determine the structure and properties of rare-earth ferrites – garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ and $Pr_3Fe_5O_{12}$ ……. 62

Cherkesova N.V., Mustafaev G.A., Mustafaev A.G., Zdravomyslov D.M. Annealing of ion-implanted silicon films on an insulator……... 67

CHEMISTRY

Borukaev T.A., Khasanov V.V., Salamov A.Kh., Tkhakakhov R.B. Effect of $Mg(SbO_3)_2$ additive on the flammability and physical and mechanical properties of cable PVC-plastic compound…… 71

Kazancheva L.A., Mirzoeva A.A., Kumysheva Y.A., Sasikov T.A. Combined mineral fertilizers as one of the factors for improving the hydrological and hydrochemical indicators of water bodies ……. 78

Mashukov N.I., Shetov R.A., Shustov G.B., Altueva A.M., Khakyasheva E.V., Kyarov A.A., Khasanov V.V. Some methodological aspects of impact testing of thermoplastics ……... 83

Shokumova M.U., Beev A.A., Beeva D.A., Khashirova S.Yu., Kharaeva Z.F., Khashirov A.A. Assessment of the hemolytic activity of copolyetheretherketone……. 90

Shustov G.B., Mashukov N.I., Shetov R.A., Balaeva S.M., Khakyasheva E.V. Synthesis and Properties of Oligoether-Based Aliphatic-Aromatic Block Copolymers with Enhanced Flame Retardancy …….. 96

The demand to the design of the scientific article, represented in the journal «Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University» …… 101

ФИЗИКА

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 5–9.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):5–9.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 532.7:669.15

Методы синтеза интерметаллидов и обоснование механизма их зарождения и роста

Анатолий Амишевич Ахкубеков[1], Светлана Наниевна Ахкубекова[2], Эльдар Магомедович Узденов[3]

[1,3]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[2]Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет им. В.М. Кокова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]dis1@kbsu.ru
[2]aminka07-07@mail.ru
[3]uzden.off@yandex.ru

Аннотация. Предложена физико-химическая модель формирования интерметаллидных фаз, объединяющая термодинамику, диффузионную кинетику и структурно-электронную самоорганизацию. Рассмотрены механизмы зарождения и роста интерметаллидов, а также влияние температуры и деформации на фазообразование. Показана роль контактного плавления как эффективного метода исследования фазовых превращений и формирования интерметаллидных слоёв.

Ключевые слова: интерметаллиды, контактное плавление, диффузия, самоорганизация
Для цитирования: Аккубеков А.А., Аккубекова С.Н., Узденов Э.М. Методы синтеза интерметаллидов и обоснование механизмов и зарождения и роста // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 5–9.

PHYSICS

Original article

Methods of synthesis of intermetallics and justification of mechanisms of nucleation and growth

Anatoly A. Ahkubekov[1], Svetlana N. Ahkubekova [2], Eldar M. Uzdenov [3]

[1,3]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[2] Kabardino-Balkarian State Agrarian University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[1]dis1@kbsu.ru
[2]aminka07-07@mail.ru
[3]uzden.off@yandex.ru

Abstract. A physicochemical model of intermetallic phase formation is proposed, integrating thermodynamics, diffusion kinetics, and structural-electronic self-organization. The mechanisms of intermetallic nuclea-

tion and growth, as well as the effects of temperature and deformation on phase formation, are considered. The role of contact melting as an effective method for studying phase transformations and the formation of intermetallic layers is demonstrated.

Keywords: intermetallics, contact melting, diffusion, self-organization

For citation: Akkubekov A.A., Akkubekova S.N., Uzdenov E.M. Methods of synthesis of intermetallics and justification of mechanisms of nucleation and growth. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):5–9. (In Russ.).

1. Введение

Интерметаллиды представляют собой обширный класс неорганических соединений, характеризующихся дальним атомным порядком и специфическим типом химической связи, что обеспечивает им уникальный комплекс физико-механических свойств: высокую твёрдость, жаропрочность, коррозионную стойкость, а также магнитные и сверхпроводящие характеристики [1–3]. Интерес к ним не ослабевает на протяжении десятилетий, поскольку их свойства критически зависят от условий синтеза – температуры, давления, скорости охлаждения и степени деформации.

Несмотря на обилие экспериментальных данных, фундаментальный вопрос о механизмах зарождения и роста интерметаллидной фазы остаётся дискуссионным. Зачастую исследователи ограничиваются констатацией факта образования той или иной фазы, не вскрывая глубинные термодинамические движущие силы процесса. Существующие методы синтеза (спекание, механохимия, СВС) [4, 5] хорошо отработаны технологически, но мало пригодны для строгого анализа кинетики на начальных стадиях.

Настоящая работа ставит целью систематизацию известных подходов и разработку строгого физико-математического аппарата, описывающего весь «жизненный цикл» интерметаллидной фазы – от возникновения флуктуации до формирования макроскопического слоя. Мы предлагаем перейти от разрозненных эмпирических закономерностей к единой модели, связывающей термодинамическую выгодность, диффузионную реализуемость и структурную совместимость компонентов. Особое внимание уделяется методу контактного плавления (диффузионных пар) [6, 7], который мы рассматриваем как наиболее информативный инструмент для верификации предлагаемой теории.

Образование новой фазы термодинамически возможно лишь при условии уменьшения свободной энергии Гиббса системы G. В условиях постоянных температуры T и давления P критерием устойчивости является отрицательное изменение энергии Гиббса для реакции образования интерметаллида $\varphi = A_m B_n$ из чистых компонентов:

$$\Delta G_f^{\varphi}(T,P) = G_m^{\varphi}(T,P) - x_A G_m^{A}(T,P) - x_B G_m^{B}(T,P) < 0,$$

где G_m^{φ}, G_m^{A}, G_m^{B} – молярные энергии Гиббса фазы и компонентов: x_A, x_B – мольные доли.

Однако феноменологическая запись $\Delta G < 0$ является необходимым, но не достаточным условием для быстрого протекания процесса. Реальная кинетика определяется градиентом химического потенциала μ_i [8]. Для неидеальных металлических систем диффузионный поток компонента i строго описывается уравнением

$$J_i = -M_i c_i \nabla \mu_i,$$

где M_i – подвижность атомов, c_i – концентрация. В случае идеального раствора $\mu_i = \mu_i^0 + RT\ln x_i$, и это выражение переходит в классический первый закон Фика: $J_i = -D_i \nabla c_i$. Однако в реальных системах, особенно при образовании интерметаллидов с сильным межатомным взаимодействием, учёт химического потенциала через активности $a_i = \gamma_i x_i$ становится критически важным, где x_i – число атомов, γ_i – коэффициент активности («свой-чужой»).

Особое внимание, как отмечалось выше, следует обратить при зарождении и росте интерметаллидов на фазовые диаграммы через кривые молярной энергии Гиббса.

Фазовая диаграмма бинарной системы является проекцией трёхмерной поверхности энергии Гиббса на плоскость состав-температура. Как показано в фундаментальной работе [8], устойчивой является та фаза или совокупность фаз, которая соответствует наименьшему значению молярной энергии Гиббса $G_m(x)$ при заданных T и P.

Интерметаллид на диаграмме проявляется как фаза, обладающая отдельным минимумом $G_m(x)$ в узком концентрационном интервале. Это означает, что упорядоченная структура соединения энергетически выгоднее неупорядоченного твёрдого раствора или смеси фаз при данном составе. Ширина области гомогенности интерметаллида определяется кривизной функции $G_m(x)$ и, как правило, расширяется с ростом температуры за счёт увеличения энтропийного вклада.

Среди многообразия методов синтеза (спекание, механохимия, СВС, электрохимия, аддитивные технологии) [4, 5, 9] метод контактного плавления [6, 7, 10] занимает особое место. Он не является промышленным, но незаменим для фундаментальных исследований по следующим причинам:

– позволяет наблюдать кинетику в изотермических условиях, близких к равновесным;

– даёт возможность чётко фиксировать последовательность смены фаз в диффузионной зоне (например, в системе Al–Cu: $Al_2Cu \rightarrow AlCu \rightarrow Al_2Cu_3 \rightarrow Al_4Cu_9$) [11–13];

– обеспечивает прямую верификацию законов диффузии.

Контактное плавление реализуется в трёх режимах [7]: кинетическом (лимитируется реакцией на границе), стационарно-диффузионном (контролируется диффузией через прослойку) и нестационарно-диффузионном (сопровождается переносом через жидкую фазу). Важно подчеркнуть, что появление жидкой прослойки резко интенсифицирует массоперенос, но по мере роста твёрдого интерметаллидного слоя механизм переключается на твёрдофазную диффузию.

Мы предлагаем рассматривать образование интерметаллида как пятистадийный процесс, каждая стадия которого имеет строгое математическое описание:

– **возникновение градиента химического потенциала.** После приведения компонентов в контакт возникает неравновесное состояние $\nabla\mu_i \neq 0$, что инициирует направленный поток атомов: $J_i = -M_i c_i \nabla\mu_i$;

– **локальное пересыщение и зарождение.** Зарождение критического зародыша описывается классической теорией гомогенного образования [2]. Для сферического зародыша радиуса r изменение энергии Гиббса имеет вид

$$\Delta G(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta g_v + 4\pi r^2 \sigma,$$

где $\Delta g_v < 0$ – объёмный выигрыш энергии, σ – удельная межфазная энергия. Критический радиус (устойчивый зародыш) и энергетический барьер соответственно равны:

$$r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta g_v}, \Delta G^* = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\Delta g_v)^2}.$$

– **диффузионно-контролируемый рост**. После преодоления барьера ΔG^* рост слоя лимитируется диффузией через слой толщиной L. Из решения второго закона Фика при постоянном потоке на границе следует параболический закон роста

$$L^2 = k_p t,$$

где k_p – параболическая константа, пропорциональная коэффициенту диффузии D;

– **температурная активация.** Температурная зависимость роста определяется уравнением Аррениуса:

$$k_p = k_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right).$$

Расчётный пример. Для $Q = 80$ кДж/моль при $T_1 = 600$ К и $T_2 = 700$ К

$$\frac{D_2}{D_1} = \exp\left[\frac{Q}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right] = \exp(2.29) \approx 9.9.$$

Таким образом, повышение температуры на 100 К ускоряет массоперенос примерно на порядок;

– **структурно-электронная самоорганизация.** Финальная стадия – спонтанное упорядочение атомов в кристаллическую решётку с минимумом свободной энергии. В отличие от биохимической терминологии, мы предлагаем трактовать *комплементарность* как **структурно-электронную совместимость**, включающую:

1. Соотношение атомных радиусов (фактор плотной упаковки).
2. Валентно-электронную концентрацию (определяет заполнение зон).
3. Разность электроотрицательностей (обеспечивает направленность связи).

4. Энтропийный фактор ($-T\Delta S$).

Условие стабилизации интерметаллида относительно альтернативных фаз:

$$\Delta G_{IMC} = \Delta H_{IMC} - T\Delta S_{IMC} < \Delta G_{solution}.$$

Отметим также влияние деформации на процессы, протекающие в контакте разнородных кристаллов. Механическая деформация создаёт в материале упругую энергию E_{def}, которая суммируется с поверхностной энергией зародыша, снижая эффективный барьер

$$\Delta G^*_{eff} = \Delta G^* - E_{def}.$$

Этот эффект, деформационно-индуцированным зарождением фаз (ДИЗФ), объясняет ускоренное интерметаллидообразование в зонах сварки взрывом и при интенсивной пластической деформации [14, 15].

Совокупность приведённых уравнений образует замкнутую физико-математическую модель процесса:

$$\Delta G_f^{\varphi} < 0 \longrightarrow \nabla\mu_i \neq 0 \longrightarrow J_i = -M_i c_i \nabla\mu_i \longrightarrow r > r^* \longrightarrow L^2 = k_p t$$
$$\longrightarrow \Delta G_{IMC} = \min$$

Заключение

1. Образование интерметаллидов является многоуровневым процессом, определяемым совместным действием термодинамической движущей силы ($\Delta G < 0$), кинетики массопереноса ($\nabla\mu$) и структурной совместимости.

2. Метод диффузионных пар (контактного плавления) является наиболее адекватным инструментом для изучения механизмов фазообразования.

3. Предложенные соотношения для критического радиуса (r^*) и барьера (ΔG^*) позволяют количественно оценить условия зарождения.

4. Параболический закон роста $L^2 = k_p t$ и уравнение Аррениуса дают строгое описание кинетики, а учёт химического потенциала уточняет движущие силы диффузии.

5. Деформация и дефекты структуры выступают мощными катализаторами процесса за счёт снижения энергетического барьера.

Представленная модель может служить основой для прогнозирования фазового состава и морфологии интерметаллидов в новых материалах, а также для оптимизации режимов термической и термомеханической обработки.

Библиография

1. Харина Г.В. Химические свойства конструкционных металлов и сплавов. Екатеринбург: РГППУ, 2019. 153 с.

2. Ковтунов А.И. Интерметаллидные сплавы. Тольятти: ТГУ, 2018. 77 с.

3. Напалков В.И., Попов Д.А., Афанасьев А.Е. Структуры и дефекты слитков из алюминия и его сплавов. Красноярск: СФУ, 2018. 172 с.

4. Сурков В.А. Анализ методов получения интерметаллидов p-, d-металлов // Вестник Казанского технологического университета. 2014. С. 27–33.

5. Ибраева Г.М. Многослойная структура интерметаллидных соединений алюминидов кобальта, никеля и титана: дис. ... док. физ.-мат. наук. Алматы, 2019. 291 с.

6. Саввин. В.С. Фазовые переходы первого рода в контакте разнородных металлов: дисс. ... док. физ-мат. наук. Екатеринбург, 2009. 303 с.

7. Ахкубеков А.А., Орквасов Т.А., Созаев В.А. Контактное плавление металлов и наноструктур на их основе. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 147 с.

8. Борщевский А.Я. Физическая химия. Т. 1. Общая и химическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017. 868 с.

9. Каминский В.В., Петрович С.Ю., Липин В.А. Получение интерметаллидов в системе Al–Ti–Zn // Записки Горного института. 2018. Т. 233. С. 512–517.

10. Рогов В.И. Иследование контактного плавления металлических систем в диффузионном режиме: дисс. канд. физ-мат. наук. Нальчик: Каб-Балк. ун-т, 1969. 170 с.

11. Cao F., Zhang P., Zou J., Wang T. The formation and growth of intermetallic compounds during interdiffusion of Al/Cu bimetals // Materials Research Express, 2022. P. 13–18.

12. Бондарь А.А., Агейкова Л.Н., Демьянов Б.Ф. Рост интерметаллидов и образование переходного слоя в зоне контакта меди с жидким оловом // Ползуновский вестник. 2019. N 2. С. 133–137.

13. Park M., Arróyave R. Concurrent nucleation, formation and growth of two intermetallic compounds Cu_6Sn_5 and Cu_3Sn during the early stages of lead-free soldering // Acta Materialia, 2012. P. 53–61.

14. Ахкубеков А.А., Ахкубекова С.Н., Узденов Э.М., Хаджиева М.Т. Анализ методов синтеза интерметаллидов и особенностей механизма их зарождения и роста // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14, N 2. С. 49–55

15. Трыков Ю.П., Гуревич Л.М., Жоров А.Н., Гурулев Д.Н. Влияние деформации изгиба на кинетику диффузии в сваренном взрывом композите ОТ4 – АД1 – АМГ6 // Перспективные материалы. 2003. N 6. С. 76–80.

References

1. Kharina G.V. Chemical Properties of Structural Metals and Alloys. Ekaterinburg: RGPPU; 2019. 153 p. (In Russ.).

2. Kovtunov A.I. Intermetallic Alloys. TOLYAT: TSU; 2018. 77 p. (In Russ.).

3. Napalkov V.I., Popov D.A., Afanasyev A.E. Structures and Defects of Ingot Alloys of Aluminum and Its Alloys. Krasnoyarsk: SFU; 2018. 172 p. (In Russ.).

4. Surkov V.A. Analysis of methods for obtaining intermetallic compounds of p-, d-metals. *Vestnik Kazanskogo technologicheskogo universiteta = Bulletin of Kazan Technological University*. 2014:27–33. (In Russ.).

5. Ibraeva G.M. Multilayer structure of intermetallic compounds of cobalt, nickel and titanium aluminides: dis. ... doct. phys.-math. sci. Almaty, 2019. 291 p. (In Russ.).

6. Savvin V.S. First-order phase transitions in the contact of dissimilar metals: dissertation ... Doctor of Physical and Mathematical Sciences. Ekaterinburg; 2009. 303 p. (In Russ.).

7. Akhkubekov A.A., Orkvasov T.A., Sozaev V.A. Contact melting of metals and nanostructures based on them. Moscow: FIZMATLIT; 2008. 147 p. (In Russ.).

8. Borshchevsky A.Ya. Physical Chemistry. Vol. 1. General and Chemical Thermodynamics. Moscow: INFRA-M, 2017. 868 p. (In Russ.).

9. Kaminsky V.V., Petrovich S.Yu., Lipin V.A. Production of intermetallic compounds in the Al–Ti–Zn system. *Zapiski gornogo instituta = Notes of the Mining Institute*. 2018;233:512–517. (In Russ.).

10. Rogov V.I. Study of contact melting of metal systems in a diffusion regime: dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences. Nalchik: Kab.-Balk. Univ.; 1969. 170 p. (In Russ.).

11. Cao F., Zhang P., Zou J., Wang T. The formation and growth of intermetallic compounds during interdiffusion of Al/Cu bimetals. *Materials Research Express.* 2022:13–18.

12. Bondar A.A., Ageykova L.N., Demyanov B.F. Growth of intermetallic compounds and formation of a transition layer in the contact zone between copper and liquid tin. *Polzunovskii vestnik = Polzunov Vestnik.* 2019;2:133–137. (In Russ.).

13. Park M., Arróyave R. Simultaneous nucleation, formation and growth of two intermetallic compounds CU_6Sn_5 and CU_3Sn during the early stages of lead-free soldering. *Acta Materialia*. 2012:53–61.

14. Akhkubekov A.A., Akhkubekova S.N., Uzdenov E.M., Khadzhieva M.T. Analysis of methods for synthesizing intermetallic compounds and the features of the mechanism of their nucleation and growth. Izvestiya Kabardino-Balkarskogo *Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2024;14(2):49–55. (In Russ.).

15. Trykov Yu.P., Gurevich L.M., Zhorov A.N., Gurulev D.N. The effect of bending deformation on the kinetics of diffusion in an explosion-welded composite OT4 – AD1 – AMG6. *Perspektivnye materialy = Perspective Materials*. 2003;6:76–80.

© Ахкубеков А.А., Ахкубекова С.Н., Узденов Э.М., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 10–17.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):10–17.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 541.64: 546.26

Влияние геометрии углеродных нанотрубок на молекулярные характеристики полимерной матрицы нанокомпозитов

Илья Игоревич Долбин[1], Игорь Викторович Долбин[2], Алексей Сергеевич Кочетков[3]

[1,3]Российский государственный университет туризма и сервиса, Московская область, дп. Черкизово, Россия
[2]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]ilua.06@list.ru
[2]i_dolbin@mail.ru

Аннотация. Показано, что геометрия углеродных нанотрубок (нановолокон), оказывает критическое влияние на конечные свойства полимерных нанокомпозитов. Совместное влияние характеристик полимерной матрицы и нанонаполнителя определяет уровень межфазной адгезии полученных нанокомпозитов. Продемонстрирована возможность прогнозирования степени усиления полимерных нанокомпозитов с достаточно высокой точностью.

Ключевые слова: нанокомпозит, полипропилен, углеродные нанотрубки, степень усиления, межфазная адгезия

Для цитирования: Долбин И.И., Долбин И.В., Кочетков А.С. Влияние геометрии углеродных нанотрубок на молекулярные характеристики полимерной матрицы нанокомпозитов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 10–17.

PHYSICS

Original article

Influence of carbon nanotube geometry on the molecular characteristics of the polymer matrix in nanocomposites

Ilya I. Dolbin[1], Igor V. Dolbin[2], Aleksei S. Kochetkov[3]

[1,3]Russian State University of Tourism and Service, Moscow Region, dp. Cherkizovo, Russia
[2]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]ilua.06@list.ru
[2]i_dolbin@mail.ru

Abstract. It has been shown that the geometry of carbon nanotubes (nanofibers) has a critical influence on the final properties of polymer nanocomposites. The combined effect of the polymer matrix and nanofiller characteristics determines the level of interfacial adhesion in the resulting nanocomposites. The feasibility of predicting the reinforcement degree of polymer nanocomposites with reasonably high accuracy has been demonstrated.

Keywords: nanocomposite, polypropylene, carbon nanotubes, reinforcement degree, interfacial adhesion

For citation: Dolbin I.I., Dolbin I.V., Kochetkov A.S. Influence of carbon nanotube geometry on the molecular characteristics of the polymer matrix in nanocomposites. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):10–17. (In Russ.).

Введение

Как известно [1–8], углеродные нанотрубки (нановолокна) формируют в полимерной матрице нанокомпозитов кольцеобразные структуры, которые критическим образом влияют на их свойства. При контакте полимера с поверхностью твердого тела макромолекулы изменяют свою конформацию в зависимости от структуры указанной поверхности [9]. Так на плоской поверхности с размерностью d_n=2 макромолекулы будут растягиваться, а на шероховатой поверхности с $d_n \to 3$ – сохранять конфигурацию статистического клубка. Очевидно, что этот эффект будет влиять на молекулярные характеристики полимерной матрицы, как минимум, в межфазных слоях. Авторы [10] предложили молекулярную концепцию усиления полимерных нанокомпозитов, в которой степень усиления является функцией молекулярных характеристик полимерной матрицы, модифицированной введением нанонаполнителя. Целью настоящей работы является исследование влияния геометрии углеродных нанотрубок (нановолокон) в полимерной матрице на ее молекулярные характеристики и уровень межфазной адгезии.

Экспериментальная часть

В качестве матричного полимера использован полипропилен (ПП) промышленного производства «Каплен» марки 01030. Эта марка ПП имеет показатель текучести расплава 2,3–3,6 г/10 мин, средневесовую молекулярную массу ~ (2–3)×10^5 и индекс полидисперсности 4,5.

В качестве нанонаполнителя использованы углеродные нанотрубки (УНТ) марки «Таунит», имеющие наружный диаметр 20–70 нм, внутренний диаметр 5-10 нм и длину 2 мкм и более. В исследуемых нанокомпозитах ПП/УНТ содержание таунита варьировалось в пределах 0,25–3,0 масс. %. Кроме того, использованы многослойные углеродные нановолокна (УНВ) с числом слоев 15–30 и диаметром 20–30 нм с длиной порядка 2 мкм. Содержание УНВ в нанокомпозитах ПП/УНВ варьировалось в пределах 0,15–3,0 масс. %.

Нанокомпозиты ПП/УНТ и ПП/УНВ получены смешиванием компонентов в расплаве на двухшнековом экструдере Thermo Haake модели Reomex RTW 25/42 (ФРГ). Смешивание выполнено при температуре 463–503 К и скорости вращения шнека 50 об/мин в течение 5 мин. Образцы для испытаний получены методом литья под давлением на литьевой машине Test Sample Molding Apparate RR/TS MP фирмы Ray-Ran (Великобритания) при температуре 503 К и давлении 43 МПа.

Механические испытания на одноосное растяжение выполнены на образцах в форме двухсторонней лопатки с размерами согласно ГОСТ 11262-80. Испытания проводились на универсальной испытательной машине Gotech Testing Machine CT-TCS 2000 (Тайвань), при температуре 293 К и скорости деформации ~ 2×10^{-3} $с^{-1}$.

Результаты и обсуждение

В рамках молекулярной концепции усиления полимерных нанокомпозитов получено следующее уравнение для нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки [10]

$$\frac{E_н}{E_м} = 1 + \frac{0{,}19 W_н l_{ст}^{мф}}{D_{УНТ}^{1/2}}, \qquad (1)$$

где $E_н$ и $E_м$ – модули упругости нанокомпозита и матричного полимера, соответственно (отношение $E_н/E_м$ принято называть степенью усиления нанокомпозита), $W_н$ – массовое содержание нанонаполнителя, $l_{ст}^{мф}$ – длина статистического сегмента полимерной цепи в межфазном слое, $D_{УНТ}$ – диаметр углеродной нанотрубки (нановолокна).

В свою очередь, радиус кольцеобразных структур углеродных нанотрубок (нановолокон) $R_{УНТ}$ можно определить в рамках теории перколяции с помощью следующего уравнения [11]

$$\varphi_н = \frac{\pi L_{УНТ} r_{УНТ}^2}{\left(2R_{УНТ}\right)^3}, \qquad (2)$$

где $\varphi_н$ – объемное содержание нанонаполнителя, $L_{УНТ}$ и $r_{УНТ}$ – длина и радиус углеродных нанотрубок (нановолокон), соответственно.

Величину $\varphi_н$ можно определить согласно хорошо известной формуле [10]:

$$\varphi_н = \frac{W_н}{\rho_н}, \tag{3}$$

где $\rho_н$ – плотность нанонаполнителя, определяемая для наночастиц следующим образом [10]:

$$\rho_н = 188\left(D_{\text{УНТ}}\right)^{1/3}, \qquad \text{кг/м}^3, \tag{4}$$

где $D_{\text{УНТ}}$ – диаметр углеродной нанотрубки (нановолокна), который дается в нм.

На *рисунке 1* приведена зависимость $l_{cm}^{мф}$ от $R_{\text{УНТ}}$ для рассматриваемых нанокомпозитов. Как и следовало ожидать, уменьшение $R_{\text{УНТ}}$, т. е. усиление кривизны поверхности кольцеобразных структур УНТ (УНВ), ухудшает способность макромолекул матричного полимера «вытягиваться» на их поверхности и уменьшает величину $l_{cm}^{мф}$. В свою очередь, снижение $l_{cm}^{мф}$ согласно уравнению (1) приводит к снижению степени усиления $E_н/E_м$ нанокомпозита. Взаимосвязь между параметрами $l_{cm}^{мф}$ и $R_{\text{УНТ}}$ аналитически можно выразить следующим эмпирическим уравнением:

$$l_{cm}^{мф} = 3{,}1\times10^{-2} R_{\text{УНТ}}. \tag{5}$$

Таким образом, уменьшение $R_{\text{УНТ}}$ ухудшает «вытяжку» макромолекул полимерной матрицы на поверхности кольцеобразных структур УНТ (УНВ). Кроме того, можно предположить еще несколько факторов, влияющих на этот эффект. Как известно [10], структура межфазных слоев отличается от структуры объемной полимерной матрицы нанокомпозита, в том числе и длиной статистического сегмента $l_{cm}^{мф}$ и l_{cm}, соответственно.

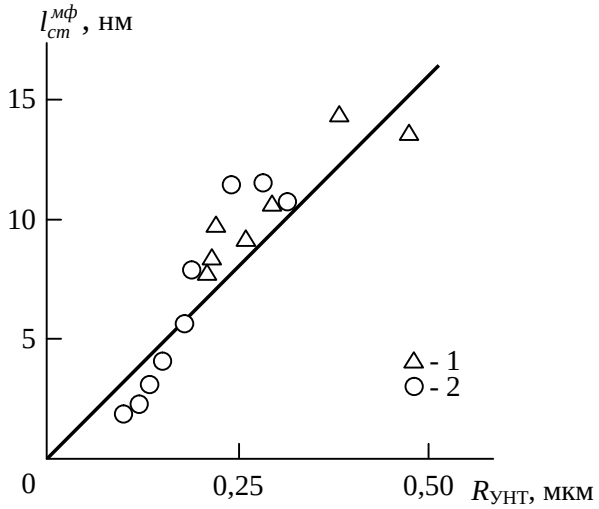


Рисунок 1 – Зависимость длины статистического сегмента в межфазном слое $l_{cm}^{мф}$ от радиуса кольцеобразных структур УНТ (УНВ) $R_{\text{УНТ}}$ для нанокомпозитов ПП/УНТ (1) и ПП/УНВ (2)

Поэтому следует ожидать, что чем больше длина статистического сегмента l_{cm} объемной полимерной матрицы, тем легче протекает «вытяжка» полимерной цепи на поверхности нанонаполнителя. Кроме того, критическим фактором является степень взаимодействия полимерная матрица–нанонаполнитель, т.е. уровень межфазной адгезии, который можно охарактеризовать с помощью безмерного параметра b_α [10]. Следовательно, можно ожидать, что величина $l_{cm}^{мф}$ будет увеличиваться по мере роста комплексного параметра ($l_{cm}b_\alpha/R_{\text{УНТ}}$). Рассмотрим методы оценки параметров l_{cm} и b_α. Длина статистического сегмента l_{cm} определяется следующим образом [10]:

$$l_{cm} = l_0 C_\infty, \tag{6}$$

где l_0 – длина скелетной связи основной цепи, равная для ПП 0,154 нм [12], C_∞ – характеристическое отношение, которое связано с фрактальной размерностью d_f структуры полимерной матрицы соотношением [12]

$$C_\infty = \frac{2d_f}{d(d-1)(d-d_f)} + \frac{4}{3}, \tag{7}$$

где d – размерность евклидова пространства, в котором рассматривается фрактал (очевидно, в нашем случае d=3).

Размерность d_f можно определить согласно уравнению [13]

$$d_f = (d-1)(1+\nu), \tag{8}$$

где ν – коэффициент Пуассона, оцениваемый по результатам механических испытаний с помощью соотношения [14]

$$\frac{\sigma_T}{E_н} = \frac{1-2\nu}{6(1+\nu)}, \tag{9}$$

где σ_T и $E_н$ – предел текучести и модуль упругости нанокомпозита, соответственно.

Параметр b_α можно определить с помощью следующего перколяционного соотношения [10]:

$$\frac{E_н}{E_м} = 1 + 11(c\varphi_н b_\alpha)^{1,7}, \tag{10}$$

где c – постоянный коэффициент, равный примерно 2,8 для углеродных нанотрубок [10].

На *рисунке 2* приведено соотношение между параметрами ($l_{ст}b_\alpha/R_{УНТ}$) и $l_{ст}^{мф}$, которое показало их примерное равенство. Однако здесь следует отметить очень важный методологический аспект. В первоначальном варианте соотношения ($l_{ст}b_\alpha/R_{УНТ}$) – $l_{ст}^{мф}$ для нанокомпозитов ПП/УНТ и ПП/УНВ выражаются прямыми с разным наклоном и для их нормализации в случае нанокомпозитов ПП/УНВ использован коэффициент приведения ($D_{УНТ}/D_{УНВ}$), где $D_{УНТ}$ и $D_{УНВ}$ – диаметр УНТ и УНВ, соответственно, для комплексного параметра ($l_{ст}b_\alpha/R_{УНТ}$). Указанный коэффициент учитывает влияние повышения кривизны поверхности УНВ по сравнению с УНТ в направлении, перпендикулярном оси УНТ (УНВ), тогда как радиус $R_{УНТ}$ учитывает этот фактор в направлении, параллельном оси УНТ (УНВ).

Примерное равенство приведенных на *рисунке 2* параметров позволяет получить следующее уравнение для оценки теоретической величины параметра b_α (b_α^T):

$$b_\alpha^T = \frac{l_{ст}^{мф} R_{УНТ}}{l_{ст}}. \tag{11}$$

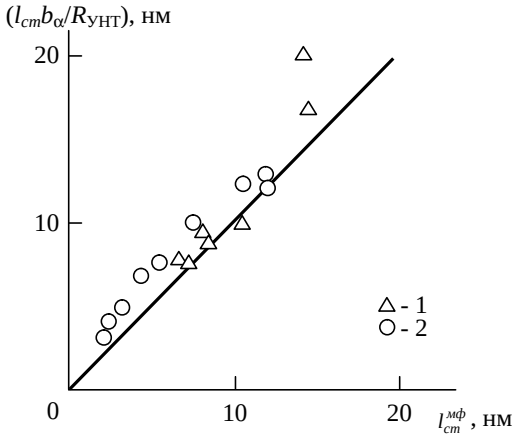


Рисунок 2 – Сравнение длины статистического сегмента в межфазном слое $l_{ст}^{мф}$ и комплексного параметра ($l_{ст}b_\alpha/R_{УНТ}$) для нанокомпозитов ПП/УНТ (1) и ПП/УНВ (2)

На *рисунке 3* приведено сравнение величин параметров b_α и b_α^T, рассчитанных согласно уравнениям (10) и (11), соответственно. Как можно видеть, получено достаточно хорошее соответствие результатов обоих методов расчета, которое показывает, что уровень межфазной адгезии повышается по

мере усиления «вытяжки» полимерной цепи на поверхности нанонаполнителя, т. е. увеличения $l_{cm}^{мф}$, повышения радиуса кольцеобразных структур УНТ (УНВ) $R_{УНТ}$, тесно связанного с параметром $l_{cm}^{мф}$ (см. уравнение (5)) и снижения l_{cm}, т. е. по существу уменьшения фрактальной размерности структуры d_f (см. уравнения (6) и (7)). Отметим, что отношение $l_{cm}^{мф}/l_{cm}$ по своему физическому смыслу является кратностью «вытяжки» полимерной цепи в межфазном слое по сравнению с объемной полимерной матрицей.

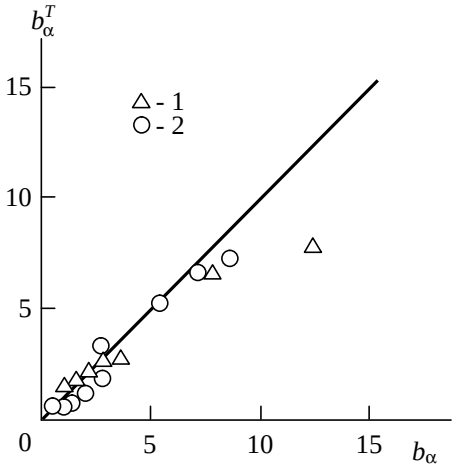


Рисунок 3 – Сравнение рассчитанных согласно уравнениям (10) и (11) параметров b_α и b_α^T, соответственно, для нанокомпозитов ПП/УНТ (1) и ПП/УНВ (2)

Авторы [15] обнаружили увеличения характеристического отношения C_∞ (т. е., по существу, $l_{cm}^{мф}$) по мере роста произведения $b_\alpha W_н$ для нанокомпозитов линейный полиэтилен низкой плотности/органоглина. Однако для рассматриваемых нанокомпозитов получен противоположный эффект – снижение C_∞ (или $l_{cm}^{мф}$) по мере роста указанного произведения. Поэтому в указанное соотношение $C_\infty(b_\alpha W_н)$ для нанокомпозитов ПП/УНТ и ПП/УНВ был введен параметр $R_{УНТ}$. На *рисунке 4* приведена зависимость $C_\infty^{мф}$, рассчитанного согласно уравнению (6) по известным значениям $l_{cm}^{мф}$, от комплексного параметра ($b_\alpha W_н R_{УНТ}$). В этом случае получено ожидаемое увеличение $C_\infty^{мф}$ по мере роста $b_\alpha W_н R_{УНТ}$, хотя и с достаточно большим разбросом данных. Тем не менее, указанное соотношение наглядно демонстрирует определяющую роль кольцеобразных структур УНТ (УНВ) в формировании свойств соответствующих нанокомпозитов.

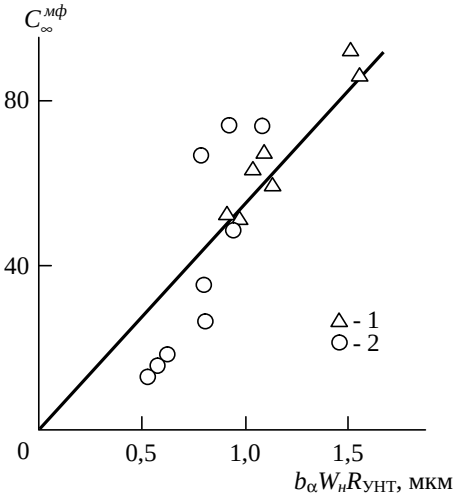


Рисунок 4 – Зависимость характеристического отношения $C_\infty^{мф}$ полимерных цепей в межфазном слое от комплексного параметра ($b_\alpha W_н R_{УНТ}$) для нанокомпозитов ПП/УНТ (1) и ПП/УНВ (2)

И наконец, сочетание уравнений (1) и (5) позволило получить следующее уравнение для прогнозирования степени усиления $E_н/E_м$ нанокомпозитов, наполненных УНТ (УНВ):

$$\frac{E_н}{E_м} = 1 + \frac{0{,}59 \times 10^{-2} W_н R_{УНТ}}{D_{УНТ}^{1/2}}, \qquad (12)$$

где $W_н$ дается в масс. %, $R_{УНТ}$ и $D_{УНТ}$ – в нм.

Сравнение уравнений (2)–(4) и (12) демонстрирует, что при таком методе прогнозирования степени усиления необходимо знание следующих параметров: $L_{УНТ}$, $D_{УНТ}$ и $W_н$, т. е. параметров, которые известны до получения нанокомпозитов, причем два первых параметра представляют геометрию УНТ (УНВ), а величина $W_н$ (или $\varphi_н$) существенно влияет на нее (см. уравнение (2)). В *таблице 1* приведено сравнение экспериментальных $E_н/E_м$ и рассчитанных согласно уравнениям (2)-(4) и (12) $(E_н/E_м)^T$ величин степени усиления для рассматриваемых нанокомпозитов вместе с расхождением между теорией и экспериментом Δ. Как следует из приведенных данных, получено достаточно хорошее соответствие теории и эксперимента со средним значением Δ=5,9 %, что является вполне достаточной точностью для целей предварительного прогнозирования.

Таблица 1 – Прогнозирование степени усиления $E_н/E_м$ нанокомпозитов ПП/УНТ и ПП/УНВ

Нанокомпозит	$W_н$, масс. %	$E_н/E_м$	$(E_н/E_м)^T$, уравнение (12)	Δ, %
ПП/УНТ	0,25	1,19	1,10	7,6
	0,50	1,29	1,16	10,0
	1,0	1,30	1,26	3,1
	1,5	1,32	1,34	1,5
	2,0	1,34	1,41	5,2
	2,5	1,35	1,47	4,4
	3,0	1,41	1,54	9,2
ПП/УНВ	0,15	1,06	1,06	-
	0,25	1,11	1,09	1,8
	0,50	1,22	1,12	8,2
	0,75	1,22	1,17	4,1
	1,0	1,20	1,20	-
	1,5	1,22	1,26	3,3
	2,0	1,20	1,32	10,0
	2,5	1,21	1,33	9,9
	3,0	1,20	1,40	16,7

Выводы

Результаты настоящей работы продемонстрировали, что геометрия углеродных нанотрубок (нановолокон), характеризуемая их длиной и диаметром и, в конечном итоге, радиусом формируемых кольцеобразных структур, оказывает критическое влияние на свойства полимерных нанокомпозитов. Уровень межфазной адгезии в указанных нанокомпозитах определяется совместным влиянием характеристик как полимерной матрицы, так и нанонаполнителя. Знание геометрии углеродных нанотрубок (нановолокон) и их содержания позволяет прогнозировать степень усиления полимерных нанокомпозитов с достаточно высокой точностью.

Библиография

1. Schaefer D.W., Justice R.S. How nano are nanocomposites? // Macromolecules. 2007. V. 40, N 24. P. 8501–8517.

2. Козлов Г.В., Яновский Ю.Г., Жирикова З.М., Алоев В.З., Карнет Ю.Н. Геометрия углеродных нанотрубок в среде полимерных композитных материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. 2012. Т. 18, N 1. С. 131–153.

3. Атлуханова Л.Б., Долбин И.В. Взаимосвязь свойств и степени дисперсии нанонаполнителя для нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки // Наноиндустрия. 2024. Т. 17, N 1. С. 74–79.

4. Магомедов М.А., Долбин И.В. Оценка степени усиления нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки в рамках микромеханической и перколяционной моделей // Справочник. Инженерный журнал. 2024. N 7 (328). С. 3–7.

5. Долбин И.И., Долбин И.В., Квашин В.А., Чавдарь У.Д. Структурная модель процесса горения нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2025. Т. 15, N 4. С. 10–13.

6. Магомедов Г.М., Козлов Г.В., Долбин И.В. Специфические особенности структуры углеродных нанотрубок при их ультрамалом содержании в полимерных нанокомпозитах // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2025. Т. 15, N 2. С. 15–19.

7. Козлов Г.В., Долбин И.В., Карнет Ю.Н., Власов А.Н., Долбин И.И. Моделирование углеродных нанотрубок (нановолокон) как макромолекулярных клубков – модель свободносочлененной цепи // Механика композиционных материалов и конструкций. 2025. Т. 31, N 1. С. 74–81.

8. Долбин И.И., Долбин И.В. Зависимость порога перколяции углеродных нанотрубок от степени их дисперсности в полимерной матрице нанокомпозитов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 2. С. 11–15.

9. Пфейфер П. Взаимодействие фракталов с фракталами: адсорбция полистирола на пористой поверхности Al_2O_3 // Фракталы в физике / ред. Пьетронеро Л., Тозатти Э. М.: Мир, 1988. С. 72–81.

10. Микитаев А.К., Козлов Г.В., Заиков Г.Е. Полимерные нанокомпозиты: многообразие структурных форм и приложений. М.: Наука, 2009. 278 с.

11. Bridge B. Theoretical modeling of the critical volume fraction for percolation conductivity in fibre-loaded conductive polymer composites // J. Mater. Sci. Lett. 1989. V. 8, N 2. P. 102–103.

12. Козлов Г.В., Овчаренко Е.Н., Микитаев А.К. Структура аморфного состояния полимеров. М.: Изд-во РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2009. 392 с.

13. Баланкин А.С. Синергетика деформируемого тела. М.: Изд-во Министерства Обороны СССР, 1991. 404 с.

14. Козлов Г.В., Сандитов Д.С. Ангармонические эффекты и физико-механические свойства полимеров. Новосибирск: Наука, 1994. 261 с.

15. Джангуразов Б.Ж., Козлов Г.В., Микитаев А.К. Структура и свойства нанокомпозитов полимер/органоглина. М.: Изд-во РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2013. 316 с.

References

1. Schaefer D.W., Justice R.S. How nano are nanocomposites? *Macromolecules*. 2007;40(24):8501–8517.

2. Kozlov G.V., Yanovsky Yu.G., Zhirikova Z.M., Aloev V.Z., Karnet Yu.N. Geometry of carbon nanotubes in a polymer composite material matrix. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsii = Journal on Composite Mechanics and Design*. 2012;18(1):131–153. (In Russ.).

3. Atlukhanova L.B., Dolbin I.V. The interconnection of properties and dispersion degree of nanofiller for nanocomposites polymer/carbon nanotube. *Nanoindustriya = Nanoindustry*. 2024;17(1):74–79. (In Russ.).

4. Magomedov M.A., Dolbin I.V. Assessment of the reinforcement degree of polymer/carbon nanotube nanocomposites within the framework of micromechanical and percolation models. *Spravochnik. Inzhenernyi Zhurnal = Reference Guide. Engineering Journal*. 2024;7(328):3–7. (In Russ.).

5. Dolbin I.I., Dolbin I.V., Kvashin V.A., Chavdar U.D. Structural model of the combustion process of polymer/carbon nanotube nanocomposites. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2025;15(4):10–13. (In Russ.).

6. Magomedov G.M., Kozlov G.V., Dolbin I.V. Specific structural features of carbon nanotubes at ultralow concentrations in polymer nanocomposites. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2025;15(2):15–19. (In Russ.).

7. Kozlov G.V., Dolbin I.V., Karnet Yu.N., Vlasov A.N., Dolbin I.I. Modeling carbon nanotubes (nanofibers) as macromolecular coils: the freely jointed chain model. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsii = Journal on Composite Mechanics and Design*. 2025;31(1):74–81. (In Russ.).

8. Dolbin I.I., Dolbin I.V. Dependence of the carbon nanotube percolation threshold on the degree of their dispersion in the polymer matrix of nanocomposites. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(2):11–15. (In Russ.).

9. Pfeifer P. Fractal-fractal interaction: adsorption of polystyrene on a porous Al2O3 surface // In: Fractals in Physics / Eds. Pietronero L., Tosatti E. Moscow: Mir; 1988. P. 72–81. (In Russ.).

10. Mikitaev A.K., Kozlov G.V., Zaikov G.E. Polymer Nanocomposites: Diversity of Structural Forms and Applications. Moscow: Nauka; 2009. 278 p. (In Russ.).

