

Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ  
СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОГО,  
ТЕРАГЕРЦОВОГО И ОПТИЧЕСКОГО  
ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ  
МИКРО- И НАНОСТРУКТУРАМИ,  
МЕТАМАТЕРИАЛАМИ И БИООБЪЕКТАМИ**

Сборник статей восьмой Всероссийской научной школы-семинара

Под редакцией профессора *Ал.В. Скрипаля*

Саратов 2021

УДК537.5  
ББК 32.85+22.3

**Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами: Сборник статей восьмой Всероссийской научной школы-семинара / под ред. проф. Ал.В. Скрипаля – Саратов: Изд-во «Саратовский источник», 2021. – 280 с.: ил.**

**ISBN 978-5-6046464-5-8**

Приведены результаты научных исследований по современным проблемам взаимодействия электромагнитного излучения сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического диапазонов с полупроводниковыми микро-, наноструктурами, метаматериалами и биообъектами и применению соответствующих физических эффектов в современной полупроводниковой микро- и наноэлектронике, в системах радиолокации, медицинской технике и устройствах неразрушающего контроля. Представлены разработки в области твердотельной электроники СВЧ, методов диагностики наноструктур и нанокompозитов, устройств на СВЧ фотонных кристаллах, измерителей наноперемещений, скоростей и ускорений.

Для специалистов и научных работников, занимающихся исследованиями в области физической электроники, радиофизики, твердотельной электроники, медицинской физики, аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

**Редакционная коллегия:**

*Ал.В. Скрипаль (отв. редактор), Пономарев Д.В. (отв. секретарь),  
В.М. Аникин, В.Н. Посадский, В.С. Тяжлов, Ан.В. Скрипаль*

УДК 537.5  
ББК 32.85+22.3

**ISBN 978-5-6046464-5-8**

©Коллектив авторов, 2021

## СОДЕРЖАНИЕ

<b><u>ВВЕДЕНИЕ</u></b> .....	8
60-ЛЕТИЮ ПЕРВОГО ПОЛЁТА ЧЕЛОВЕКА В КОСМОС.....	9
В. М. Аникин КОСМИЧЕСКИЕ СТРАНИЦЫ БИОГРАФИЙ ВЫПУСКНИКОВ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.....	9
<b><u>1 ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКА</u></b> .....	17
В.А. Быков, Ан.В. Быков, Ю.А.Бобров, В.В.Котов, С.И. Леесмент, В.В. Поляков СКАНИРУЮЩАЯ ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОМЕТРОВОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ – ОТ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ДО МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИАГНОСТИКИ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ.....	17
А.В. Джафаров, М.Г. Инкин, С.Ю. Добдин, А.В. Скрипаль НАНОПРОФИЛОМЕТРИЯ ПРИ ТОКОВОЙ МОДУЛЯЦИИ ЛАЗЕРНОГО АВТОДИНА.....	23
М.И. Шишкин, Ю.В. Никулин, А.Г. Роках ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИКРОКРИСТАЛЛИТОВ $InSb$ В ШИРОКОМ СПЕКТРАЛЬНОМ ДИАПАЗОНЕ.....	28
А.С.Дронкин, А.А.Семёнов МОДЕЛИ ТРОИЧНЫХ ЛОГИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В СХЕМОТЕХНИКЕ ПРОЦЕССОРОВ.....	31
К.А. Зыков, Р.А. Щипцов, И.В. Хайрушев, В.А.Кильдишева, И.С. Великанов, А.А. Андреев, Н.В. Короневский, Е.А. Рябов, Б.В. Сергеева УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ УСТРОЙСТВА ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ LORAWAN.....	36
М. В. Давидович, О. Е. Глухова, И. С. Нефедов, М. М. Слепченко ОСОБЕННОСТИ ОДНОМЕРНОГО РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА МНОГОЯМНЫХ БАРЬЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ.....	40
Д.А. Тимошенко, И.В. Синёв, В.В. Симаков, Н.А. Клычков ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ, ИНДУЦИРОВАННЫХ АДСОБИРОВАННЫМИ ЧАСТИЦАМИ КИСЛОРОДА И ПРОПАНОЛ-2, НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОВИСКЕРОВ ДИОКСИДА ОЛОВА.....	46
В.В.Шунаев, О.Е. Глухова ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ ВЫГОДНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОРАХ НАНОСЕТЧАТОГО ГРАФЕНА.....	50
Н. А. Клычков, Д.А. Тимошенко, И.В. Синёв, В.В. Симаков ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА К ПАРАМ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ.....	54
А.В.Козловский, Д.Р. Байбикова, С.В. Стецюра ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ СВЕТОАДРЕСУЕМЫХ БИОСЕНСОРОВ С СУБМИКРОННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ.....	59

Кааби Сабах Абед Дауд, Н.А. Дроздов, А.В. Скрипаль, В.Н. Гусятников ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ-ПОЛУПРОВОДНИКОВ $TiGaSe_2$ и $TlInS_2$ .....	63
С.В. Стецюра