11. Bridge B. Theoretical modeling of the critical volume fraction for percolation conductivity in fibre-loaded conductive polymer composites. *J. Mater. Sci. Lett*. 1989;8(2):102–103.

12. Kozlov G.V., Ovcharenko E.N., Mikitaev A.K. Structure of the Amorphous State of Polymers. Moscow: D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia Press; 2009. 392 p. (In Russ.).

13. Balankin A.S. Synergetics of a Deformable Body. Moscow: USSR Ministry of Defense Press; 1991. 404 p. (In Russ.).

14. Kozlov G.V., Sanditov D.S. Anharmonic Effects and Physicomechanical Properties of Polymers. Novosibirsk: Nauka; 1994. 261 p. (In Russ.).

15. Dzhangurazov B.Zh., Kozlov G.V., Mikitaev A.K. Structure and Properties of Polymer/Organoclay Nanocomposites. Moscow: D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia Press; 2013. 316 p. (In Russ.).

© Долбин И.И., Долбин И.В., Кочетков А.С., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 18–23.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):18–23.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 620.22

Исследование влияния анизотропии поверхности органических волокон на фрикционный износ композитов на основе полиарилата

Заира Муссавна Жирикова[1], Владимир Закиевич Алоев[2]

[1,2]Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет им. В.М. Кокова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]zaira.dumaeva@mail.ru
[2]aloev56@list.ru

Аннотация. Статья посвящена исследованию влияния органических волокон на фрикционный износ композитов на основе полиарилата. Показано увеличение относительной доли областей локального порядка (кластеров) в структуре полимерной матрицы с увеличением объемного содержания волокон. Уплотнение структуры полимерной матрицы определяется анизотропией макромолекул в межфазном слое полимер-наполнитель, обусловленной вытяжкой парных макромолекулярных цепей полиарилата на поверхности волокон (фибрилизацией). Указанные изменения структуры вызывают существенную вариацию фрикционного износа этих материалов.

Ключевые слова: композит, полиарилат, углен, вниивлон, анизотропия, фрикционный износ, фибриллизация

Для цитирования: Жирикова З.М., Алоев В.З. Исследование влияния анизотропии поверхности органических волокон на фрикционный износ композитов на основе полиарилата // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 18–23.

PHYSICS

Original article

Study of the effect of anisotropy of the surface of organic fibers on friction wear of polyarylate-based composites

Zaira M. Zhirikova[1], Vladimir Z. Aloev[2]

[1,2]Kabardino-Balkarian State Agricultural University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]zaira.dumaeva@mail.ru
[2]aloev56@list.ru

Abstract.The article is devoted to the study of the effect of organic fibers on the frictional wear of polyarylate-based composites. An increase in the relative proportion of regions of local strand (clusters) in the structure of the polymer matrix with an increase in the volume content of fibers is shown. The densification of the polymer matrix structure is determined by the anisotropy of macromolecules in the polymer-filler interfacial layer due to the stretching of macromolecular vapor chains on the surface of the fibers (fibrilization). These structural changes cause substantial variation in the frictional wear of these materials.

Keywords: composite, polyarylate, coal, vignivlon, anisotropy, frictional wear, fibrillation

For citation: Zhirikova Z.M., Aloev V.Z. Study of the effect of anisotropy of the surface of organic fibers on friction wear of polyarylate-based composites. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):18–23 (In Russ.).

Введение

В настоящее время одним из эффективных способов упрочнения полимерных материалов является наполнение их ориентированными органическими волокнами, имеющих ряд специфических особенностей по сравнению с дисперсными наполнителями [1]. Ориентированные волокна являются очень перспективными наполнителями для полимерных матриц в силу двух своих специфических особенностей: высокой степени анизотропии (их аспектное отношение α, т. е. отношение длина/диаметр может достигать 1500) и высокого модуля упругости порядка 1 ТПа [2].

Авторами работы [3] было высказано предположение, что фибриллярная структура поверхности волокон приводит к большей фрикционной устойчивости по сравнению с изотропной структурой аналогичных волокон. Кроме того, авторы [3] методами ИК-спектроскопии продемонстрировали наличие водородных связей на границе раздела волокон углен и вниивлон с полиарилатом (ПАР), который использован в качестве связующего. Наличие таких связей предполагает анизотропию макромолекул ПАР на границе раздела, что также должно сказаться на фрикционной износоустойчивости композита. Такое «копирование» основных особенностей поверхности волокна приграничными слоями полимера хорошо иллюстрируется на примере системы ПАР-терлон. Это волокно имеет кристаллическую структуру, что вызывает кристаллизацию ПАР до степени кристалличности ~0,20 [3], тогда как аморфные углен и вниивлон такого эффекта не дают.

Исходя из сказанного целью настоящей работы является исследование влияния анизотропии поверхности волокон углен и вниивлон на фрикционный износ композитов на основе полиарилата.

Экспериментальная часть

В качестве матричного полимера использован полиарилат (ПАр) марки ДВ-102, а в качестве наполнителя органические волокна (углен, вниилон). Концентрация наполнителей в композитах варьировалась в пределах 5–35 масс. % [3]. Плотность углена равна 1240 кг/м^3, а вниивлона – 1100 кг/м^3.

Образцы для испытаний готовили методом "сухого" смешения компонентов во вращающемся электромагнитном поле. В реактор загружали порошкообразные полимер, углеродные волокна (УВ) и неравновесные ферромагнитные частицы длиной 40 мм. Реактор помещали в расточку генератора электромагнитного аппарата. Под воздействием вращающегося электромагнитного поля ферромагнитные частицы начинали движение, сталкиваясь друг с другом. Это приводило к хаотическому распределению УВ в полимерной матрице. В процессе соударений происходило истирание ферромагнитных частиц, и продукты износа включались в состав композиции. Для удаления ферромагнитных частиц из смеси применяли магнитную и механическую сепарацию [4, 5].

Исследование интенсивности фрикционного износа проведено в условиях сухого трения. Для этого блочные образцы подвергались износу без использования смазочных материалов. Условия эксперимента: нагрузка – 0,15 МПа, скорость скольжения – 0,25 м/с, путь трения – 1000 м. Испытания проводились по схеме «диск-пальчик» на дисковой машине трения СМЦ-2. Схема установки представлена на *рисунке 1*. Машина приводится в движение электродвигателем постоянного тока 1. Крутящий момент от двигателя передается на вертикальный вал 2 через ременную передачу. На этот вал устанавливается сменный диск 3, изготовленный из стали 45 (ГОСТ 1050-2013) и термообработанный до твердости 45–48 HRC. Поверхность диска имеет шероховатость R_a = 0,16–0,32 мкм. К жестко закрепленной крестовине 4 независимо крепятся три рычага 5, в которых размещаются образцы композитов 6. Нормальное давление на образцы создается с помощью съемных грузов 7, устанавливаемых на рычагах. Независимые положения рычагов (отношения плеч 1:2:6) позволяют одновременно испытывать от 1 до 3 образцов. Во время эксперимента частицы износа удаляются с поверхности диска с помощью трех щеток 9. Точность измерения силы трения и линейного износа составляет ± 5 %. Перед началом испытаний проводится приработка диска трением по образцу в течение 20 секунд, после чего диск промывается бензином для удаления загрязнений. К жестко закрепленной крестовине 4 независимо крепятся три рычага 5, в кото-

рых размещаются образцы композитов 6. Нормальное давление на образцы создается с помощью съемных грузов 7, устанавливаемых на рычагах. Независимые положения рычагов (отношения плеч 1:2:6) позволяют одновременно испытывать от 1 до 3 образцов.

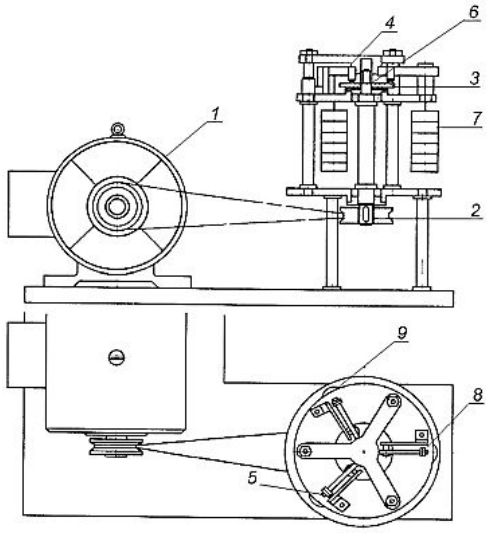


Рисунок 1 – Дисковая машина трения

Износ образцов определялся весовым методом с использованием аналитических весов ВЛР-200 с точностью до ± 0,1 мг. Интенсивность линейного износа рассчитывалась по методике, изложенной в работе [6].

Рентгеноструктурные исследования выполняли на приборе ДРОН-3 по методу Брэгга – Бренетано в интервале углов 2θ = 10–70°. Использовали CuK_α – излучение, фильтрованное *Ni* – фильтром.

Результаты и обсуждение

На *рисунке 2* приведены дифракционные рентгеновские кривые для ПАР, углена и углепластиков на основе ПАР с разным объемным содержанием углена $\varphi_н$.

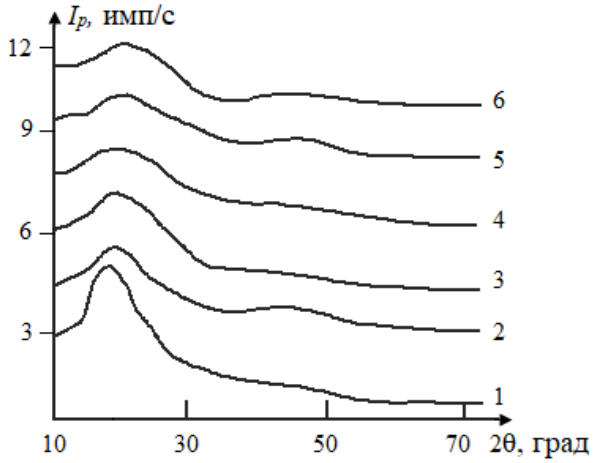


Рисунок 2 – Дифракционные рентгеновские кривые для полиарилата (1), композитов на основе полиарилата с объемным содержанием углена 0,038 (2), 0,114 (3), 0,195 (4), 0,282 (5) и углена (6)

Как можно видеть, по мере роста $\varphi_н$ наблюдается снижение интенсивности I_p аморфного углепластика и смещение его максимума в сторону больших углов рассеивания 2θ. Подобное изменение дифракционных кривых указывает на увеличение относительной доли областей локального порядка (кластеров) $\varphi_{кл}$ в структуре полимерной матрицы и уменьшение межцепного расстояния по мере роста $\varphi_н$ [7].

Следует отметить, что в данной работе принято обобщенное определение кластеров: это участки структуры, состоящие из сегментов с «замороженной» молекулярной подвижностью [8]. Кроме того, на

уплотнение структуры полимерной матрицы по мере роста $\varphi_н$ указывают измерения плотности композитов ρ: экспериментальная величина ρ выше аддитивной, причем это различие растет по мере увеличения $\varphi_н$ [3]. Зависимость между параметрами I_p и $\varphi_{кл}$ может быть описана соотношением [7]

$$\varphi_{кл}^{-1} = CI_p \ , \tag{1}$$

где C – константа.

Оценка значения C для исследуемых композитов может быть выполнена следующим образом. Для исходного ПАР величину $\varphi_{кл}$ можно определить из перколяционного соотношения [9]

$$\varphi_{кл} \approx 0,03\left(T_c - T\right)^{0,55}, \tag{2}$$

где T_c и T – соответственно температуры стеклования и испытания

Затем значение C определяется как обратная величина произведения полученного таким образом значения $\varphi_{кл}$, и экспериментальной величины I_p для ПАр:

$$C = \frac{1}{\varphi_н \cdot I_p} \tag{3}$$

На основании этого можно предположить, что уплотнение структуры полимерной матрицы (согласно расчету по уравнению (1) дает повышение $\varphi_{кл}$ от 0,514 для исходного ПАр до 0,887 для композита ПАр-углен с объемным содержанием углена 0,282) определяется анизотропией макромолекул в межфазном слое полимер-наполнитель, обусловленной наличием анизотропии структуры поверхности волокон и водородных связей между угленом и ПАр [3]. Иначе говоря, предполагается вытяжка макромолекул ПАр на поверхности волокон наполнителя. Степень этой вытяжки можно оценить с помощью фрактальной размерности D_y участка цепи между точками ее фиксации [10], которую можно рассчитать с помощью уравнения

$$\frac{2}{\varphi_{кл}} = C_\infty^{D_y}, \tag{4}$$

где C_∞ – характеристическое отношение, которое является показателем статистической гибкости полимерной цепи. Для ПАр C_∞ = 2,3 [11].

На *рисунке 3* приведена зависимость рассчитанной согласно уравнению (4) фрактальной размерности D_y от объемного содержания углена и вниивилона в рассматриваемых композитах. Как и следовало ожидать, наблюдается снижение D_y по мере роста $\varphi_{кл}$, предполагающее процесс вытяжки цепей ПАр на поверхности волокон (фибриллизацию). При $\varphi_н \approx 0,25$ достигается асимптотическое значение $D_y \approx 1,05$, означающее почти полную потерю молекулярной подвижности для цепей ПАР. Необходимо отметить, что для указанных композитов минимальная величина интенсивности линейного изнашивания I достигается примерно при $\varphi_{кл} \approx 0,2–0,22$.

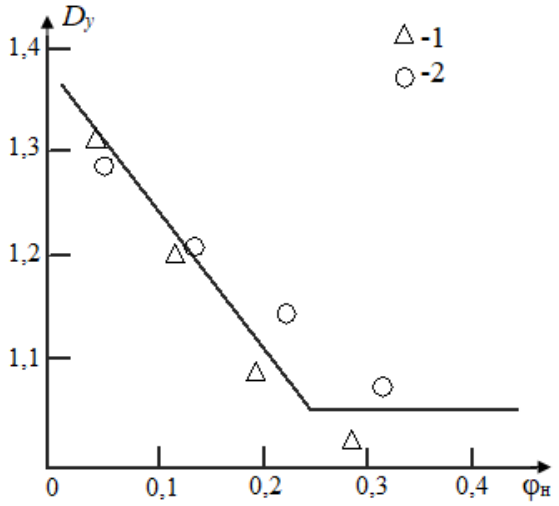


Рисунок 3 – Зависимость фрактальной размерности D_y участка цепи между кластерами от объемного содержания волокон $\varphi_н$ для композитов ПАр-углен (1) и ПАр- вниивлон (2)

Еще одним фактором, влияющим на фибриллизацию полимера на поверхности волокон, является площадь их суммарной поверхности, пропорциональная величине $\varphi_н$ – чем больше эта площадь, тем выше концентрация активных мест, способных формировать водородные связи полимер-наполнитель. Исходя из сказанного выше, следует ожидать, что уменьшение D_y и повышение $\varphi_н$ приведет к снижению I.

На *рисунке 4* приведена зависимость I от величины отношения $D_y/\varphi_н$, которая достаточно хорошо аппроксимируется линейной корреляцией, проходящей через начало координат. Такой ход зависимости I ($D_y/\varphi_н$) показывает, что интенсивность фрикционного изнашивания уменьшается по мере увеличения числа водородных связей и степени вытяжки (фибриллизацией) полимерных цепей поверхности анизотропных волокон в полимерных композитах.

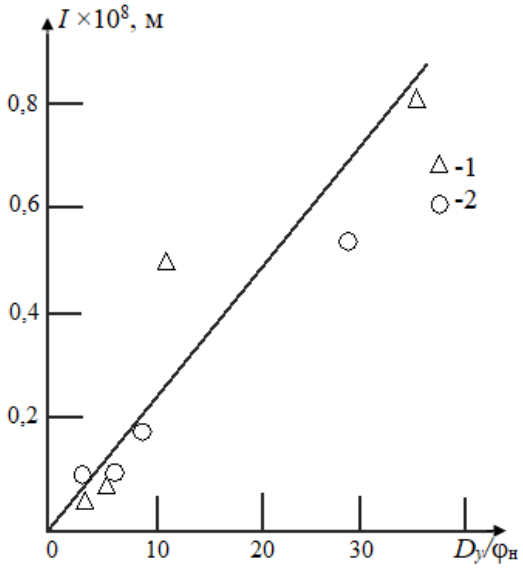


Рисунок 4 – Зависимость интенсивности линейного изнашивания I от величины отношения ($D_y/\varphi_н$) для композитов ПАр-углен (1) и ПАр-вниивлон (2)

Выводы

Результаты настоящей работы показывают влияние анизотропии структуры поверхности коротких волокон на структуру межфазного слоя в полимерных композитах. В свою очередь, указанные изменения структуры вызывают существенную вариацию фрикционного износа этих материалов. В этом аспекте важную роль играет наличие водородных связей полимер-волокно.

Библиография

1. Липатов Ю.С. Межфазные явления в полимерах. Киев: Наукова думка, 1980. 260 с.
2. Kim H., Abdala A.A., Macosko C.W. Graphene/Polymer Nanocomposites // Macromolecules. 2010. V. 43, N 16. P. 6515–6530.
3. Буря А.И., Чигвинцева О.П. Сучилина-Соколенко С.П. Полиарилаты. Синтез, свойства, композиционные материалы. Днепропетровск: Наука и образование, 2001. 152 с.
4. Козлов Г.В., Буря А.И., Алоев В.З., Яновский Ю.Г. Структурный аспект межфазной адгезии в углепластиках // Физическая мезомеханика. 2005. Т. 8, N 2. С. 35–38.
5. Буря А.И., Козлов Г.В. Структурные аспекты трения и износа углепластиков на основе фенилона // Трение и износ. 2003. Т. 24, N 3. С. 279–283.
6. Алоев В.З., Жирикова З.М. Исследование фрикционного износа конструкционных углепластиков // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2025. Т. 15, N 4. С. 5–9.
7. Козлов Г.В., Белошенко В.А., Шогенов В.Н., Липатов Ю.С. Локальная деформация пленок полиарилатеульфона // Доклады НАН Украины. 1995. N 5. С. 100–102.
8. Kozlov G.V., Zaikov G.E. Structure pf the Polymer Amorphous State. Leiden-Boston. Brill Academic Publishers, 2004. 465 p.

9. Козлов Г.В., Газаев М.А., Новиков В.У., Микитаев А.К. Моделирование структуры аморфных полимеров как перколяционного кластера // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22, N 6. С. 31–38.

10. Козлов Г.В., Новиков В.У. Синергетика и фрактальный анализ сетчатых полимеров. М.: Классика, 1998. 112 с.

11. Будтов Г.В. Физическая химия полимерных растворов. СПб.: Химия, 1992. 384 с.

References

1. Lipatov Yu.S. Interphase phenomena in polymers. Kiev: Naukova dumka; 1980. 260 p. (In Russ.).

2. Kim H., Abdala A.A., Macosko C.W. Graphene/Polymer Nanocomposites. *Macromolecules*. 2010; 43(16):6515–6530.

3. Burya A.I., Chigvintseva O.P., Suchilina-Sokolenko S.P. Polyarylates. Synthesis, properties, composite materials. Dnepropetrovsk: Nauka i obrazovanie; 2001. 152 p. (In Russ.).

4. Kozlov G.V., Burya A.I., Aloev V.Z., Yanovskiy Yu.G. The structural aspect of interfacial adhesion in carbon fiber plastics. *Fizicheskaya mezomekhanika = Physical Mesomechanics*. 2005;8(2):35–38. (In Russ.)

5. Burya A.I., Kozlov G.V. Structural aspects of friction and wear of carbon fiber plastics based on phenylene. *Trenie i iznos = Journal of Friction and Wear*. 2003; 24(3):279–283. (In Russ.).

6. Aloev V.Z., Zhirikova Z.M. Investigation of frictional wear of structural carbon plastics. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2025;15(4):5–9. (In Russ.).

7. Kozlov G.V., Beloshenko V.A., Shogenov V.N., Lipatov Yu.S. Local deformation of polyarylateulfone films. *Doklady NAN Ukrainy = Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine*. 1995; 5:100–102. (In Russ.)

8. Kozlov G.V., Zaikov G.E. Structure of the Polymer Amorphous State. Leiden-Boston: Brill Academic Publishers; 2004. 465 p.

9. Kozlov G.V., Gazaev M.A., Novikov V.U., Mikitaev A.K. Modeling of the structure of amorphous polymers as a percolation cluster. *Pisma v ZhTF = Technical Physics Letters*. 1996;22(6):31–38. (In Russ.).

10. Kozlov G.V., Novikov V.U. Modeling of the structure of amorphous polymers in the form of a percolation cluster. Moscow: Klassika; 1998. 112 p. (In Russ.)

11. Budtov G.V. Physical chemistry of polymer solutions. Sankt-Peterburg: Khimiya; 1992. 384 p. (In Russ.).

© Жирикова З.М., Алоев В.З., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 24–28.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):24–28.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 531.43

Ван-дер-ваальсово взаимодействие цилиндрических тел со стенками плоской щели

Анзор Азреталиевич Канаметов

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Нальчик, Россия
kanametov_a@mail.ru

Аннотация. Рассматривается ван-дер-ваальсово взаимодействие нейтрального тела цилиндрической формы со стенками плоской щели в случае, когда движение тела происходит параллельно поверхности. Показано, что как для параллельной, так и для перпендикулярной ориентации ван-дер-ваальсова сила трения значительно меньше силы статического притяжения.

Ключевые слова: сила Ван-дер-ваальса, ван-дер-ваальсово трение, наноразмерная щель, нанотрубка, наностержень

Для цитирования: Канаметов А.А. Ван-дер-ваальсово взаимодействие цилиндрических тел со стенками плоской щели // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 24–28.

PHYSICS

Original article

Van-der -waals interaction of cylindrical bodies with a flat walls of a gap

Anzor A. Kanametov
Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
kanametov_a@mail.ru

Abstract. Van-der-waals interaction of an neutral cylindrical body moving along the flat surfaces of gap is considered. For the both of perpendicular and parallel orientation of nanotube dynamical frictional forces are much smaller than the static attractional one.

***Keywords*:** Van der Waals forces, Van der Waals friction, nanosized gap, nanotube, nanorod

For citation: Kanametov A.A. Van-der -waals interaction of cylindrical bodies with a flat walls of a gap. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):24–28. (In Russ.).

Введение

В статье рассматривается взаимодействие наночастиц цилиндрической формы (наностержни, нанотрубки) с плоскопараллельными стенками наноразмерной щели. Работа является продолжением [1], в которой рассматривалось динамическое ван-дер-ваальсово (ВДВ) взаимодействие между нанотрубкой и плоским образцом в модели сплошной среды. Так же, как и в [1] расчет проводится в рамках аддитивного незапаздывающего приближения.

Как уже отмечалось в работах [2, 3] тела цилиндрической формы часто рассматриваются в качестве рабочих элементов устройств нано- и микросистемной техники и по этой причине необходимы детальные знания о поведении таких частиц в различных системах. Одним из методов изучения взаимодействия наночастиц с макротелами, как известно, является измерение параметров динамики движения их в узких каналах и нанощелях [4]. Кроме того, знания о динамике движения наночастиц в микро- и наноразмерных щелях могут быть использованы, например, для анализа степени загрязненности газовых сред наночастицами в составе различных сенсоров и датчиков или для управления потоками частиц [5]. Знание механизмов взаимодействия наночастиц с макроскопическими телами имеет важное значение и в коллоидной химии [6]. Следует отметить также, что в последнее время значительный интерес обращен к неуглеродным нанотрубкам, наностержням, нановискерам [7].

В этой связи представляется актуальной задача разработки теоретической модели динамического ВДВ взаимодействия тел цилиндрической формы со стенками плоской щели с учетом их относительного движения и взаимной ориентации.

Теоретическая часть

В режиме латерального движения, когда наночастица движется вдоль поверхностей щели вдали от областей, на которых могут образоваться химические связи, взаимодействие обусловлено силами ВДВ притяжения (ВДВП) и ВДВ трения (ВДВТ).

В рамках аддитивного приближения для расчета притягивающих сил ВДВ между нанотрубкой и плоскими стенками, достаточно воспользоваться результатами работы [1]. При этом результирующая сила будет определяться суммой сил, создаваемых стенками щели. В качестве исходного используем выражение для силы ВДВ, учитывающее динамические эффекты и действующее на незаряженную малую частицу, движущуюся параллельно поверхности [8]. При равенстве температур взаимодействующих тел, латеральные и нормальные к поверхности образца силы, действующие на частицу, запишутся в виде двух выражений:

$$F_z = -\frac{3}{4\pi}\frac{\hbar}{z^4} r^3 I_z(\omega), \tag{1}$$

$$F_x = -\frac{3}{8\pi}\frac{\hbar^2 V}{z^5}\frac{r^3}{k_B T} I_x(\omega), \tag{2}$$

где z – расстояние между наночастицей и образцом, V – скорость частицы, T – температура частицы и образца, $\hbar$ и k_B – постоянные Планка и Больцмана, F_z – сила ВДВП, F_x – сила ВДВТ, а функции $I_z(\omega)$ и $I_x(\omega)$ определяются так же, как и в [1]. Характерные размеры щели не превышают 100 нм, поэтому эффекты запаздывания не принимаются в расчет.

Взаимодействие наностержня со стенками щели описывается выражениями, получающимися после интегрирования сил (1) и (2) по объему наностержня (аддитивное приближение). В результате, для наностержня при нормальной к поверхности ориентации (НО), получим конечные выражения для сил ВДВТ и ВДВП:

$$F_z = -\frac{9\hbar}{16\pi^2} I_z(\omega)\left(J_{lz}(z,R,H) - J_{wz}(D-z,R,H)\right), \tag{3}$$

$$F_x = -\frac{9}{32\pi^2}\frac{\hbar^2 V}{k_B T} I_x(\omega)\left(J_{lx}(z,R,H) - J_{wx}(D-z,R,H)\right), \tag{4}$$

где геометрические факторы $J_{lz}(z,R,H)$, $J_{wz}(D-z,R,H)$, $J_{lx}(z,R,H)$, $J_{wx}(D-z,R,H)$ зависят от ширины щели D, радиуса сплошного наностержня R и его длины H:

$$J_{lz}(z,R,H) = -\frac{\pi R^2}{3}\left(\frac{1}{(z+H)^3} - \frac{1}{z^3}\right), \tag{5}$$

$$J_{wz}(D-z,R,H) = -\frac{\pi R^2}{3}\left(\frac{1}{(D-z+H)^3} - \frac{1}{(D-z)^3}\right), \tag{6}$$

$$J_{lx}(z,R,H) = -\frac{\pi R^2}{4}\left(\frac{1}{(z+H)^4} - \frac{1}{z^4}\right). \tag{7}$$

$$J_{wx}(D-z,R,H) = -\frac{\pi R^2}{4}\left(\frac{1}{(D-z+H)^4} - \frac{1}{(D-z)^4}\right). \tag{8}$$

Полученные выражения легко применить для нанотрубок с открытыми или закрытыми концами, а так же нанотрубок, заполненных другим веществом, при незначительной модификации (3) и (4).

При параллельной ориентации (ПО) наностержня силы притяжения и трения принимают вид

$$F_z = -\frac{9\hbar}{16\pi^2} I_z(\omega)\left(G_{lz}(z,R,H) - G_{wz}(D-z,R,H)\right), \tag{9}$$

$$F_x = -\frac{9}{32\pi^2}\frac{\hbar^2 V}{k_B T} I_x(\omega)\left(G_{lx}(z,R,H) - G_{wx}(D-z,R,H)\right), \tag{10}$$

а соответствующие геометрические факторы $G_{lz}(z,R,H)$, $G_{wz}(D-z,R,H)$, $G_{lx}(z,R,H)$, $G_{wx}(D-z,R,H)$,

имеют вид

$$G_{lz}(z,R,H)=\pi H\left(\frac{R^2(z+R)}{\left((z+R)^2-R^2\right)^{5/2}}\right), \tag{11}$$

$$G_{wz}(D-z,R,H)=\pi H\left(\frac{R^2(D-z+R)}{\left((D-z+R)^2-R^2\right)^{5/2}}\right), \tag{12}$$

$$G_{lx}(z,R,H)=\frac{\pi HR^2}{4}\left(\frac{4(z+R)^2+R^2}{\left((z+R)^2-R^2\right)^{7/2}}\right), \tag{13}$$

$$G_{wx}(D-z,R,H)=\frac{\pi HR^2}{4}\left(\frac{4(D-z+R)^2+R^2}{\left((D-z+R)^2-R^2\right)^{7/2}}\right). \tag{14}$$

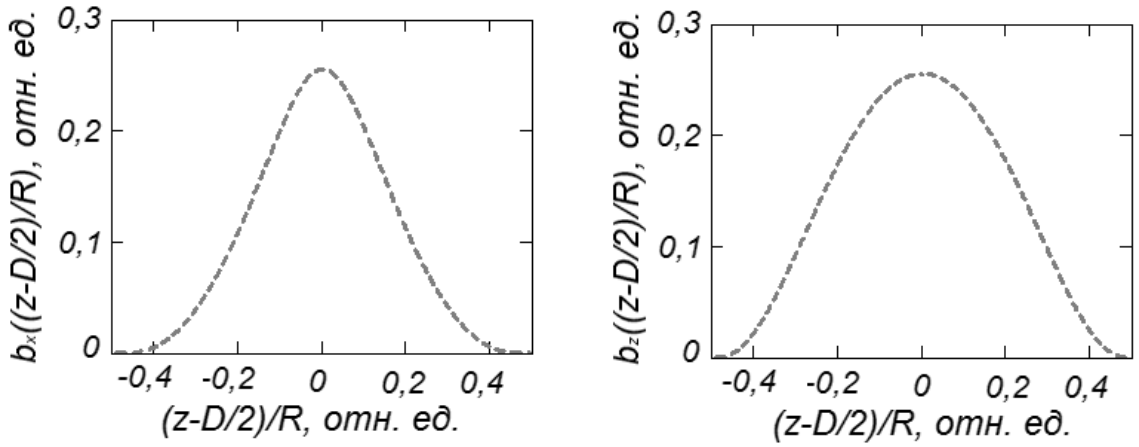
В качестве материалов пробного тела и образца выберем золото. В качестве модели диэлектрической проницаемости для всех взаимодействующих тел используем низкочастотное приближение (см. (4) в [1]), а для дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ частички вещества наностержня используем классическую модель:

$$\alpha(\omega)=r^3\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+2}, \tag{15}$$

где r – радиус наночастицы, $\varepsilon(\omega)$ – частотно-зависимая диэлектрическая проницаемость вещества наностержня. Принимая с приемлемой точностью статическую проводимость золота равной $\sigma=1.85\cdot10^{17}$ c^{-1}, для значений частотных интегралов $I_z(\omega)$ и $I_x(\omega)$, получим значения, различающиеся на 8 порядков величины ($I_z(\omega) > I_x(\omega)$). Из этого следует, что силы ВДВТ должны быть значительно слабее сил ВДВП. При T=300 К, V=1 м/с, R=2,5 нм, H=50 нм и D=100 нм, проведем расчеты для наностержня, ориентированного перпендикулярно и параллельно к поверхностям щели.

Результаты расчета и их обсуждение

Первоначально был проведен расчет для геометрических факторов сил. Анализ результатов, полученных для геометрических факторов сил трения и притяжения (*рисунок 1*) позволяет заключить, что вблизи центра щели, наблюдается максимум, который соответствует наибольшему совпадению величин для НО и ПО. Причем значения для ПО во всем диапазоне позиций наностержня оказываются по меньшей мере на порядок меньше аналогичных значений для НО в центре щели и на несколько порядков меньше вдали от центра.



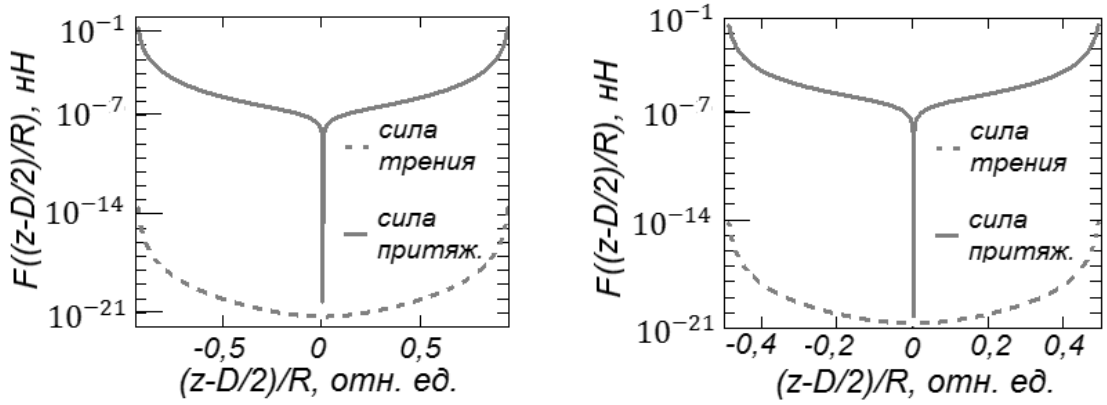
а б

Рисунок 1 – Отношение геометрических факторов при ПО к факторам при НО в зависимости от относительного положения $(z-D/2)/R$ наностержня в щели: а) для сил ВДВТ, б) для сил ВДВП. z – позиция геометрического центра наностержня в щели, D – ширина щели, R – радиус наностержня

Форма кривой, соответствующей силам ВДВТ и ее незначительное отличие от кривой для ВДВП, обусловлены более сильной зависимостью геометрических факторов от позиции наностержня, чем для сил ВДВП, хотя характер зависимостей практически схож.

Полученный результат является вполне ожидаемым с учетом того, что позиция наностержня относительно стенок щели отсчитывается (здесь и далее в расчетах сил) от геометрического центра наночастицы.

Как следует из результатов расчета сил, приведенных на *рисунках 2а* и *2б*, характер зависимостей сил от относительной позиции практически идентичен для разных ориентаций наностержня, отличаясь лишь незначительно. Величины сил ВДВП и ВДВТ для ПО оказываются примерно на порядок выше, чем для НО вблизи стенок щели. То же справедливо и для сил ВДВТ в центре щели. Обратная ситуация наблюдается для сил в центре щели. Относительно сил ВДВП, следует отметить, что точность значений отображаемых на рисунках для различных ориентаций, в этом случае ограничена шагом и погрешностями вычислений.



а б

Рисунок 2 – Абсолютные значения сил ВДВТ и ВДВП в зависимости от относительного положения (*z-D/2)/R* наностержня в щели: а) при ПО, б) при НО. *z* – позиция геометрического центра наностержня в щели, *D* – ширина щели, *R* – радиус наностержня

Из *рисунка 1б* видно, что в центре щели отношение факторов для сил ВДВП должно было асимптотически стремиться к единице, однако на графике мы этого не наблюдаем в силу того, что возникающая в этом случае неопределенность 0/0, по-видимому, не может быть раскрыта вычислительным алгоритмом программы.

Из *рисунка 2* следует, что силы трения при любой ориентации наностержня возрастают при приближении к стенкам щели и достигают ненулевого значения в её центре. Силы притяжения примерно на 13 порядков больше сил ВДВТ и ведут себя так же при приближении к стенкам щели, однако в центре щели резко падают до нуля, как и должно быть

В целом можно утверждать, что при различных ориентациях наностержня основной вклад в результирующую силу будут вносить силы ВДВП. Однако в центре щели и в её окрестности общая сила полностью определяется силой трения (хоть и очень слабой в сравнении с силой притяжения). В центре щели положение наностержня неустойчиво равновесное, а вдали от центра – неравновесное.

Выводы

В заключение следует отметить, что анализ обнаруженных зависимостей сил ВДВТ позволяет утверждать, что для хорошо проводящих материалов они не могут оказывать существенного влияния на движение частиц в щели, даже в её центральной части. В то же время, при наличии методов регистрации сверхслабых сил, центральная область щели является наиболее подходящей для изучения сил ВДВТ, поскольку силы ВДВП в ней существенно уменьшаются, вплоть до обнуления *(рисунок 2).* Соответственно, для изучения сил ВДВТ целесообразно рассматривать движение частиц вдали от центра щели.

Библиография

1. Канаметов А.А. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие цилиндрических тел с плоской поверхностью // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, N 3. С. 17–20.

2. Дедков Г.В., Рехвиашвили С.Ш. Нанотрубки и силовые взаимодействия в атомно-силовом микроскопе // Журнал технической физики. 1999. Т. 69, N 8. С. 124–127.

3. Запороцкова И.В., Борозина Н.П., Пархоменко Ю.Н., Кожитов Л.В. Сенсорные свойства углеродных нанотрубок // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2017. Т. 20, N 1. С. 5–21.

4. Дедков Г.В. О каналировании атомных пучков кэВ-ных энергий в плоских и цилиндрических каналах // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 2026. Т. 123, N 11. С. 799–803.

5. Artru X., Fomin S.P., Shul'ga N.F., Ispirian K.A., Zhevago N.K. Carbon nanotubes and fullerites in high-energy and x-ray physics // Phys. Rep. 2005. V. 412. P. 89–189.

6. Канаметов А.А. Сила ван-дер-ваальсова притяжения наночастицы к плоской поверхности // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. Серия физическая. 2016. Т. 6, N 4. С. 53–59.

7. Ivanovskii A.L. Non-carbon nanotubes: synthesis and simulation // Russian Chemical Reviews. 2002. V. 71, N 3. P. 175–194.

8. Дедков Г.В., Кясов А.А. Электромагнитное и флуктуационно-электромагнитное взаимодействие движущихся частиц и нанозондов с поверхностями. Нерелятивистское рассмотрение // Физика твердого тела. 2002. Т. 44, N 10. С. 1729–1763.

References

1. Kanametov A.A. Van-der-Waals interaction of cylindrical bodies with a flat surface. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2023;13(3):17–20. (In Russ.).

2. Dedkov G.V., Rehviashvili S.Sh. Nanotubes and force interactions in the atomic-force microscope. *Zhurnal Tekhnicheskoj fiziki = Technical Physics*. 1999;69(8):124–127. (In Russ.).

3. Zaporocova I.V., Borozina N.P., Parhomenko Y.N., Kojitov L.V. Sensory properties of carbon nanotubes. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy elektronnoy techniki = Materials of electronics engineering*. 2017;20(1):5–21. (In Russ.).

4. Dedkov G.V. On channeling of keV atomic beams in a flat and cylindrical channels. *Pis'ma v zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoj fiziki = Journal of experimental and theoretical physics*. 2026;123(11):799–803. (In Russ.).

5. Artru X., Fomin S.P., Shul'ga N.F., Ispirian K.A., Zhevago N.K. Carbon nanotubes and fullerites in high-energy and x-ray physics. *Physics Reports*. 2005;412:89–189.

6. Kanametov A.A. An attractional van-der-Waals force of nanoparticle to a flat surface. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2016;6(4):53–59. (In Russ.).

7. Ivanovskii A.L. Non-carbon nanotubes: synthesis and simulation. *Russian Chemical Reviews*. 2002;71(3):175–194.

8. Dedkov G.V., Kyasov A.A. Electromagnetic and fluctuation-electromagnetic interaction of nanoparticles and nanoprobes moving near a surfaces. Nonrelativistic approach. *Fizika tverdogo tela = Physics of the solid state*. 2002;44(10):1729–1763. (In Russ.).

© Канаметов А.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 29–32.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):29–32.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 678.01:539.4

Влияние температурно-временных параметров термической обработки на жесткость полипропиленовых пленок

Анатолий Сергеевич Кинкович[1], Ольга Олеговна Молоканова[2], Ольга Андреевна Молоканова[3]

[1,2,3]Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
[1]kinkovich2014@gmail.com
[2]o.o.molokanova@kbsu.ru
[3]olga-moskalyuk@mail.ru

Аннотация. Исследовано влияние температурно-временных параметров изотермической выдержки на модуль жесткости полипропиленовых пленок. Установлено, что изотермическая обработка улучшает упругие свойства материала, повышая модуль жесткости полипропиленовых пленок. При приложении нагрузки в продольном направлении наибольшие значения наблюдаются у пленок, обработанных при 408 K, а при приложении нагрузки в поперечном направлении 423 K.

Ключевые слова: полипропилен, пленки, термическая обработка, изотермическая выдержка, модуль жесткости

Для цитирования: Кинкович А.С., Молоканова О.О., Молоканова О.А. Влияние температурно-временных параметров термической обработки на жесткость полипропиленовых пленок // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 29–32.

PHYSICS

Original article

Effect of time temperature parameters of heat treatment on stiffness of polypropylene films

Anatolii S. Kinkovich[1], Olga O. Molokanova[2], Olga A. Molokanova[3]

[1,2,3]Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia
[1]kinkovich2014@gmail.com
[2]o.o.molokanova@kbsu.ru
[3]olga-moskalyuk@mail.ru

Abstract. The influence of isothermal holding temperature and time parameters on the stiffness modulus of polypropylene films was investigated. Isothermal treatment has been found to improve the elastic properties of the material by increasing the modulus of stiffness of the polypropylene films. When applying a load in the longitudinal direction, the highest values are observed for films processed during 408 K, and when applying a load in the transverse direction 423 K.

Keywords: polypropylene, films, heat treatment, isothermal holding, elastic modulus, degree of crystallinity

For citation: Kinkovich A.S., Molokanova O.O., Molokanova O.A. Effect of time temperature parameters of heat treatment on stiffness of polypropylene films. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):30–33. (In Russ.).

Введение

Полипропилен широко применяют для получения упаковочных и технических пленок. В процессе переработки и эксплуатации такие материалы подвергаются нагреву при экструзии, формовании полотна, фильерной вытяжке, термофиксации, ламинировании. Температурное воздействие возможно также при горячеей сушке. Поэтому свойства готовой пленки определяются не только характеристиками исходного полимера, но и его тепловой предысторией [1, 2].

Полипропилен состоит из упорядоченных кристаллических и менее упорядоченных аморфных участков. Его механические свойства зависят от их соотношения, а также от размера и строения кристаллических областей. Существенное влияние на структуру материала оказывают условия охлаждения расплава. При быстром охлаждении в полипропилене может формироваться промежуточная, менее упорядоченная кристаллическая структура. При более медленном снижении температуры формируются кристаллы моноклинной α-формы, которые объединяются в сферолиты. Поэтому изменение скорости охлаждения приводит к изменениям в структуре полимера и, как следствие, в его поведении при деформировании [3].

Степень кристалличности является одним из основных факторов, влияющих на жесткость полипропилена. В работе [2] показано, что модуль упругости частично кристаллических полимеров зависит от количества кристаллической фазы и размеров кристаллитов. При этом на жесткость также влияют строение кристаллических областей, состояние аморфной фазы и ориентация макромолекул [2-4]. Поэтому при нагреве модуль упругости может как увеличиваться вследствие дополнительной кристаллизации, так и снижаться из-за перестройки структуры материала.

В работах [1–7] рассмотрено влияние переработки, теплового воздействия, степени кристалличности и структуры на свойства полипропилена. Однако совместное влияние температуры и времени изотермической выдержки на жесткость полипропиленовых пленок изучено недостаточно.

Экспериментальная часть

Изготовление образцов полиолефиновой пленки осуществлялось методом плоскощелевой экструзии с использованием лабораторного экструзионного оборудования, включающего одношнековый экструдер Scientific Mini LME16-30/C и мини-каландр Scientific Mini LMCR-150. Температурный профиль экструзии во всех зонах цилиндра и фильеры, а также температура расплава поддерживались на уровне 220 °C. Технологические параметры процесса включали: скорость вращения шнека – 100 мин$^{-1}$; скорость экструзии и скорость вращения охлаждающего барабана – 10 м/мин; температура поверхности охлаждающего барабана – 50 °C.

Параметры полученной пленки составили: толщина 100 мкм, ширина 110 мм. Величина фильерной вытяжки 173 %.

Изотермическая выдержка образцов полипропиленовой пленки проводилась в модульной печи Volgobot VBFA3.1.1 с терморегулятором ВАРТА ТП703. Термическая обработка выполнялась при постоянной температуре в диапазоне 408–428 К. Температурные режимы составляли 408, 413, 418, 423 и 428 К. Для каждого температурного режима устанавливалось время выдержки 900, 1800, 3600 и 7200 секунд.

Определение модуля жесткости полипропиленовой пленки в продольном и поперечном направлениях проводилось на универсальной испытательной машине Instron 34TM-10 при одноосном растяжении. При проведении испытаний использовались плоские пневматические захваты с резиновыми вставками, давление которых составляло 5 бар. Базовая длина рабочей зоны образца составляла 50 мм, зажимная длина 80 мм, скорость перемещения траверсы при растяжении 100 мм/мин. Модуль жесткости определялся по диаграмме растяжения в координатах «напряжение-деформация» путем расчета угла наклона линейного участка кривой деформирования с использованием программного обеспечения испытательной машины.

Результаты и обсуждение

На основании проведенных испытаний по изотермической выдержке и одноосному растяжению установлено влияние температурно-временных параметров на модуль жесткости полипропиленовых пленок. Полученные зависимости представлены на *рисунках 1* и *2*.

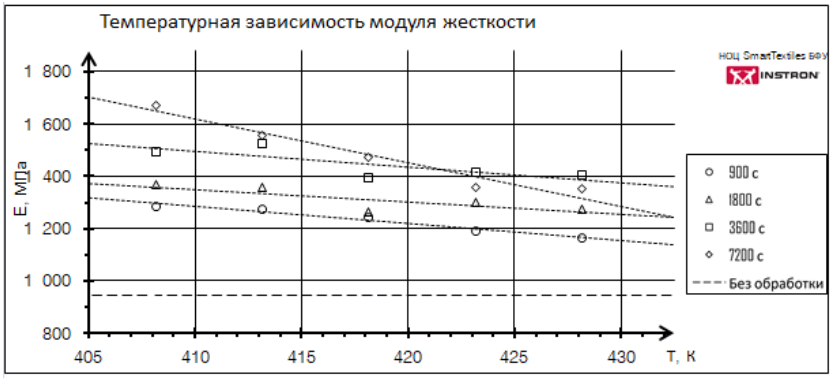


Рисунок 1 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения модуля жесткости полипропиленовых пленок, ориентированных вдоль направления экструзии

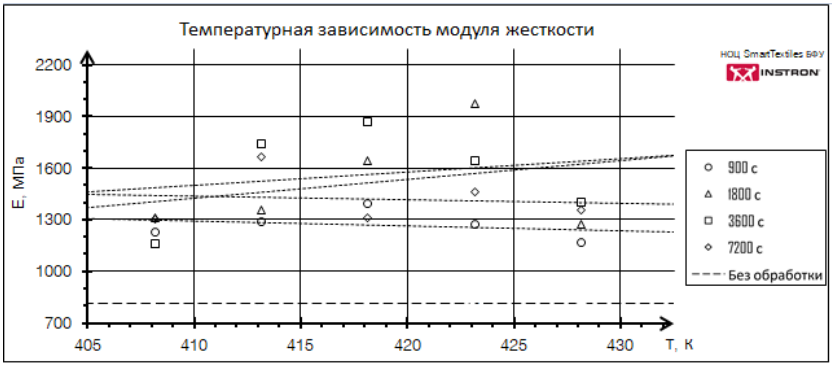


Рисунок 2 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения модуля жесткости полипропиленовых пленок, ориентированных поперек направления экструзии

Анализ полученных данных после проведения серии механических испытаний демонстрирует, что изотермическая выдержка в интервале от 408–428 К приводит к увеличению модуля жесткости. Для пленок, ориентированных вдоль направления экструзии после изотермической выдержки значения модуля жесткости варьируются от 1283 МПа при 408 К до 1165 МПа при 428 К. Исходное значение модуля жесткости для пленок, изготовленных вдоль направления экструзии составляет 943 МПа. Увеличение времени выдержки до 7200 сек. ведет к росту показателя жесткости и составляет 1673 МПа при 408 К. Таким образом рост модуля жесткости возрастает в среднем в 1,5 раза.

Для пленок, ориентированных поперек направления экструзии исходное значение модуля жесткости составляет 814 МПа. Проведение изотермической обработки в температурном диапазоне 408–428 К так же приводит к увеличению показателей жесткости материала. Максимальное значение модуля жесткости составляет 1975 МПа при 423 К и 1800 сек. выдержки, что в 2,4 раза превышает исходное значение. При дальнейшем увеличении времени изотермической обработки до 3600 и 7200 сек. наблюдается небольшое снижение показателей модуля жесткости [8].

Выводы

Таким образом, выявлено, что без изотермической обработки жесткость пленок вдоль направления экструзии на 20 % выше поперечного. Применение термической обработки оказывает наиболее существенное влияние на значения модуля жесткости пленки при приложении нагрузки в поперечном к направлению экструзии, и позволяя достичь значений на 20 % выше значения вдоль направления экструзии. Стоит отметить, что процесс плоскощелевой экструзии уже сам формирует в пленке некоторую анизотропию вдоль направления экструзии, в результате жесткость в этом направлении изначально выше. Термическая обработка позволяет нивелировать это влияние.

Описанный эффект может быть объяснен перегруппировкой элементов надмолекулярной структуры полипропилена преимущественно в поперечном направлении, что приводит к дополнительной ориентации кристаллических ламелей или формированию более протяженных фибриллярных структур поперёк потока. Предложенное нами объяснение планируется в дальнейшем подтвердить результатами рентгеноструктурных исследований.

Финансирование

Исследования выполняются в рамках стратегического технологического проекта «Масштабируемые технологии производства отечественных решений и компонентов для литий-ионных и постлитиевых накопителей» Программы Приоритет 2030 БФУ им. И. Канта.

Библиография

1. Садритдинов А.Р., Глазырин А.Б., Псянчин А.А., Захарова Е.М., Хуснуллин А.Г., Захаров В.П. Влияние условий переработки полипропилена на его термические и физико-механические характеристики // Пластические массы. 2021. N 3–4. С. 46–49.

2. Аскадский А.А., Мацеевич Т.А. Влияние степени кристалличности на модуль упругости в высокоэластическом состоянии полимеров // Пластические массы. 2022. N 3–4. С. 11–15.

3. Трубченко А.А., Коваль Е.О., Мацько М.А., Майер Э.А. Интерпретация полимодальности эндотерм плавления марок полипропилена // Известия Томского политехнического университета. 2012. Т. 321, N 3. С. 106–109.

4. Ермакова И.Н. Физическое моделирование процесса скрытой маркировки деталей упаковки из жесткоэластического полипропилена // Вестник Московского государственного университета печати. 2012. Т. 33, N 3. С. 63–74.

5. Ефимов А.В., Недорезова П.М., Баженов С.Л., Палазник О.М., Гроховская Т.Е., Польщиков С.В. Влияние прокатки на механизм разрушения полимеризационно-наполненного композита полипропилен–графеновые пластины // Высокомолекулярные соединения А. 2020. Т. 62, N 3. С. 207–219.

6. Марков А.В., Кулезнев В.Н. Формирование фазовой структуры и ее влияние на свойства ориентированных пленок из смесей полипропилена и полиэтилена // Высокомолекулярные соединения А. 2008. Т. 50, N 4. С. 651–658.

7. Sharaf M.A., Kloczkowski A. Evolution of the Deformation- and Flow-Induced Crystallization and Characterization of the Microstructure of a Single Spherulite, Lamella, and Chain of Isotactic Polypropylene // Macromolecular Chemistry and Physics. 2024. V. 225. P. 2300203.

References

1. Sadritdinov A.R., Glazyrin A.B., Psyanchin A.A., Zakharova E.M., Khusnullin A.G., Zakharov V.P. Influence of polypropylene processing conditions on its thermal and physico-mechanical characteristics. *Plasticheskie Massy = International Polymer Science and Technology*. 2021;3-4:46–49. (In Russ.).

2. Askadskii A.A., Matseevich T.A. Influence of the degree of crystallinity on the elastic modulus in rubbery state of polymers. *Plasticheskie Massy = International Polymer Science and Technology*. 2022;3-4:11–15. (In Russ.).

3. Trubchenko A.A., Koval E.O., Matsko M.A., Mayer E.A. Interpretation of polymodality of polypropylene grades melting endotherms. *Izvestiya Tomskogo Politekhnicheskogo Universiteta = Tomsk Polytechnic University Bulletin*. 2012;321(3):106–109. (In Russ.).

4. Ermakova I.N. Physical modeling of the hidden marking process of rigid-elastic polypropylene packaging parts. *Vestnik Moskovskogo Gosudarstvennogo Universiteta Pechati = Bulletin of Moscow State University of Printing*. 2012;33(3):63–74. (In Russ.).

5. Efimov A.V., Nedorezova P.M., Bazhenov S.L., Palaznik O.M., Grokhovskaya T.E., Polshchikov S.V. Effect of rolling on the fracture mechanism of polymerization-filled composite polypropylene–graphene plates. *Vysokomolekulyarnye Soedineniya A = Polymer Science. Series A*. 2020;62(3):207–219. (In Russ.).

6. Markov A.V., Kuleznev V.N. Formation of the phase structure and its influence on the properties of oriented polypropylene-polyethylene blend films. *Vysokomolekulyarnye Soedineniya A = Polymer Science. Series A*. 2008;50(4):651–658. (In Russ.).

8. Sharaf M.A., Kloczkowski A. Evolution of the Deformation- and Flow-Induced Crystallization and Characterization of the Microstructure of a Single Spherulite, Lamella, and Chain of Isotactic Polypropylene. *Macromolecular Chemistry and Physics*. 2024; 225:2300203.

© Кинкович А.С., Молоканова О.О., Молоканова О.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 33–37.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):33–37.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 678.01:539.4

Повышение деформационно-прочностных характеристик полипропиленовых пленок методом изотермической выдержки

Анатолий Сергеевич Кинкович[1], Георгий Олегович Молоканов[2], Ольга Андреевна Молоканова[3]

[1,2,3]Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия
[1]askinkovich@stud.kantiana.ru
[2]joj_mol@rambler.ru
[3]olga-moskalyuk@mail.ru

Аннотация. Исследовано влияние изотермической выдержки на деформационно-прочностные характеристики полипропиленовой пленки, полученной методом плоскощелевой экструзии. Термообработку проводили в диапазоне температур близких к температуре плавления полимера 408–428 К, и времени выдержки 900–7200 сек. Установлено, что повышение температуры и времени выдержки увеличивает прочность и снижает предельную деформацию. Определены оптимальные режимы термообработки, повышающие прочностные характеристики пленки.

Ключевые слова: полипропиленовая пленка, изотермическая выдержка, деформационно-прочностные характеристики, одноосное растяжение

Для цитирования: Кинкович А.С., Молоканов Г.О., Молоканова О.А. Повышение деформационно-прочностных характеристик полипропиленовых пленок методом изотермической выдержки // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 33–37.

PHYSICS

Original article

Improvement of deformation-strength characteristics of polypropylene films by isothermal annealing

Anatolii S. Kinkovich.[1], Georgii O. Molokanov[2], Olga A. Molokanova[3]

[1,2,3]Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia
[1]askinkovich@stud.kantiana.ru
[2]joj_mol@rambler.ru
[3]olga-moskalyuk@mail.ru

Abstract. The effect of isothermal annealing on the deformation and strength properties of flat-die extruded polypropylene film was investigated. Heat treatment was carried out at temperatures close to the polymer melting point 408–428 K for 900–7200 s. Increasing the annealing temperature and holding time improved tensile strength while reducing elongation at break. The optimal heat-treatment conditions providing the highest mechanical performance of the film were determined successfully.

Keywords: polypropylene film, isothermal treatment, deformation and strength characteristics, uniaxial stretching

For citation: Kinkovich A.S., Molokanov G.O., Molokanova O.A. Improvement of deformation-strength characteristics of polypropilene films by isothermal exposure. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):33–37. (In Russ.).

Введение

Полипропиленовые пленки широко применяются в различных областях промышленности благодаря сочетанию эксплуатационных и технологических свойств полипропилена. Низкая плотность, устойчивость к воздействию химических веществ и возможность переработки позволяют использовать такие материалы в упаковочной промышленности, медицине, сельском хозяйстве и электротехнической отрасли [1, 2]. При этом уровень механических характеристик пленок определяется не только свойствами самого полимера, но и особенностями структуры, которая формируется в процессе получения материала. Для полипропилена важную роль играет соотношение кристаллической и аморфной фаз, а также степень ориентации полимерных цепей, поскольку именно эти параметры во многом определяют прочность, жесткость и деформационное поведение пленок [3, 4].

В процессе переработки расплава полипропилена происходит формирование надмолекулярной структуры материала. При охлаждении расплава происходят процессы кристаллизации и ориентации макромолекул, зависящие от условий получения пленки. Однако после завершения переработки структурное состояние полимера не остается постоянным. Последующее температурное воздействие может приводить к перестройке сформированной структуры за счет релаксации внутренних напряжений, роста кристаллических областей и протекания процессов вторичной кристаллизации [5]. Изменение этих параметров отражается на способности материала переносить механическую нагрузку.

Свойства полипропилена во многом определяются особенностями его кристаллической структуры [6]. Одним из вариантов управления структурным состоянием полипропилена является изотермическая выдержка. В отличие от методов химической модификации данный подход позволяет изменять свойства материала за счет перестройки уже сформированной структуры. Применение термической обработки позволяет изменять как степень кристаллической структуры полипропилена, так и управлять размером самих сферолитов. При этом повышение степени кристалличности может приводить не только к увеличению жесткости материала, но и к снижению его способности к деформации (т.е. приводить к охрупчиванию) [7].

Таким образом, исследование влияния температуры и времени выдержки представляет научный и технологический интерес для определения условий обработки, при которых возможно улучшение комплекса деформационно-прочностных характеристик полипропиленовых пленок.

Экспериментальная часть

Объектом исследования является полиолефиновая пленка, полученная методом плоскощелевой экструзии на лабораторной мини линии Scientific Mini LME16-30/C с мини-каландром Scientific Mini LMCR-150. Температурный профиль экструдера составлял: температура 1-й зоны цилиндра 220 °C, температура 2-й зоны цилиндра 220 °C, температура расплава 220 °C, температура 1-й зоны фильеры 220 °C, температура 2-й зоны фильеры 220 °C, скорость вращения шнека – 100 об/мин, скорость выгрузки 10 м/мин, скорость вращения охлаждающего барабана 10 об/мин, температура барабана 50 °C, Изготовленная пленка имела толщину 100 мкм, ширину 110 мм. Величина фильерной вытяжки составляет 173 %.

Далее пленка подвергалась изотермической выдержке при температурах 408, 413, 418, 423, 428 K в течение 900, 1800, 3600, 7200 сек.

Для определения основных деформационно-прочностных характеристик таких, как предел текучести ($\sigma_т$, МПа), деформация при разрушении ($\varepsilon_р$, %), деформация при пределе текучести ($\varepsilon_т$, %) применялась универсально-испытательная машина Instron 34TM-10 с использованием плоских прорезиненных зажимов. Оценка механических характеристик полиолефиновых пленок проводилась вдоль направления экструзии.

Механические испытания проводились по методике, основанной на ГОСТ 14236-81 «Полимерные пленки. Испытания на растяжение». Испытания выполнялись при температуре 23,4 °C и относительной влажности 48 %. Разрывная (базовая) длина образца составляла 50 мм, зажимная длина – 80 мм (по 40 мм в каждом зажиме), давление пневмозахватов составляло 5 бар, скорость раздвижения зажимов составляла 100 мм/мин.

Результаты и обсуждение

На *рисунке 1* представлено влияние температуры изотермической выдержки на значения деформации при пределе текучести полипропиленовых пленок.

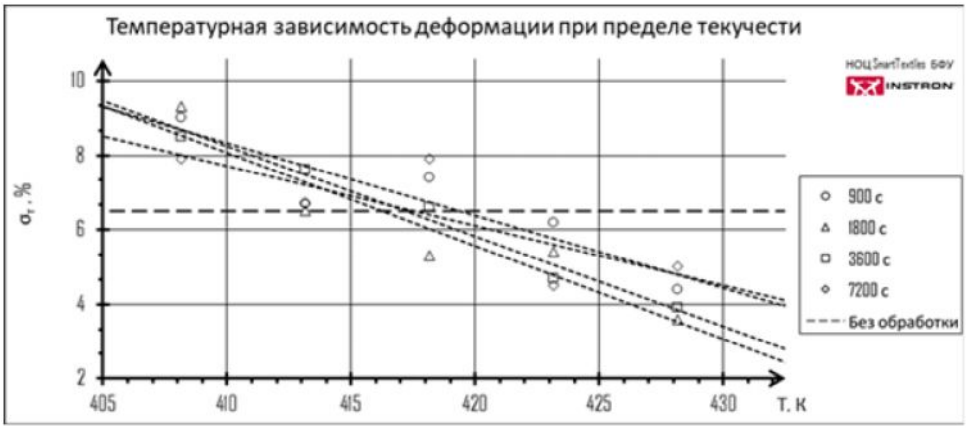


Рисунок 1 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения деформации при пределе текучести полипропиленовых пленок

Анализ графика показывает, что в исследованном температурном интервале 408–428 К зависимости имеют возрастающий характер во всех временных промежутках термической обработки. Из графика следует, что термическая обработка способствует увеличению значений предела текучести приблизительно на 20–30 % от исходного значения необработанной полипропиленовой пленки.

На *рисунке 2* представлено влияние температуры изотермической выдержки на значения напряжения при пределе текучести полипропиленовых пленок.

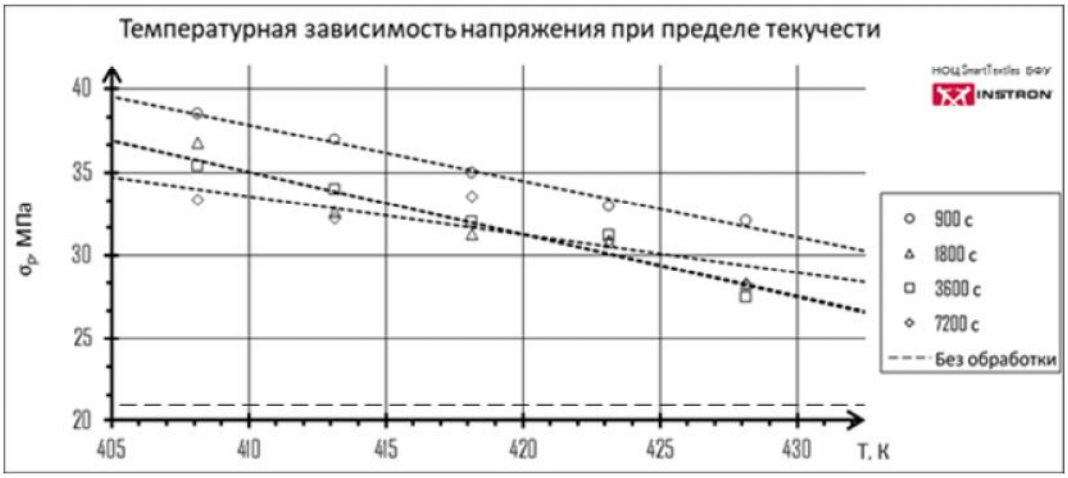


Рисунок 2 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения напряжений при пределе текучести полипропиленовых пленок

Судя по графику, с повышением температуры термообработки наблюдается снижение деформационных характеристик полипропиленовых пленок.

Значения деформации при пределе текучести лежат выше показателей необработанной пленки, что свидетельствует о повышении жесткости материала и снижении его способности к пластической деформации.

На *рисунке 3* отражены температурные зависимости деформации при разрушении полипропиленовых пленок

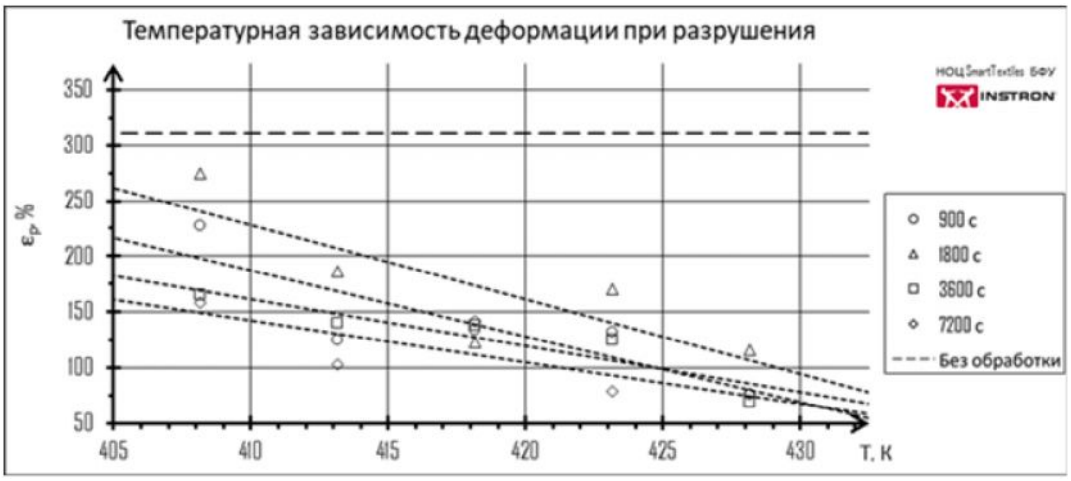


Рисунок 3 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения деформации при разрушении полипропиленовых пленок

Из графика следует, что с ростом температуры и увеличением времени изотермической выдержки значения предельной деформации снижаются. Показатели для обработанных образцов располагаются ниже значений контрольного образца. Наибольшее падение деформации при разрушении наблюдается при температуре 428 К и продолжительности выдержки 7200 сек.

На *рисунке 4* представлено влияние температуры изотермической выдержки на значения напряжения при разрушении полипропиленовых пленок.

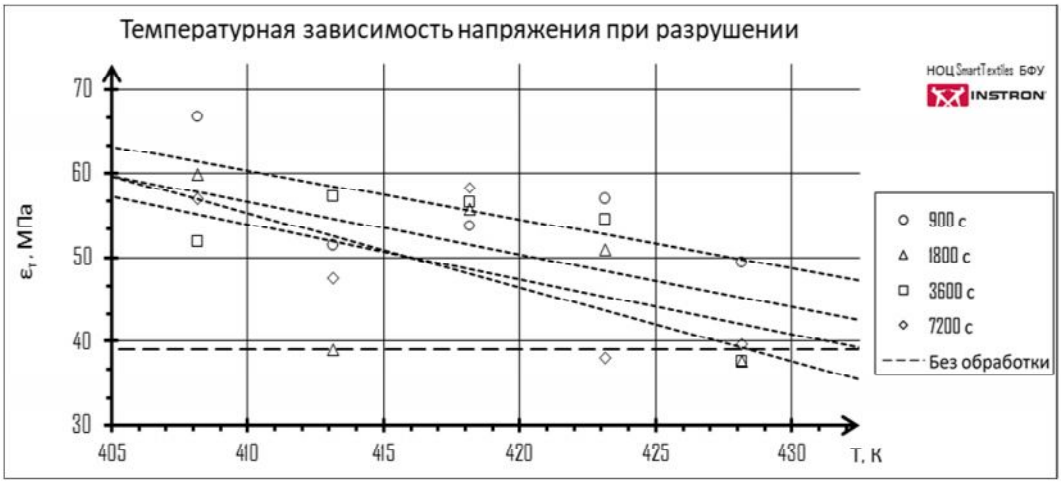


Рисунок 4 – Влияние температуры изотермической выдержки на значения напряжений при разрушении полипропиленовых пленок

Из графика следует, что с ростом температуры и увеличением времени изотермической выдержки значения напряжения при разрушении снижаются. Наиболее значительное падение напряжения при разрушении составляет 25–30 % и наблюдается при максимальных температурах 423 и 428 К и продолжительности выдержки 1800–7200 сек. При этом сами значения прочности для обработанных образцов в большинстве экспериментальных точек располагаются выше значений контрольного (в среднем на 20–30 %).

Выводы

Таким образом, независимо от продолжительности термической обработки, значения напряжения при пределе текучести и напряжения при разрушении возрастают на 20-30 % с учетом погрешности измерений. Повышение данных параметров может быть обусловлено протеканием релаксационных процессов, приводящих к снятию внутренних напряжений, накопленных в полимере в процессе плоскощелевой экструзии, и формированием более совершенной надмолекулярной структуры. Однако при по-

вышении температуры термической обработки наблюдается снижение показателей деформации при разрушении, обусловленное скорее всего вторичной кристаллизацией, приводящей к росту степени кристалличности и толщины ламелей.

Финансирование

Исследования выполняются в рамках стратегического технологического проекта «Масштабируемые технологии производства отечественных решений и компонентов для литий-ионных и постлитиевых накопителей» Программы Приоритет 2030 БФУ им. И. Канта.

Библиография

1. Hossain M.T., Shahid M.A., Mahmud N., et al. Research and application of polypropylene: a review // Discover Nano. 2024. V. 19, N 1. P. 1–21.

2. Karian H.G. Handbook of Polypropylene and Polypropylene Composites. Boca Raton: CRC Press, 2003. 760 p.

3. Strobl G. The Physics of Polymers: Concepts for Understanding Their Structures and Behavior. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007. 518 p.

4. Fischer C., Drummer D. Crystallization and Mechanical Properties of Polypropylene under Processing-Relevant Cooling Conditions with Respect to Isothermal Holding Time // International Journal of Polymer Science. 2016. N 10. P. 1–11.

5. Varga J. Supermolecular structure of isotactic polypropylene // Journal of Materials Science. 1992. V. 27, N 10. P. 2557–2579.

References

1. Hossain M.T., Shahid M.A., Mahmud N., et al. Research and application of polypropylene: a review. *Discover Nano*. 2024;19(1):1–21.

2. Karian H.G. Handbook of Polypropylene and Polypropylene Composites. Boca Raton: CRC Press; 2003. 760 p.

3. Strobl G. The Physics of Polymers: Concepts for Understanding Their Structures and Behavior. Berlin, Heidelberg: Springer; 2007. 518 p.

4. Fischer C., Drummer D. Crystallization and Mechanical Properties of Polypropylene under Processing-Relevant Cooling Conditions with Respect to Isothermal Holding Time. *International Journal of Polymer Science*. 2016;10:1–11.

5. Varga J. Supermolecular structure of isotactic polypropylene. *Journal of Materials Science*. 1992;27(10):2557–2579.

© Кинкович А.С., Молоканов Г.О., Молоканова О.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 38–44.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):38–44

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 539

Экспериментальное исследование тепловых полей в полиметилметакрилате, как в модельном материале

Борис Иналович Кунижев[1], Алексей Петрович Савинцев[2], Мариям Тахировна Хаджиева[3], Азамат Асланович Жамбеков[4]

[1,2,3,4]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]b.kunizhev51@mail.ru
[2]savinal@mail.ru
[3]khadzhiieva2000@mail.ru
[4] ajambekov_4@mail.ru

Аннотация. Проведено экспериментальное исследование тепловых полей в полиметилметакрилате (ПММА) при локальном лазерном нагреве. Целью данной работы является получение количественных данных о тепловых полях в ПММА при различных режимах нагрева – импульсном и непрерывном. На основе этих данных предполагается провести верификацию численной модели теплопереноса, учитывающей температурную зависимость теплофизических свойств материала. Такая модель позволит более точно прогнозировать термическое поведение ПММА в условиях эксплуатации.

Ключевые слова: тепловое поле, полиметилметакрилат, лазерный нагрев, инфракрасная термография, температурная зависимость, теплопроводность, теплоёмкость, численное моделирование, верификация модели

Для цитирования: Кунижев Б.И., Савинцев А.П., Хаджиева М.Т., Жамбеков А.А. Экспериментальное исследование тепловых полей в полиметилметакрилате, как в модельном материале // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 38–44

PHYSICS

Original article

Experimental study of thermal in polymethylmethacrylate as model material

Boris I. Kunizhev[1], Alexey P. Savintsev[2], Mariam T. Khadzhieva[3], Azamat A. Zhambekov[4]

[1,2,3,4] Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[1]b.kunizhev51@mail.ru
[2]savinal@mail.ru
[3]khadzhiieva2000@mail.ru
[4] ajambekov_4@mail.ru

Abstract. An experimental study of thermal fields in polymathylmethacrylate (PMMA) under local laser heating has been carried out. The purpose of this work is to obtain quantitative data on thermal fields in PMMA under various heating modes – pulsed and continuous. Based on these data, it is proposed to verify a numerical model of heat transfer that takes into account the temperature dependence of the thermophysical properties of

the material. This model will make it possible to more accurately predict the thermal behavior of PMMA under operating conditions.

***Keywords*:** thermal field, polymethylmethacrylate, laser heating, infrared thermography, temperature dependence, thermal conductivity, heat capacity, numerical modeling, model verification

For citation: Kunizhev B.I., Savintsev A.O., Khadzhieva M.T., Zhambekov A.A. Experimental study of thermal in polymethylmethacrylate as model material. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):38–44 (In Russ.).

Введение

Полиметилметакрилат (ПММА) благодаря высокой оптической прозрачности и хорошей обрабатываемости широко применяется в качестве конструкционного материала для линз, световодов и защитных экранов, а также в медицинских устройствах. В таких приборах точность контроля температурных полей становится критической для предотвращения термических деформаций и разрушений. Однако существующие аналитические и численные модели распространения тепла в ПММА ограничены: они не учитывают нелинейное изменение теплопроводности и теплоёмкости в диапазоне температур, характерном для локального нагрева, что приводит к существенным погрешностям при проектировании.

Современные методы бесконтактной термографии высокого разрешения позволяют проводить детальные измерения пространственно-временных распределений температуры с высокой точностью. Тем не менее, систематических экспериментальных исследований тепловых полей в ПММА при локальном нагреве лазерным излучениием в литературе представлено недостаточно.

Эксперимент

Для реализации бесконтактного лазерного нагрева и регистрации температурных полей в полиметилметакрилате была разработана оптическая схема, центральным элементом которой является непрерывный CO_2-лазер с длиной волны излучения 10,6 мкм. Данное излучение эффективно поглощается полимером, что обеспечивает локализованный нагрев образца. Инфракрасная тепловизионная камера, работающая в спектральном диапазоне 8–14 мкм, предназначена для регистрации двумерного распределения температуры на поверхности материала. Важным аспектом является то, что «для осуществления качественной обработки тонких пленок необходимо знать пространственное распределение температуры в пленке, формирующееся при локальном импульсном воздействии на нее лазерного излучения» [1], что подчеркивает актуальность выбранного подхода. Фокусирующая оптика, входящая в состав установки, обеспечивает заданный диаметр пятна нагрева на поверхности образца, а система позиционирования позволяет варьировать координаты зоны воздействия с высокой точностью. Для минимизации паразитных засветок и отражений используются соответствующие светофильтры. Такая конфигурация гарантирует воспроизводимость условий эксперимента и позволяет получать данные, необходимые для верификации математических моделей теплопереноса. В результате обеспечивается надежная основа для проведения количественного анализа.

Ключевым требованием к установке является синхронизация процессов нагрева и регистрации температурных полей, что реализовано посредством программируемого контроллера, управляющего работой лазера и тепловизора. Данное решение позволяет фиксировать динамику тепловых полей с временным разрешением 0,1 с. Для сравнения, в ряде работ применяются пирометры с наносекундными разрешениями, например, «временное разрешение пирометра составляло 25 нс» [2], однако для задач измерения пространственного распределения температуры в полимерных материалах достаточным является миллисекундный диапазон. Такая синхронизация критична для корректного сопоставления экспериментальных результатов с данными численного моделирования.

Первым этапом калибровки измерительного тракта стала настройка инфракрасного тепловизора по черному телу с известной температурой в диапазоне от 20 до 200 °С. По результатам измерений была установлена корректирующая функция для учета излучательной способности полиметилметакрилата. Для верификации эмиссионных характеристик дополнительно привлекались образцы с акриловым покрытием, как описано в литературе: «Изделия с акриловым покрытием толщиной 0,11 мм (заранее измеренное значение с помощью электронного штангенциркуля как разница толщины двухслойного изделия и толщины пластины без покрытия) использовали для калибровки ИС [3]». Полученная калибро-

вочная зависимость обеспечила погрешность измерения температуры менее 0,5 °C во всем рабочем диапазоне.

Образцы полиметилметакрилата вырезались из листового материала одинаковой толщины 5 мм с помощью лазерного резака с высоким разрешением. Для минимизации рассеяния лазерного излучения при нагреве торцевые поверхности образцов подвергались механической полировке до оптического качества. Контроль качества поверхности осуществлялся с помощью профилометра, шероховатость не превышала 0,02 мкм.

Разработан протокол очистки поверхности образцов от загрязнений и статического электричества, включающий последовательную обработку в ультразвуковой ванне с изопропиловым спиртом и обдув ионизированным азотом. Исключение появления локальных перегревов из-за поверхностных дефектов достигалось тщательным контролем чистоты. После очистки образцы хранились в герметичном контейнере с осушителем не более 24 часов до эксперимента.

При непрерывном лазерном нагреве полиметилметакрилата температурный отклик материала проходит несколько характерных стадий. На начальном этапе наблюдается квазилинейный рост температуры в зоне облучения, что связано с преобладанием поглощенной энергии над тепловыми потерями *(рисунок 1)*. Так, через 180 мин с момента начала нагрева сырьевой смеси, температура в центре материала достигает достаточно высоких значений [4]. Дальнейший нагрев может привести к деструктивным процессам, поэтому моделируем ситуацию с отключением источника теплоты для равномерного нагрева материала по всему объему [4]. По мере приближения к стационарному режиму скорость роста температуры замедляется, и формируется устойчивая изотермическая картина. Тепловое насыщение наступает, когда подводимая мощность уравновешивается теплоотводом в окружающую среду и вглубь образца. В результате устанавливается пространственное распределение температур, характерное для непрерывного воздействия, которое служит базой для последующего сравнения с импульсными режимами.

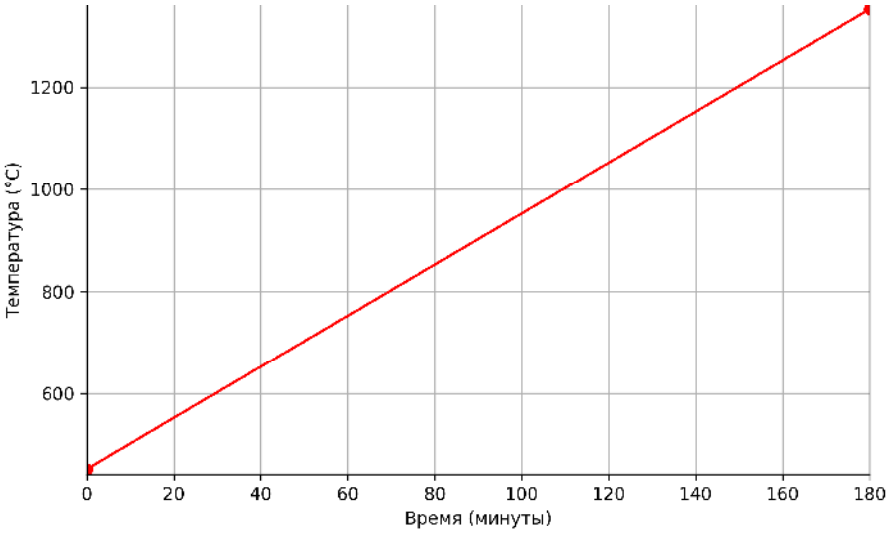


Рисунок 1 – Зависимость температуры в центре образца от времени

Импульсный нагрев принципиально отличается от непрерывного: за короткое время происходит быстрый локальный разогрев, формирующий высокие нестационарные градиенты температуры. При достаточно больших размерах пленки и облученной области в виде длинной полосы на ее поверхности теплоотвод в подложку незначителен и нагревание пленки можно считать адиабатическим [1]. После прекращения импульса начинается релаксация температурного поля, которая протекает за счет теплопроводности и конвекции, возвращая материал к исходному состоянию.

Сравнительный анализ двух режимов выявляет принципиальные различия в динамике теплового отклика. При непрерывном воздействии максимальная температура достигает высоких значений, но скорость её роста невелика, а тепловая аномалия занимает значительную площадь. В импульсном режиме, напротив, температура в зоне нагрева возрастает стремительно, однако пространственная локали-

зация аномалии остается узкой из-за малого времени воздействия. Эти различия определяют выбор режима в зависимости от конкретных технологических задач.

Толщина образца полиметилметакрилата оказывает определяющее воздействие на характер пространственного распределения изотерм при лазерном нагреве. В тонких пластинах (толщиной до 3 мм) преобладает латеральная диффузия тепла, что приводит к быстрому выравниванию температуры по поверхности и формированию широких, размытых изотермических линий. Напротив, в толстых образцах (толщиной более 6 мм) вследствие ограниченной теплопроводности вглубь материала возникают выраженные объёмные градиенты, при этом изотермы приобретают более замкнутую и концентрическую форму вокруг зоны нагрева. «Для полного учета геометрии формы для вспенивания необходимо внести ряд изменений в математическую формулировку задачи, а именно необходимость учета явлений переноса тепла по двум направлениям координат x и y» [4], что подтверждает значимость учета толщины как критического параметра. Скорость смещения характерных изотерм (например, изотермы 80 °C) в тонких образцах значительно выше, чем в толстых, что указывает на более интенсивный латеральный теплоперенос при малой толщине. Экспериментальные данные *(рисунок 2)* показывают, что в образцах толщиной 2 мм изотерма 60 °C достигает радиуса 4 мм за 10 сек. нагрева, тогда как в образце толщиной равной 8 мм, аналогичная изотерма смещается лишь на 2,5 мм за тот же промежуток времени. Такое поведение объясняется тем, что в тонких пластинах тепловой поток быстрее распространяется по поверхности из-за меньшего объёма материала, поглощающего энергию, а в толстых образцах значительная часть тепла уходит вглубь, формируя объёмные градиенты. Выявленная закономерность является ключевой для калибровки численных моделей, поскольку она задаёт начальные условия для описания теплового поля в трёхмерной постановке.

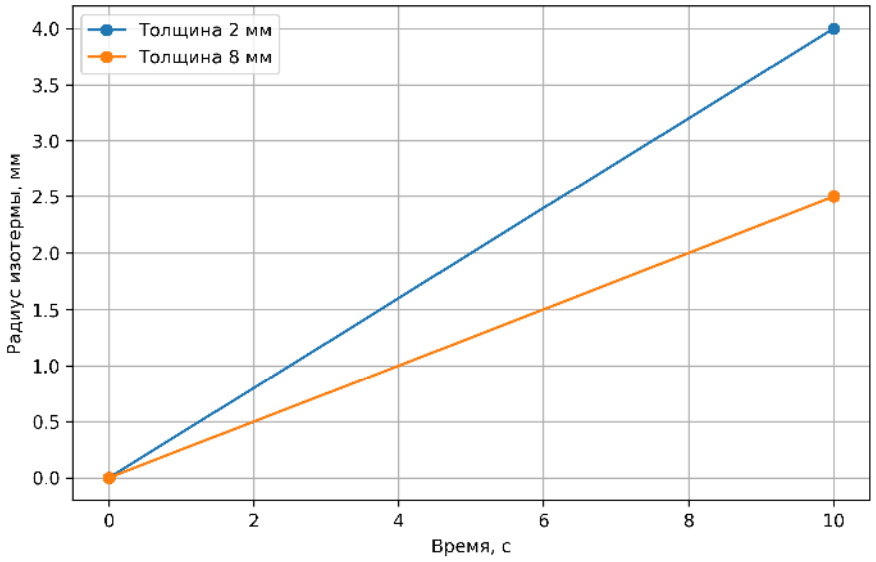


Рисунок 2 – Зависимость радиуса изотермы 60 °C от времени:
1 – толщина образца – 2 мм, 2 – толщина образца – 8 мм

Краевые эффекты становятся существенными, когда зона лазерного нагрева располагается на расстоянии менее двух диаметров пятна от края образца. При таком расположении изотермы деформируются: они вытягиваются в сторону края из-за ограниченного теплоотвода и частичного отражения теплового потока от границы раздела сред. В частности, при удалении центра пятна на величину 3 мм от края пластины толщиной 4 мм, изотерма 70 °C смещается к границе на 15 % быстрее, чем в центральной области, что свидетельствует о существенном перераспределении тепла. Это явление необходимо учитывать при проектировании экспериментов, так как неконтролируемые краевые эффекты могут искажать истинные значения тепловых параметров материала.

Варьирование отношениия длины стороны пластины (L) к диаметру лазерного пятна (D) в диапазоне от 5 до 20 позволило выявить универсальные закономерности изменения формы изотерм (*рисунок 3).* При L/D > 15 изотермы приобретают практически круговую симметрию с эксцентриситетом, не превы-

шающим 1,05, тогда как при L/D < 8 наблюдается значительное сплющивание изотерм (эксцентриситет до 1,4) из-за влияния краевых эффектов. Размер изотерм (радиус по главной оси) при фиксированном времени нагрева увеличивается с ростом L/D, достигая насыщения при L/D > 12.

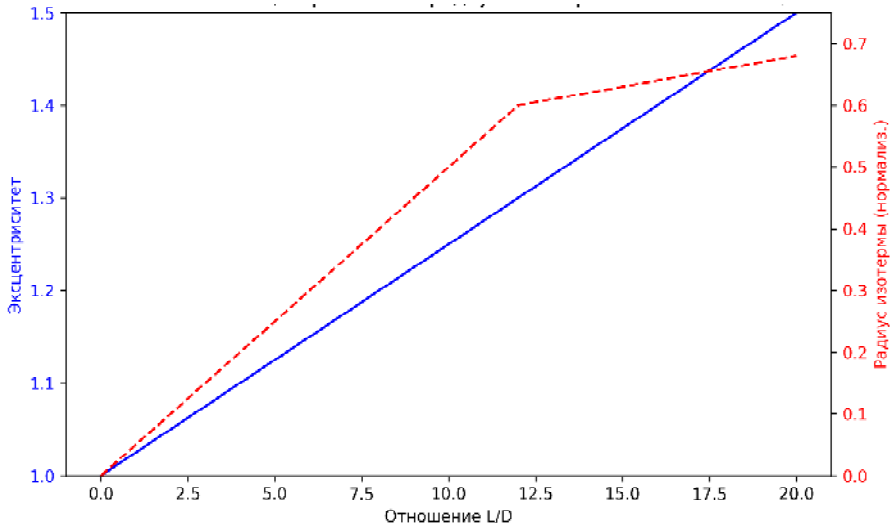


Рисунок 3 – Зависимость эксцентриситета (прямая) и радиуса изотермы (ломанная линия) от отношения длины стороны пластины к радиусу лазерного пятна (L/D)

Экспериментальное исследование тепловых полей проводилось на образцах полиметилметакрилата (ПММА) в форме пластин толщиной 5 и 10 мм, закрепленных в теплоизолирующем держателе. Лазерное воздействие осуществлялось непрерывным излучением с длиной волны 1,06 мкм и мощностью 5 Вт, при этом диаметр пятна нагрева составлял 2 мм. Регистрация температурных распределений выполнялась с помощью тепловизионной камеры FLIR A615 с частотой кадров 30 Гц и пространственным разрешением 0,1 мм/пиксель. Как указано в литературе: «В работе рассматривается одномерная задача периодического нагрева непрозрачного материала импульсным облучением от лазера при наличии конвективного теплообмена на поверхности материала с внешней средой» [5], что соответствует условиям проведенного эксперимента.

Результаты и обсуждение

Сравнение рассчитанных и измеренных температурных профилей проводилось в осесимметричной постановке для момента времени t = 300 сек. после начала непрерывного лазерного воздействия. Максимальная температура в центре зоны нагрева по данным эксперимента составила 68,5 °C, тогда как численная модель предсказала значение 66,8 °C, что дает абсолютное расхождение 1,7 °C. Средняя относительная погрешность вдоль радиального направления на расстоянии до 8 мм от центра нагрева не превысила 5 %. Дополнительно выполнялось сравнение изотермических линий для температурных уровней 45, 50 и 55 °C на поверхности образца. Результаты показали, что расхождение в радиусе изотерм между экспериментом и моделью не превышает 0,3 мм, что составляет менее 5 % от характерного размера зоны нагрева. Таким образом, средняя относительная погрешность по всей области температурных полей не превышала 5 %, что подтверждает адекватность разработанной конечно-элементной модели.

Разработка конечно-элементной модели теплопереноса в образцах полиметилметакрилата была выполнена в среде COMSOL Multiphysics. На первом этапе задавалась трехмерная геометрия, в точности повторяющая габариты экспериментальных образцов, с выделением области лазерного воздействия. Граничные условия формулировались с учётом конвективного теплообмена на внешних поверхностях и лазерного теплового потока. В основу модели была положена «математическая модель на основе дифференциальных уравнений нестационарной теплопроводности в частных производных параболического типа с начальными и граничными условиями I и III рода, позволяющая строить температурные профили в структуре материала» [4].

Ключевым аспектом, повысившим адекватность численного моделирования, стал учёт нелинейного изменения теплофизических свойств ПММА с температурой. Экспериментальные данные по теплопроводности и теплоёмкости были аппроксимированы полиномиальными зависимостями и интегрированы в модель. Такой подход позволил корректно описывать перераспределение тепла в материале при его нагреве от комнатных температур до зоны стеклования. Внедрение температурно-зависимых параметров существенно повлияло на итоговую точность прогноза тепловых полей. Вариация теплопроводности и теплоёмкости, измеренная в независимых калориметрических опытах, для диапазона 20–120 °C достигала 15–20 %, что делало предположение о постоянстве свойств неприемлемым. Сравнение результатов моделирования с показаниями ИК-камеры показало, что расхождение для стационарных режимов не превышает 3 %, что на порядок меньше погрешности изотермического приближения.

Заключение

Проведенное экспериментальное исследование подтвердило высокую эффективность метода инфракрасной термографии высокого разрешения для количественного анализа тепловых полей в полиметилметакрилате при локальном лазерном нагреве. Полученные массивы данных для непрерывных и импульсных режимов воздействия, а также для образцов различной толщины, позволили детально охарактеризовать пространственно-временное распределение температуры. Выявлены характерные особенности динамики изотерм, которые определяются как параметрами нагрева, так и геометрией образца, что создает надежную основу для последующего теоретического анализа.

Установлено, что нелинейное изменение теплофизических свойств полиметилметакрилата в диапазоне температур, характерном для локального нагрева, оказывает существенное влияние на динамику тепловых полей. Экспериментально зафиксированы отклонения от решений классического уравнения теплопроводности с постоянными коэффициентами, что подтверждает значимость учета температурной зависимости теплопроводности и теплоемкости. Данный вывод подчеркивает необходимость использования более сложных моделей для точного прогнозирования термических процессов в полимере.

Разработанная конечно-элементная модель, учитывающая выявленные нелинейные зависимости теплофизических свойств полиметилметакрилата, продемонстрировала высокую сходимость с экспериментальными данными. Результаты верификации подтвердили адекватность модели и обоснованность принятых при ее построении допущений, что позволяет использовать её в качестве надежного инструмента для анализа теплопереноса. Достигнутое согласие эксперимента и расчета доказывает эффективность предложенного подхода для описания реальных физических процессов.

Полученные результаты могут быть использованы для повышения точности расчетов термических полей в изделиях из полиметилметакрилата, а также для оптимизации режимов лазерной обработки и проектирования оптических систем. Перспективы дальнейших исследований связаны с изучением влияния механических напряжений и учета анизотропии свойств материала, что позволит расширить область применения разработанных методик

Библиография

1. Шахно Е.А., Самохвалов А.А. Лазерные микро- и нанотехнологии. Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2015. 46 с.

2. Бордзиловский С.А., Воронин М.С., Караханов С.М. Температура полиметилметакрилата во вторичной ударной волне // Физика горения и взрыва. 2021. N 6. С. 112–116.

3. Майникова Н.Ф., Горбунова А.Ю., Калинина Н.К. и др. Применение неразрушающего теплового контроля при исследовании полимерно-металлических изделий // Пластические массы. 2020. N 9. С. 59–61.

4. Баканов М.О. Моделирование высокотемпературных процессов в технологии пеностекла. Часть 1: Формирование динамики циклических нестационарных двумерных температурных полей // Вестник ПГТУ. 2021. N 2. С. 87–91.

5. Тудрий Е.В., Галкина И.В., Собанов А.А. и др. Физико-химия полимеров. Казань: Казанский университет, 2015. 45 с.

References

1. Shakhnova E.A., Samokhvalov A.A. Laser Micro- and Nanotechnologies. Saint Petersburg: ITMO University; 2015. 46 p. (In Russ.).

2. Bordzilovsky S.A., Voronin M.S., Karakhanov S.M. Temperature of polymethyl methacrylate in a secondary shock wave. *Fizica gorenia I vzryva*.. 2021;6:112–116.

3. Mainikova N.F., Gorbunova A.Yu., Kalinina N.K., et al. Application of non-destructive thermal control in the study of polymer-metal products. *Plasticheskie Massy = International Polymer Science and Technology*. 2020;9:59–61. (In Russ.).

4. Bakanov M.O. Modeling of high-temperature processes in the technology of foam glass. Part 1: Formation of the dynamics of cyclic non-stationary two-dimensional temperature fields. *Vestnik PGTU*. 2021. N 2. Pp. 87–91. (In Russ.).

5. Tudriy E.V., Galkina I.V., Sobanov A.A., et al. Physico-chemistry of polymers. Kazan: Kazan University; 2015. 45 p. (In Russ.).

© Кунижев Б.И., Савинцев А.П., Хаджиева М.Т., Жамбеков А.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 45–49.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):45–49.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 538.958

Моделирование и калибровка цилиндрического Nd-содержащего жидкосцинтилляционного детектора с ФЭУ-39А

Адам Музарифович Пшуков[1], Алим Заурбекович Кашежев[2]

[1,2]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]pshukov1959@mail.ru
[2]alim.kashezhev562@gmail.com

Аннотация. Разработана модель цилиндрического Nd-содержащего жидкосцинтилляционного детектора с ФЭУ-39А в Geant4 11.3, внешними источниками ^{137}Cs и ^{22}Na и четырьмя вариантами сцинтилляционной среды, включая псевдокумольным, синтин-нафталиновым, додекан-нафталиновым и додекан-нафталиновым с квантовыми точками. Калибровка выполнена по трём комптоновским краям ^{137}Cs и ^{22}Na. Относительный световыход додекан-нафталинового состава составил 122,15 ± 2,19 %, а состав с квантовыми точками – 113,75 ± 2,18 %. Результаты относятся к параметрической вычислительной модели.

Ключевые слова: жидкий сцинтиллятор, Geant4, неодим-150, ФЭУ-39А, комптоновский край, квантовые точки, калибровка

Для цитирования: Пшуков А.М., Кашежев А.З. Моделирование и калибровка цилиндрического Nd-содержащего жидкосцинтилляционного детектора с ФЭУ-39А // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 45–49.

PHYSICS

Original article

Modeling and calibration of a cylindrical Nd-loaded liquid-scintillator detector with an FEU-39A photomultiplier

Adam M. Pshukov[1], Alim Z. Kashezhev[2]

[1,2]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[1]pshukov1959@mail.ru
[2]alim.kashezhev562@gmail.com

Abstract. A Geant4 11.3 model of a cylindrical Nd-loaded liquid-scintillator detector with an FEU-39A photomultiplier was developed. External ^{137}Cs and ^{22}Na sources and four scintillator compositions were considered: pseudocumene-based, syntin–naphthalene, dodecane–naphthalene, and dodecane-naphthalene with quantum dots. Calibration used three Compton edges of ^{137}Cs and ^{22}Na. The relative light output was 122.15 ± 2.19 % for the dodecane–naphthalene composition and 113.75 ± 2.18 % after adding quantum dots. The results characterize the adopted parametric computational model.

Keywords: liquid scintillator, Geant4, neodymium-150, FEU-39A, Compton edge, quantum dots, calibration

For citation: Pshukov A.M., Kashezhev A.Z. Modeling and calibration of a cylindrical Nd-loaded liquid-scintillator detector with an FEU-39A photomultiplier. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):45–49. (In Russ.).

Введение

Моделирование взаимодействия излучения и оптического отклика выполнено в Geant4, основные возможности которого описаны в работах [1, 2]. Жидкие органические сцинтилляторы применяются в нейтринных детекторах благодаря совмещению мишени и регистрирующей среды [3–5]. Оптические и спектрометрические свойства систем на основе синтина, нафталина и ППО исследованы в работах [6–8], а Nd-содержащие составы – в работе [9]. Возможность спектрального преобразования с помощью квантовых точек рассмотрена в работе [10]. Цель исследования – сопоставить отклик четырёх составов и

выполнить калибровку модели внешними источниками ^{137}Cs и ^{22}Na применительно к задачам поиска 0νββ-распада ^{150}Nd [11].

Модель и методы

Кварцевая кювета имела наружные диаметр и высоту 40 мм при толщине стенки 3 мм. Активный цилиндр диаметром и высотой 34 мм имел объём 30,87 см^3 и содержал 0,5 масс. % Nd. Нижнее окно соединялось с фотокатодом ФЭУ-39А диаметром 34 мм через слой оптической смазки толщиной 0,10 мм; боковая поверхность и верхний торец закрывались алюминиевым отражателем. Основные параметры сведены в *таблицу 1*.

Таблица 1 – Основные параметры вычислительной модели

Параметр	Значение
Сцинтилляторы	Псевдокумол + 2,5 г/л ППО; синтин или додекан + 100 г/л нафталина + 2,5 г/л ППО; вариант додекана с 10 мг/л квантовых точек
Световыход	13 000; 12 220; 15 600 фотон/МэВ соответственно
Оптика	Максимумы излучения 362, 378 и 410 нм; Lпогл = 0,8-11 м; LRayleigh = 12-40,5 м; Birks 0,126 мм/МэВ [5]
ФЭУ и электроника	ФЭУ-39А, 1088 В, QEmax = 0,12; 2048 каналов; 3,065 пКл/канал; пьедестал 80 каналов
Источники	^{137}Cs: 661,657 кэВ; ^{22}Na: 510,999 и 1274,537 кэВ

Физический список включал G4EmStandardPhysics_option4, G4DecayPhysics, G4RadioactiveDecayPhysics и G4OpticalPhysics. Учитывались сцинтилляция, поглощение, рэлеевское рассеяние, граничные процессы и WLS-переизлучение. Для каждого калибровочного режима генерировалось 10^6 первичных событий в трёх повторах. Отбор требовал Edep ≥ 10 кэВ, не менее трёх фотоэлектронов и положительный анодный заряд. Комптоновский край аппроксимировался функцией erfc с линейным фоном; пуассоновская ошибка аппроксимации объединялась со стандартной ошибкой между повторами.

Результаты и обсуждение

После отбора спектры ^{137}Cs содержали комптоновский континуум и размытый спад; для отдельных повторов сохранялось 29,6–31,2 тыс. событий, а χ^2/ndf аппроксимации составлял 0,82–1,73 *(рисунок 1)*.

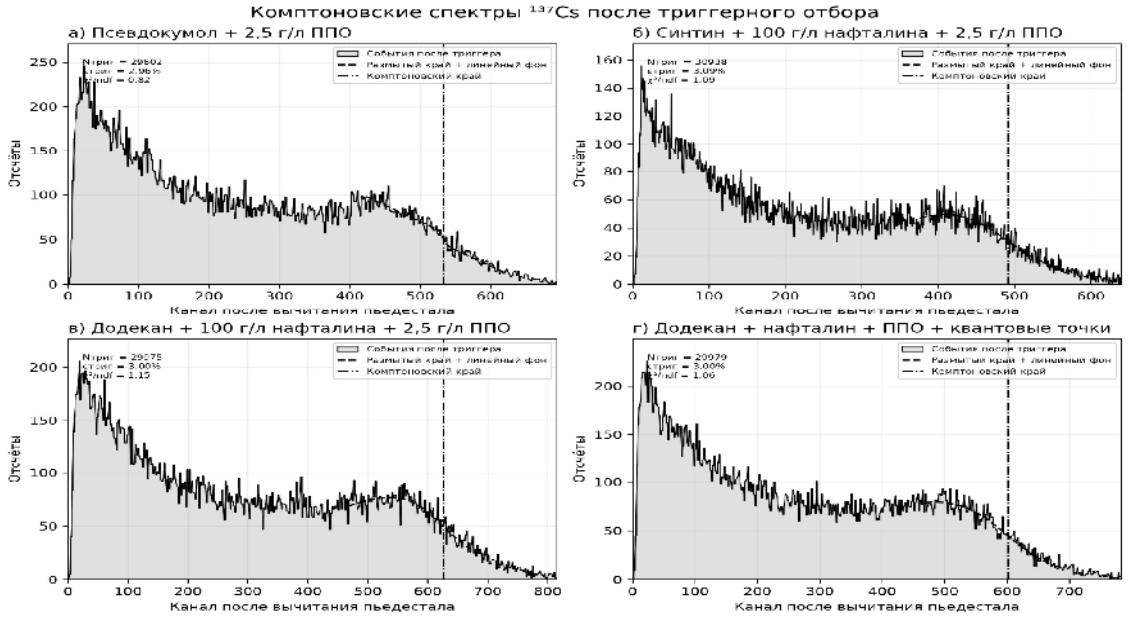


Рисунок 1 – Комптоновские спектры ^{137}Cs после триггерного отбора для четырёх составов

Положение края и относительный световыход приведены в *таблице 2* и на *рисунке 2*. Максимальный отклик получен для додекан-нафталинового состава. Добавление квантовых точек уменьшило отклик на 6,9 % относительно того же состава без КТ.

Таблица 2 – Световой отклик исследованных составов

Состав	Край, канал	Световыход, %	Оптическая эффективность, %
Псевдокумол + ППО	519,06 ± 7,94	100,00 ± 1,53	3,584
Синтин + нафталин + ППО	495,23 ± 6,84	95,41 ± 1,97	3,587
Додекан + нафталин + ППО	634,02 ± 5,89	122,15 ± 2,19	3,589
Додекан + нафталин + ППО + КТ	590,43 ± 6,82	113,75 ± 2,18	3,084

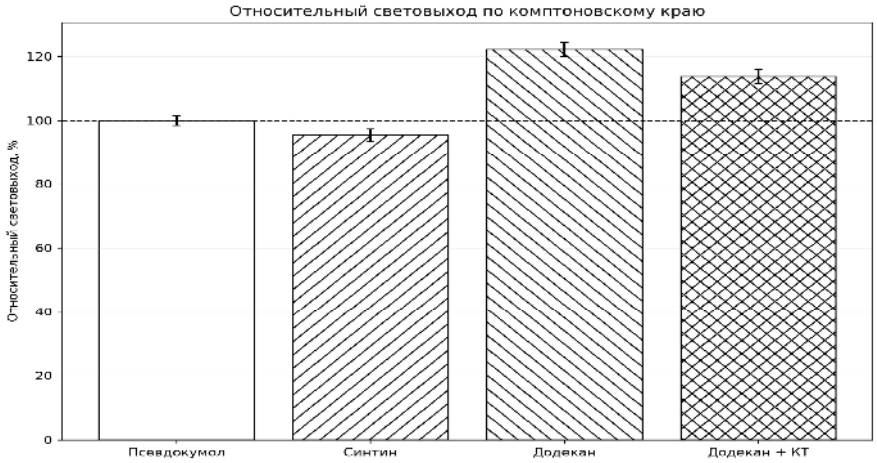


Рисунок 2 – Относительный световыход по положению комптоновского края ^{137}Cs

Три калибровочных края ^{22}Na – ^{137}Cs – ^{22}Na соответствовали энергиям 0,340666; 0,477334 и 1,061703 МэВ. Взвешенная аппроксимация дала зависимость

$$C = (1238{,}77 \pm 18{,}49)E - (2{,}42 \pm 8{,}84),$$

где C – эквивалентный канал, E – энергия края в МэВ. Максимальный относительный остаток составил 0,262 %, χ^2/ndf = 0,072 *(рисунок 3)*. Линейность подтверждена только до 1,062 МэВ, поэтому экстраполяция к Qββ(^{150}Nd) = 3,37138 МэВ требует независимой проверки.

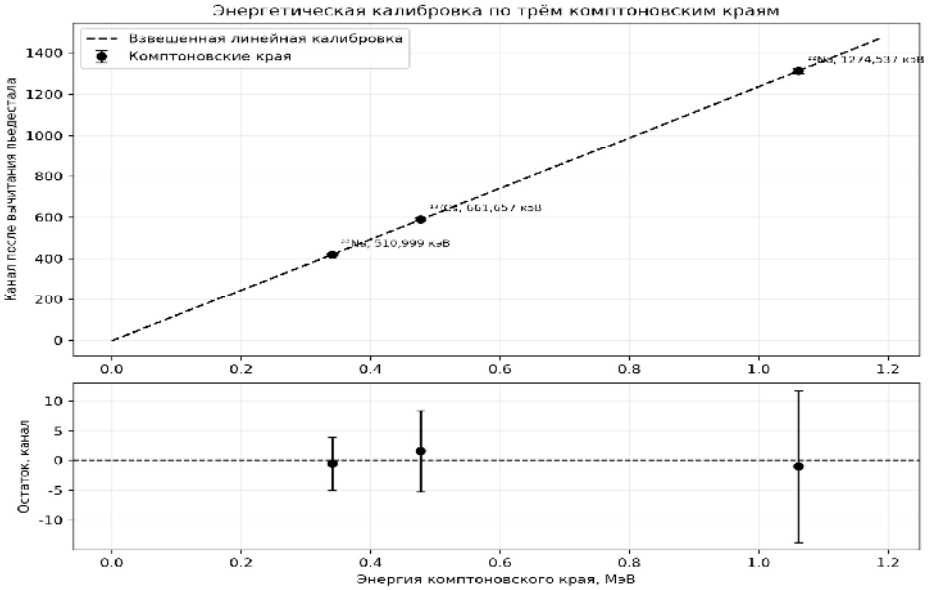


Рисунок 3 – Энергетическая калибровка по трём комптоновским краям и остатки аппроксимации

Для полного режима ^{22}Na эффективность отбора составила 8,70 %, а переполнение виртуального АЦП – 0,0046 %. В оптическом расчёте базовые составы регистрировали 3,58–3,59 % рождённых фотонов. Квантовые точки сформировали 2,42×107 WLS-фотонов, но снизили полную эффективность до 3,084 % вследствие повторного поглощения и квантового выхода 0,50 *(рисунок 4)*. Следовательно, результат характеризует выбранные параметры КТ, а не их предельную эффективность.

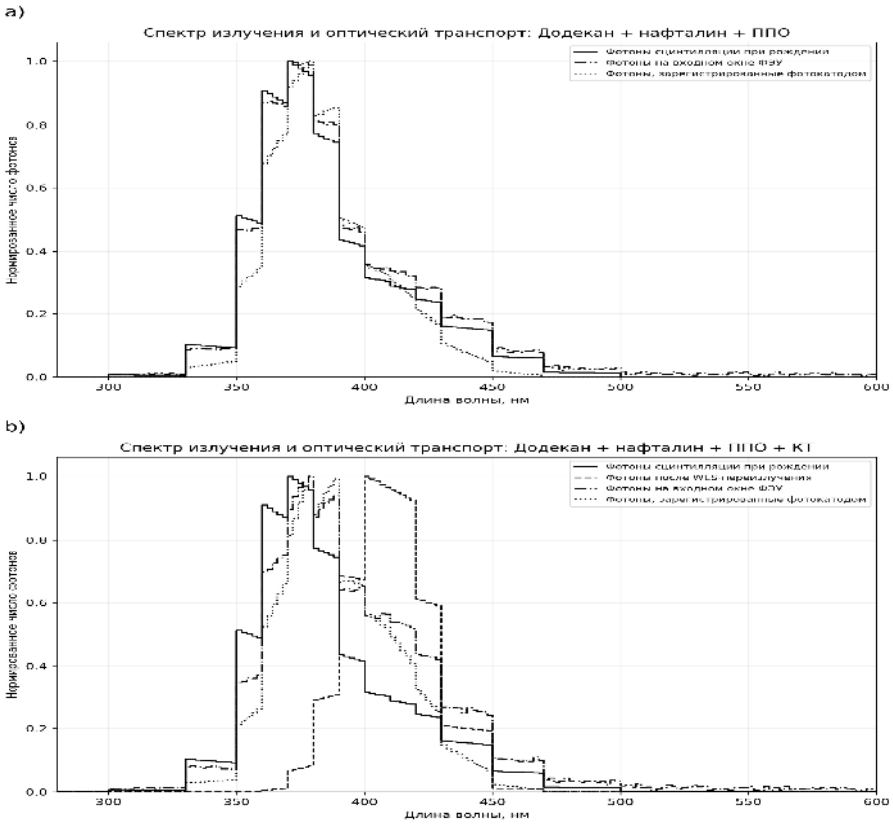


Рисунок 4 – Оптический транспорт в додекан-нафталиновом составе:
а – без квантовых точек; б – с квантовыми точками

Заключение

Построена модель цилиндрического Nd-содержащего детектора с ФЭУ-39А и внешней калибровкой. Додекан-нафталиновый состав обеспечил относительный световыход 122,15 ± 2,19 %; при принятых параметрах квантовых точек получено 113,75 ± 2,18 %. Трёхточечная калибровка линейна в диапазоне 0,341–1,062 МэВ. QE фотокатода, усиление, оптические длины, параметры КТ и электроники заданы параметрически, поэтому результаты относятся к вычислительной конфигурации и требуют экспериментальной проверки.

Библиография

1. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 – a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 2003. V. 506. N 3. P. 250–303.

2. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Recent developments in Geant4 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 2016. V. 835. P. 186–225.

3. Elisei F., Gatti F., Goretti A. et al. Measurements of liquid scintillator properties for the Borexino detector // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A. 1997. V. 400. N 1. P. 53–68.

4. Anderson M.R., Andringa S., Anselmo L. et al. Development, characterisation, and deployment of the SNO^+ liquid scintillator // Journal of Instrumentation. 2021. V. 16. N 5. P. P05009.

5. Birks J.B. The Theory and Practice of Scintillation Counting. Oxford: Pergamon Press, 1964. 662 p.

6. Пшуков А.М., Кокоева А.А. Исследование оптических свойств жидкого органического сцинтиллятора на основе синтина и нафталина для использования в нейтринной физике // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, N 3. С. 39–44.

7. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Кашежев А.З., Ермоленко Д.Н. Исследование люминесцентных и спектрометрических свойств гибридных жидких органических сцинтилляторов с добавкой нафталиновых кристаллов для использования в нейтринной физике // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14, N 3. С. 30–37.

8. Пшуков А.М., Кокоева А.А., Ермоленко Д.Н., Кашежев А.З. О возможности использования нафталиновых кристаллов при получении жидких органических сцинтилляторов для нейтринной физики // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2025. N 17. С. 148–160.

9. Barabanov I.R., Veresnikova A.V., Moiseeva A.A. et al. New basic solvents for liquid organic scintillators. Development of Nd-loaded scintillators on the basis of synthine-pseudocumene mixture // Physics of Atomic Nuclei. 2023. V. 86, N 2. P. 119–128.

10. Aberle C., Li J.J., Weiss S., Winslow L. Optical properties of quantum-dot-doped liquid scintillators // Journal of Instrumentation. 2013. V. 8, N 10. P. P10015.

11. Elliott S.R., Vogel P. Double beta decay // Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2002. V. 52. P. 115–151.

References

1. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 – a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. 2003;506(3):250–303.

2. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Recent developments in Geant4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. 2016;835:186–225.

3. Elisei F., Gatti F., Goretti A. et al. Measurements of liquid scintillator properties for the Borexino detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*. 1997;400(1):53–68.

4. Anderson M.R., Andringa S., Anselmo L. et al. Development, characterisation, and deployment of the SNO^+ liquid scintillator. *Journal of Instrumentation*. 2021;16(5):P05009.

5. Birks J.B. The Theory and Practice of Scintillation Counting. Oxford: Pergamon Press; 1964. 662 p.

6. Pshukov A.M., Kokoeva A.A. Investigation of optical properties of a liquid organic scintillator based on synthine and naphthalene for use in neutrino physics. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2023;13(3):39-44. (In Russ.).

7. Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Kashezhev A.Z., Ermolenko D.N. Investigation of luminescent and spectrometric properties of hybrid liquid organic scintillators with naphthalene crystals for use in neutrino physics. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2024;14(3):30–37. (In Russ.).

8. Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Ermolenko D.N., Kashezhev A.Z. On the possibility of using naphthalene crystals in liquid organic scintillators for neutrino physics. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov = Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials*. 2025;17:148–160. (In Russ.).

9. Barabanov I.R., Veresnikova A.V., Moiseeva A.A. et al. New basic solvents for liquid organic scintillators. Development of Nd-loaded scintillators on the basis of synthine-pseudocumene mixture. *Physics of Atomic Nuclei*. 2023;86(2):119–128.

10. Aberle C., Li J.J., Weiss S., Winslow L. Optical properties of quantum-dot-doped liquid scintillators. *Journal of Instrumentation*. 2013;8(10):P10015.

11. Elliott S.R., Vogel P. Double beta decay. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*. 2002;52:115–151.

© Пшуков А.М., Кашежев А.З., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 50–55.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):50–54.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 538.9:004.942

Проблемы сходимости самосогласованного поля при моделировании $CsPbBr_3$, легированного Nd, методом теории функционала плотности

Адам Музарифович Пшуков[1], Елизавета Игоревна Ханукаева[2]

[1,2]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]pshukov1959@mail.ru
[2]elizavetahanukaeva95@gmail.com

Аннотация. Проведен анализ причин неустойчивой сходимости самосогласованного поля при расчете модельной суперъячейки $CsPbBr_3$:Nd методом теории функционала плотности. Показано, что автоматическая релаксация без стабилизации приводит к нефизическим искажениям структуры. Ручное сканирование расстояния Nd-Br может использоваться как медиагностический этап выбора стартовой геометрии. Для окончательных выводов необходимы зарядовая компенсация, учет спина и полная проверка сходимости.

Ключевые слова: $CsPbBr_3$; неодим; теория функционала плотности; самосогласованное поле; локальная структура; сходимость

Для цитирования: Пшуков А.М., Ханукаева Е.И. Проблемы сходимости самосогласованного поля при моделировании $CsPbBr_3$, легированного Nd, методом теории функционала плотности // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 50–54.

PHYSICS

Original article

Problems of self-consistent field convergence in density functional theory modeling of Nd-doped $CsPbBr_3$

Adam M. Pshukov[1], Elizaveta I. Khanukaeva[2]

[1,2]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[1]pshukov1959@mail.ru
[2]elizavetahanukaeva95@gmail.com

Abstract. The work analyzes unstable self-consistent field convergence for a model $CsPbBr_3$:Nd supercell calculated by density functional theory. It is shown that automatic relaxation without stabilization leads to nonphysical structural distortions. Manual scanning of the Nd-Br distance can be used as a diagnostic step for choosing the initial geometry. Final conclusions require charge compensation, spin treatment and full convergence verification.

Keywords: $CsPbBr_3$; neodymium; density functional theory; self-consistent field; local structure; convergence

For citation*:* Pshukov A.M., Khanukaeva E.I. Problems of self-consistent field convergence in density functional theory modeling of Nd-doped $CsPbBr_3$. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):50–54. (In Russ.).

Введение

Галогенидный перовскит $CsPbBr_3$ интересен для оптоэлектроники, фотоники и сцинтилляционных материалов. Введение редкоземельных ионов, в том числе Nd^{3+}, может расширить спектральный диапазон излучения и изменить локальные свойства кристаллической матрицы [1].

Расчет такой системы методом теории функционала плотности (density functional theory, DFT) осложняется локализованными состояниями неодима. В стандартных приближениях эти состояния могут находиться около уровня Ферми и вызывать колебания электронной плотности в ходе решения задачи самосогласованного поля. В результате расчет не сходится, а силы на атомах становятся ненадежными [2–4].

Цель работы – выявить причины плохой сходимости расчета $CsPbBr_3$:Nd и определить простой практический способ подготовки начальной геометрии для последующей строгой оптимизации. Работа имеет методический характер и не претендует на окончательное описание оптических свойств материала.

Расчетная модель и методы

Моделировалась суперъячейка $CsPbBr_3$ размером 2×2×2 элементарных ячейки, содержащая 40 атомов. Один атом Pb был заменен атомом Nd, что соответствует модельной концентрации примеси 12,5 %. Такая концентрация использовалась как расчетный тест и не должна напрямую отождествляться с разбавленным легированием реальных образцов.

Расчеты выполнялись в программах ABINIT 9.10.4 и Quantum ESPRESSO. Электрон-ионное взаимодействие описывалось методом проекционно-присоединенных волн (projector augmented wave, PAW) [5, 6]. Для обмена и корреляции использовалось приближение Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Проверялись разные коэффициенты смешивания электронной плотности, схемы диагонализации, подход DFT+U, а также псевдопотенциал Nd с переносом 4f-электронов в остов.

Поскольку полная автоматическая релаксация была неустойчивой, дополнительно применяли ручное изменение ближайшего окружения Nd. Варьировалось расстояние Nd-Br, после чего оценивались число итераций до прекращения расчета, поведение полной энергиии и остаточная невязка самосогласованного поля. Значения энергии из несогласованных расчетов использовались только в качестве диагностического показателя.

Результаты и обсуждение

Нестабильность автоматической релаксации

Первоначальная автоматическая релаксация суперъячейки $CsPbBr_3$:Nd без специальных стабилизирующих приемов оказалась неустойчивой. В ходе оптимизации появлялись сильные смещения атомов Cs и нарушение октаэдрического окружения Nd *(рисунок 1)*. Такие изменения следует расценивать как нефизические, поскольку расчеты сил выполнялись в условиях, когда самосогласованное поле еще не достигло сходимости.

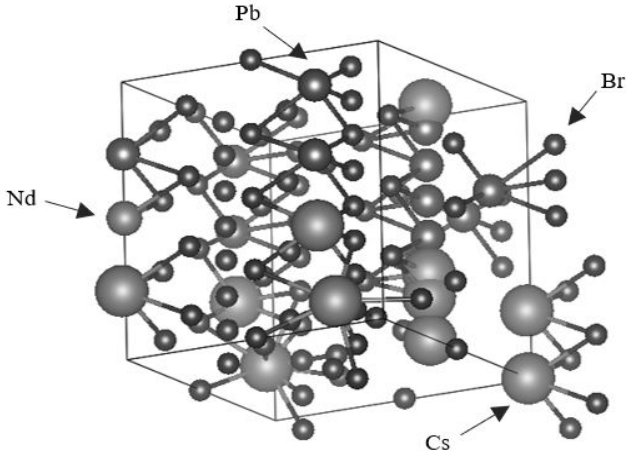


Рисунок 1 – Визуализация геометрии суперъячейки, полученной в результате автоматической релаксации (BFGS) без стабилизации f-состояний

Энергия в ходе итераций изменялась скачкообразно, а невязка потенциала оставалась высокой. Это соответствует известной проблеме переноса заряда между итерациями: электронная плотность не стабилизируется, а переходит между близкими по энергии состояниями. Для систем с редкоземельными элементами такая проблема встречается особенно часто из-за локализованных f-состояний [3, 4].

Проверка стабилизирующих подходов

Поправка Хаббарда в методе DFT+U частично изменяла положение локализованных состояний Nd, но не устраняла проблему полностью [2]. Поэтому выбранные значения U и J следует рассматривать как предварительные расчетные параметры, а не как окончательно определенные физические величины.

Псевдопотенциал Nd с 4f-электронами в остове также не обеспечил полной сходимости. Это означает, что нестабильность может быть связана не только с 4f-, но и с 5d-состояниями Nd, локальным искажением решетки и зарядовым несоответствием при замещении Pb^{2+} на Nd^{3+}.

Переход от ABINIT к Quantum ESPRESSO не дал принципиального улучшения. Следовательно, главная причина затруднений связана не только с конкретной программой, а с выбранной моделью дефекта и особенностями электронной структуры.

Сканирование локального окружения Nd

Для поиска более устойчивой начальной геометриии были подготовлены несколько конфигураций с разными расстояниями Nd-Br. Все остальные атомы на первом этапе оставались близкими к идеальным положениям. Результаты приведены в *таблице 1*.

Таблица 1 – Поведение расчета при изменении расстояния Nd-Br

Конфигурация	Nd-Br, Å	Итераций до остановки	Минимальная энергия, Ha	Комментарий
A	2,74	2	−976,62	исходная; энергия нерепрезентативна
B	2,62	9	−1342,59	частичная стабилизация
C	2,86	18	−1342,01	максимум итераций
D	2,50	12	−1345,12	минимум энергии
E	2,68	5	−1342,28	низкая устойчивость
F	2,56	11	−1344,05	промежуточный вариант

Примечание. Энергии для несогласованных расчетов приведены только для сравнения поведения расчетов и не являются строгими равновесными энергиями.

Из *таблицы 1* видно, что численная устойчивость и минимальная достигнутая энергия не совпадают. Конфигурация C позволяла выполнить больше итераций, тогда как конфигурация D давала более низкую энергию. Поэтому выбирать геометрию только по одному признаку некорректно.

Наиболее полезным оказался пошаговый переход между конфигурациями с использованием предыдущей волновой функции как начального приближения. Такой прием позволил получить более устойчивую локальную конфигурацию с расстоянием Nd-Br около 2,6 Å. Эту структуру следует рассматривать как предварительно стабилизированную, а не как окончательный минимум энергии.

Дальнейшая верификация модели

Перед расчетом зонной структуры и оптических характеристик необходимо уточнить физическую модель дефекта. Замещение Pb^{2+} на Nd^{3+} создает зарядовое несоответствие. Поэтому следует проверить варианты компенсации: вакансию Br, вакансию Cs, заряженную суперъячейку с компенсирующим фоном или поверхностную модель, если расчет относится к квантовым точкам.

Также требуется учесть спиновую поляризацию. Для Nd нужно задать начальный магнитный момент и проследить его изменение после расчета. Для электронных свойств $CsPbBr_3$ желательно проверить влияние спин-орбитального взаимодействия, поскольку в структуре присутствует тяжелый атом Pb.

Параметры DFT+U необходимо обосновать отдельно. Желательно сравнить несколько значений U для 4f- и 5d-состояний Nd или определить эффективный U методом линейного отклика. Кроме того, следует построить графики полной энергии, невязки самосогласованного поля и максимальной силы по

итерациям. Финальная структура может быть использована для анализа свойств только после полной сходимости при более строгих параметрах.

Заключение

Показано, что расчет $CsPbBr_3$:Nd методом теории функционала плотности чувствителен к локальному окружению Nd и параметрам самосогласованного поля. Автоматическая релаксация без предварительной стабилизации приводит к нефизическим искажениям структуры.

Проверенные подходы, включая DFT+U, псевдопотенциал с 4f-электронами в остове и смену расчетного кода, не обеспечили полной сходимости в выбранной модели. Ручное сканирование расстояния Nd-Br может использоваться как практический диагностический этап для подготовки более устойчивой начальной геометрии.

Полученная конфигурация не должна рассматриваться как окончательный энергетический минимум до проверки зарядовой компенсации, спиновой поляризации, спин-орбитального взаимодействия и строгой сходимости. После выполнения этих доработок модель может быть использована для последующих расчетов электронной структуры и оптических свойств.

Библиография

1. Zhou B., Yan D., Dong H., Zhang L., Yu H., Chen X. Rare-Earth Doping in Halide Perovskites: Recent Advances and Challenges // Adv. Optical Mater. 2020. V. 8, N 20. P. 2001077.

2. Альтудов Ю.К., Пшуков А.М., Кокоева А.А., Пухаева Н.Е., Кхесва Н., Корноухов В.Н. Синтез и оптические свойства квантовых точек перовскита $CsPb_{0.8}Nd_{0.2}BrCl_2$, легированных ионами неодима // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2026. Т. 90, N 6. С. 928–934.

3. Altudov Y.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Pukhaeva N.E., Kheswa N.Y., Kornoukhov V.N. Colloidal Synthesis and Optical Properties of Nd-Containing Mixed-Halide CsPbBr3-γClγ Quantum Dots with λem ≈ 458 nm and PLQY ≈ 56 % // Physchem. 2026. V. 6. P. 37.

4. Katan C., Mercier N., Even J. Quantum dielectric function and excitonic properties of $CsPbX_3$ (X=Cl, Br, I): a first-principles study // Chem. Mater. 2018. V. 30. P. 2345–2352.

5. Bokdam M., Lahnsteiner J., Ramberger B., Kresse G. Assessing the performance of hybrid density functional theory for lead-halide perovskites // J. Phys. Chem. C. 2018. V. 122. P. 26288–26297.

6. Topsakal M., Wentzcovitch R.M. Accurate DFT simulations of f-electron systems: why standard approaches fail and how to fix them // Comput. Mater. Sci. 2018. V. 147. P. 318–326.

7. Bruneval F., Crocombette J.-P., Gonze X., Jollet F., Torrent M. Charge sloshing in ab initio molecular dynamics: causes and cures // J. Chem. Phys. 2015. V. 142. P. 154101.

8. Cococcioni M., de Gironcoli S. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 035105.

9. Dal Corso A. Pseudopotentials periodic table: from H to Pu // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 95. P. 337–350.

10. Jollet F., Torrent M., Holzwarth N. Generation of Projector Augmented Waves for rare-earth elements: treatment of 4f states // Comput. Phys. Commun. 2017. V. 214. P. 186–195.

11. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.

12. Lany S., Zunger A. Accurate prediction of defect properties in complex oxides: the role of electrostatic corrections and geometry relaxation // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 235104.

13. Altudov Yu.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Pukhaeva N.E., Kheswa N., Kornoukhov V.N. Synthesis and Optical Properties of Quantum Dots of Perovskite Doped with Neodymium Ion // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2026. V. 90, N 6. P. 928–934.

References

1. Zhou B., Yan D., Dong H., Zhang L., Yu H., Chen X. Rare-Earth Doping in Halide Perovskites: Recent Advances and Challenges. *Adv. Optical Mater*. 2020;8(20):2001077.

2. Altudov Yu.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Pukhaeva N.E., Kheswa N., Kornoukhov V.N. Synthesis and Optical Properties of Quantum Dots of $CsPb_{0.8}Nd_{0.2}BrCl_2$ Perovskite Doped with Neodymium Ions. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya = Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2026;90(6):928-934. (In Russ.).

3. Altudov Y.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Pukhaeva N.E., Kheswa N.Y., Kornoukhov V.N. Colloidal Synthesis and Optical Properties of Nd-Containing Mixed-Halide $CsPbBr_3$-γClγ Quantum Dots with λem ≈ 458 nm and PLQY ≈ 56 %. *Physchem*. 2026;6:37.

4. Katan C., Mercier N., Even J. Quantum dielectric function and excitonic properties of $CsPbX_3$ (X=Cl, Br, I): a first-principles study. *Chem. Mater*. 2018;30:2345–2352.

5. Bokdam M., Lahnsteiner J., Ramberger B., Kresse G. Assessing the performance of hybrid density functional theory for lead-halide perovskites // *J. Phys. Chem. C*. 2018;122:26288–26297.

6. Topsakal M., Wentzcovitch R.M. Accurate DFT simulations of f-electron systems: why standard approaches fail and how to fix them. *Comput. Mater. Sci*. 2018;147:318–326.

7. Bruneval F., Crocombette J.-P., Gonze X., Jollet F., Torrent M. Charge sloshing in ab initio molecular dynamics: causes and cures // *J. Chem. Phys*. 2015;142:154101.

8. Cococcioni M., de Gironcoli S. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method. *Phys. Rev. B*. 2005;71:035105.

9. Dal Corso A. Pseudopotentials periodic table: from H to Pu. *Comput. Mater. Sci*. 2014;95:337–350.

10. Jollet F., Torrent M., Holzwarth N. Generation of Projector Augmented Waves for rare-earth elements: treatment of 4f states. *Comput. Phys. Commun*. 2017;214:186–195.

11. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*. 1996;54:11169.

12. Lany S., Zunger A. Accurate prediction of defect properties in complex oxides: the role of electrostatic corrections and geometry relaxation. *Phys. Rev. B*. 2008;78:235104.

13. Altudov Yu.K., Pshukov A.M., Kokoeva A.A., Pukhaeva N.E., Kheswa N., Kornoukhov V.N. Synthesis and Optical Properties of Quantum Dots of Perovskite Doped with Neodymium Ion. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys*. 2026;90(6):928–934.

© Пшуков А.М., Ханукаева Е.И.., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 55–61.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):55–61.

PHYSICS

Original article

Mechanisms of resistive switching in chalcogenide heterojunctions

Evgeniy F. Troyan[1], Alexander G. Smirnov[2], Sergey Yu. Kharkov[3], Alexander V. Kolobov[4], Ahmed. M. Karmokov[5], Oleg A. Molokanov[6]

[1,2,3]Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus
[4]State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, Russia
[5,6]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[1]troevfe@gmail.com
[2]smirnov@bsuir.by
[3]seriy77729@mail.ru
[4]akolobov@herzen.spb.ru
[5]karmokov@kbsu.ru
[6]molokanov@kbsu.ru

Abstract. Analysis of chalcogenide heterojunctions shows that classical electroforming or phase transitions cannot explain their energy and speed limits. This work studies alternative switching mechanisms based on polar electromigration at thin-film interfaces. For the first time, a concept of resistive threshold switching with the formation and structural stabilization of metastable dichalcogenide phases is proposed, providing low threshold voltages, high speed, and long data storage.

Keywords: thin films, chalcogenide, switching and memory effects, chalcogenide heterojunctions

For citation: Troyan E.F., Smirnov A.G., Kharkov S.Yu., Kolobov A.V., Karmokov A.M., Molokanov O.A. Mechanisms of resistive switching in chalcogenide heterojunctions. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):P. 55–61.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 538.975:539.216.2

Механизмы резистивного переключения в гетероструктурах на основе халькогенидов

Евгений Федорович Троян[1], Александр Георгиевич Смирнов[2], Сергей Юрьевич Харьков[3], Александр Владимирович Колобов[4], Ахмед Мацеевич Кармоков[5], Олег Артемович Молоканов[6]

[1,2,3]Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь
[4]Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия
[5,6]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]troevfe@gmail.com
[2]smirnov@bsuir.by
[3]seriy77729@mail.ru
[4]akolobovov@herzen.spb.ru
[5]karmokov@kbsu.ru
[6]molokanov@kbsu.ru

Аннотация. Представлены результаты исследований физических процессов на границе раздела в тонкопленочных структурах на основе двух- и трехкомпонентных халькогенидов, определяющих механизмы фазовых переходов и памяти. Предложена альтернативная концепция резистивного порогового переключения на границах раздела двух- и трехкомпонентных халькогенидных полупроводниковых материалов с формированием метастабильных дихалькогенидных соединений. Рассмотрены методы структурной стабилизации таких соединений.

Ключевые слова: тонкие пленки, халькогенидные соединения, эффекты переключения и памяти, дихалькогениды переходных металлов

***Для цитирования*:** Троян Е.Ф., Смирнов А.Г., Харьков С.Ю., Колобов А.В., Кармоков А.М., Молоканов О.А. Механизмы резистивного переключения в гетероструктурах на основе халькогенидов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 55–61.

Introduction

Presently, the important scientific and technical task is to find alternative switching mechanisms in memory cells that could provide record write/erase times, low threshold voltages and long data storage times. One of the promising way is the usage of chalcogenide phase-change materials (PCM). Despite intensive studies of their crystal structure and chemical composition, the nature of resistive switching mechanisms in these compounds has not yet been conclusively established.

PCM materials are amorphous tellurium-based chalcogenide glasses capable of switching from a high-resistance OFF-state to a low-resistance ON-state when a certain threshold voltage U_{th} is exceeded. This resistive switching effect is divided into two types: (i) threshold switching and (ii) switching with memory. In devices of the first type, after removing the applied voltage, an automatic return to the OFF-state occurs, while devices with memory maintain the on state even after the voltage is turned off. Thus, in amorphous thin-film chalcogenide semiconductors like SiTeAsGe (STAG), when an external voltage $U \geq U_{th}$ is applied, an abrupt decrease in resistance (transition to ON-state) is observed. When the voltage drops to $U \leq U_{th}$, the sample jumps back to the initial high-resistance OFF-state. In chalcogenides of a different composition, for example, GeTeSb (GTS), the low-resistance ON-state is maintained after the voltage is removed, and the reverse transition to the OFF-state is initiated by the supply of a current pulse of sufficient amplitude ($I \geq I_{th}$).

Under the influence of high electric fields, a local conductive channel, the so-called "conduction filament," is formed between the electrodes. Intense fields lead to significant currents, which causes local heating inside the thread. In this regard, the memory effects in GTS structures are traditionally explained by thermal processes, namely, melting and subsequent crystallization of the amorphous phase. At the same time, switching effects in STAG are associated with electronic mechanisms such as the accumulation of spatial charges, the Poole-Frenkel effect, etc. However, the thermal concept existing for more than 50 years and various electronic models do not explain in any way the simultaneous observation of the effects of memory and threshold switching in chalcogenide compounds of identical composition, as well as the dependence of resistive characteristics on the polarity of the applied voltage [1, 2].

We have previously shown [1] that switching and memory effects observed both in amorphous PCM materials (GTS, STAG) and in other resistive structures (for example, *i*-PCM, Al-Al_2O_3-Te, etc.) [3] have a single memristor nature. They are due to electromigration of the ions of the main PCM components, leading to the formation of local regions of two-dimensional (2D) dichalcogenides that form the "conduction filament".

In particular, the memory effect in GTS and i-PCM films is associated with the electromigration of Ge^+ and Sb^+ cations and the formation of local regions of 2D dichalcogenides $GeTe_2$ and $SbTe_2$. The threshold switching effect in tellurium films with impurities of aluminum and oxygen is due to the migration of Al^+ and O^- ions under the influence of an external electric field. This threshold switching effect is associated by the formation of metastable highly conductive semimetallic clusters of 2D dichalcogenide $AlTe_2$ with metavalent directional bonds (bond alignment) on the surface of Te or at the Al-Al_2O_3-Te interface [3]. The compounds $AlTe_2$ and $SbTe_2$ do not exist in nature in a stable form, but it has been experimentally shown that these metastable clusters can be fixed in a highly conductive state either due to the external holding voltage U_{hold}, or under the influence of the induced internal field U_{ind} in ferroelectric films SnTe or GeTe [4].

Thus, the proposed alternative concept is based on the assumeption that at the moment of switching to the ON-state, a crystalline region is formed in the active region of the thin film element, consisting of highly conductive metastable dichalcogenide clusters ($AlTe_2$ or $SbTe_2$), in which residual internal polarization remains

$$P_{in} = -k \times U_{hold},$$

where k is the proportionality factor determined by the dielectric constant of the active material, and U_{hold} is the retention voltage of the element in a low-resistance state. Based on this, there is a need to form additional layers of active material surrounding these metastable clusters, in which the effect of induced polarization with $P_{ind} \geq P_{in}$ can be realized. It is assumed that in this case the effect of non-volatile memory will be observed. If there is no or little stable fixed polarization in the surrounding layers, then when the external voltage drops to $U \leq U_{hold}$, the threshold switching effect will be realized.

Experimental procedure

For experimental testing of the proposed concept, a multilayer memory element with the structure $Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me$ was manufactured and studied, where Ni, Cr or Mo were used as the upper electrode (Me). Films of two-component chalcogenides Al_2Te_3 and SnTe were deposited in vacuum ~ 10^{-4} Torr by molecular beam epitaxy using effusion Knudsen cells. As a result, it was possible to obtain a stably functioning thin film nonvolatile memory element characterized by an extremely short switching time ($t_{sw} \leq 0.1$ μs), a low threshold voltage ($U_{th} \leq 3.5$ V) and a long storage time for recorded information (more than 10 years).

Spectroscopic methods were used to study the processes at the interface of $Al_2Te_3/SnTe$ layers at various stages of structure formation: measurement of frequency dependencies of the dielectric loss coefficient ε″, nuclear magnetic resonance (NMR) [4] and Mossbauer spectroscopy. The studies were conducted on specially prepared samples in high-resistance and low-resistance states. Frequency relationships ε″ were measured using a Novocontrol BDS-80 broadband dielectric spectrometer for both cell states. Mossbauer resonance spectra for the ^{119}Sn isotope were recorded on a YaGRS-4M spectrometer; $BaSnO_3$ was used as a source of γ-radiation. Measurements were carried out at a temperature of 293 K. Al_2Te_3 and SnTe films were successively sprayed onto aluminum foil with a diameter of 15 mm and a thickness of 0.1 mm, transparent for γ-radiation. The NMR spectra on the ^{27}Al cores were recorded in the magic angle rotation mode (MAS, rotation frequency 14 kHz) on a Bruker AVANCE III wide-band spectrometer with a magnetic field induction of 16.4 T.

Results and discussion

X-ray diffraction analysis (*Figure 1*) indicates the absence of an amorphous phase and indicates a typical polycrystalline nature of sprayed films, characterized by a diverse orientation of crystallites in the multilayer structure $Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me$.

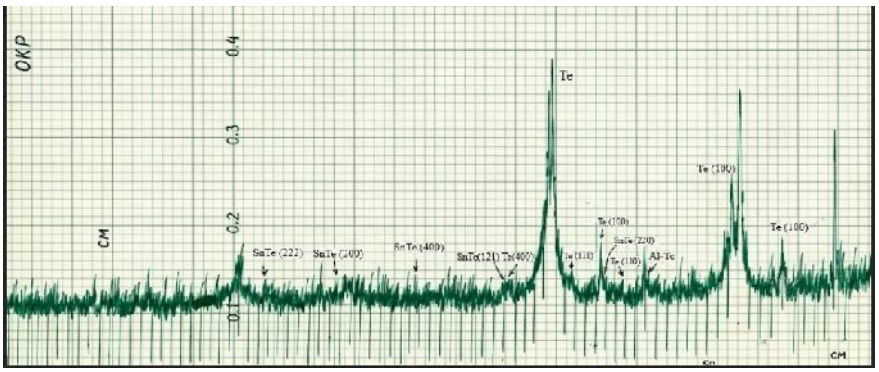


Figure 1 – X-ray diffraction analysis of thin film structure $[Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me$ (Me – Ta, Ni, Cr, C)$]_n$

The polarized-dependent voltage-current characteristic of the obtained memory element based on this structure is shown in *Figure 2*.

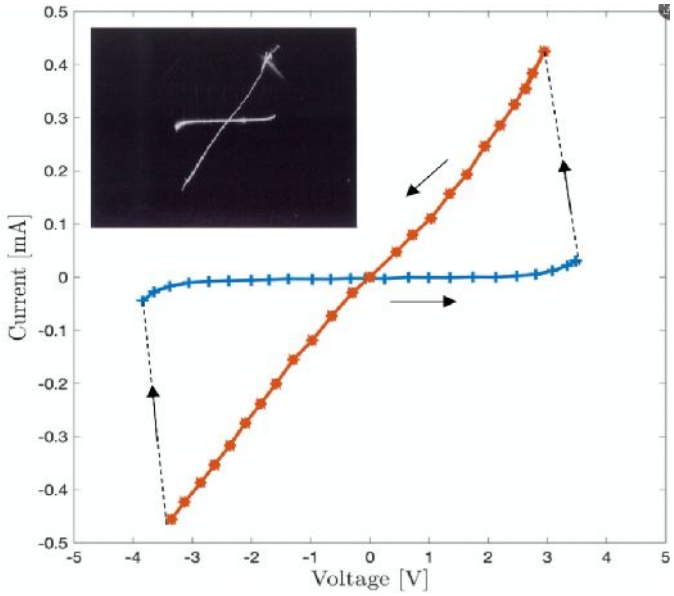


Figure 2 – V-I characteristic of structure [Al/Al2Te3/SnTe/TeO2/SnTe/Me (Me -Ta, Ni, Cr, C)]$_n$

This multilayer structure was switched to the low-resistance state only at a negative voltage $U_{pore} \leq 3.5$ V supplied to the Al electrode. The element returned to the high-resistance state when the polarity of the applied voltage changed. Polarity-dependent voltage-current characteristic indicates the memristor nature of the observed effects, which are usually associated with electromigration of ions of the main film components. In our case, it is chalcogenide films: Al_2Te_3 and SnTe.

NMR spectra on ^{27}Al cores for specially prepared samples in high-resistance and low-resistance states are shown in *Figures 3a* and *3b* respectively.

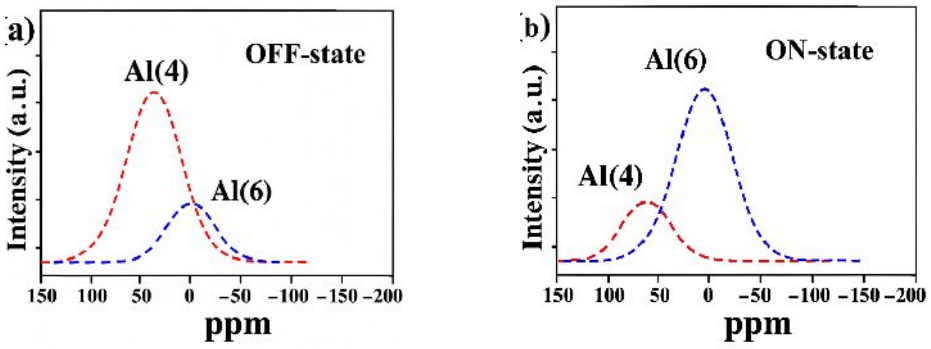


Figure 3 – ^{27}Al NMR-spectroscopy of [Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me (Me-Ta, Ni, Cr, C)]$_n$ memory elements in OFF-state (a) and ON-state (b)

Analysis of the results of NMR spectroscopy made it possible to establish [4] that during the phase transition from the OFF- to the ON-state, aluminum atoms undergo reversible tetrahedral-octahedral rearrangements. Similar structural changes in Al_2Te_3 compounds have previously been noted by other authors [5, 6]. As is known [7], the octahedral coordination of transition metal atoms is a distinctive feature of the polymorphic structures 1T, 1T′ and Td observed in the dichalcogenides $MoTe_2$, WTe_2, $PtTe_2$, VTe_2, etc. In such 2D dichalcogenides, transition metal regions have octahedral coordination, which leads to partial filling of two of the three degenerate d-orbitals (d_{xy}, d_{xz} and d_{yz}). It is this circumstance that determines the metallic character of the metastable polymorphic phases 1T, 1T′ and Td [7]. In our opinion, the obtained NMR spectra indirectly confirm the formation of dichalcogenide clusters of the $AlTe_2$ type in the studied thin-film structure Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me during its transition to a low-resistance ON state. These metastable clusters are involved in the formation of a crystalline phase ("conduction filament") at the interface of the Al_2Te_3/SnTe layers under the influence of a strong external electric field. The existence of $AlTe_2$ clusters with octahedral coor-

dination of Al atoms in the conducting filament can be explained within the framework of the "formal electron shell" formation model [3, 6].

For experimental verification of this assumption, Mössbauer spectroscopy was carried out on the ^{119}Sn isotope on samples of memory elements of this structure (*Figure 4 a, b*).

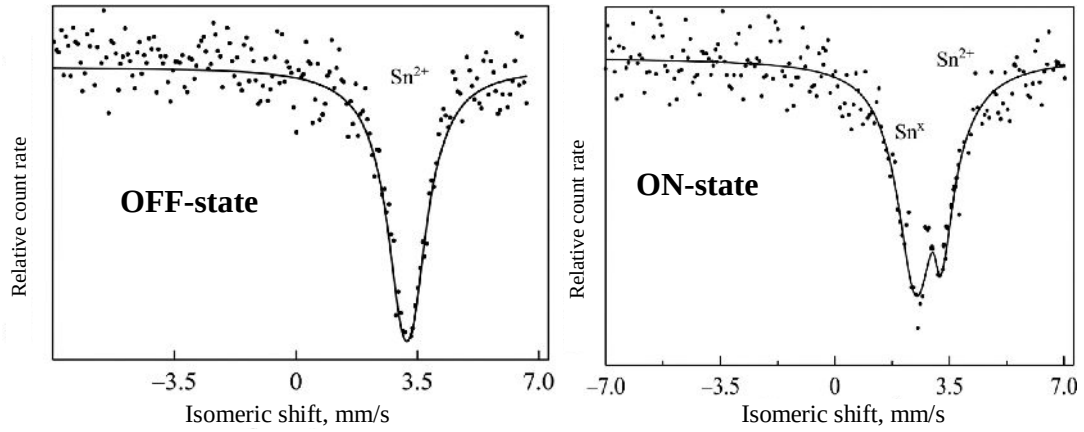


Figure 4 – ^{119}Sn Mössbauer spectroscopy [$Al/Al_2Te_3/SnTe/TeO_2/SnTe/Me$ (Me-Ta, Ni, Cr, C)] n memory elements in OFF-state (a) and ON-state (b)

On the spectra of multicomponent structures in the OFF-state (*Figure 4a*), a line corresponding to bivalent tin is observed. It is characterized by the following parameters: isomeric shift δ = 3.48 mm/s (relative to SnO_2), line width Γ = 0.75 mm/s, quadrupole splitting ΔE = 0.2 mm/s. These values are typical for the connection of SnTe with a cubic crystal lattice [8].

On the spectra of samples after switching to the ON-state (*Fig. 4b*), a line appears with an isomeric shift of δ = 3.39 mm/s, which is an overlap of two broadened components, which leads to a significant expansion of the spectral line. This line is characterized by the manifestation of a quadrupole doublet with similar values of isomeric shifts, but differing values of quadrupole splits. A decrease in isomeric shift to δ = 3.39 mm/s compared to the reference sample (δ = 3.47 mm/s), as well as the appearance of a quadrupole doublet, indicate rhombohedral distortion of the SnTe cubic lattice of the NaCl type [8]. The rhombohedral phase with metavalent bonds, subject to such distortion, always has polarity [9]. Therefore, the presence of this phase can be associated with the induction of the internal field U_{ind} in the ferroelectric film SnTe. The appearance of a line with an isomeric shift of δ = 3.39 mm/s also indicates the presence of distorted octahedral complexes in a multicomponent structure [8], which, as noted earlier, is a characteristic feature of dichalcogenides. Thus, we assume that at the interface between the Al_2 Te_3 /SnTe films, when the memory element switches to the ON- state, along with the 2D dichalcogenide $AlTe_2$, which has its own polarization vector, a 2D dichalcogenide $SnTe_2$ with mirror chirality is additionally formed, i.e., with an oppositely directed polarization vector. Mirror chirality is characteristic of nanoheterostructures based on 2D dichalcogenides with distorted octahedral lattices separated at the atomic level by a Van der Waals gap [10]. As a result, we can conclude that under the influence of external voltage, a certain part of the $SnTe/Al_2Te_3$ interface transforms into an ordered, stable multilayer superstructure – the "conduction filament" of the $SnAlTe_4$ composition, which is responsible for the highly conductive ON-state of the memory element [1].

In addition, the frequency relationships of the dielectric loss coefficient ε″ were investigated. Since the electrical parameters of the memory element have been studied in sufficient detail, the analysis of its dielectric properties is of practical interest, especially considering the presence of dipole polarization characteristic of 2D dichalcogenides [11]. Frequency dependencies ε″ were measured for both high-resistance (OFF-state) and low-resistance (ON-state) states of the memory element (*Figures 3a* and *3b*, respectively).

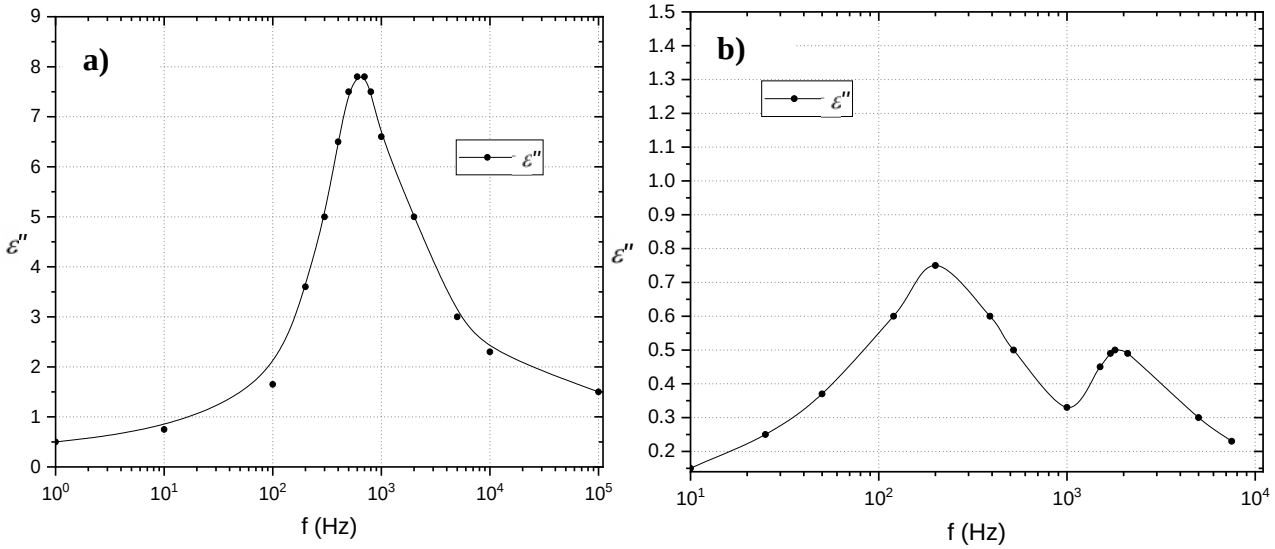


Figure 5 – Frequency dependence of dielectric loss factor ε" (a) OFF-State, (b) ON-State

It can be seen from *Figure 5*, a that for the OFF- state, the dependence of ε'' shows one intense low-frequency maximum at f = 600 Hz, characteristic of pronounced dipole polarization [12]. For the ON-state (*Fig. 5b*), two weakly expressed peaks are observed at frequencies f_1 = 200 Hz and f_2 = 1800 Hz, which are associated with "heavy" ($SnTe_2$) and "light" ($AlTe_2$) octahedral fragments, respectively. These fragments appear to be formed at the Al_2Te_3/SnTe film interface as a result of electromigration memristor processes. In these fragments, the asymmetric arrangement of bonds causes dipole polarization [12], since the relative displacement of atoms of transition metals and tellurium under the influence of external voltage ($U \geq U_{th}$) underlies the so-called sliding out-of-plane polarization observed in the polymorphs of 1T, 1T′ and Td 2D dichalcogenides [11]. In our opinion, the polarization vectors of two different fragments are mutually compensated. At the same time, the polarization vector of the "heavy" octahedral fragment $SnTe_2$ stabilizes the "light" octahedral fragment $AlTe_2$ in a highly conductive state, which provides the effect of non-volatile memory [4].

Conclusion

In the work, it was first experimentally established that the nature of the effects of resistive switching at the interfaces of tellurium chalcogenide films is due to electrostimulated memristor processes, accompanied by the formation of a metastable phase of $AlTe_2$ dichalcogenide. It was found that metastable octahedral $AlTe_2$ clusters with high conductivity can be stabilized and fixed at room temperature not only by an external field (threshold switching effect), but also by an internal field of comparable or larger magnitude with an opposite vector (non-volatile memory effect). The scientific novelty of the results lies in the demonstration of the key role of ferroelectric fields in stabilizing this state, which is described within the framework of the effect of fixed "induced polarization". Based on the obtained data, an original multilayer structure with additional ferroelectric layers is proposed, which allows achieve record-breaking characteristics of memory elements.

By methods of NMR and Mössbauer spectroscopy, reversible tetrahedral-octahedral rearrangements of Al and Sn atoms induced by external voltage were found. Analysis of dielectric properties confirms that as a result of polar electromigration of components at $U \geq U_{th}$, part of the interface between SnTe/Al_2 Te_3 films is transformed into an ordered stable multilayer superstructure – the "conduction filament" of the $SnAlTe_4$ composition. This superstructure is formed by two 2D dichalcogenide blocks ($SnTe_2$ and $AlTe_2$) separated by a Van der Waals gap. The polarization vector of the octahedral fragment $SnTe_2$ stabilizes the out-of-plane polarization of the fragment $AlTe_2$ in a highly conductive state, which ensures the effect of non-volatile memory. The design of the developed memory element is protected by US patent [13].

Authors' contribution

E.F. Troyan and A.V. Kolobov developed a physical model of the effects of memory and threshold switching to chalcogenide glasses based on tellurium, A.G. Smirnov conducted NMR- and Mössbauer- spectroscopy, S.Yu. Kharkov prepared samples of memory elements for research, A.M. Kamrokov and O.A. Molo-

kanov participated in experiments and interpretation of the results of measuring the frequency dependences of the dielectric loss coefficient ε for both high-resistance OFF-state and low-resistance ON-state states of the memory element.

Conflict of interests. The authors declare that there is no conflict of interests.

Gratitude. This work has been carried out within the framework of grants N 25-7026 and 26-3057.

References

1. Troyan E.F., Doronin A.V. Change of GeTe/Sb_2Te_3 thin-film memory elements resistance R_{ON} under external pressure. *Comprehensible Science: ICCS 2020 / eds.: T. Antipova, A. Rocha. / Lecture Notes in Networks and Systems*. 2021;186:451–460.

2. Pandian R., Kooi Bart J., Palasantzas George, De Hosson Jeff T. M. Nanoscale electrolytic switching in phase-change chalcogenide films. *Adv. Mater.* 2007;19(24):4431–4437.

3. Kolosnitcin B.S., Troyan E.F. Switching and memory effects in thin film disoder chalcoginide semiconductors. *Doklady BGUIR*. 2017;2(104):25–30. (In Russ.).

4. Troyan E.F. Smirnov A.G., Stepanov A.A., Jouvneric N.V., at al. Memory and switching processes in thin-film structures based on two- and three-component chalcogenides. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2024;14(3):11–14. (In Russ.).

5. Xia M., Ding K., Rao F., Li X., Wu L., Song Zh. Aluminum-centered tetrahedron-octahedron transition in advancing Al-Sb-Te phase change properties. *Scientific Reports*. 2015;5(1):8548.

6. Pumlianmunga R.K. Electrical switching, local structure and thermal crystallization in Al-Te glasses. *Materials Research Bulletin*. 2017;86:88–94.

7. Saif S., Chowde G.Ch., Solomon D., Raphael T., Sourav P., Kumar S.K., et al. Emerging two-dimensional tellurides. *Materials Today.* 2021:1–23.

8. Marchenko A.V., Terukov E.I., Nasredinov F.S., Petrushin Yu.A., Seregin P.P. Local Structure of germanium atoms and anti-structur defects of tin in amorphous and crystalline Ge2Sb2Te5 films. *Physics and technology of semiconductors*. 2021;55(1):3–8.

9. Kerres P., Mazzarello R., Cojocaru-Mirédin O., Wuttig M. Growth of Textured Chalcogenide Thin Films and Their Functionalization through Confinement. *Phys. Status Solidi. A.* 2024;221(22):2300921.

10. Branzi L., Martyn J., Fitzsimmons L., Gun'ko Y.K. Chirality in Transition Metal Dichalcogenide Nanostructures. *Chem. Eur. J*. 2025;31(35):1–27.

11. Li X., James G., McHugh L., Fal'ko V.I. Ferroelectric properties of Van der Waals chalcogenides: a density functional theory perspective. *Academia Nano: Science, Materials, Technology*. 2025;2:1–9.

12. Kononov A.A., Kolobov A.V. Dielectric relaxation in amorphous and crystalline Sb_2Te_3 thin films. *J. Mater. Sci: Matewr. Electron.* 2021;32:14072–14078.

13. Troyan E.F. Patent US 9,865,811, jan. 9, 2018.

© Троян Е.Ф., Смирнов А.Г., Харьков С.Ю., Колобов А.В., Кармоков А.М., Молоканов О.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 62–66.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):62–66.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 544.778.4

Основные параметры гидротермального синтеза, определяющие структуру и свойства редкоземельных ферритов – гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$

Спартак Александрович Хайманов[1], Наталья Ильинична Цидаева[2], Ахсарбек Таймуразович Накусов[3]

[1,2,3]Северо-Кавказский горно-металлургический институт (государственный технологический университет), Республика Северная Осетия – Алания, Владикавказ, Россия
[1]sh_khaymanov@mail.ru
[2]tsidaevan@mail.ru
[3]shasha_nat@mail.ru

Аннотация. Представлены результаты исследования этапов гидротермального синтеза наноструктурированных порошков редкоземельных ферритов-гранатов. Определены два основных параметра гидротермального синтеза (температура синтеза и количество добавляемой щелочи NaOH), контроль которых существенно улучшает свойства полученных материалов.

***Ключевые слова*:** наноструктурированные порошки, редкоземельные ферриты-гранаты
Для цитирования: Хайманов С.А., Цидаева Н.И., Накусов А.Т. Основные параметры гидротермального синтеза, определяющие структуру и свойства редкоземельных ферритов-гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 62–66.

PHYSICS

Original article

The main parameters of hydrothermal synthesis that determine the structure and properties of rare-earth ferrites – garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ and $Pr_3Fe_5O_{12}$

Spartak A. Khaymanov[1], Natalia I. Tsidaeva[2], Ahsarbek T. Nakusov[3]

[1,2,3]North Caucasian Institute of Mining and Metallurgy (State Technological University), Republic of North Ossetia - Alania, Vladikavkaz, Russia
[1]sh_khaymanov@mail.ru
[2]tsidaevan@mail.ru
[3]shasha_nat@mail.ru

Abstract. The results of the study of the stages of hydrothermal synthesis of nanostructured powders of rare-earth iron garnets are presented. Synthesis parameters have been selected that make it possible to obtain materials with the specified and required properties. Two main parameters of hydrothermal synthesis (synthesis temperature and the amount of added NaOH alkali) have been identified; controlling and varying these parameters significantly improves the properties of the resulting materials.

Keywords: nanostructured powders, rare-earth iron garnets
For citation: Khaymanov S.A., Tsidaeva N.I., Nakusov A.T. Main parameters of hydrothermal synthesis determining the structure and properties of rare-earth iron garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ and $Pr_3Fe_5O_{12}$. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):62–66. (In Russ.).

Введение

Редкоземельные ферриты-гранаты, обладая уникальными магнитными, оптическими и электрофизическими свойствами, на протяжении нескольких десятилетий находят широкое применение в раз-

личных областях промышленности, науки и техники. Данный фактор стал возможен благодаря исследованиям, которые начали в 30-е годы ученые-основоположники физики магнетизма Луи Неель и Лев Ландау, первые результаты которых были опубликованы в работах [1–2]. Вышеуказанные ученые положили начало бурному росту исследований ферритов-гранатов различного химического состава, изучение которых остается актуальным и по сей день [3–6].

Настоящая работа имеет целью показать результаты определения оптимальных параметров гидротермального синтеза для получения порошков ферритов-гранатов с необходимыми свойствами. Объектами исследования являлись наноструктурированные порошки $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$.

Метод синтеза и методики исследований

При получении наноструктурированных порошков редкоземельных ферритов-гранатов с необходимыми свойствами в первую очередь нужно решить вопрос подбора методики синтеза, поскольку обширное разнообразие различных методов синтеза, используемых в настоящее время, не гарантирует необходимого результата [7].

В ходе проведения работы, а именно получения материалов для исследования, мы использовали гидротермальный метод синтеза. Несмотря на большое количество достоинств у вышеуказанного метода, есть несколько недостатков [8].

Подробно схема и принцип действия данного метода описаны как в наших предыдущих работах, так и в работах других авторов [9–10]. В связи с чем в данной публикации остановимся только на основных этапах и более подробно – на интервалах изменения параметров.

Температурный интервал, используемый при синтезе, был обусловлен двумя факторами:

1) при температурах меньших 150 °С кубической структуре феррита-граната не удается сформироваться (подтверждено данными РФА и рамановской спектроскопии), так же (как показали результаты исследований) появляется большое количество примесей Fe_2O_3 (подтверждено СЭМ и СЗМ), оказывающих негативное влияние на свойства исследуемых порошков;

2) использование температур синтеза свыше 240 °С лишает полученные порошки ферритов-гранатов магнитных свойств, поскольку точкой Кюри для данных материалов является Т = 250 °С [11].

Химический состав щелочи, а именно NaOH, и ее добавляемое количество от 2 до 20 граммов подбирались с учетом возможности исходных реагентов сформировать необходимые для нас исследуемые материалы (количество щелочи выше или ниже указанного интервала не позволяет проходить процессам формирования редкоземельных ферритов-гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$, а также дает возможность благоприятной среды для образования вредоносных примесей Fe_2O_3).

Результаты и их обсуждение

Рентгенофазовый анализ и рамановская спектроскопия

Основными методами, используемыми для качественного определения и контроля элементного и химического состава синтезированных образцов, являлись рентгенофазовый анализ и рамановская спектроскопия. Параметры, при которых проводилось исследование вышеуказанными методиками, достаточно подробно описаны в работах [12, 13].

Дифрактограммы и спектрограммы, полученные данными методами исследования, представлены на *рисунках 1 и 2*.

Проведя анализ полученных данных, можно отметить следующие закономерности и сделать следующие выводы:

– интенсивности и углы расположения пиков на дифрактограммах и спектрограммах подтверждают кубическую структуру ферритов-гранатов самария и празеодима *(рис. 2)*;

– увеличение температуры синтеза со 150 до 240 °С, а также количества щелочи с 2 до 20 граммов позволяет более качественно проходить процессам образования ферритов-гранатов и уменьшает количество остаточных продуктов реакции, которыми в основном являются оксиды железа.

Проведя ряд экспериментов, можно констатировать, что наиболее оптимальными параметрами гидротермального синтеза являются температура синтеза Т=240 °С и количество добавляемой щелочи NaOH 14 граммов.

Сканирующие зондовая и электронная микроскопии

Микроструктурные особенности, а также форма и размеры частиц влияют на целый спектр свойств ферритов-гранатов, отметим лишь магнитные и адсорбционные свойства. При исследовании вышеуказанных свойств мы (подобно авторам [14–16]) использовали современные виды микроскопии – сканирующую электронную и сканирующую зондовую микроскопии (СЭМ и СЗМ).

Результаты, представленные в виде СЭМ- и АСМ-изображений, показаны на *рисунках 3* и *4*.

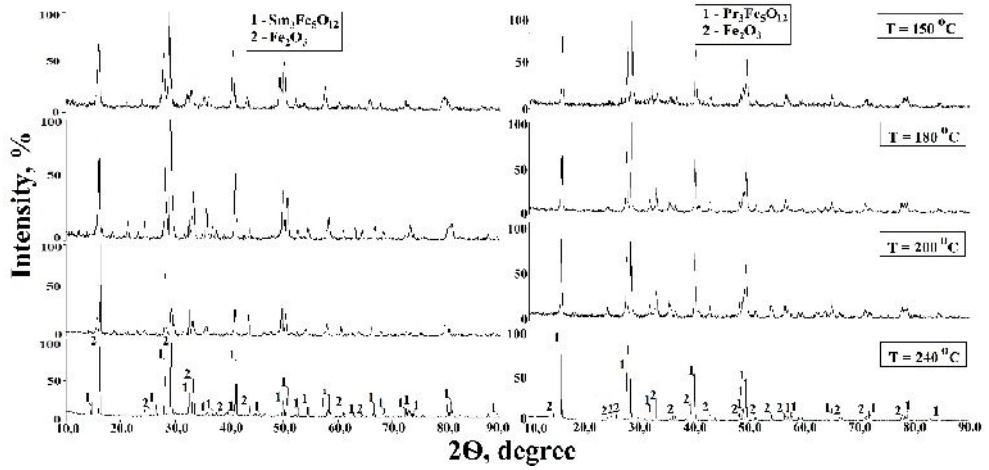


Рисунок 1 – Дифрактограммы порошков ферритов-гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ при температурах синтеза 150, 180, 200 и 240 °С с идентификацией пиков, относящихся к материалам $Sm_3Fe_5O_{12}$, $Pr_3Fe_5O_{12}$ и Fe_2O_3

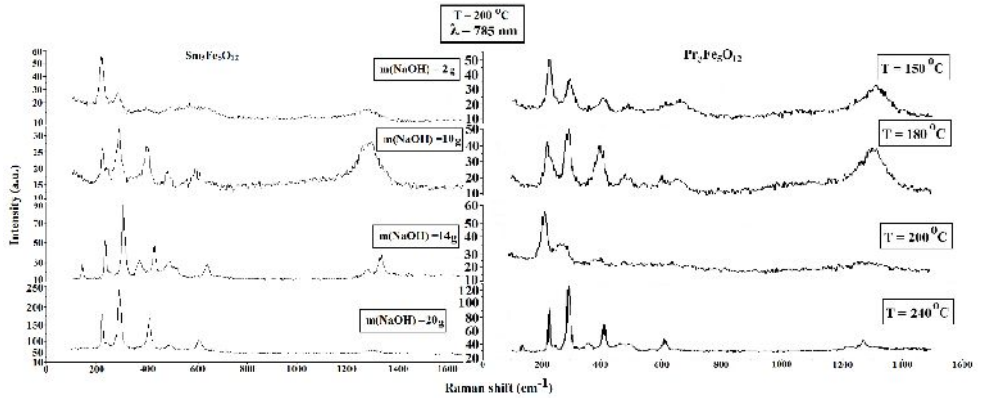


Рисунок 2 – Рамановские спектры порошков ферритов-гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ при температурах синтеза 150, 180, 200 и 240 °С и количестве добавляемой щелочи NaOH 2, 10, 14 и 20 граммов

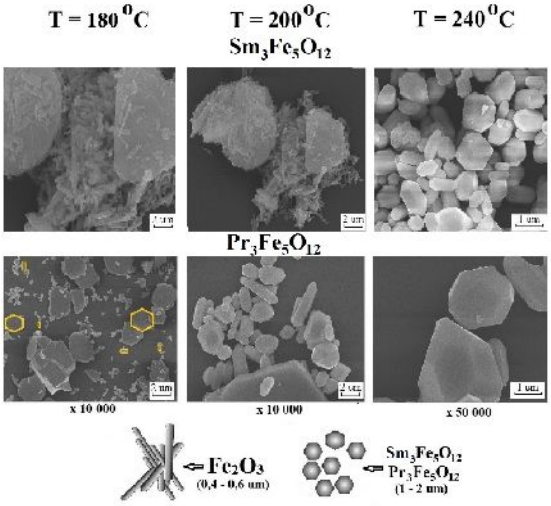


Рисунок 3 – СЭМ-изображения порошков ферритов-гранатов $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ и примеси Fe_2O_3 при температурах синтеза 180, 200 и 240 °С

Подведя итоги анализа полученных данных, отметим следующее:

– СЭМ- и АСМ-изображения визуализируют частицы, соответствующие характерным формам и размерам ферритов-гранатов Sm и Pr, а также Fe_2O_3;

– размеры частиц для ферритов-гранатов варьируются в пределах от 1 до 2 мкм. Особенность формы - ромбический додекаэдр. Частицы оксида железа имеют уникальную форму, вытянутую в горизонтальном направлении, размерами 0,4–0,6 мкм;

– результаты подтверждают, что рост температуры от 180 до 240 °С уменьшает количество частиц, соответствующих по размерам и формам оксиду железа, и увеличивает число частиц, относящихся к ферритам-гранатам.

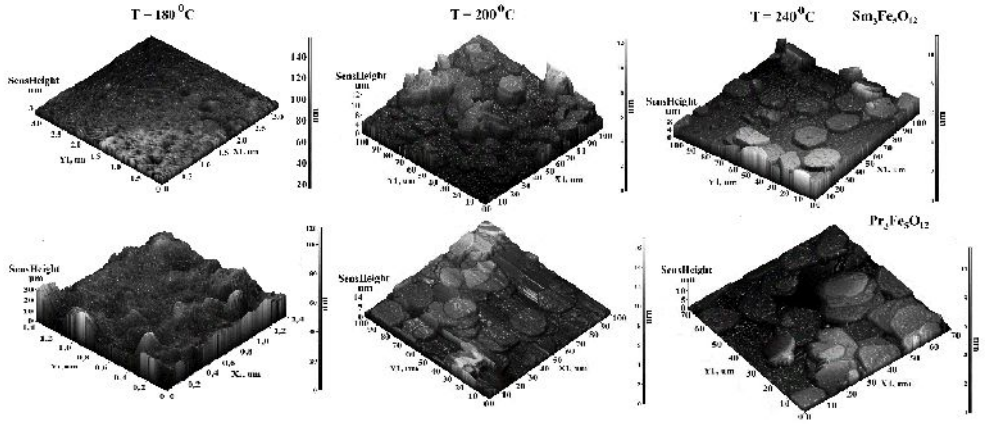


Рисунок 4 – АСМ-изображения порошков $Sm_3Fe_5O_{12}$ и $Pr_3Fe_5O_{12}$ при температурах синтеза 180, 200 и 240 °С

Заключение

Таким образом, показаны уникальные возможности влияния параметров гидротермального синтеза на создание материалов с необходимыми свойствами. Данный факт позволит создать фильтрующие материалы на основе ферритов-гранатов с высокими магнитными и адсорбционными свойствами.

Библиография

1. Neel L. Influence des fluctuations du champ moléculaire sur les propriétés magnétiques des corps // Annales de Physique. 1932. N 17. P. 61.

2. Landau L. Возможное объяснение зависимости восприимчивости от поля при низких температурах // Phys. Zs. Sowjetunion. 1933. N 4. P. 675.

3. Tsidaeva N., Nakusov A., Khaimanov S., Wang W. Hydrothermal synthesis of various magnetic properties of controlled micro/nanostructured powders and films of rare earth iron garnet // Nanomaterials. 2021. V. 11 (4). P. 972.

4. Nakusov A.T., Khaymanov S.A., Wang W., Tsidaeva N.I. Industrial wastewater purification adsorption materials based on rare-earth ferrite garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ // Sustainable Development of Mountain Territories. 2021. V.13. N 4 (50). P. 629–636.

5. Tsidaeva N.I., Abaeva V.V., Enaldieva E.V., Magkoev T.T., Ramonova A.G., Butkhuzi T.G., Kesaev V.I., Turiev A.M. Features of Optical Anisotropy of Europium and Terbium Iron Garnets // Optical Materials. 2013. V. 35. N 10. P. 1783-1786.

6. Agarwal P., Khanduri H., Link J., Stern R., Khan S., Garg V., Dimri M.C. Structural, microstructural, and magnetic studies of Y3Fe5-xNixO12 garnet nanoparticles // Ceram. Int. 2020. V. 46. P. 21039–21045.

7. Tsidaeva N.I., Nakusov A.T., Khaimanov S.A., Khubaev A.K., Kubalova L.M., Wang W. Microstructure and elemental composition of nanopowders and films of $Sm_3Fe_5O_{12}$ rare-earth garnet ferrites // Technical Physics. 2020. V. 65, N 2. P. 276–283.

8. Цидаева Н.И., Накусов А.Т., Хайманов С.А., Хубаев А.К., Силаев И.В. Исследование влияния температуры проведения гидротермального синтеза на свойства микро/наноструктурированных порошков феррита-граната самария // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2019. N 4 (52). С. 105–116.

9. Chen R., Wang W., Zhao X., Zhang Y., Wu S., Li F. Rapid hydrothermal synthesis of magnetic Co_xNi $1xFe_2O_4$ nanoparticles and their application on removal of Congo red // Chem. Eng. J. 2014. V. 242. P. 226–233.

10.Guo L., Yuan H.-M., Huang K.-K., Yuan L., Liu S.-K., Feng S.-H. Hydrothermal synthesis, characterization and magnetic properties of rare-earth iron garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ and $Eu_3Fe_5O_{12}$ // Chem. Res. Chin. Univ. 2011. V. 27. P. 715–719.

11.Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.

12.Mingsheng P., Mao H.K., Dien L., Chao E.C.T. Raman Spectroscopy of Garnet-group Minerals // Chin. J. Geochem. 1994. N 13. P. 176-183.

13.Lewis I.R., Edwards H. Handbook of Raman Spectroscopy. Monticello: Marcel Dekker, 2001. 1054 p.

14.Горох Г.Г., Федосенко В.С., Эм М., Янушкевич В.В., Таратын И.А. Многокомпонентные оксидные системы на основе столбиковых наноструктур вентильных металлов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. 14, N 3. С. 5–10.

15.Кяров А.Х., Люев В.К. Морфология, состав и электрофизические свойства поверхности кремния n-типа // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2016. Т. 6, N 2. С. 27–33.

16.Цурова А.Т., Бесланеева З.Л., Мамхегов Р.М., Хаширова С.Ю., Микитаев А.К. Разработка органоглины для модификации термостойких полимерных матриц // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2017. Т.7. N 1. С. 50–53.

References

1. Neel L. Influence des fluctuations du champ moléculaire sur les propriétés magnétiques des corps. *Annales de Physique.* 1932;17:61.

2. Landau L. A Possible Explanation of the Field Dependence of the Susceptibility at Low Temperatures. *Phys. Z. Sowjetunion.* 1933;4:675.

3. Tsidaeva N., Nakusov A., Khaimanov S., Wang W. Hydrothermal synthesis of various magnetic properties of controlled micro/nanostructured powders and films of rare earth iron garnet. *Nanomaterials*. 2021;11(4):972.

4. Nakusov A. T., Khaymanov S. A., Way Wang., Tsidaeva N. I. Industrial wastewater purification adsorption materials based on rare-earth ferrite garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$. *Sustainable Development of Mountain Territories.* 2021;13(4):629–636.

5. Tsidaeva N.I., Abaeva V.V., Enaldieva E.V., Magkoev T.T., Ramonova A.G., Butkhuzi T.G., Kesaev V.I., Turiev A.M. Features of Optical Anisotropy of Europium and Terbium Iron Garnets. *Optical Materials*. 2013;35(10):1783-1786.

6. Agarwal P., Khanduri H., Link J., Stern R., Khan S., Garg V., Dimri M.C. Structural, microstructural, and magnetic studies of Y3Fe5-xNixO12 garnet nanoparticles. *Ceram. Int.* 2020;46:21039–21045.

7. Tsidaeva N.I., Nakusov A.T., Khaimanov S.A., Khubaev A.K., Kubalova L.M., Wang W. Microstructure and elemental composition of nanopowders and films of $Sm_3Fe_5O_{12}$ rare-earth garnet ferrites. *Technical Physics*. 2020;65(2):276–283.

8. Tsidaeva N.I., Nakusov A.T., Khaymanov S.A., Khubaev A.K., Silaev I.V. Study of the effect of temperature for hydrothermal synthesis on the properties of micro/nanostructured samarium garnet ferrite powders. *Izvestiya vyshikh uchebnykh zavedenii. Povolzhskii region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physics and mathematics sciences. Physics.* 2019;4(52):105–116. (In Russ.).

9. Chen R., Wang W., Zhao X., Zhang Y., Wu S., Li F. Rapid hydrothermal synthesis of magnetic Co_xNi $1xFe_2O_4$ nanoparticles and their application on removal of Congo red. *Chem. Eng. J.* 2014;242:226-233.

10.Guo L., Yuan H.-M., Huang K.-K., Yuan L., Liu S.-K., Feng S.-H. Hydrothermal synthesis, characterization and magnetic properties of rare-earth iron garnets $Sm_3Fe_5O_{12}$ and $Eu_3Fe_5O_{12}$. *Chem. Res. Chin. Univ*. 2011;27:715–719.

11.Vonsovski S.V. Magnetism. New York, Toronto: J. Wiley & Sons; Jerusalem: London: Israel Program for Scientific Translations; 1974. 461 p.

12.Mingsheng P., Mao H.K., Dien L., Chao E.C.T. Raman Spectroscopy of Garnet-group Minerals. *Chin. J. Geochem*. 1994;13:176-183.

13. Lewis I.R., Edwards H. Handbook of Raman Spectroscopy. Monticello: Marcel Dekker; 2001; 1054 p.

14.Gorokh G.G., Fiadosenka U.S., Em M., Yanushkevich V.V., Taratyn I.A. Multi-Component Oxide Systems Based on Column Nanostructures of Valve Metals. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2024;14(3):5–10. (In Russ.).

15.Kyarov A.H., Lyuev V.K. The Morphology, Composition and Electrical Properties of the N-Type Silicon Surface. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University.* 2016;6(2):27–33. (In Russ.).

16.Tsurova A.T., Beslaneeva Z.L., Mamhegov R.M., Khashirova S.Yu., Mikitaev A.K. Development of Organo-Modifying Heat-Resistant Polymer Matrices. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceedings of the Kabardino-Balkarian State University*. 2017;7(1):50–53. (In Russ.).

© Хайманов С.А., Цидаева Н.И., Накусов А.Т., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 67–70.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):67–70.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 621.382

Отжиг ионно-имплантированных пленок кремния на изоляторе

Наталья Васильевна Черкесова[1], Гасан Абокарович Мустафаев[2], Арслан Гасанович Мустафаев[3], Денис Михайлович Здравомыслов[4]

[1,2,4]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[3]Дагестанский государственный университет народного хозяйства, Республика Дагестан, Махачкала, Россия
[1]natasha07_2002@mail.ru
[2]zoone@mail.ru
[3]arslan_mustafaev@mail.ru
[4]zlh1407@gmail.com

Аннотация. Проведены исследования влияния отжига в твердой фазе и отжига в жидкой фазе с помощью сканирующего полоскового нагревателя с имплантированными ионами фосфора P^+ и бора B^+ на пленки кремния Si. Показано, что, при этом электрическая активация примесей сравнима с активацией в результате отжига в печи при температуре 1000 °С, а подвижность носителей меньше теоретических значений вследствие образования дефектов в пленках кремния Si и остаточным повреждением в результате имплантации. Отжиг в жидкой фазе сканирующим нагревателем приводит к однородному легированию.

Ключевые слова: отжиг в твердой фазе, отжиг в жидкой фазе, пленки кремния, активация примесей, подвижности носителей, имплантация, дефекты, рекристаллизация, профили распределения

Для цитирования: Черкесова Н.В., Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Здравомыслов Д.М. Отжиг ионно-имплантированных пленок кремния на изоляторе // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 67–70.

PHYSICS

Original article

Annealing of ion-implanted silicon films on an insulator

Natalya V. Cherkesova[1], Gasan A. Mustafaev[2], Arslan G. Mustafaev[3], Denis M. Zdravomyslov[4]

[1,2,4]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nalchik, Russia
[3]Dagestan State University of National Economy, Republic of Dagestan, Makhachkala, Russia
[1]natasha07_2002@mail.ru
[2]zoone@mail.ru
[3]arslan_mustafaev@mail.ru
[4] zlh1407@gmail.com

Abstract. The effects of solid-phase annealing and liquid-phase annealing on silicon Si films were studied using a scanning strip heater implanted with phosphorus (P^+) and boron (B^+) ions. It was shown that the electrical activation of impurities is comparable to that resulting from annealing in a furnace at 1000 °C, while

carrier mobility is lower than theoretical values due to defect formation in the silicon Si films and residual damage resulting from implantation. Liquid-phase annealing with a scanning heater results in uniform doping.

Keywords: solid-phase annealing, liquid-phase annealing, silicon films, impurity activation, carrier mobilities, implantation, defects, recrystallization, distribution profiles

For citation: Cherkesova N.V., Mustafaev G.A., Mustafaev A.G., Zdravomyslov D.M. Annealing of ion-implanted silicon films on an insulator. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):67–70. (In Russ.).

Введение

Режимы отжига плёнок кремния (Si) с имплантированными ионами фосфора (P^+) и бора (B^+) существенно влияют на структуру, свойства и распределение примесей в материале [1–4]. Отжиг используется для залечивания дефектов, перевода примесных атомов в электрически активное состояние, формирования химических соединений, устранения радиационных дефектов кристаллической решетки и оптимизации свойств материала. Режимы подбираются индивидуально в зависимости от требуемой глубины залегания и типа примеси.

Результаты и обсуждение

В работе рассмотрены различные режимы отжига пленок кремния Si с имплантированными ионами фосфора P^+ и бора B^+ с помощью сканирующего полоскового нагревателя.

На подложке (100) кремния Si выращивался слой окисла толщиной 0,9 мкм [5], затем проводили фотолитографию и вскрывали окна; сверху осаждался слой поликристаллического слоя кремния Si [6] толщиной 0,5 мкм. Маскирующее покрытие состояло из слоя окисла [7] толщиной 0,05 мкм, полученного термическим окислением, слоя окисла SiO_2 [8] толщиной 0,05 мкм, нанесенным методом высокочастотного плазменного осаждения. Образцы помещались на графитовую полоску, которая нагревалось в потоке аргона Ar до температуры 1300 °С в течение 30 с. Затем нагревалась графитовая полоска шириной 1 мм, находящаяся на расстоянии 0,5 мм от поверхности образца. Она перемещалась над поверхностью образца со скоростью 1мм/мин, создавая движущуюся узкую расплавленную область. При этом сначала происходила рекристаллизация поликристаллического кремния в областях над окнами в оксидной пленке, где монокристаллический Si подложки служил затравкой. Рекристаллизованные области способствовали затем поперечной рекристаллизации всей пленки по мере движения расплавленной зоны [1, 9].

В рекристаллизованные пленки кремния Si имплантировались ионы B^+ с энергией 70 кэВ или P^+ с энергией 150 кэВ. Для отжига использовались два режима: режим отжига в твердой фазе и отжиг в жидкой фазе.

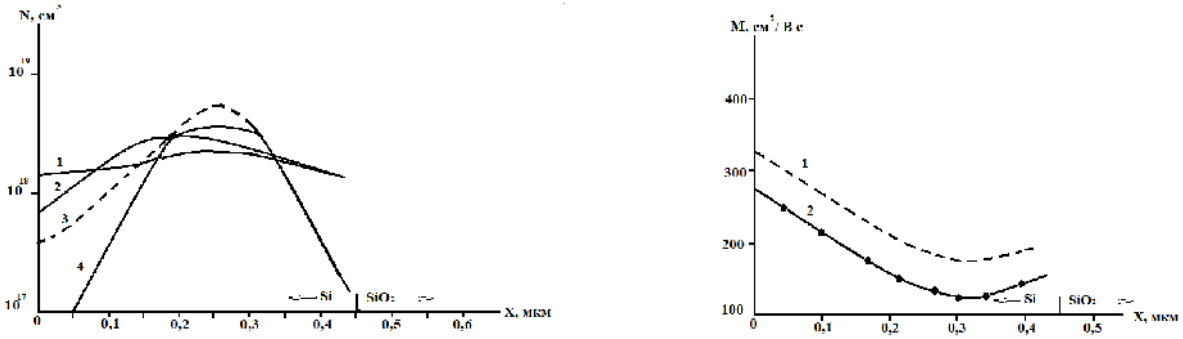
В режиме отжига в твердой фазе мощность полоскового нагревателя поддерживалась ниже порога плавления. Графитовая полоска шириной 1 см, расположенная на расстоянии 1 мм от поверхности образца, перемещалась со скоростью 1 мм/с. Нижняя графитовая полоска поддерживалась при комнатной температуре.

На *рисунке 1* представлены результаты холловских измерений и измерений слоевого удельного сопротивления, а также данные вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС) для пленок кремния Si с имплантированными ионами B^+.

Аналогичные данные получены и для донорной примеси фосфора P^+. Электрическая активация примесей в рассматриваемом режиме отжига сравнима с активацией в результате отжига в печи при температуре 1000 °С в течение 30 мин. Профили распределения электрически активной примеси простираются по всей ширине пленки. Как видно *из рисунка 1б*, подвижности дырок в случае имплантации ионов B^+ оказываются меньше теоретических значений, что объясняется дефектами пленок и остаточным повреждением в результате имплантации [1, 9]. Однако, они сравнимы с подвижностями в аналогичных пленках кремния Si, подвергнутых отжигу в печи при температуре 1000°С в течение 30 мин.

Значения электронной подвижности в клетках, отожженных сканирующим нагревателем с имплантированными ионами фосфора P^+, меньше, соответствующих характеристик для отожженных в печи, особенно вблизи максимума профиля. Вероятно, это связано с неполным отжигом больших радиационных повреждений [1, 9], вызванных ионами фосфора P^+ которые тяжелее, чем ионы бор B^+.

Профили ВИМС на *рисунке 1* свидетельствуют о том, что отжиг с помощью полоскового нагревателя в твердой фазе не сопровождается диффузией примеси, а отжиг в печи приводит к заметному перераспределению атомов примеси. Это справедливо для имплантации как ионов бора B^+, так и ионов фосфора P^+.

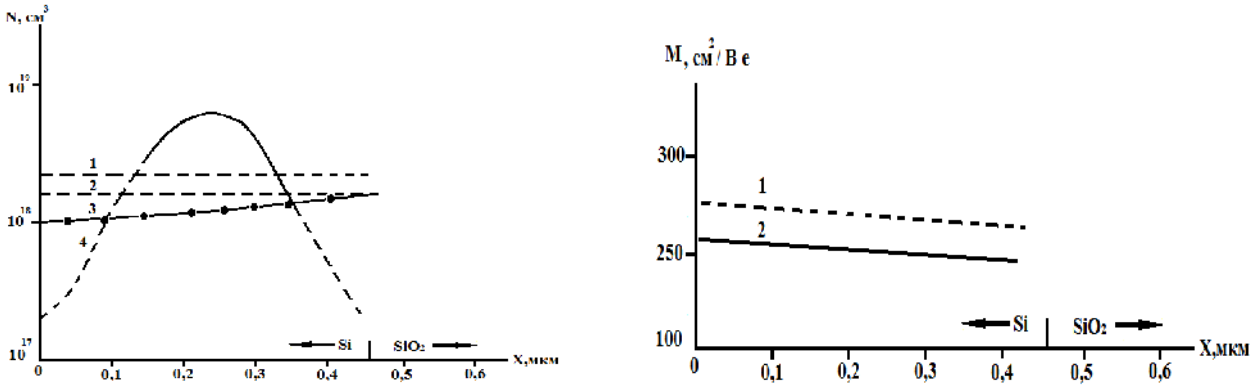


а) б)

Рисунок 1 – профили распределения концентрации акцепторов по глубине: а) 1 – данные электрических измерений; 2 – профили ВИМС после отжига; 3 – данные ВИМС до отжига; 4 – данные ВИМС для отжига в печи (1000 °С, 30 мин), б) подвижности дырок: 1 – теоретические значения подвижности, 2 – экспериментальные значения подвижности дырок

Отжиг в жидкой фазе сканирующим нагревателем приводит к однородному легированию. В качестве примера, на *рисунке 2* представлены профили распределения акцепторов и подвижности для ионов бора B^+, полученные после отжига.

Как и ожидалось, при отжиге в жидкой фазе исходное распределение примесей не сохраняется, и профили концентрации легирующей примеси становятся пологими. Электрическая активация имплантированных примесей при отжиге в жидкой фазе сканирующим нагревателем немного ниже, чем при отжиге в печи, а также в случае отжига в твердой фазе полосковым нагревателем.



а) б)

Рисунок 2 – профиль распределения концентрации акцепторов: а) 1 – данные электрических измерений; 2 – профили ВИМС после отжига; 3 – профиль ВИМС для образца, подвергнутого отжигу в печи (1100 °С, 30 мин); б) 1 – теоретические значения подвижности, 2 – экспериментальные значения подвижности дырок

Интегральные площади под профилями ВИМС на *рисунке 2а* указывают на небольшую обратную диффузию примесей в маскирующее покрытие и нижележащий слой окисла. Небольшое различие электрических и атомных концентраций возможно связано с сегрегацией легирующей примеси вдоль границ субзерен [1, 9].

При отжиге в жидкой фазе подвижность существенно не изменяется по глубине, отражая однородное легирование, и оказывается меньше теоретических значений, вероятно, из-за присутствия границ субзерен.

Аналогичные результаты получены и для распределения фосфора P^+ в пленках кремния Si.

После отжига в жидкой фазе профили распределения концентрации становятся пологими, что неудивительно, так как длина диффузии для бора B^+ и фосфора P^+ в рассматриваемом случае, по расчетам, составляют 155 и 226 мкм соответственно, намного превышая толщину пленок кремния Si, а маскирующее покрытие и нижележащий слой окисла препятствуют значительной потере примеси.

Важно отметить, что аналогичные пологие атомные профили получаются после отжига пленок с маскирующим покрытием двуокиси кремния SiO_2 толщиной 1 мкм в печи при температуре 1100 °С в течение 30 мин (см. *рисунок 2*). При этих условиях длина диффузии равна 0,23 мкм и сравнима с проецированным пробегом Rp, а также с разностью (t – Rp), где толщина пленки кремния Si t = 0,45 мкм. В этом случае слои двуокиси кремния действуют как отражающие барьеры при отжиге дефектов, связанных с имплантацией бора B^+ и фосфора P^+, так как коэффициенты диффузии в двуокиси кремния SiO_2 намного ниже, чем в кремнии Si [1, 9].

Исследования показали, что интегральные площади под атомными профилями в пределах ошибки измерений при ВИМС не зависят от положения вдоль длины образца. Отсутствие эффектов зонной очистки при отжиге сканирующим нагревателем очевидно обусловлено применяемыми скоростями рекристаллизации, не допускающими полного перемешивания примесей в зоне плавления, вследствие диффузии от тыльного конца границы раздела расплав/твердое тело в объем расплавленной области. Электрическая активация примесей также не зависит от положения по длине образца. Так как основная цель зонной плавки и рекристаллизации после ионной имплантации состоит в получении однородного легирования пленки, то эти результаты являются обнадеживающими.

Выводы

Отжиг в твердой фазе некогерентным излучением сканирующего полоскового графитового нагревателя обеспечивает электрическую активацию имплантированных примесей бора B^+ и фосфора P^+, что сопоставимо с результатами отжига в печи при температуре 1000 °С в течение 30 мин, однако данный метод характеризуется и значительно меньшее перераспределение примеси. Остаточные повреждения в результате имплантации обусловливают величину подвижности, меньшую теоретических значений.

Отжиг в жидкой фазе позволяет получить однородно легированные пленки. Электрические профили оказываются ниже атомных профилей вследствие сегрегации имплантированных примесей вдоль границ субзерен. Значения подвижностей носителей заряда составляют 70 % от теоретических из-за рассеяния на границах субзерен.

Библиография

1. Зи С. Технология СБИС. М.: Мир, 1986. 453 с.
2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир, 1984. 842 с.
3. Комаров Ф.Ф. Ионная имплантация в полупроводники. М.: Металлургия, 1990. 331 с.
4. Вавилов В.С., Киселев В.Ф., Мукашев Б.Н. Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука, 1990. 211 с.
5. Патент РФ N 2688864. Способ изготовления полупроводникового прибора / Г.А. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, А. Г. Мустафаев, Н.В. Черкесова. Опубл. 22.05.2019 г. Бюлл. N 15.
6. Патент РФ N 2633799. Способ изготовления полупроводникового прибора / А.Г. Мустафаев, Г.А. Мустафаев, А.И. Хасанов. Опубл. 18.10.2017 г. Бюлл. N 29.
7. Патент РФ N 2688864. Способ изготовления полупроводникового прибора / Г.А. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, А.Г. Мустафаев, Н.В. Черкесова. Опубл. 22.05.2019 г. Бюлл. N 15.
8. Патент РФ N 2755175. Способ изготовления полупроводникового прибора / А.И. Хасанов А.Г. Мустафаев, Г.А. Мустафаев, А.Г. Мустафаев Опубл. 13.09.2021 г. Бюлл. N 26.
9. Зятьков И.И., Кривошеева А.Н. Базовые процессы планарной технологии: учебное пособие. СПб.: ЛЭТИ, 2018. 62 с.

References

1. Zi S. VLSI Technology. Moscow: Mir; 1986. 453 p. (In Russ.).
2. Zi S. Physics of Semiconductor Devices. Moscow: Mir; 1984. 842 p. (In Russ.).
3. Komarov F.F. Ion Implantation into Semiconductors. Moscow: Metallurgiya; 1990. 331 p. (In Russ.).
4. Vavilov V.S., Kiselev V.F., Mukashev B.N. Defects in Silicon and on Its Surface. Moscow: Nauka; 1990. 211 p. (In Russ.).
5. Patent N 2688864 Russian Federation. Method for manufacturing a semiconductor device / G.A. Mustafaev, A.G. Mustafaev, A. G. Mustafaev, N.V. Cherkesova. Publ. 22.05.2019. Bull. N 15. (In Russ.).
6. Patent N 2633799 Russian Federation. Method for manufacturing a semiconductor device / A.G. Mustafaev, G.A. Mustafaev, A.I. Khasanov. Publ. 18.10.2017. Bull. N 29. (In Russ.).
7. Patent N 2688864 Russian Federation. Method for manufacturing a semiconductor device / G.A. Mustafaev, A.G. Mustafaev, A.G. Mustafaev, N.V. Cherkesova. Publ. 22.05.2019. Bull. N 15. (In Russ.).
8. Patent N 2755175 Russian Federation. Method for manufacturing a semiconductor device / A.I. Khasanov, A.G. Mustafaev, G.A. Mustafaev, A.G. Mustafaev. Publ. 13.09.2021. Bull. N 26. (In Russ.).
9. Zyatkov I.I., Krivosheeva A.N. Basic processes of planar technology: a tutorial. St. Petersburg: LETI; 2018. 62 p. (In Russ.).

© Черкесова Н.В., Мустафаев Г.А., Мустафаев А.Г., Здравомыслов Д.М., 2026

ХИМИЯ

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 71–77.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):71–77.

ХИМИЯ

Научная статья
УДК 621.316

Влияние добавки $Mg(SbO_3)_2$ на горючесть и физико-механические свойства кабельного ПВХ-пластиката

Тимур Абдулович Борукаев[1], Владислав Владимирович Хасанов[2], Али Хасмагометович Саламов[3], Руслан Баширович Тхакахов[4]

[1,2,4]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Нальчик, Россия
[3]Ингушский государственный университет, Республика Ингушетия, Магас, Россия
[1]boruk-chemical@mail.ru
[2]vlad.khasanov.2017@mail.ru
[3]a.salamov2015@mail.ru
[4]tkhakakhov50@bk.ru

Аннотация. Спеканием $MgCO_3$ и Sb_2O_3 на воздухе получена соль $Mg(SbO_3)_2$. Полученную соль – $Mg(SbO_3)_2$ использовали для замены оксида сурьмы (III) в рецептуре кабельного ПВХ-пластиката марки НГП 30–32. Обнаружено, что введение соли $Mg(SbO_3)_2$ в состав компаунда позволяет не только сохранить пожаробезопасность ПВХ-пластиката, но и основные термические и эксплуатационные характеристики материала.

Ключевые слова: соль – $Mg(SbO_3)_2$, получение, поливинилхлоридный пластикат, состав, свойства

Для цитирования: Борукаев Т.А., Хасанов В.В., Саламов А.Х., Тхакахов Р.Б. Влияние добавки $Mg(SbO_3)_2$ на горючесть и физико-механические свойства кабельного ПВХ-пластиката // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 71–77.

CHEMISTRY

Original article

Effect of $Mg(SbO_3)_2$ additive on the flammability and physical and mechanical properties of cable PVC-plastic compound

Timur A. Borukaev[1], Vladislav V. Khasanov[2], Ali Kh. Salamov[3], Ruslan B. Tkhakakhov[4]

[1,2,4]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[3]Ingush State University, Republic of Ingushetia, Magas, Russia
[1]boruk-chemical@mail.ru

[2]vlad.khasanov.2017@mail.ru
[3]a.salamov2015@mail.ru
[4]tkhakakhov50@bk.ru

Abstract. By sintering $MgCO_3$ and Sb_2O_3 in air, a salt, $Mg(SbO_3)_2$, was obtained. The resulting salt, $Mg(SbO_3)_2$, was used to replace antimony (III) oxide in the formulation of NGP 30–32 cable PVC plastic. It was found that the introduction of salt – $Mg(SbO_3)_2$ into the compound composition allows not only to preserve the fire safety of PVC plastic, but also the main thermal and operational characteristics of the material.

Keywords: salt – $Mg(SbO_3)_2$, production, polyvinylchloride plastic compound, composition, properties

For citation: Borukaev T.A., Khasanov V.V., Salamov A.Kh., Tkhakakhov R.B. Effect of $Mg(SbO_3)_2$ additive on the flammability and physical and mechanical properties of cable PVC-plastic compound. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):71–77. (In Russ.).

Введение

В качестве изоляционного материала для электрических проводов и кабелей используют компаунды на основе поливинилхлорида (ПВХ) [1]. Причем в последнее время наблюдается заметный рост производства ПВХ-пластикатов для кабельной промышленности [2]. Это связано с тем, что технологи и материаловеды активно занимаются разработкой перспективных ПВХ-пластикатов, отвечающие по своему составу и характеристикам современным требованиям [3]. При этом одним из перспективных возможностей создания ПВХ-пластикатов, отвечающих требованиям промышленности – это отказ от токсичных компонентов, которые целенаправленно вводят в компаунды для придания им определенных свойств. В частности, одним из таких веществ, используемых для повышения пожарной безопасности ПВХ-пластикатов, является Sb_2O_3 [4], который является достаточно токсичным, недешевым и относительно недоступным соединением. Причем частицы Sb_2O_3 недостаточно равномерно распределяются в композитах на основе ПВХ [5]. В связи с этим, поиск перспективных соединений, которые могли бы эффективно заменить Sb_2O_3 в рецептурах ПВХ-пластикатов, является важной и актуальной. Кроме того, такие соединения могут быть использованы и для направленной модернизации рецептур, существующих промышленных марок ПВХ-пластикатов, придавая им повышенную пожарную безопасность, которой они изначально не обладали [6].

Целью настоящей работы является получение соли $Mg(SbO_3)_2$, введение его в состав промышленного кабельного ПВХ пластиката марки НГП 30-32 вместо оксида сурьмы (Sb_2O_3), определение горючести и физико-механических свойств, полученного компаунда.

Экспериментальная часть

В работе в качестве исходного компаунда использовали промышленный ПВХ-пластикат марки НГП 30-32. В состав данного пластиката, для повышения пожаробезопасности, вводят оксид сурьмы (III) (Sb_2O_3). Взамен последнего в рецептуру пластиката НГП 30–32 вводили соль – $Mg(SbO_3)_2$, которую получали спеканием карбоната магния ($MgCO_3$) и Sb_2O_3 на воздухе при температуре 850 °С: $MgCO_3 + Sb_2O_3 + O_2 \rightarrow Mg(SbO_3)_2 + CO_2$

Для получения соли – $Mg(SbO_3)_2$, предварительно 17,870 г $MgCO_3$ и 62,138 г Sb_2O_3 смешивали и перетирали в фарфоровой чашке. Затем смесь перенесли в предварительно прокаленный тигель. После, тигель со смесью поместили в печь с регулируемой температурой и при температуре 850 °С осуществляли их спекание в течение 18 ч. В процессе спекания было обнаружено, что объём и масса исходного порошка заметно уменьшилась (с 80 г до 70 г). Это является следствием выделения газообразных веществ (в частности, углекислого газа). Для полноты реакции в процессе спекания, исходную смесь перемешивали несколько раз.

После завершения процесса тигель с продуктом охладили до комнатной температуры и взвесили. Взвешивание показало, что проведенные расчеты по уравнению химической реакции, подтверждают получение соли $Mg(SbO_3)_2$. Полученная соль $Mg(SbO_3)_2$ представляла собой белый порошок с размером частиц 2–5 мкм, определенная с помощью лазерного анализатора размера частиц производства «Analysette 22» (Fritsch, Германия).

Введение соли – $Mg(SbO_3)_2$ в компаунд осуществляли на стадии добавки Sb_2O_3 в ПВХ-пластикат. Количество введенной соли $Mg(SbO_3)_2$ в состав ПВХ-пластиката составляло 1,52 масс. %. Это количество соответствует содержанию Sb_2O_3 в базовой марке ПВХ-пластиката.

После приготовления горячей смеси ПВХ-композиции, сыпучую массу охлаждали при перемешивании до комнатной температуры. Затем смесь экструдировали с помощью двушнекового экструдера при соответствующих температурных режимах по зонам: I – 145 °С, II – 150 °С, III – 155 °С, IV – 165 °С. Скорость вращения шнека 48 об/мин. Полученные экструдаты гранулировали и сушили в вакуумном шкафу (температура сушки 70 °С, остаточное давление 10^{-1} МПа, время сушки 10 ч, остаточная влажность компаунда менее 0,12 %). На основе высушенного гранулированного компаунда методом литья под давлением, были изготовлены соответствующие образцы. Изготовленные образцы были испытаны на горючесть и определены их физико-механические свойства. Для изготовления неестовых образцов использовалась литьевая машина «Politest» производства «Ray-Ran» (Великобритания). Литье образцов осуществляли при температуре расплава ПВХ пластиката 165–170 °С, а температура и давление запирания формы составляли 80 °С и 8 бар, соответственно.

Перед проведением исследования полученные литьевые образцы согласно требованиям ГОСТ 12423-2013, были кондиционированы при комнатной температуре в течение 16 ч.

Горючесть ПВХ-пластикатов оценивали по таким показателям, как продолжительность самостоятельного горения образца, скорость распространения пламени, коксовый остаток и кислородный индекс (ГОСТ 12.1.044-2018). Определение продолжительности самостоятельного горения и скорости распространения пламени проводили на брусках с размером 100×10×4 мм. Испытания проводились следующим образом. Образец ПВХ-пластиката закрепляли в горизонтальном положении. Для поджога образца использовали газовую горелку, которую устанавливали под углом 45±1 °С. Высоту пламени выбирали таким образом, чтобы при вертикальном ее расположении она составляла примерно 100 мм. При этих условиях брусок находился в пламенной зоне в течение 60 с. Затем одновременно убрали горелку и включили секундомер для измерения продолжительности самостоятельного горения бруска. Для корректности оценки продолжительности горения ПВХ-пластиката, в качестве конечного результата использовали среднеарифметическое значение пяти измерений.

В работе значение кислородного индекса (КИ, %) ПВХ-пластикатов определяли с помощью прибора производства Noselab ast. Fire testing, модель Oxygen Index (Италия). Испытания проводились согласно ГОСТ 12.1.044-2018 с использованием литьевых брусков (100×10×4 мм).

Термогравиметрический анализ (ТГА) и дифференциально-термическую гравиметрию (ДТГ) ПВХ-пластиката проводили с использованием прибора TGA 400 производства PerkinElmer (США). Анализы проводили на воздухе в динамическом режиме нагревания при температуре от 20 до 800 °С (скорость подъема температуры составляла 5 град/мин). Для анализа использовали керамические тигли, где навески ПВХ пластикатов составляли (10±1) мг.

Показатель текучести расплава (ПТР) ПВХ-пластикатов определяли с помощью капиллярного вискозиметра марки ИИРТ-М (Россия) согласно ГОСТ 11645-2021. Определение проводили при температуре 190 °С и нагрузке 10 кг. Внутренний диаметр капилляра вискозиметра составляла 2 мм.

Термостабильность ПВХ-пластикатов определяли в соответствии с методикой, приведенной в ГОСТ 14041-91. Испытания проводили с использованием гранул ПВХ-пластиката. За термостабильность ПВХ-пластиката принимали время изменения цвета индикаторной бумаги в результате выделения хлороводорода из компаунда.

В работе плотность литьевых образцов (20×10×4 мм) ПВХ-пластикатов определяли согласно ГОСТ 15139-69, п. 3.2 методом гидростатического взвешивания. В качестве рабочей жидкости использовали дистиллированную воду, температура которой составляла 20±2 °С. За результат принимали среднеарифметическое трех параллельных измерений.

Определение механических характеристик ПВХ-пластикатов при растяжении и изгибе проводили с использованием разрывной машины марки Gotech Testing Masines, Inc. GT-TCS-2000 (Тайвань). При этом условия определения модуля упругости при изгибе соответствовали ГОСТ 4648-71. В свою очередь модуль упругости ПВХ-пластиката при растяжении определяли в соответствии ГОСТ 11262-2017. Испытания на прочность и деформацию при разрыве ПВХ-пластикатов проводили в соответствии

ГОСТ 11262-2017. Для механических испытаний на растяжение использовали образцы ПВХ-пластикатов, представлявшие собой лопатки (тип 1А), изготовленные согласно ГОСТ 11262-2017. Испытания проводили с использованием 10 лопаток каждого компаунда при температуре 20 °С и скорости растяжения 1 мм/мин и 10 мм/мин. Механические испытания на изгиб проводили с использованием брусков ПВХ-пластикатов размером 80×10×4 мм и изготовленные в соответствии с ГОСТ 7648-2014. Для испытаний использовали 10 брусков каждого ПВХ-пластиката и определяли среднеарифметическое значение показателя.

Результаты и их обсуждение

Оценку горючести ПВХ-пластикатов проводили по таким показателям, как продолжительность самостоятельного горения, кислородный индекс (КИ) и коксовый остаток (КО). Как показали испытания, замена в рецептуре ПВХ-пластиката Sb_2O_3 на $Mg(SbO_3)_2$ не приводит к снижению горючести компаунда *(таблица)*. В частности, при определении КИ исходного ПВХ-пластиката с Sb_2O_3 и компаунда с $Mg(SbO_3)_2$ обнаружено, что КИ данных образцов практически одинаковый – 32 %. Кроме того, оценка продолжительности горения ПВХ-пластикатов показала, что оба ПВХ пластиката, с Sb_2O_3, и с $Mg(SbO_3)_2$, не поддерживают горение. То есть образцы данных ПВХ-пластикатов, при выносе из пламенной зоны гаснут уже через 15 с (*таблица*).

Таблица 1 – Горючесть и физико-механические свойства ПВХ пластикатов

Показатели	Значения	
	1*	2**
КИ, %	32	32
КО, %	10	11
Скорость распространения пламени, мм/мин	гаснет через 15 с	гаснет через 15 с
ПТР***, г/10 мин	18,4	18,8
Плотность, г/см^3	1,501	1,485
Термостабильность при 200 °С, мин, не менее	100	100
Модуль упругости при изгибе, МПа	31,2	31,0
Термическая усадка, %	2,1	2,2
Модуль упругости при растяжении, МПа (скорость растяжения 1 мм/мин)	33,5	33,0
Модуль упругости при растяжении, МПа (скорость растяжения 10 мм/мин)	33,8	34,6
Прочность при разрыве, МПа	14,1	14,0
Прочность при растяжении, МПа	12,2	12,1
Относительное удлинение, %	220	218

Примечание: *образец ПВХ-пластиката с Sb_2O_3; **образец ПВХ-пластиката, где в рецептуре Sb_2O_3 заменен на $Mg(SbO_3)_2$; ***ПТР измеряли при 190 °С и нагрузке 10 кг.

Следует отметить, что замена Sb_2O_3 в рецептуре ПВХ-пластиката на $Mg(SbO_3)_2$ приводит к незначительному увеличению значений коксового остатка (КО) (*таблица 1*). Очевидно, это связано с процессами образования солей магния, например, $MgCl_2$. Следовательно, результаты оценки горючести ПВХ-пластикатов показывают, что замена токсичного антипирена – синергиста – Sb_2O_3 [7] на $Mg(SbO_3)_2$ не приводит к снижению горючести компаунда.

Одним из требований к ПВХ-пластикатам – это их термостабильность [8], поскольку высокая термостабильность компаунда позволяет перерабатывать его при соответствующих температурных режимах. В частности, для нормальной переработки, некоторые кабельные марки ПВХ-пластикатов должны удовлетворять определенным требованиям по термостабильности, т. е. термостабильность компаунда при 200 °С должна быть не менее 100 мин [9]. Как показали исследования, термостабильность промышленного ПВХ-пластиката и образца компаунда с $Mg(SbO_3)_2$ высокая, они оба имеют значение больше 100 мин (*таблица 1*). Это показывает, что ПВХ-пластикат, содержащий $Mg(SbO_3)_2$ по термостабильности удовлетворяет требованиям потребителей пластикатов. Такое поведение ПВХ-плас-

тиката, содержащий $Mg(SbO_3)_2$ можно объяснить тем, что ионы Mg^{2+} будут эффективно участвовать в нейтрализации хлороводорода [10], который образуется в результате дегидрохлорирования полимерной матрицы (ПВХ) при действии высоких температур [11]. В свою очередь, образующийся хлороводород если его оставить в реакционной зоне, то может существенно увеличить скорость образования кратных связей в структуре макромолекул, а также спровоцировать дальнейшие деструктивные процессы, приводящие к разрыву основной цепи полимера [12]. Удаление или эффективное связывание хлороводорода, например, добавкой, содержащей ионы Mg^{2+} ($Mg(SbO_3)_2$), приведет к замедлению деструктивных процессов.

Сохранение высокой термостабильности ПВХ-пластикатом, содержащий $Mg(SbO_3)_2$, косвенно подтверждают результаты ТГА и ДТГ (*рисунок*). Так, образец ПВХ-пластиката с $Mg(SbO_3)_2$ до температуры 200 °С практически не теряет массы и не подвергается деструктивным процессам. Термограммы показывают, что деструктивные процессы в ПВХ-пластикате, связанные с температурой, начинают происходить при температуре выше 200 °С. Причем деструктивные процессы, приводящие к разложению ПВХ-пластиката достигают максимума при температуре 267 °С.

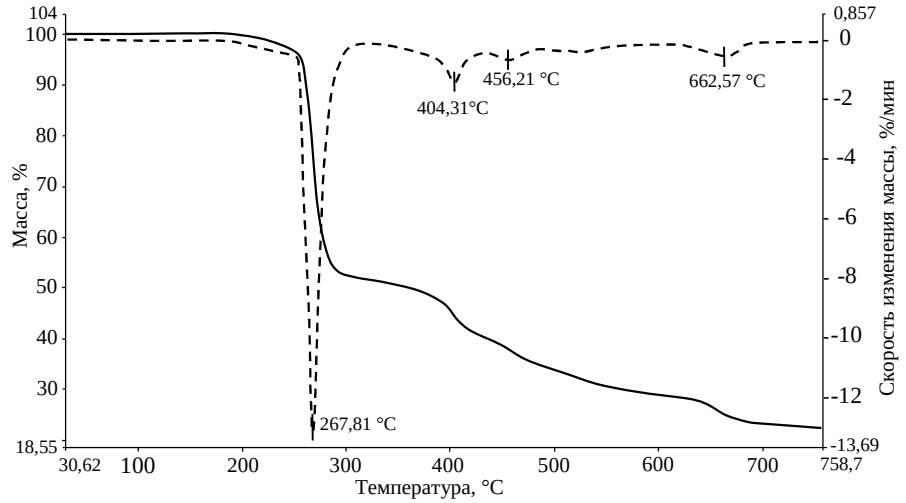


Рисунок – ТГА и ДТГ ПВХ пластиката с $Mg(SbO_3)_2$

Известно [13], что модернизация, варьирование состава полимерных композитных материалов приводит к изменению их основных физико-механических и эксплуатационных свойств. В этом отношении ПВХ-пластикаты не является исключением, поскольку их горючесть, а также основные физико-механические, термические свойства определяются составом, природой и свойствами компонентов компаунда [14].

Проведенные в работе исследования показали, что физико-механические свойства ПВХ-пластиката, содержащий в составе вместо Sb_2O_3 антимонат магния $Mg(SbO_3)_2$, остаются на уровне исходного компаунда (*таблица 1*). В частности, результаты исследований плотности компаундов показали, что замена в составе ПВХ-пластиката Sb_2O_3 на $Mg(SbO_3)_2$ приводит к незначительному снижению данного показателя. Такое снижение плотности можно объяснить некоторым возмущением системы ПВХ-пластиката, которая происходит в результате введения добавки $Mg(SbO_3)_2$ (размер частиц $Mg(SbO_3)_2$ в два и более раза больше, чем размер частиц Sb_2O_3). В свою очередь, такое возмущение системы сопровождается незначительным снижением модуля упругости при растяжении и изгибе при малых скоростях растяжения, а также прочности при растяжении (*таблица 1*).

Влияние $Mg(SbO_3)_2$ на свойства ПВХ-пластиката также обнаружено на основе результатов оценки поведения расплава компаунда. В частности, сравнение значений ПТР двух ПВХ-пластикатов показывает, что введение $Mg(SbO_3)_2$ приводит к незначительному увеличению текучести расплава ПВХ-пластиката. Так, значение ПТР ПВХ-пластиката с $Mg(SbO_3)_2$ больше на 0,4 г/10 мин, чем ПТР промышленного компаунда, т.е. наблюдается некоторое улучшение технологичности материала. Однако все изменения физико-механических свойств ПВХ-пластиката при введении $Mg(SbO_3)_2$ являются несущественными, так как они минимальные и заметного влияния не оказывают на весь спектр свойств материала, которые являются и так достаточно высокими.

Таким образом, $Mg(SbO_3)_2$ можно использовать для замены Sb_2O_3 в рецептуре огнестойких кабельных ПВХ-пластикатов. При этом ПВХ-пластикат, содержащий $Mg(SbO_3)_2$, по своим характеристикам: горючести; термостабильности и физико-механическим показателям не уступает исходному компаунду и может быть использован в качестве пожаробезопасного изоляционного материала при изготовлении электрических проводов и кабелей.

Библиография

1. Мартынова А.В., Мазина Л.А., Ключников О.Р. Модификация кабельных поливинилхлоридных пластикатов пониженной горючести // Вестник КНИТУ. Химическая технология. 2016. Т. 19, N 15. С. 73–75.

2. Каменский М.К., Мещанов Г.И., Фрик А.А. Кабели и провода пожаробезопасного исполнения. Современное состояние и тенденции развития // Кабели и провода. 2017. N 3. С. 30–35.

3. Борукаев Т.А., Мартазанова Р.М. Теплофизические и физико-механические свойства модернизированного промышленного ПВХ пластиката // Вопросы материаловедения. 2021. Т. 105, N 1. С. 84–93.

4. Зарипов И.И., Вихарева И.Н., Буйлова Е.А., Берестова Т.В., Мазитова А.К. Добавки для снижения горючести полимеров // Нанотехнологии в строительстве: научный интернет-журнал. 2022. Т. 14, N 2. С. 156–161.

5. Еремеева А.В., Готлиб Е.М. Снижение горючести ПВХ линолеума // Вестник КНИТУ. Химическая технология. 2015. Т. 18, N 23. С. 16–18.

6. Борукаев Т.А., Саламов А.Х, Маламатов А.Х., Паштова Л.Р. Влияние добавки $(Mg(OH))_2CO_3$ на некоторые характеристики пожарной опасности и физико-механические свойства ПЭНД // Материаловедение. 2024. N 12. С. 30–37.

7. Анцупов Е.В., Родивилов С.М. Антипирены для пористых материалов // Пожаровзрывобезопасность. 2011. Т. 20, N 10. С. 25–32.

8. Аминова Г.К., Маскова А.Р., Буйлова Е.А., Анисимова В.С., Ахметова И.И. Исследование термостабильности некоторых ПВХ композиций // Башкирский химический журнал. 2016. Т. 23, N 2. С. 16–19.

9. Нафикова Р.Ф., Фаткулин Р.Н., Афанасьев Ф.И., Степанова Л.Б., Исламутдинова А.А. Исследование влияния пластификатора ДЭС М-2 на физико-механические и технологические свойства ПВХ пластикатов // Пластические массы. 2020. N 3-4. С. 33–36.

10. Лавров Н.А., Ксенофонтов Г.В., Белухичев Е.В. О механизме стабилизации поливинилхлорида (обзор) // Пластические массы. 2016. N 11–12. С. 16–20.

11. Kuznetsov S.M., Sagitova E.A., Prokhorov K.A., Nikolaeva G.Y., Mendeleev D.I., Donfack P., Materny A. Raman spectroscopic detection of polyene-length distribution for highsensitivity monitoring of photo- and thermal degradation of polyvinylchloride // Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc. 2021. V. 252. Art. N 119494. P. 1–8.

12. Лавров Н.А., Колерт К., Ксенофонтов Г.В., Лаврова Т.В., Белухичев Е.В. О механизме деструкции поливинилхлорида (обзор) // Известия СПбГТИ (ТУ). 2012. Т. 42, N 16. С. 31–35.

13. Лутфуллаев С.Ш. Исследование влияния наполнителей на свойства ПВХ композиции // Universum: технические науки: электр. научн. журнал. 2022. Т. 105, N 12. URL: https://7universum.com/ru/-tech/archive/item/14755

14. Галигузов А.А., Сердан А.А., Яшин Н.В., Авдеев В.В. Влияние состава ПВХ пластиката на эксплуатационные свойства и огнезащитную эффективность полимерных материалов на его основе // Пожаровзрывобезопасность. 2023. Т. 32, N 5. С. 26–39.

References

1. Martynova A.V., Mazina L.A., Klyuchnikov O.R. Modification of low-flammability PVC cable plastics. *Vestnik KNITU. Khimicheskaya tekhnologiya = Proceedings the Kazan Scientific Research Technical University*. 2016;19(15):73–75. (In Russ.).

2. Kamensky M.K., Meshchanov G.I., Frik A.A. Fire-resistant cables and wires. Current status and development trends. *Kabely i provoda = Cables and wires*. 2017;3:30–35. (In Russ.).

3. Borukaev T.A., Martazanova R.M. Thermophysical and physical-mechanical properties of modernized industrial PVC plastic. *Voprosy materialovedrniya = Inorganic Materials: Applied Research*. 2021; 105(1):84–93. (In Russ.).

4. Zaripov I.I., Vikhareva I.N., Builova E.A., Berestova T.B., Mazitova A.K. Additives for reducing the flammability of polymers. *Nanotekhnologii v stroitelstve = Nanotechnologies in Construction: a Scientific Internet-Journal*. 2022;14(2):156–161. (In Russ.).

5. Eremeeva A.V., Gotlib E.V. Reducing the flammability of PVC linoleum. *Vestnik KNITU. Khimicheskaya tekhnologiya = Proceedings the Kazan Scientific Research Technical University*. 2015;18(23):16–18. (In Russ.).

6. Borukaev T.A., Salamov A.Kh., Malamatov A.Kh., Pashtova L.R. The influence of the additive $(Mg(OH))_2CO_3$ on some fire hazard characteristics and physical and mechanical properties of HDPE. *Materialovedenie = Inorganic Materials: Applied Research*. 2024;12:30–37. (In Russ.).

7. Ancupov E.V., Rodivilov S.M. Fire retardants for porous materials. *Pozharovzryvobezopasnost = Fire and Explosion Safety*. 2011;20(10):25–32. (In Russ.).

8. Aminova G.K., Maskova A.R., Builova E.A., Anisimova V.S., Akhmetova I.I. Study of thermal stability of some PVC compounds. *Bashkirskyi khimicheskyi zhurnal = Bashkir Chemical Journal*. 2016; 23(2):16–19. (In Russ.).

9. Nafikova R.F., Fatkulin R.N., Afanasev F.I., Stepanova L.B., Islamutdinova A.A. Study of the influence of the plasticizer DES M-2 on the physical, mechanical and technological properties of PVC plastics. *Plasticheskie massy = International Polymer Science and Technology*. 2020;3-4:33–36. (In Russ.).

10. Lavrov N.A., Ksenofontov G.V., Belukhichev E.V. On the mechanism of stabilization of polyvinyl chloride (review). *Plasticheskie massy = International Polymer Science and Technology*. 2016;11-12:16–20. (In Russ.).

11. Kuznetsov S.M., Sagitova E.A., Prokhorov K.A., Nikolaeva G.Y., Mendeleev D.I., Donfack P., Materny A. Raman spectroscopic detection of polyene-length distribution for highsensitivity monitoring of photo- and thermal degradation of polyvinylchloride. Spectrochim. *Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc*. 2021;252(119494):1–8.

12. Lavrov N.A., Kolert K., Ksenofontov G.V., Lavrov T.V., Belukhichev E.V. On the mechanism of destruction of polyvinyl chloride (review). *Izvestiya SPGTI(TU) = Proceedings Saint Petersburg State Technical Institute (Technical University)*. 2012;42(16):31–35. (In Russ.).

13. Lutfullaev S.Sh. Study of the influence of fillers on the properties of PVC compositions. *Universum: technicheskie nauki: elektr. nauchn. zhurnal*. 2022;105(12):URL: https://7universum.com/ru/tech/archive/-item/14755 (In Russ.).

14. Galiguzov A.A., Serdan A.A., Yashin N.V., Avdeev V.V. The influence of PVC plastic composition on the performance properties and fire-protective efficiency of polymeric materials based on it. *Pozharovzryvobezopasnost = Fire and Explosion Safety*. 2023;32(5):26–39. (In Russ.).

© Борукаев Т.А., Хасанов В.В., Саламов А.Х., Тхакахов Р.Б., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 78–82.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):78–82.

ХИМИЯ

Научная статья
УДК 636.082.12:631.811.9

Комбинированные минеральные удобрения как один из факторов улучшения гидрологических и гидрохимических показателей водоемов

Людмила Атабиевна Казанчева[1], Анита Анатольевна Мирзоева[2], Юлия Александровна Кумышева[3], Тамерлан Анатольевич Сасиков[4]

[1,2,3,4]Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет им. В.М. Кокова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]kazancheva1954@mail.ru
[2]anita_mirzoeva@mail.ru
[3]ykumysheva@mail.ru
[4]sasikov.tamik@mail.ru

Аннотация. Внесение в водоемы комплексных или смешанных удобрений изменяет качество дисперсной системы прудов, улучшает микрофлору, образуя бактерии и низшие водные растения, а также создает трофическую цепь для зоопланктона, бентоса и ихтиофауны. Эффект от их действия определяется физическими, химическими или экологическими показателями водоема. Работа посвящена возможности улучшения биопродукции путем подбора оптимальных количеств и условий применения смешанных или комплексных удобрений.

Ключевые слова: ихтиофауна, дисперсная система, комбинированные удобрения, термофактор
Для цитирования: Казанчева Л.А., Мирзоева А.А., Кумышева Ю.А., Сасиков Т.А. Комбинированные минеральные удобрения как один из факторов улучшения гидрологических и гидрохимических показателей водоемов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 78–82.

CHEMISTRY

Original article

Combined mineral fertilizers as one of the factors for improving the hydrological and hydrochemical indicators of water bodies

Lyudmila A. Kazancheva[1], Anita A. Mirzoeva[2], Yulia A. Kumysheva[3], Tamerlan A. Sasikov[4]

[1,2,3,4]Kabardino-Balkarian State Agrarian University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]kazancheva1954@mail.ru
[2]anita_mirzoeva@mail.ru
[3]ykumysheva@mail.ru
[4] sasikov.tamik@mail.ru

Abstract. The introduction of complex or mixed fertilizers into water bodies changes the quality of the dispersed system of ponds, improves the microflora, forming bacteria and lower aquatic plants, creates a trophic chain for zooplankton, benthos and ichthyofauna. The effect of their action is determined by the physical,

chemical or environmental indicators of the reservoir. The work is devoted to the possibility of improving bio-products, choosing the optimal amounts and conditions for the use of mixed or complex fertilizers.

Keywords: ichthyofauna, disperse system, combined fertilizers, thermal factor

For citation: Kazancheva L.A., Mirzoeva A.A., Kumysheva Yu.A., Sasikov T.A. Combined Mineral Fertilizers as One of the Factors Improving the Hydrological and Hydrochemical Parameters of Water Bodies. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(2):78–82. (In Russ.).

Введение

Мероприятия по изменению качества прудовых вод требуют обоснованной научной методологии, одной из которых является использование комплексных или комбинированных удобрений, способствующих повышению качества жизни растительных и животных организмов, улучшению микрофлоры.

Бактерии являются источником консума зоопланктона и зообентоса, они участвуют в процессах пищеварения, например, детрит – полноценный консумент для *Cladocera*, личинок *Chironomus plumosus,* моллюсков и олигохет. Качественный и количественный состав бактерий в прудах зависит от их гидрологического, гидрохимического состояния, зональных и климатических особенностей местности, а также способов внесения удобрений [1–3]. Эффективность действия удобрений определяется физическими и гидрохимическими показателями (t °C, pH, газовым режимом) [4]. Исследование гидробиологических гидрохимических параметров, определяющих действия минеральных удобрений на биологическую продуктивность водоёмов в условиях Кабардино-Балкарской Республики представляет определенный интерес.

Материалы и методы исследования

Данная работа посвящена изучению характера взаимодействия между водоемом и комплексными удобрениями, закономерностями их использования, приводящими к изменениям процессов в аквасистеме.

Объектом контроля явились рыбоводные пруды колхоза им. Петровых Прохладненского района, где нами были проведены эксперименты по определению роли комплексных удобрений в жизнедеятельности флоры и фауны прудов. Мониторинг гидрологических и гидрохимических параметров проводили по общепринятым методикам анализа прудовых вод. Измерения концентрации водородных ионов (pH) проводили потенциометрическим способом с использованием pH-метра (HANNA HI 2002-02), а термопоказатель измеряли термометром. Концентрацию кислорода определяли объемным, иодометрическим методом. Биогенные элементы определяли путем рассчета выноса биогенных веществ в донных отложениях.

Результаты исследований

Многие исследователи считают, что содержание кислорода в прудах не должно быть менее 2 мг/л. При более низких значениях могут возникнуть массовые заморы ихтиофауны, усиление окислительно-восстановительных процессов, повышающих уровень сероводорода и аммиака, что негативно влияет на деятельность водных аквакультур. Поэтому необходим мониторинг содержания кислорода посуточно, и при его недостатке следует проводить аэрирование.

По результатам наших исследований (*таблица 1*) содержание кислорода в исследованных прудах находится на достаточном уровне в течение всего периода наблюдений. Создавать наиболее благоприятные условия для развития естественной кормовой базы и улучшения газового режима, можно внеся в водоемы комбинированные минеральные удобрения, эффективность действия которых должны способствовать повышению первичной продукции и увеличению естественной рыбопродуктивности.

Таблица 1 – Концентрация кислорода в прудах в зависимости от времени года

Пруды	pH	Весна	Лето	Осень	Среднее за сезон
		Концентрация кислорода, мг/л			
1	6,8	11,4	8,8	10,9	10,3
2	6,9	11,2	9,5	10,5	10,4
3	7,0	10,7	9,4	10,2	10,1
4	6,9	10,4	9,2	10,1	9,9

Благоприятный кислородный режим позволяет уплотнять посадку ихтиофауны и проводить интенсивное кормление искусственными кормосмесями.

Водоёмы для аквакультур представляют собой сложную гидрологическую и гидрохимическую систему, где закономерности и условия определяют распределение и трансформацию внесённых в нее веществ, эффективность удобрений [5].

Вносимые в пруд удобрения создают условия для массового развития микроорганизмов как одного из важнейших звеньев трофической цепи бактерии и фитопланктона, оказывают положительное влияние на развитие зоопланктона (*рисунок)*.

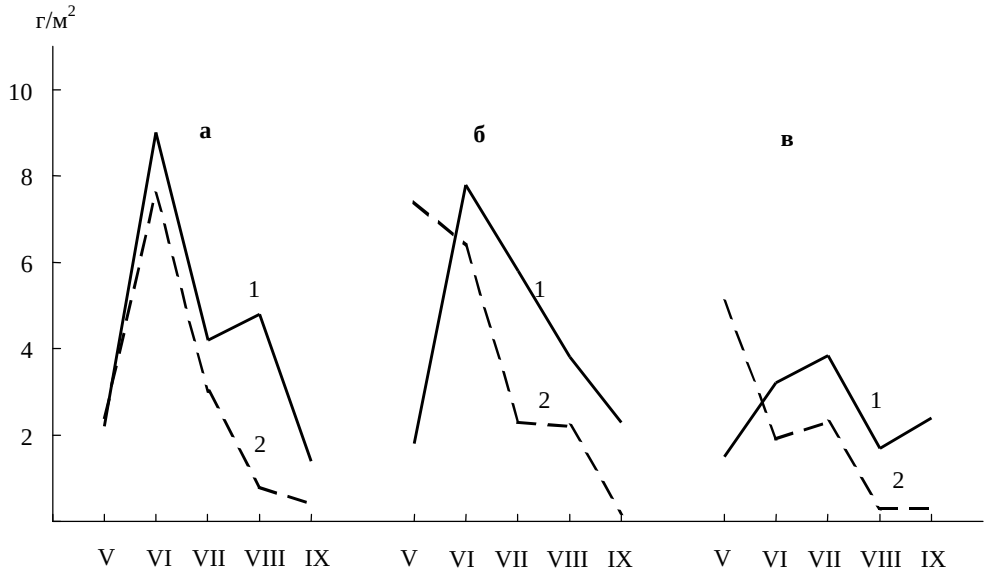


Рисунок – Влияние удобрений и плотности посадки личинок ихтиофауны на динамику биомассы зообентоса: а – 80 тыс. экз./га; б – 120 тыс. экз./га; в – 160 тыс. экз./га; 1 – удобренные и произвесткованные; 2 – не удобренные

Мониторинг гидрологического режима исследованных прудов показал, что минеральные удобрения имеют положительный эффект в развитии зоопланктона, а если использовать комбинированные или комплексные удобрения, эффект значительно возрастает (*рисунок 1*). Следует отметить, что различия между удобренными и неудобренными прудами при плотности посадки личинок до 40 тыс. экз/га незначительны. Но с увеличением плотности посадки в удобренных и произвесткованных прудах биомасса зоопланктона возрастало, например при плотности посадки личинок карпа 80 тыс. экз./га или годовиков 2,4–2,8 тыс. экз/га содержание зоопланктона составляло 9,5 г/м^2; при плотности посадки 120 тыс. экз./га личинок или 4,0 тыс. годовиков – 7,9 г/м^2; при плотности посадки 160 тыс. экз./га – 3,8 г/м^2. Согласно полученным данным, численность бактериоплактона в прудах, удобренных комплексными удобрениями оказалось в 1,5 раза выше, чем в неудобренных. Биогенные вещества, поступающие в водоемы с удобрениями, оказывают влияния и на репродуктивный процесс. Значительная скорость размножения наблюдалась в июле-августе после внесения комплексных удобрений. Следует предположить, что они способствуют увеличению скорости роста бактерий, усилению взаимодействия бактериофагов и бактериальных клеток.

Гидрологический режим, трофность, динамика и структурные изменения в сообществе зоопланктона прудов определяются плотностью посадки ихтиофауны, количеством и составом удобрений, а также наличием биогенных элементов [6].

Необходимость использование минеральных удобрений в прудах возникает в случае незначительной концентрации биогенных элементов в воде (*таблица 2*).

Таблица 2 – Средние показатели концентрации биогенных элементов в исследованных прудах

Пруды (1–4)	Компоненты, мг/л			
	NH_4^+	NO_2^-	NO_3^-	PO_4^{3-}
весна				
1–4	0,37	0,062	0,64	0,40
лето				
1–4	0,75	0,023	2,01	0,69
осень				
1–4	0,84	0,019	1,0	0,53

Содержание азота и фосфора в водоемах ежегодно пополняется, они поступают со стоками вод с водосбросных площадей в виде минеральных солей и неразложившихся органических остатков.

Значительную роль в пополнении азота играют сапрофитные бактерии. При этом азот белков частично выделяется в среду в виде амонийного азота (NH_4^+) или идёт на построение тела бактерий.

Содержание соединений азота в водоёмах резко колеблется от 0,37 до 2,01 мг/л (*таблица 2*).

Ключевую роль в жизни бактериопланктона играет фосфор, выступая важнейшим питательным веществом, который регулирует его рост и активность. Он участвует в ключевых процессах метаболизма. В воде фосфор содержится в виде солей фосфорной кислоты и органических соединений. Содержание фосфора в прудах изменялась от 0,40 до 0,69 мг/л, что в целом является благоприятным для роста и развития аквакультуры водоемов.

Биоэкологические явления в водоемах требуют систематических и углублённых исследований, направленных на создание научно-методологической теории о закономерностях биотического круговорота биогенных элементов. Несмотря на недостаточную изученность возможности использования комплексных минеральных удобрений и этапов действия их на биопродуктивность, проведённые исследования позволяют сделать некоторые общие выводы.

Выводы

1. Минеральные удобрения следует вносить в водоемы только после мониторинга их на предмет содержания биогенов.
2. Внесение в водоемы комбинированных или комплексных удобрений способствует увеличению биопродукции при определенных значениях плотности посадки личинок карпа и годовиков.
3. Применение смешанных азотно-фосфорных минеральных удобрений является более целесообразным для достижения хороших результатов. Большое значение имеет и частота внесения.

Библиография

1. Баканов А.И. Использование зообентоса для мониторинга пресноводных водоемов (обзор) // Биология внутренних вод. 2000. N 1. С. 68–82.

2. Балушкина Е.В. Новый метод оценки качества вод по показателям зообентоса // Тезисы конференции «Современные проблемы гидроэкологии». СПб., 1995. С. 8–9.

3. Кожаева Д.К., Казанчев С.Ч., Кожаева С.К. Рекомендации по повышению и использованию биологических ресурсов водоёмов КБР. Нальчик, 2006. 29 с.

4. Алекин О.А., Семенов А.Д., Скопинцев Б.А. Руководство по химическому анализу вод суши. Л.: Гидрометеоиздат, 1973. 270 с.

5. Методические рекомендации по сбору и обработке материалов при гидробиологических исследованиях на пресноводных водоёмах. Зообентос и его продукция. Л.: ЗИН РАН, ГосНИОРХ, 1984. 52 с.

6. Ruoppa M., Heinonen P. Biological Methods of Water Body Research. Helsinki: Edita Prima Oy, 2006. 111 p.

References

1. Bakanov A.I. The use of zoobenthos for monitoring freshwater reservoirs (review). *Biologiya vnutrennikh vod = Biology of inland waters*. 2000;1:68–82. (In Russ.).

2. Balushkina E.V. A new method for assessing water quality based on zoobenthos indicators: Tez. conf. «Modern problems of hydroecology». Sankt-Pererburg; 1995. P. 8–9. (In Russ.).

3. Kozhaeva D.K., Kazanchev S.Ch., Kozhaeva S.K. Recommendations for the improvement and use of biological resources in the reservoirs of the Kabardino-Balkarian Republic. Nalchik; 2006. 29 p. (In Russ.).

4. Alekin O.A., Semenov A.D., Skopintsev B.A. Guide to the Chemical Analysis of Landwater. Leningrad: Gidrometeoizdat; 1973. 270 p. (In Russ.).

5. Guidelines for the collection and processing of materials in hydrobiological studies on freshwater reservoirs. Zoobenthos and its products. Leningrad: ZIN RAS, GosNIORKh; 1984. 52 p. (In Russ.).

6. Ruoppa M., Heinonen P. Biological Methods of Water Body Research. Helsinki: Edita Prima Oy; 2006. 111 p.

© Казанчева Л.А., Мирзоева А.А., Кумышева Ю.А., Сасиков Т.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 83–89.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):83–89.

ХИМИЯ

Научная статья
УДК 541.64

Некоторые методические аспекты ударных испытаний термопластов

Нурали Иналович Машуков[1], Руслан Адибович Шетов[2], Геннадий Борисович Шустов[3], Альбина Мухамедовна Алтуева[4], Элина Валерьевна Хакяшева[5], Аслан Асланбиевич Кяров[6], Владислав Владимирович Хасанов[7]

[1,2,3,4,5,6,7]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]mnurali@mail.ru
[2]rus.shetov@mail.ru
[3]alla_7583@mail.ru
[4]k-a.albina@mfil.ru
[5]ek_kbsu@mail.ru
[6]aslankyarov700@mail.ru
[7]vlad.khasanov.2017@mail.ru

Аннотация. В работе проведен сравнительный анализ различных подходов к исследованию деформационно-прочностных свойств термопластов. Показано, что инструментированные и натурные испытания термопластов более эффективны и информативны по сравнению со стандартными лабораторными испытаниями, например, по методам Шарпи или Изода.

***Ключевые слова*:** аморфно-кристаллический полимер, деформация, ударное нагружение, инструментированные ударные испытания, энергия разрушения полимера

Для цитирования: Машуков Н.И., Шетов Р.А., Шустов Г.Б., Алтуева А.М., Хакяшева Э.В., Кяров А.А., Хасанов В.В. Некоторые методические аспекты ударных испытаний термопластов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 83–89.

CHEMISTRY

Original article

Some methodological aspects of impact testing of thermoplastics

Nurali I. Mashukov[2], Ruslan A. Shetov[2], Gennady B. Shustov[3], Albina M. Altueva[4], Elina V. Khakyasheva[5], Aslan A. Kyarov[6], Vladislav V. Khasanov[7]

[1,2,3,4,5,6,7]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]mnurali@mail.ru
[2]rus.shetov@mail.ru
[3]alla_7583@mail.ru
[4]k-a.albina@mfil.ru
[5]ek_kbsu@mail.ru
[6]aslankyarov700@mail.ru
[7]vlad.khasanov.2017@mail.ru

Abstract. The work provides a comparative analysis of various approaches to studying the deformation-strength properties of thermoplastics. It has been shown that instrumented and full-scale tests of thermoplastics are more effective and informative compared to standard laboratory tests, for example, using the Charpy or Izod methods.

***Keywords*:** amorphous-crystalline polymer, deformation, impact loading, instrumented impact tests, polymer fracture energy

For citation: Mashukov N.I., Shetov R.A., Shustov G.B., Altueva A.M., Khakyasheva E.V., Kyarov A.A., Khasanov V.V. Some methodological aspects of impact testing of thermoplastics. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):83–89. (In Russ.).

Прочность пластмасс при ударном нагружении является одним из важнейших показателей механических свойств. Показатель ударной прочности часто используется в качестве параметра, по которому классифицируют пластмассы. Например, в нормали фирм-автопроизводителей на пластмассы, применяемые в автомобилестроении, содержатся два основных базовых классификационных показателя, первым из которых является прочность при ударе, а вторым – теплостойкость [1].

В научной литературе существует достаточно много публикаций, посвященных поведению полимеров при ударном нагружении, но в большинстве своем они носят эмпирический характер [2–3]. Одной из причин такого положения является значительная методическая трудность ударных испытаний. Не так давно в ударных испытаниях полимеров можно было оценить практически только одну величину – энергию разрушения U [2–4], и по ней рассчитать ударную вязкость A_p по известной формуле

$$A_p = U/S,$$

где S – площадь поперечного сечения стандартного образца.

Величина A_p не является свойством материала, поскольку зависит от размеров образца, длины и условий нанесения надреза, и т. д. Поэтому на практике нашли широкое применение так называемые натурные испытания, т.е. ударные испытания не стандартных образцов, а готовых изделий из полимера, часто объемных и сложной конфигурации. Естественно, что такие испытания отражают не столько качество материала, сколько качество конструкции изделия. В связи с этим в последнее время созданы и практикуются комплексные исследования поведения полимеров при ударном нагружении, которые привели к более глубокому пониманию протекающих при этом процессов и к усовершенствованию экспериментальных методик. Два направления этих поисков следует выделить особо. Первое из них включает применение линейной механики упругого разрушения (ЛМУР) для характеристики полимерных материалов, в частности, с помощью критической скорости освобождения энергии деформации, которая не зависит от размеров образца и острого надреза, и поэтому является свойством материала. Другое направление включает применение инструментированных приборов для ударных испытаний, т. е. приборов, позволяющих осуществлять регистрацию хода процесса ударного нагружения, например, в координатах «нагрузка – время». Понятно, что такие инструментированные ударные испытания позволяют получить значительно бóльшую и достоверную информацию, чем обычные стандартные испытания [2–4]. В данной работе приведены некоторые результаты сравнительного анализа двух подходов при реализации испытания термопластов при ударном нагружении.

Полиэтилен, а также значительное число других аморфно-кристаллических полимеров (ПП, ПА и др.) относится к вязким материалам, которые не разрушаются в стандартных испытаниях на высокоскоростной изгиб (методики Шарпи, Изода) при обычных температурах. Поэтому для таких полимеров, как правило, применяются испытания образцов с надрезом. Практика показывает, что надрез является эффективным средством реализации процесса разрушения [5]. Однако следует помнить, что введение надреза означает введение искусственного дефекта, которого нет в реальном полимере. Если ударная вязкость образцов без надреза определяется двумя конкурирующими факторами – жесткостью дефекта и интенсивностью неупругих деформаций, то для образцов с надрезом действие первого фактора нивелируется и, по существу, в таких испытаниях определяется действие второго фактора, т. е. пластичности материала [6]. Тем не менее, такие испытания имеют важное значение, поскольку они моделируют жесткие условия, сочетающие действие высокой скорости нагружения и жесткости дефектов, которые могут легко возникнуть в практических условиях, где роль дефекта могут сыграть усталостная трещина, случайная царапина и т. д. [7].

Измеренная энергия разрушения E, как и рассчитанная по ней ударная вязкость A_p, имеют ограниченную ценность, поскольку они являются интегральными величинами, зависящими и от напряжения, и от деформации. Пока мы пренебрегаем величиной деформации при разрушении, такая интегральная величина A_p, строго говоря, не указывает на то, является ли материал вязким или хрупким. Из *рисунка 1* можно видеть, что два материала – **А** и **Б** – с одинаковой ударной вязкостью могут деформироваться по-разному: деформация материала **А** в 2 раза меньше, чем у материала **Б**.

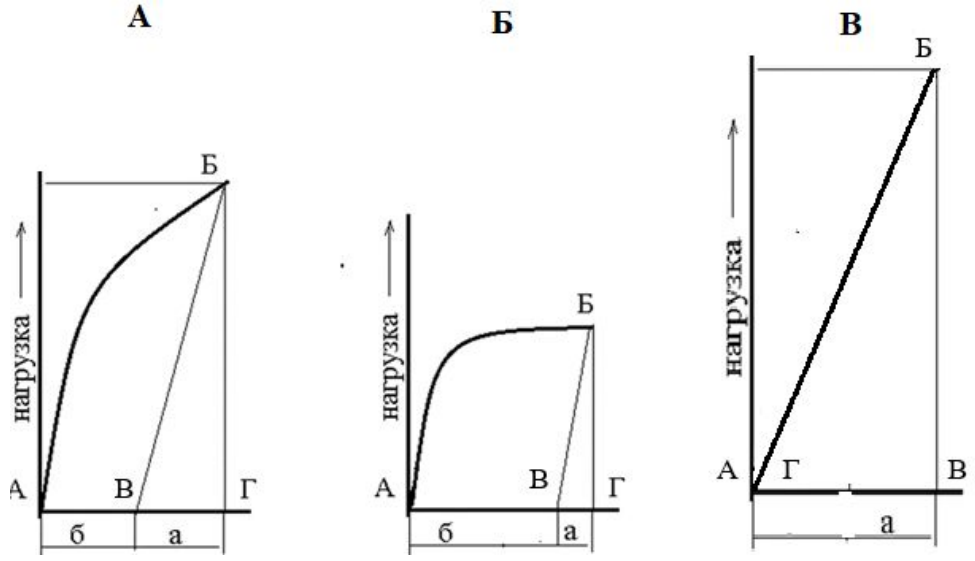


Рисунок 1 – Деформация и энергия нагружения различных материалов (схематически). **А** и **Б** – упруго-пластическая деформация; **В** – хрупкая. Здесь а – упругая деформация; б – пластическая деформация; площадь АБВ – общая энергия; площадь ГБВ – упругая энергия [5]

Измеренная величина энергии разрушения может ввести в заблуждение еще больше, если материал имеет высокую жесткость, но склонен к охрупчиванию. Материал **В** из *рисунка 1* также деформируется, и деформация имеет конечную величину, но в этом случае макроскопическая деформация имеет чисто упругую природу. Следует отметить, что инструментированные ударные испытания позволяют получить важную информацию о поведении полимеров, необходимую для успешной эксплуатации изделий из них. Важность такого разделения вкладов различных видов деформации продемонстрирована в работе [5] на примере автомобильных ремней безопасности.

К этим ремням предъявляются специфические требования. Их функция – предотвратить удар человека о рулевое колесо или ветровое стекло при возможном столкновении автомобиля с препятствием и замедлить скорость рывка насколько возможно мягко в ограниченном пространстве. Следовательно, материал, из которого изготавливается такой ремень, должен обладать определенными механическими свойствами. С одной стороны, ремень должен быть достаточно мягким, чтобы при контакте не травмировать пассажира, а с другой стороны, не должен слишком легко подвергаться вынужденно-эластическим деформациям, поскольку в этом случае он не выполнит основного своего предназначения и не предотвратит удар пассажира при аварии.

Ремень не должен вести себя подобно каучуку и поглощать энергию только за счет упругих деформаций, поскольку когда движение вперед окончено, поглощенная энергия отбросит пассажира назад на сиденье, что может привести к травме шеи. Идеальный ремень безопасности преобразует кинетическую энергию тела в пластическую деформацию. При таком способе деформирования напряжение в ремне остается сравнительно невысоким и обратный бросок – коротким. Однако при серьезных авариях ремень растягивается до такой степени, что становится непригодным для дальнейшего использования. В связи с этим для испытания ремней безопасности было сконструировано устройство для испытаний на удар падающим грузом высотой падения 12 м. Это позволило проводить испытания с максимальной скоростью 15 м/с (54 км/час). Специальные датчики фиксировали нагрузку и удлинение, что позволило получить соответствующие кривые. На *рисунке 2* показаны полученные таким образом кривые «нагрузка – удлинение» для ремней из льняной ткани, полиамида и полиэфира. Начальные скорости удара бы-

ли приняты равными 8,8 м/с для пластиковых ремней и 4,5 м/с для льняного ремня. Ремни из полиамида и полиэфира не разрушались на протяжении испытании и наблюдался некоторый возврат после достижения грузом своей нижней точки. Это дает непрерывный график, из которого можно определить накопленную ремнем энергию упругой деформации.

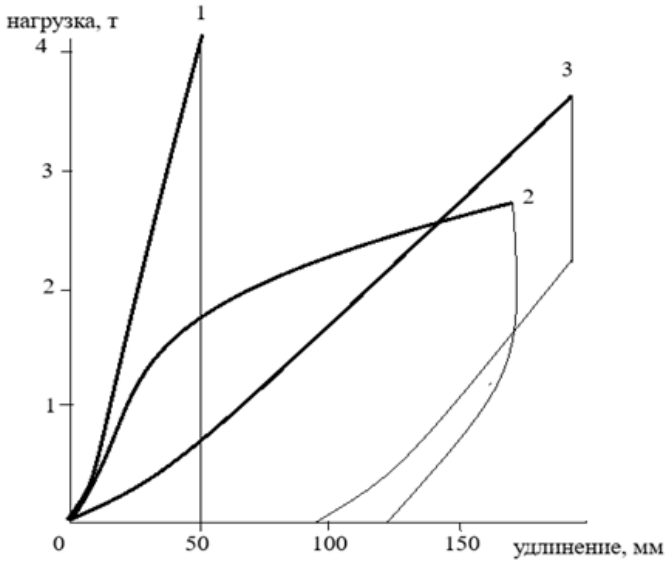


Рисунок 2 – Кривые «нагрузка – удлинение» для автомобильных ремней безопасности, изготовленных из льняного волокна (1), полиэфира (2) и полиамида (3)

Данные *рисунка 2* наглядно показывают, что ремень из растительного льняного волокна обладает очень небольшой пластической деформацией. Поэтому нагрузка на ремень быстро возрастает по мере поглощения кинетической энергии нагрузки, и разрыв ремня наступает достаточно быстро. Ремень из полиамида оказался гораздо более пригодным для рассматриваемых целей, чем льняной ремень, как следует из сравнения полученных для них кривых «нагрузка – удлинение». Максимальная нагрузка 4,85 т в случае ремня из растительного волокна снижается до 3,7 т для ремня из полиамида, а энергия пластической деформации значительно возрастает. Еще более удачное сочетание свойств показал ремень из полиэфира. Его максимальная нагрузка составила только 2,75 т, а энергия пластической деформации даже больше, чем у полиамида. Как видно из *рисунка 2*, кривая «нагрузка – удлинение» для ремня из полиэфира приближается к идеальным условиям [5]. Понятно, что получить такую исчерпывающую информацию на основании только величины энергии разрушения невозможно. Инструментированные испытания на ударное растяжение позволяют сравнить поведение полимеров при разных (и очень различающихся) скоростях деформации. Примеры такого сравнения для трех разных полиэтиленов приведены на *рисунках 3–5*.

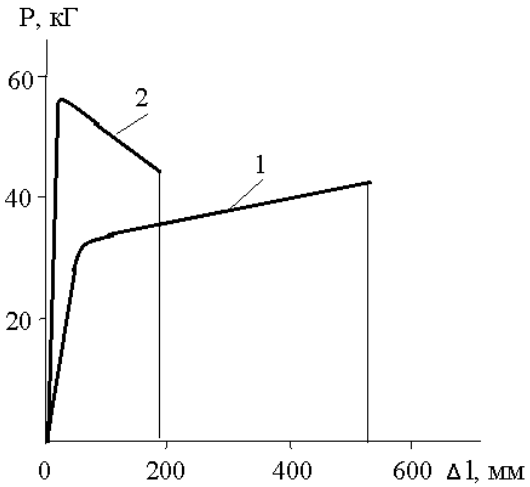


Рисунок 3 – Кривые «нагрузка – удлинение» для ПЭНП при скоростях деформирования $1{,}67\times10^{-3}$ м/с (1) и 6,0 м/с (2) [5]

Для ПЭНП предел вынужденной эластичности заметно увеличивается при росте скорости деформации (*рисунок 3*), тогда как для полиэтилена высокой плотности ПЭВП его величина практически остается неизменной (*рисунки 4* и *5*).

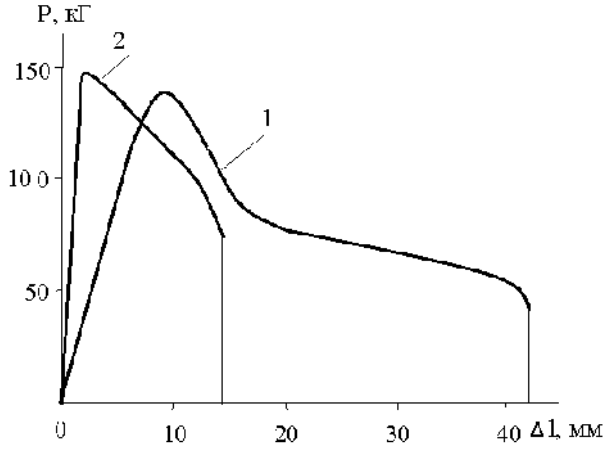


Рисунок 4 – Кривые «нагрузка – удлинение» для ПЭВП при скоростях деформирования $1{,}67\times10^{-3}$ м/с (1) и 6,0 м/с (2) [5]

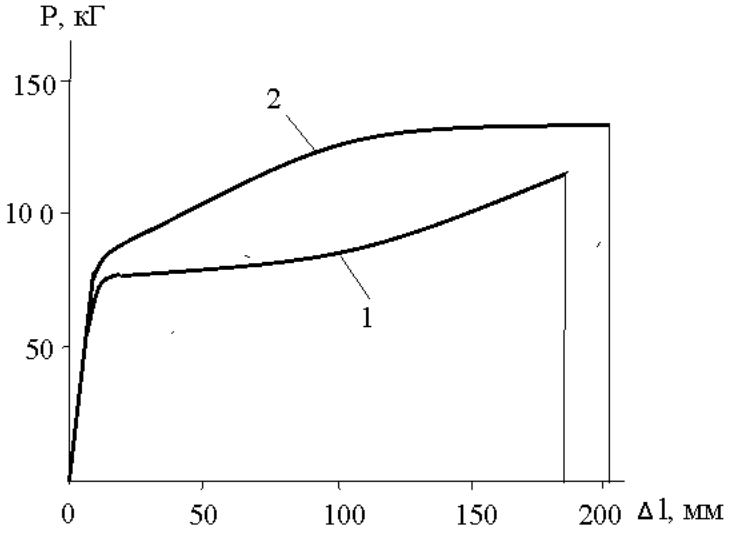


Рисунок 5 – Кривые «нагрузка – удлинение» для высокомолекулярного ПЭВП при скоростях деформирования $1{,}67\times10^{-3}$ м/с (1) и 6,0 м/с (2) [5]

Для низкомолекулярных полиэтиленов наблюдается отсутствие деформационного упрочнения при высоких скоростях нагружения (*рисунки 3* и *4*), для высокомолекулярного ПЭВП оно сохраняется (*рисунок 5*).

Обращает на себя внимание уменьшение деформации вынужденной эластичности по мере увеличения скорости деформации (*рисунки 3* и *4*). Отметим, что аналогичные наблюдения были получены и в ударных испытаниях полиэтиленов по методике Шарпи.

Из приведенных примеров видно, что инструментированные ударные испытания позволяют получить очень важную информацию о поведении полимеров, необходимую для успешной эксплуатации изделий из них.

Иногда можно получить информацию о параметрах процесса разрушения, и не прибегая к инструментированным ударным испытаниям. Например, для оценки напряжения разрушения хрупких полимеров может быть использована формула Таккермана [8], позволяющая определить напряжение разрушения через модуль упругости с учетом геометрии образца (толщины и ширины), соответственно расстояния между опорами устройства (пролета). Очевидной проблемой применения формулы Таккер-

мана в этом случае является независимое определение величины напряжения разрушения, соответствующего условиям ударных испытаний.

В работе [9] предполагается, что для характеристики поведения полимера при ударном нагружении необходимо рассматривать всю кривую «нагрузка – удлинение». На практике это означает определение ряда характеристических параметров, с помощью которых можно было бы выполнить количественное сравнение разных материалов, испытанных в одинаковых условиях, избегая описательных, качественных терминов (*рисунок 6*):

– максимальная нагрузка P_m;
– удлинение, соответствующее 0-Δl_m;
– удлинение, соответствующее остановке хрупкого разрушения Δl_m;
– энергия, поглощаемая до Δl_m;
– энергия, поглощаемая от Δl_m до Δl_b;
– энергия, поглощаемая после Δl_m;
– энергия, поглощаемая после Δl_b;
– общая энергия, поглощаемая на протяжении всего испытания 0-Δl_r.

Каждая из указанных величин, взятая в отдельности, представляет частный аспект общей информации.

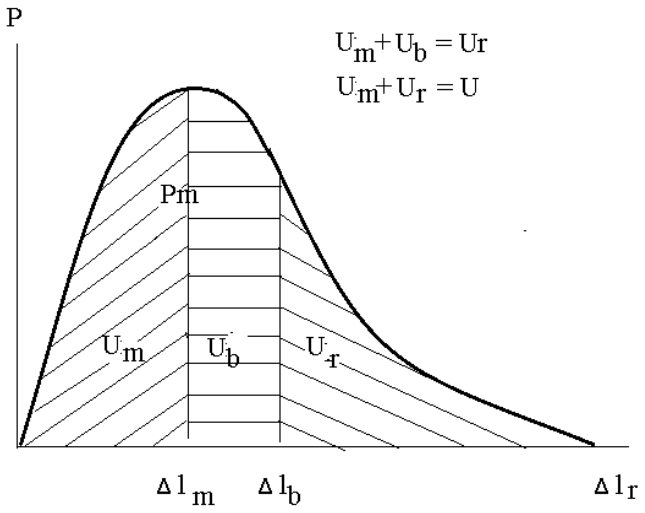


Рисунок 6 – Схематическое представление кривой «нагрузка – удлинение», показывающее наиболее важные ее характеристики [9]

Таким образом, даже краткий обзор современных методик ударных испытаний полимеров демонстрирует, что получаемая в них информация как по объему, так и по качеству во много раз превышает ту небольшую информацию, которую в состоянии дать стандартные испытания. Следует отметить, что полноценное исследование деформационно-прочностных свойств дисперсно-наполненных кристаллизующихся термопластов с аномальными свойствами возможно и эффективно только с применением инструментированных методов [10]. Как правило, оснащение приборов в таких случаях не является технически сложным (например, универсальный калиброванный осциллограф с пьезодатчиком).

Библиография

1. Чухланов, В.Ю., Ермолаева Е. В., Чижова Л.А. Современные методы исследования эксплуатационных свойств полимерных материалов: учеб. пособие к лаб. и практ. занятиям. Владимир: Изд-во ВлГУ, 2019. 104 с.

2. Малкин А.Я., Аскадский А.А., Коврига В.В. Методы измерения механических свойств полимеров. М.: Химия, 1979. 336 с.

3. Кауш Г. Разрушение полимеров. М.: Мир, 1981. 440 с.

4. Нарисава И. Прочность полимерных материалов. М.: Химия, 1987. 400 с.

5. Richard K. Determination of the mechanical properties of high polymers at high speeds of testing // J. Polymer Sci. 1962. V. 58, N 1. P. 71–84.

6. Белоусов В.Н., Козлов Г.В., Микитаев А.К. Экспериментальное определение критического дефекта в полимерах в условиях ударного разрушения // ДАН СССР. 1983. Т. 27, N 5. С. 1120–1123.

7. Kausch H.H. The nature of defects and their role in large deformation and fracture of engineering thermoplastics // Pure and Appl. Chem. 1983. V. 55, N 5. P. 333–844.

8. Glathar J.L., Preston F.W. The behaviour of glass under impact: theoretical consideration // Glass Technology. 1969. V. 9, N 4. P. 89–100.

9. Lubert W., Rink M., Pavan A. Force-displacement evaluation of macromolecular materials in flexural impact tests.I. Apparatus and data handling // J. Appl. Polymer Sci. 1976. V. 10, N 5. P. 1107–1116.

10. Mashukov N.I., Kharaev A.M., Bazheva R.Ch., Kharaeva R.A. The Effect of “Double” Nanotechnology as a Tool for Regulation of Physicochemical Properties in the Development of Crystallizing // Polymer Science. Series D. 2020. V. 13, N 2. P. 201–205.

References

1. Chukhlanov V.Yu., Ermolaeva E.V., Chizhova L.A. Modern Methods for Studying Operational Properties of Polymeric Materials. Study Guide for Laboratory and Practical Sessions. Vladimir: Vladimir State University; 2019. 104 p. (In Russ.).

2. Malkin A.Ya., Askadskii A.A., Kovriga V.V. Methods for Measuring Mechanical Properties of Polymers. Moscow: Khimiya; 1979. 336 p. (In Russ.).

3. Kausch, H. Fracture of Polymers. Moscow: Mir; 1981. 440 p. (In Russ.).

4. Narisawa, I. Strength of Polymeric Materials. Moscow: Khimiya; 1987. 400 p. (In Russ.).

5. Richard K. Determination of the mechanical properties of high polymers at high speeds of testing. *J. Polymer Sci*. 1962;58(1):71–84.

6. Belousov V.N., Kozlov G.V., Mikitaev A.K. Experimental Determination of the Critical Defect in Polymers under Impact Fracture Conditions. *Doklady Akademii Nauk SSSR = Soviet Physics. Doklady*. 1983;270(5):1120–1123. (In Russ.).

7. Kausch H.H. The nature of defects and their role in large deformation and fracture of engineering thermoplastics. *Pure and Appl. Chem*. 1983;55(5):333–844.

8. Glathar J.L., Preston F.W. The behaviour of glass under impact: theoretical consideration. *Glass Technology*. 1969;9(4):89–100.

9. Lubert W., Rink M., Pavan A. Force-displacement evaluation of macromolecular materials in flexural impact tests.I. Apparatus and data handling. *J. Appl. Polymer Sci*. 1976;10(5):1107–1116.

10. Mashukov N.I., Kharaev A.M., Bazheva R.Ch., Kharaeva R.A. The Effect of “Double” Nanotechnology as a Tool for Regulation of Physicochemical Properties in the Development of Crystallizing. *Polymer Science. Series D*. 2020;13(2):201–205.

© Машуков Н.И., Шетов Р.А., Шустов Г.Б., Алтуева А.М., Хакяшева Э.В., Кяров А.А., Хасанов В.В., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 90–95.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):90–95.

ХИМИЯ

Научная статья
УДК 678.01:612.111.45

Оценка гемолитической активности сополиэфиэфиркетона

Милана Уматиевна Шокумова[1], Ауес Ахмедович Беев[2], Джулетта Анатольевна Беева[3], Светлана Юрьевна Хаширова[4], Заира Феликсовна Хараева[5], Азамат Аскерович Хаширов[6]

[1,2,3,4,5,6]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]milanashokumova89@mail.ru
[2]difenol@mail.ru
[3]d.beeva@mail.ru
[4]sveta_daova@mail.ru
[5]lirafe@yandex.ru
[6]khashaz@yandex.ru

Аннотация. Статья посвящена исследованию совместимости синтезированных сополимеров с целью оценки потенциала их применения в медицине. Результаты проведенных экспериментов подтверждают перспективность использования данных соединений в медицинских целях и открывают новые возможности для разработки инновационных биополимерных материалов.

Ключевые слова: полиэфирэфиркетон, биосовместимость, гемолитическая активность, гемолиз, хемилюминесцентная активность

Для цитирования: Шокумова М.У, Беев А.А., Беева Д.А., Хаширова С.Ю., Хараева З.Ф., Хаширов А.А. Оценка гемолитической активности сополиэфиэфиркетона // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 90–95.

CHEMISTRY

Original article

Assessment of the hemolytic activity of copolyetheretherketone

Milana U. Shokumova[1], Aues A. Beev[2], Dzhuletta A. Beeva[3], Svetlana Yu. Khashirova[4], Zaira F. Kharaeva[5], Azamat A. Khashirov[6]

[1,2,3,4,5,6]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]milanashokumova89@mail.ru
[2]difenol@mail.ru
[3]d.beeva@mail.ru
[4]sveta_daova@mail.ru
[5] lirafe@yandex.ru
[6]khashaz@yandex.ru

Abstract. The article is devoted to the study of the compatibility of synthesized copolymers in order to assess the potential of their use in medicine. The results of the experiments confirm the prospects of using these compounds for medical purposes and open up new opportunities for the development of innovative biopolymer materials.

Keywords: polyetheretherketone, biocompatibility, hemolytic activity, hemolysis, chemiluminescent activity
For citation: Shokumova M.U., Beev A.A., Beeva D.A., Khashirova S.Yu., Kharaeva Z.F., Khashirov A.A. Assessment of the hemolytic activity of copolyetheretherketone. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):90–95. (In Russ.).

Введение

Из множества доступных в настоящее время полимеров лишь немногие используются для замещения костной ткани, поскольку большинство полимеров впитывают жидкости, набухают, выделяют нежелательные продукты и могут быть подвержены стерилизации. Более того, некоторые полимеры слишком гибкие и слишком слабые, для использования в ортопедических имплантатах [1]. В 1978 году группа английских ученых разработала ПЭЭК (полиэфирэфиркетон), полукристаллический линейный полициклический ароматический термопласт.

Впервые он был коммерциализирован в 1980-х годах для промышленного применения в производстве самолетов, лопаток турбин, поршневых деталей, изоляции кабелей, подшипников и клапанов компрессорных пластин, среди прочего [1–2]. ПЭЭК впоследствии стал важной альтернативой металлическим компонентам имплантатов, особенно в травматологических приложениях, ортопедии и спинальных имплантатах [1–4].

Биосовместимость и модуль упругости, сходный с модулем упругости человеческой кости, делают ПЭЭК хорошей альтернативой металлическим компонентам имплантатов, особенно в ортопедических и травматологических приложениях [5–10].

Углеродные армированные ПЭЭК (CFR-PEEK) фиксационные пластины были разработаны в качестве альтернативы костным пластинам из нержавеющей стали. CFR-PEEK также используется для фиксации переломов и в качестве бедренного протеза в искусственных тазобедренных суставах [5–7]. ПЭЭК широко используется в качестве материала для межпозвонковых имплантатов при вертебральной хирургии и в спинальной хирургии. Он также рассматривался для замены суставов пальцев и полной замены межпозвоночных дисков [5–7]. Ортопедические имплантаты обычно включают металлы, керамику, композиты и полимеры. Металлы, такие как Ni-Ti, Ti, Co-Cr, используются для постоянных и временных имплантатов, но у них есть недостатки.

Недостатками металла является возможность возникновения аллергических реакций, высокий модуль упругости, который может вызывать напряжение в околоимплантатной кости, а также рентгеноконтрастность материала, вызывающая артефакты на КТ-сканах [5–7]. К недостаткам керамики относятся высокий модуль упругости, низкая трещиностойкость и пластичность [5]. ПЭЭК предлагает более предпочтительную биоматериальную замену металлическим имплантатам и керамике.

В отличие от металла, ПЭЭК биосовместим и имеет естественный цвет зуба, поэтому широко используется в имплантатах, имплантат-опорах, балках или зажимных материалах в области съемных зубных протезов и верхнечелюстных обтураторных протезов [11–13]. ПЭЭК также предлагает альтернативу ортодонтическим проволокам из содержаний улучшения эстетики, устранения аллергии на металл и интерференции металлов с ТК [12]. Кроме того, ПЭЭК легко поддается обработке с помощью стоматологических боров, хотя из-за его низкой прозрачности и сероватой пигментации он по-прежнему требует облицовки [13].

Исходя из изложенного ПЭЭК все чаще используется в медицине как альтернатива титану в области ортопедии, нейрохирургии и травматологии [14–15].

Несмотря на многочисленные преимущества полиэфирэфиркетона, его высокие гидрофобные свойства влияют на качество остеоиндукции или обрастания клетками. Для улучшения остеоиндуктивных свойств материала применяют различные подходы к функционализации поверхностей полиэфиркетонов и изменению его структуры.

Исходя из этого были синтезированы новые полимерные материалы органического характера, проявляющих повышенные теплофизические и физико-механические свойства – ароматические сополиэфирэфиркетоны (АСПЭЭК). [16]. Сополимеры относятся к важнейшим высокомолекулярным соединениям, в которых путем изменения макромолекулярного дизайна можно удачно реализовать необходимые заданные эксплуатационные характеристики разных классов полимеров. Регулированием количественного соотношения сульфоновых и кетонных групп можно синтезировать сополимеры, сочетающие полезные свойства полисульфонов и полиэфиркетонов [17].

Экспериментальная часть

Подготовка проб N 1, 3, 5: навески образцов 20 мг поместили отдельно в 1 мл стерильной воды и в 30 % раствор H_2O_2. Образцы оставили в этих растворах на 36 часов при комнатной температуре. По окончании инкубации образцы отмыли водой, используя пятикратное центрифугирование (10 мин, 10000 об/мин). Таким образом были получены образцы 1-1 (инкубация в H_2O), 1-2 (инкубация в H_2O_2), 3-1, 3-2 и 5-1, 5-2, соответственно.

Инкубация в воде позволяет определить, изменятся ли свойства при контакте с водой. Инкубация в 30 % растворе H_2O_2 имитирует окислительное воздействие, которое может происходить при контакте с воспаленными тканями.

Приготовление 10 % взвеси эритроцитов. Для приготовления взвеси эритроцитов была использована эритроцитарная масса приготовленная на 3,9 % -ном растворе цитрата натрия в соотношении 1:9. Срок хранения цитратной крови (эритроцитарной массы) – 72 ч при + 4 °С. Эритроцитарную массу 5 мл центрифугировали 10 минут при 900 об./мин. Проводили дважды отмывание эритроцитов. После отмывания надосадочная жидкость должна быть прозрачна, бесцветна, не иметь следов гемолиза. Если надосадочная жидкость не соответствовала указанным требованиям, эритроциты не использовались для приготовления взвеси эритроцитов. Для получения 10 %-ной взвеси эритроцитов 1 мл осадка клеток смешивали с 9 мл 0,9 %-ного раствора хлористого натрия. Полученную взвесь эритроцитов хранили не более 24 часов в холодильнике при температуре от 4 до 8 °С.

Контрольные пробы. Приготовление контрольной пробы и пробы со 100 % гемолизом: контрольная проба: 0,1 мл 10 %-ной взвеси эритроцитов и 1 мл 0,9 %-го раствора хлористого натрия. Проба со 100 % гемолизом: 0,1 мл 10 %-ной взвеси эритроцитов и 1 мл дистиллированной воды.

До определения гемолитического действия образцов в пробу добавляли 0,1 мл 10 %-ной взвеси эритроцитов 1 мл образцов (20 мг/мл). Смесь ставили в термостат на 1 час при температуре 37 °С при постоянном перемешивании, затем центрифугировали в течение 20 минут при 2000 об./мин. Все манипуляции по отношению к контролю и пробе со 100 % гемолизом проводились параллельно с опытными пробами. Пробы центрифугировали и определяли оптическую плотность супернатанта при длине волны 540 нм. Расчет % гемолиза производится по формуле:

$$\% \text{ гемолиза} = (E_{оп} – E_к/E_{100} − E_к) \times 100,$$

где $E_{оп}$ – оптическая плотность опытной пробы; $E_к$ – оптическая плотность контрольной пробы; E_{100} – оптическая плотность воды со взвесью эритроцитов 100 % гемолиз.

Все пробы исследовались в повторах. Материал считается гемосовместимым, если процент гемолиза не превышает 5 %. Если гемолиз выше, материал признаётся гемолитически активным.

Анализ хемилюминесцентной активности цельной крови при добавлении к ней исследуемых образцов: в кювету люминометра Lum 1200 (ДИСофт, Москва) помещали 25 мкл крови (с ЭДТА) и 25 мкл образцов (20 мг/мл исходная концентрация), а через 1 минуту добавляли 200 мкл среды Кребса – Рингера с люминолом (0,25 мМ). Регистрировали хемилюминесценция (ХЛ) в непрерывном режиме при 37 °С. По окончании измерений в пробы добавляли раствор форбол-миристат-ацетата и регистрировали ХЛ ответ на второй активатор. В контрольные пробы вместо образцов добавляли соответствующую по объему аликвоту 0,9 %-ный NaCl.

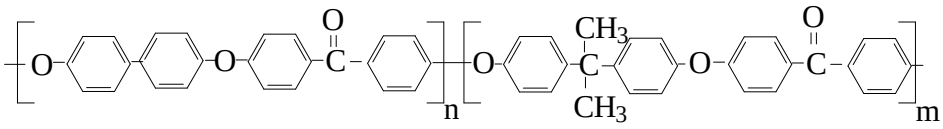
Результаты представляли, как амплитуду ХЛ ответа на образцы и на последующую активацию с помощью ФМА.

Результаты и их обсуждение

В связи с изложенными литературными данными представлялось интересным оценить биосовместимость синтезированных образцов с целью выявления возможности их использования в медицинских приложениях.

Исследования проводились по ГОСТ ISO 10993-4-2020. Изделия медицинские. Оценка биологического действия медицинских изделий. Часть 4. Исследования изделий, взаимодействующих с кровью (ISO 10993-4:2017, Biological evaluation of medical devices – Part 4: Selection of tests for interactions with blood, IDT).

Для синтезированных образцов следующей структуры:



проведена оценка прямого цитотоксического эффекта и способности взаимодействовать с клетками *in vitro*: изучена гемолитическая активность образцов (модель повреждения клеточной мембраны), исследована люминолзависимая хемилюминесценция цельной крови здоровых лиц в присутствии образцов полимеров.

Обнаружено, что образцы не вызывали выраженного гемолитического действия (*таблица 1*).

Таблица 1 – Гемолитическое действие образцов N 1, 3, 5

Образцы	Амплитуда ХЛ ответа на образцы, В
1-1	2,0 ± 0,5
1-2	3,5 ± 0,5
3-1	2,0 ± 0,5
3-2	2,5 ± 0,5
5-1	3,0 ± 0,5
5-2	4,0± 0,5

Результаты сравнительного анализа воздействия исследованных образцов на ХЛ клеток крови человека приведены в *таблице 2*.

Таблица 2 – Амплитуда ХЛ ответа цельной крови. Представлены величины амплитуды ответа на образцы и на ФМА как второй активатор (ХЛ, В)

Образцы	Амплитуда ХЛ ответа на образцы, В	Амплитуда ХЛ ответа на ФМА, В
1-1	2,5 ± 0,5*	27,5 ± 0,5*
1-2	3,5 ± 0,5*	30,5 ± 0,5*
3-1	2,0 ± 0,5*	28,0 ± 1,5*
3-2	4,5 ± 0,5*	30,5 ± 0,5*
5-1	3,5 ± 0,3*	29,5 ± 0,5*
5-2	4,0± 0,5*	30,5 ± 0,5*
NaCl	0,2 ± 0,02	4,5 ± 0,5*

Примечание: *достоверность отличий $p<0,05$ по сравнению с контрольной пробой.

Достоверного влияния синтезированных образцов 1, 3, 5 на функциональную активность клеток цельной крови по результатам исследования ХЛ анализа не выявлено, так как клетки сохраняют способность к радикалообразованию.

Выводы

Таким образом, предварительные исследования биосовместимости синтезированных сополимеров показали их перспективность для медицинского применения и открывают новые возможности для создания новых биополимерных материалов.

Библиография

1. Ngo T.D., Kashani A., Imbalzano G., Nguyen K.T.Q., Hui D. Additive Manufacturing (3D Printing): A Review of Materials, Methods, Applications and Challenges // Compos. B Eng. 2018. N 143. P. 172–196.

2. Arefin A.M.E., Khatri N.R., Kulkarni N., Egan P.F. Polymer 3D Printing Review: Materials, Process, and Design Strategies for Medical Applications // Polymers. 2021. N 13. P. 1499.

3. Электронный ресурс: 3D-Printed. Electronics Now GVR: Global 3D Printing Market Size Was Billion in 2019 // Available online: https://www.printedelectronicsnow.com/contents/view_breaking-news/2020-02-10/gvr-global-3d-printing-market-size-was-11 58-billion-in-2019/ 30.09.2021.

4. Электронный ресурс: Pohlmann T. Patent and Litigation Trends for 3D Printing Technologies // Available online: https://www.iam-media.com/article/ 05.07.2023.

5. Ma R., Tang T. Current strategies to improve the bioactivity of PEEK // Int. J. Mol. Sci. 2014. V. 15, N 4. P. 5426–5445.

6. Sarot J.R., Contar C.M., Cruz A.C., De Souza M.R. Evaluation of the stress distribution in CFR-PEEK dental implants by the three-dimensional finite element method // J. Mater Sci. Mater. Med. 2010. V. 21, N 7. P. 2079–2085.

7. Kurtz S.M., Devine J.N. PEEK biomaterials in trauma, orthopedic, and spinal implants // Biomaterials. 2007. V. 28, N 32. P. 4845–4869.

8. Zoidis P., Papathanasiou I., Polyzois G. The use of a modified polyetheretherketone (PEEK) as an alternative framework material for removable dental prostheses. a clinical report // J. Prosthodont. 2016. V. 25, N 7. P. 580–584.

9. Schwitalla A.D., Abou-Emara M., Spintig T., Lackmann J., Müller W.D. Finite element analysis of the biomechanical effects of PEEK dental implants on the peri-implant bone // J. Biomech. 2015. V. 48, N 1. P. 1–7.

10. Schwitalla A.D., Spintig T., Kallage I., Müller W.D. Flexural behavior of PEEK materials for dental application // Dent Mater. 2015. V. 31, N 11. P. 1377–1384.

11. Costa-Palau S., Torrents-Nicolàs J., Brufau de Barberà M., Cabratosa-Termes J. Use of polyetheretherketone in the fabrication of a maxillary obturator prosthesis: a clinical report // J. Prosthet Dent. 2014. V. 112, N 3. P. 680–682.

12. Maekawa M., Kanno Z., Wada T., Hongo T., Doi H., Hanawa T., Ono T., Uo M. Mechanical properties of orthodontic wires made of super engineering plastic // Dent. Mater. J. 2015. V. 34, N 1. P. 114–119.

13. Stawarczyk B., Beuer F., Wimmer T., Jahn D., Sener B., Roos M., Schmidlin P.R. Polyetheretherketone-a suitable material for fixed dental prostheses? // J. Biomed. Mater. Res. B. Appl. Biomater. 2013. V. 101, N 7. P. 1209–1216.

14. Ortega-Martínez J., Farré-Lladós M., Cano-Batalla J., Cabratosa-Termes J. Polyetheretherketone (PEEK) as a medical and dental material: a literature review // Med. Res. Arch. 2017. V. 5, N 4. P. 1–161.

15. Tekin S., Değer Y., Demirci F. Evaluation of the use of PEEK material in implant-supported fixed restorations by finite element analysis // Niger. J. Clin. Pract. 2019. V. 22. P. 1252–1258.

16. Беев А.А., Хаширова С.Ю., Беева Д.А., Шокумова М.У., Гучинов В.А. Синтез и свойства новых ароматических сополиэфирсульфонкетонов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2023. Т. 13, N 4. С. 60–66.

17. Беев А.А., Хаширова С.Ю., Беева Д.А., Шокумова М.У., Гучинов В.А., Мукожева Р.А., Балаева С.М., Кумышева Ю.А. Влияние условий сополиконденсации на синтез и свойства ароматических сополиэфирсульфонкетонов // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2020. Т. 10, N 2. С. 17–25.

References

1. Ngo T.D., Kashani A., Imbalzano G., Nguyen K.T.Q., Hui D. Additive Manufacturing (3D Printing): A Review of Materials, Methods, Applications and Challenges. *Compos. B Eng.* 2018;143:172–196.

2. Arefin A.M.E., Khatri N.R., Kulkarni N., Egan P.F. Polymer 3D Printing Review: Materials, Process, and Design Strategies for Medical Applications. *Polymers*. 2021;13:1499.

3. 3D-Printed. Electronics Now GVR: Global 3D Printing Market Size Was Billion in 2019 // Available online: https://www.printedelectronicsnow.com/contents/view_breaking-news/2020-02-10/gvr-global-3d-printing-market-size-was-11 58-billion-in-2019/ 30.09.2021.

4. Pohlmann T. Patent and Litigation Trends for 3D Printing Technologies // Available online: https://www.iam-media.com/article/ 05.07.2023.

5. Ma R., Tang T. Current strategies to improve the bioactivity of PEEK. *Int. J. Mol. Sci*. 2014;15(4):5426–5445.

6. Sarot J.R., Contar C.M., Cruz A.C., De Souza M.R. Evaluation of the stress distribution in CFR-PEEK dental implants by the three-dimensional finite element method. *J. Mater. Sci. Mater. Med*. 2010;21(7):2079–2085.

7. Kurtz S.M., Devine J.N. PEEK biomaterials in trauma, orthopedic, and spinal implants. *Biomaterials*. 2007;28(32):4845–4869.

8. Zoidis P., Papathanasiou I., Polyzois G. The use of a modified polyetheretherketone (PEEK) as an alternative framework material for removable dental prostheses. a clinical report. *J. Prosthodont*. 2016;25(7):580–584.

9. Schwitalla A.D., Abou-Emara M., Spintig T., Lackmann J., Müller W.D. Finite element analysis of the biomechanical effects of PEEK dental implants on the peri-implant bone. *J. Biomech*. 2015;48(1):1–7.

10. Schwitalla A.D., Spintig T., Kallage I., Müller W.D. Flexural behavior of PEEK materials for dental application. *Dent. Mater*. 2015;31(11):1377–1384.

11. Costa-Palau S., Torrents-Nicolàs J., Brufau de Barberà M., Cabratosa-Termes J. Use of polyetheretherketone in the fabrication of a maxillary obturator prosthesis: a clinical report. *J. Prosthet. Dent*. 2014;112(3):680–682.

12. Maekawa M., Kanno Z., Wada T., Hongo T., Doi H., Hanawa T., Ono T., Uo M. Mechanical properties of orthodontic wires made of super engineering plastic. *Dent. Mater. J*. 2015;34(1):114–119.

13. Stawarczyk B., Beuer F., Wimmer T., Jahn D., Sener B., Roos M., Schmidlin P.R. Polyetheretherketone-a suitable material for fixed dental prostheses? *J. Biomed. Mater. Res. B. Appl. Biomater*. 2013;101(7):1209–1216.

14. Ortega-Martínez J., Farré-Lladós M., Cano-Batalla J., Cabratosa-Termes J. Polyetheretherketone (PEEK) as a medical and dental material: a literature review. *Med. Res. Arch*. 2017;5(4):1–16.

15. Tekin S., Değer Y., Demirci F. Evaluation of the use of PEEK material in implant-supported fixed restorations by finite element analysis. *Niger. J. Clin. Pract*. 2019;22:1252–1258.

16. Beev A.A., Khashirova S.Yu., Beeva D.A., Shokumova M.U., Guchinov V.A. Synthesis and properties of new aromatic copolyether sulfone ketones. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2023;13(4):60–66. (In Russ.).

17. Beev A.A., Khashirova S.Yu., Beeva D.A., Shokumova M.U., Guchinov V.A., Mukozheva R.A., Balaeva S.M., Kumysheva Yu.A. The influence of copolymerization conditions on the synthesis and properties of aromatic copolyether sulfone ketones. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo Gosudarstvennogo Universiteta = Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2020;10(2):17–25. (In Russ.).

© Шокумова М.У., Беев А.А., Беева Д.А., Хаширова С.Ю., Хараева З.Ф., Хаширов А.А., 2026

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 96–100.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(3):96–100.

ХИМИЯ

Научная статья
УДК 678.674(043)

Синтез и свойства жирноароматических блок-сополимеров с повышенной огнестойкостью на основе олигоэфиров

Геннадий Борисович Шустов[1], Нурали Иналович Машуков[2], Руслан Адибович Шетов[3], Сафият Масхутовна Балаева[4], Элина Валерьевна Хакяшева[5]

[1,2,3,4,5]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия
[1]alla_7583@mail.ru
[2]mnurali@mail.ru
[3]rus.shetov@mail.ru
[4]safiyat.balaeva@mail.ru
[5]ek_kbsu@mail.ru

Аннотация. Рассмотрены синтез и свойства жирноароматических блок-сополимеров на основе олигоэфиров. Установлена зависимость свойств блок-сополимеров от состава. Показано, что термостойкость синтезированных блок-сополимеров выше в атмосфере воздуха, чем в атмосфере инертного газа. Установлена корреляция между кислородным индексом и содержанием хлора в блок-сополимере.

Ключевые слова: поликонденсация, блок-сополимеры, олигоэфиры, термостойкость, огнестойкость
Для цитирования: Шустов Г.Б., Машуков Н.И., Шетов Р.А., Балаева С.М., Хакяшева Э.В. Синтез и свойства жирноароматических блок-сополимеров с повышенной огнестойкостью на основе олигоэфиров // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 3. С. 96–100.

CHEMISTRY

Original article

Synthesis and Properties of Oligoether-Based Aliphatic-Aromatic Block Copolymers with Enhanced Flame Retardancy

Gennady B. Shustov[1], Nurali I. Mashukov[2], Ruslan A. Shetov[3], Safiyat M. Balaeva[4], Elina V. Khakyasheva[5]

[1,2,3,4,5]Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal’chik, Russia
[1]alla_7583@mail.ru
[2]mnurali@mail.ru
[3]rus.shetov@mail.ru
[4]safiyat.balaeva@mail.ru
[5]ek_kbsu@mail.ru

Abstract. The synthesis and properties of aliphatic–aromatic block copolymers based on oligoesters are investigated. The dependence of the copolymer properties on composition is established. It is shown that the thermal stability of the synthesized block copolymers is higher in air than in an inert atmosphere. A correlation between the limiting oxygen index and the chlorine content in the copolymers is revealed.

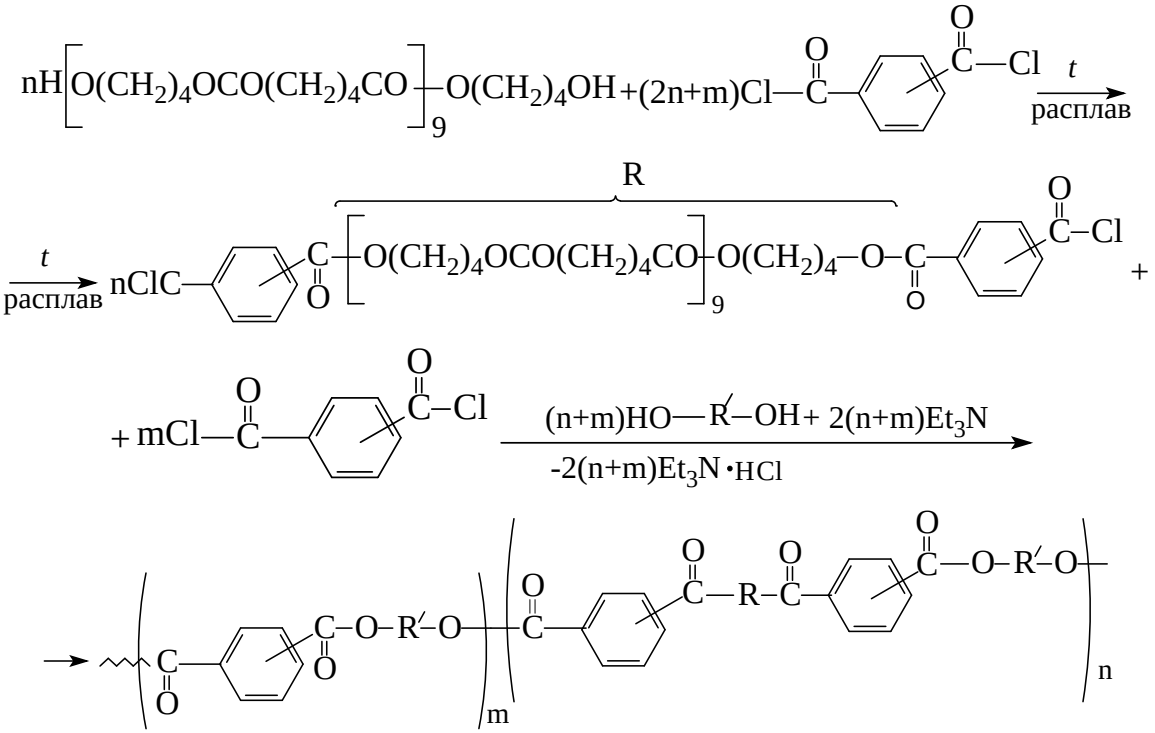
Keywords: polycondensation, block copolymers, oligoesters, thermal stability, flame retardancy

For citation: Shustov G.B., Mashukov N.I., Shetov R.A., Balaeva S.M., Khakyasheva E.V. Synthesis and Properties of Oligoether-Based Aliphatic-Aromatic Block Copolymers with Enhanced Flame Retardancy. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(3):96–100. (In Russ.).

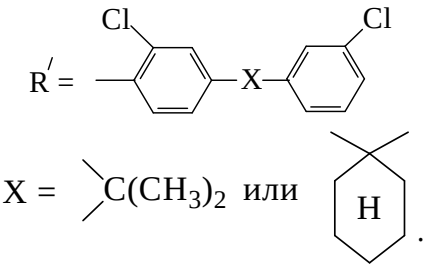
В последние годы широко исследуются методы синтеза и свойства блок-сополимеров различного типа [1–3]. Одним из перспективных классов блок-сополимеров являются термоэластопласты (ТЭП) на основе арилатных блоков и бутиленгликольадипинатных (бутадиенизопреновых, бутадиеновых) блоков [4–6].

Полиблочные термоэластопласты указанного типа синтезированы различными способами поликонденсации и имеют аморфную природу. С целью повышения огнестойкости и термостойкости термоэластопластов в настоящей работе использован наиболее эффективный путь – химическая модификация макромолекулы ароматическими и галоидсодержащими группами. Для этого были использованы следующие диоксисоединения: диан, фенолфталеин, дихлордиан, тетрахлордиан, дихлордифенилолциклогексан, олигосульфон. В качестве связующих жестких и гибких блоков использованы дихлорангидриды изофталевой (ДХАИК) и терефталевой (ДХАТК) кислот.

При разработке способов синтеза данных блок-сополимеров учитывалась значительная разница в реакционной способности концевых алифатических и ароматических гидроксильных групп у исходных олигомеров и бисфенолов в реакции поликонденсации с дихлорангидридами ароматических кислот, проводимой в условиях низкотемпературной поликонденсации [6-8]. Также принимался во внимание тот факт, что реакционная способность хлорангидридной группы на конце цепи меньше, чем реакционная способность хлорангидридной группы мономерных дихлорангидридов. Исходя из этого было предложено (разработано) два способа получения жирноароматических блок-сополимеров. Первый способ – двухстадийный синтез, проводился в одном реакционном сосуде по схеме расплав – раствор



где



.

На первой стадии синтеза получали макродихлорангидрид путем взаимодействия в расплаве избытка смеси дихлорангидридов изофталевой и терефталевой кислот и олигоэфиргликольадипината с ММ = 2000 (ОБГА). На второй стадии проводили акцепторно-каталитическую поликонденсацию (АКПК) в растворе полученного макродихлорангидрида и свободной смеси ДХАИК и ДХАТК с дихлордианом (ДХД) или дихлордифенилолциклогексаном (ДХДФЦГ).

Вторая стадия с успехом может осуществляться в условиях межфазной или эмульсионной поликонденсаций [4–6].

Вторым способом синтеза указанных жирноароматических блок-сополимеров было использование гомогенной АКПК смеси галогенсодержащих бисфенолов с ОБГА и дихлорангидридов (ДХАИК, ДХАТК) [5–8].

В результате получены блок-сополимеры с молекулярной массой 20000-75000. При этом с увеличением содержания в макромолекуле остатков ОБГА снижаются выход и приведенная вязкость полимера (*рисунок 1*).

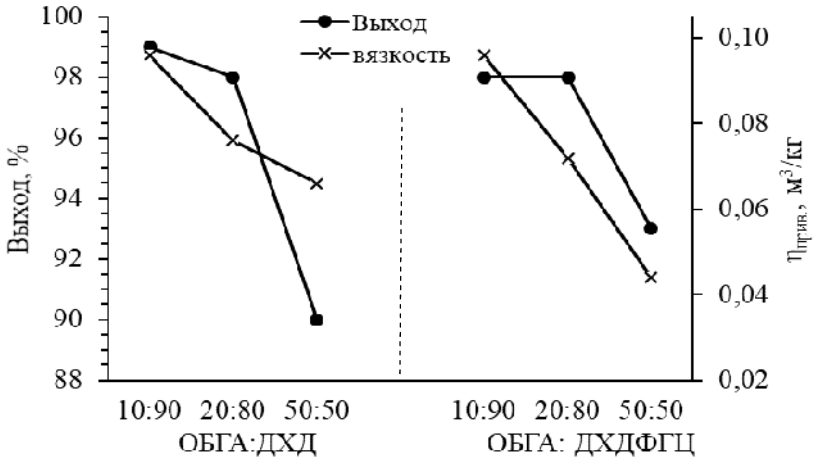


Рисунок 1 – Зависимость выхода и приведенной вязкости ТЭП от состава полимеров ОБГА-ДХД и ОБГА-ДХДФГЦ

В зависимости от состава ТЭП изменяются их температуры размягчения и деформационно-прочностные свойства (*рисунок 2*).



Рисунок 2 – Зависимости температуры размягчения $T_{разм}$, напряжения σ_p и деформации ε разрушения от состава полимеров ОБГА-ДХД и ОБГА-ДХДФГЦ

Результаты термомеханических исследований ТЭП свидетельствуют о том, что в них не происходит фазового разделения блоков различной структуры, а снижение температуры размягчения ТЭП с увеличением содержания в нем ОБГА, по-видимому, связано с совмещением ОБГА с арилатной фазой. На совместимость алифатических и ароматических блоков в исследуемых ТЭП указывают также дан-

ные температурной зависимости динамических механических свойств. Рассматриваемые ТЭП, имея один максимум механических потерь, ведут себя как обычные статистические сополимеры, что свидетельствует об отсутствии в них четко выраженного фазового разделения.

Синтезированные ТЭП хорошо растворимы в таких общих как для полиарилатов, так и для полибутиленгликольадипинатов растворителях, как хлорированные углеводороды. Это позволяет получать из ТЭП пленочные материалы методом полива из раствора полимера на подложку.

На *рисунке 3* приведены температуры начала разложения $T_н$, а также потери 5, 50, 100 % массы (T_5, T_{50}, T_{100}) на воздухе для данных ТЭП.

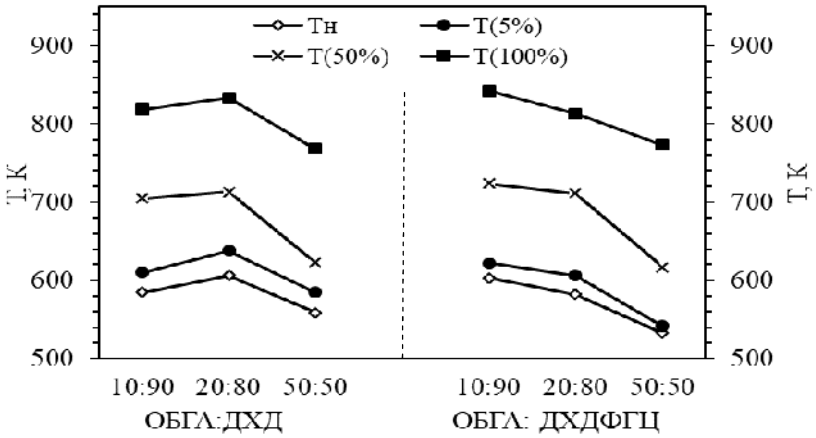


Рисунок 3 – Зависимости температур начала разложения $T_н$, потери 5, 50, 100 % массы от состава полимеров ОБГА-ДХД и ОБГА-ДХДФГЦ на воздухе

Исследование термоокислительной деструкции ТЭП на основе ОБГА показало, что температура начала потери массы у них выше, чем у полибутиленгликольадипината, но ниже, чем у полиарилатов. При этом термостойкость выше у тех ТЭП, которые содержат больше полиарилатных сегментов в своей макромолекуле.

Представляло практический интерес сравнение процессов термоокислительной деструкции и термодеструкции (в атмосфере инертного газа – гелия). Значения температуры разложения, потери 5, 50, а также 75 % массы в атмосфере гелия для полученных ТЭП приведены на *рисунке 4*.

Анализ результатов, представленных на *рисунках 3 и 4*, показывает, что термическая устойчивость синтезированных ТЭП выше в атмосфере воздуха, чем в инертной атмосфере (гелий). Такой факт можно объяснить, если предположить, что образующиеся под действием кислорода воздуха и повышенной температуры в ОБГА блоке активные радикалы, которые должны вызывать деструкцию полимера, частично ингибируются атомами хлора, содержащимися в макромолекуле. Таким образом затормаживается самый активный процесс деструкции полимера.

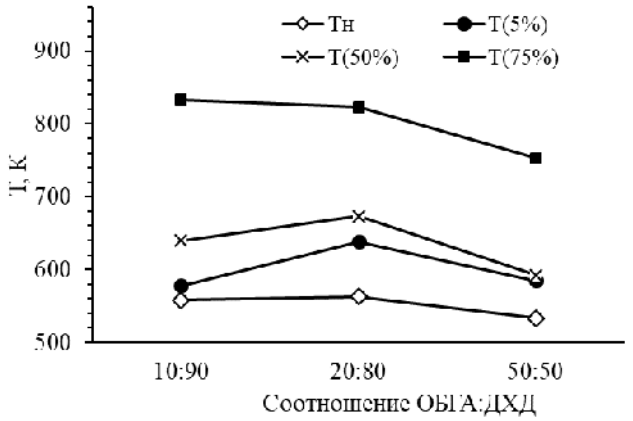


Рисунок 4 – Зависимости температур начала разложения $T_н$, потери 5, 50, 75 % массы от состава полимера ОБГА-ДХД в атмосфере инертного газа – гелия

Подобный эффект отмечался рядом авторов при исследовании различных полиэфиров [9, 10].

Вязкость расплава у ТЭП ниже, чем у соответствующих полиарилатов, что позволяет сделать более стабильной переработку литьем под давлением. Кроме того, содержание хлора в составе ТЭП позволяет отнести их к самозатухающим материалам, при этом огнестойкость последних (кислородный

индекс КИ) возрастает симбатно содержанию хлора в макромолекуле (КИ = 21-31). Для ТЭП на основе ДХД и ОБГА установлена корреляция между кислородным индексом и содержанием хлора (Х) в ТЭП:

$$КИ = 1{,}74X + 4{,}69.$$

Таким образом, представленные в настоящей работе синтезированные термореактопласты в целом являются достаточно термостойкими соединениями с пониженной горючестью, а их свойства можно изменять в широком интервале, регулируя содержание в них гибких и жестких блоков.

Библиография

1. Желтоложская Т.Б., Федорчук С.В., Сыромятников В.Т. Процессы получения линейных блок-сополимеров // Успехи химии. 2012. Т. 76, N 3. С. 784–820.

2. Ношей А., Мак-Грат Дж. Блок-сополимеры. М.: Мир, 1980. 480 с.

3. Шустов Г.Б., Шетов Р.А., Акталиева А.Г., Хакяшева Э.В., Машуков Н.И., Мирзоев Н.И., Кузамышев В.М. Поликонденсационные процессы и полимеры // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2017. Т. 7, N 2. С. 75–79.

4. Чекушкина Н.Г., Соколов Л.Б., Наумов В.С. Синтез и свойства жирноароматических блоксополимеров // Высокомолек. соед. А. 1982. Т. 24, N 1. С. 138–142.

5. Шустов Г.Б., Хаширова С.Ю., Кучменова Л.Х., Машуков Н.И. Неравновесная поликонденсация. Синтез олигоэфиров и блок-сополимеров: методические рекомендации по выполнению лабораторных работ. Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2018. 31 с.

6. Виноградова С.В., Васнев В.А. Поликонденсационные процессы и полимеры. М.: Наука, 2000. 373 с.

7. Виноградова С.В., Васнев В.А., Перфилов Ю.И., Коршак В.В. Об относительной реакционной способности некоторых типов диоксисоединений в низкотемпературной поликонденсации // Высокомолек. соед. Б. 1972. Т. 14, N 6. С. 457–462.

8. Васнев В.А., Виноградова С.В. Успехи в области акцепторно-каталити-ческой поликонденсации // Успехи химии. 1979. Т. 48, N 1. С. 3050.

9. Гавалян В.Б., Неделькин В.И., Журавлева И.В. О влиянии концевых атомов галогена на термические свойства поли-*п*-фениленсульфидов // Высокомолек. соед. Б. 1978. Т. 20, N 10. С. 768–771.

10.Гладышев Г.П., Ершов Ю.А., Шустова О.А. Стабилизация термостойких полимеров. М.: Химия, 1979. 272 с.

References

1. Zheltolozhskaya T.B., Fedorchuk S.V., Syromyatnikov V.T. Processes for obtaining linear block copolymers. *Uspekhi Khimii = Russian Chemical Reviews*. 2012;76(3):784–820. (In Russ.).

2. Noshey A., McGrath J. Block copolymers. Moscow: Mir; 1980. 480 p. (In Russ.).

3. Shustov G.B., Shetov R.A., Aktalieva A.G., Khakyasheva E.V., Mashukov N.I., Mirzoev N.I., Kuzamyshev V.M. Polycondensation processes and polymers. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo gosudarstvennogo universiteta = Proseeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2017;7(2):75–79. (In Russ.).

4. Chekushkina N.G., Sokolov L.B., Naumov V.S. Synthesis and properties of aliphatic-aromatic block copolymers. *Vysokomolekulyarnyye soyedineniya A = Polymer Science. Series A.* 1982;24(1):138–142. (In Russ.).

5. Shustov G.B., Khashirova S.Yu., Kuchmenova L.Kh., Mashukov N.I. Nonequilibrium polycondensation. Synthesis of oligoesters and block copolymers: methodological recommendations for performing laboratory work. Nalchik: Kabardino-Balkarian University; 2018. 31 p. (In Russ.).

6. Vinogradova S.V., Vasnev V.A. Polycondensation processes and polymers. Moscow: Nauka; 2000. 373 p. (In Russ.).

7. Vinogradova S.V., Vasnev V.A., Perfilov Yu.I., Korshak V.V. On the relative reactivity of some types of dihydroxy compounds in low-temperature polycondensation. *Vysokomolekulyarnyye soyedineniya B = Polymer Science. Series B*. 1972;14(6):457–462. (In Russ.).

8. Vasnev V.A., Vinogradova S.V. Advances in the field of acceptor-catalytic polycondensation. *Uspekhi khimii = Russian Chemical Reviews*. 1979;48(1):3050. (In Russ.).

9. Gavalyan V.B., Nedelkin V.I., Zhuravleva I.V. On the influence of terminal halogen atoms on the thermal properties of poly-p-phenylene sulfides. *Vysokomolekulyarnyye soyedineniya B = Polymer Science. Series B*. 1978;20(10):768–771. (In Russ.).

10. Gladyshev G.P., Ershov Yu.A., Shustova O.A. Stabilization of thermosetting polymers. Moscow: Khimiya; 1979. 272 p. (In Russ.).

© Шустов Г.Б., Машуков Н.И., Шетов Р.А., Балаева С.М., Хакяшева Э.В., 2026

Требования к оформлению научной статьи, представляемой в журнал «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета»

Для публикации в журнале «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета» принимаются статьи на русском или английском языках, содержащие результаты актуальных фундаментальных и прикладных исследований, передовых наукоемких технологий, научных и научно-методических работ.

1. Основные документы, необходимые для публикации

1.1. Один экземпляр статьи в бумажном виде и на электронном носителе отдельным файлом (на диске); на наклейке диска (дискеты) (обязательно!) указываются фамилия автора (авторов) и название статьи.

1.2. Полные сведения об авторе (авторах) на русском и английском языках в бумажном виде и в электронном варианте, оформленном отдельным от статьи файлом, который включает в себя следующие данные:

• фамилия, имя, отчество (полностью) каждого автора;

• место работы (наименование организации), ученая степень, ученое звание, должность каждого автора;

• контактные телефоны, почтовый индекс и адрес, адрес электронной почты (e-mail) каждого автора.

1.3. Сопроводительное письмо на бланке учреждения, где выполнена работа.

1.4. Внешняя рецензия доктора наук (по желанию).

1.5. Акт экспертизы о возможности опубликования в открытой печати – для физико-математических, химических, биологических, технических, экономических наук и науки о земле.

1.6. Справка об учебе в аспирантуре или докторантуре для аспирантов и докторантов.

1.7. «Лицензионный договор» (один на авторский коллектив) в 2-х экз. Без Договора статья не будет опубликована. Текст Договора размещен на сайте журнала «Известия КБГУ».

2. Правила оформления статьи

2.1. Объем статьи – в пределах 10 страниц формата А4, интервал – 1,5, размер шрифта Times New Roman Cyr 14 пт; поля страницы: слева – 3 см, справа – 1 см, сверху – 2,0 см, снизу – 2,5 см.

Краткие сообщения – в пределах 4 машинописных страниц, включающих не более 2 рисунков и 2 таблиц.

2.2. Статья должна включать:

• индекс УДК (универсальная десятичная классификация) в верхнем левом углу;

• название статьи (на русском и английском языках);

• фамилию, имя, отчество автора (авторов) (на русском и английском языках);

• реферат статьи (до 500 знаков) (на русском и английском языках);

• ключевые слова (5–7 слов на русском и английском языках);

• текст статьи, отражающий цель исследования, методы работы, собственно исследования, конкретные выводы;

• литературу (в библиографическом списке нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте; номер источника в тексте указывается в квадратных скобках – автоматическая нумерация ссылок не допускается);

• подпись автора (авторов).

2.3. Иллюстрации к статье (рисунки, фотографии) должны быть черно-белыми, четкими (разрешение не менее 300 dpi, расширение *jpg) и вставлены в текст. Обычный размер иллюстраций – не более половины листа А4. Формулы и символы помещаются в текст с использованием редактора формул Microsoft Education. Таблицы вставляются в текст; ссылки на рисунки и таблицы обязательны; названия таблиц и подрисуночных подписей обязательны.

2.4. Нумерация страниц обязательна.

2.5. Тип файла в электронном виде – RTF.

Образцы оформления литературы:

книга

Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 210 с.

Интегральные схемы: Принципы конструирования и производства / под ред. А.А. Колосова. М.: Сов. радио, 1989. 280 с.

статья из книги, сборника, журнала

Петренко В.И., Доготь А.Я. Пневмогидравлический кавитационный процесс // Геодинамические основы прогнозирования нефтегазоносности недр: тезисы докладов 1-й Всесоюзной конференции. М., 1988. Ч. 3. С. 616–617.

Хлынов В.А. Общегосударственное планирование рыночной экономики: Опыт Японии // Экономист. 1994. N 4. С. 89–94.

Базаров А.Ж. О некоторых нелокальных краевых задачах для модельных уравнений второго порядка // Известия вузов. Математика. 1990. Т. 2, N 3. С. 11–15.

диссертации и авторефераты диссертаций

Ерков С.А. Формирование художественного восприятия произведений изобразительного искусства на уроках изобразительного искусства в 5, 6 классах средней общеобразовательной школы: дисс... канд. пед. наук. М., 2006. 184 с.

Вахромов Е.Е. Психологические особенности самоактуализации подростков с отклоняющимся поведением: автореф. дисс… канд. психол. наук. М., 2003. 30 с.

патент

Патент РФ N 2102404. Способ получения полиэфиров / В.Н. Тамазина. Опубл. 20.01.1998 г. Бюлл. N 2.

электронный ресурс

Электронный ресурс: Чубыкин А. Российский рынок ПЭТ-пленок // Флексо Плюс. 2004. https://plastinfo.ru/information/news/19255_04.03.2013/

При оформлении иностранной литературы необходимо придерживаться тех же правил, что и для русскоязычных источников. Вместо символа «N» в английском языке ставится буква «N».

При формировании списка литературы необходимо указать не менее 2-х ссылок на статьи из журнала «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета».

При несоблюдении указанных правил редакция оставляет за собой право не публиковать статью.

3. Порядок рецензирования

3.1. Рукопись направляется на рецензирование ведущим специалистам в данной области (внешнее и внутреннее рецензирование).

3.2. Результаты рецензирования редакция сообщает автору по электронной почте.

3.2. По результатам рецензирования редколлегия принимает решение о целесообразности опубликования материала, о чем дополнительно сообщается автору.

4. Заявление о конфиденциальности

Имена и адреса электронной почты, введенные на сайте этого журнала, будут использованы исключительно для целей, обозначенных этим журналом, и не будут использованы для каких-либо других целей или предоставлены другим лицам и организациям.

Статьи представляются в редакционно-издательский отдел ИПЦ КБГУ.

Адрес ИПЦ КБГУ: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Контактный телефон: (8662) 72-23-13.

E-mail: rio@kbsu.ru, izvestia_kbsu@mail.ru. E-mail-адрес защищен от спам-ботов, для его просмотра у вас должен быть включен Javascript.

Ответственный секретарь редакционной коллегии – **Долбин Игорь Викторович.**

После положительного решения редколлегии о публикации статьи в журнале «Известия КБГУ» автор (или авторы) статьи перечисляет на р. сч. КБГУ плату из расчета 400 руб. (в т.ч. НДС) за страницу рукописи.

Назначение платежа: редакционно-издательские услуги («Известия КБГУ»), код дохода 07430201010010000130, разрешение N 0732069510 от 30.03.05 г. пункт 1. В стоимость входят расходы по доставке журнала по территории России. Автор (или авторы) статьи получает 2 экземпляра журнала бесплатно.

Для выкупа дополнительных номеров журнала необходимо передать в редакцию (ИПЦ КБГУ) письмо-заявку с указанием номера и количества экземпляров журнала и перечислить на р. сч. КБГУ плату из расчета 400 руб. (в т.ч. НДС) за один экземпляр журнала с назначением платежа: редакционно-издательские услуги (за журнал «Известия КБГУ»), код дохода 07430201010010000130, разрешение N 0732069510 от 30.03.05 г. пункт 1.

Реквизиты КБГУ для платежей:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова» (КБГУ)

Почтовый и юридический адрес:
360004, Кабардино-Балкарская Республика,
г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173
Телефон: 42-25-60,
Voice/fax: +7(495) 3379955
Телетайп: 257245 «Альфа»
E-mail: yka@kbsu.ru
ОКПО 02069510
ОКОНХ 92110
ОГРН 1020700739234 от 22.07.11 г.
ОКОГУ 13240
ОКАТО 83401000000
ОКЭВД 80.30.1
ОКОПФ 72
ОКФС 12

Банковские реквизиты:
Получатель:
ИНН 0711037537/ КПП 072501001
Отдел N 1 УФК по Кабардино-Балкарской Республике
(0401 КБГУ л/с 20046Х17540)
Банк получателя:
ГРКЦ НБ Кабардино-Балкарск. Респ. Банка России
г. Нальчика
БИК 048327001
Р/с 40501810100272000002
КБК 00000000000000000130

Копия платежного документа передается или высылается в редакцию журнала по электронной почте.

Стоимость журнала по подписке, согласно Каталогу «Пресса России», с учетом расходов по доставке журнала по территории России, составляет 450 руб. (в т.ч. НДС).

Копия платежного документа передается или высылается в редакцию журнала по электронной почте.

ИЗВЕСТИЯ КАБАРДИНО-БАЛКАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

PROCEEDINGS OF THE KABARDINO-BALKARIAN STATE UNIVERSITY

ТОМ XVI, № 3, 2026

Редактор ***Л.М. Хакулова***
Компьютерная верстка ***Е.Л. Шериевой***
Корректор ***М.А. Ахматова***

В печать 25.09.2026. Формат 60×84 $^{1}/_{8}$.
13,02 усл.п.л. 13,0 уч.-изд.л.
Дата выхода в свет 30.09.2026.

Адрес издателя: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173,
Кабардино-Балкарский государственный университет

Печать трафаретная. Бумага офсетная.
Тираж 1000 экз. Заказ № 1337.

Адрес типографии: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173,
Кабардино-Балкарский государственный университет.
Производственно-техническое управление. Полиграфический участок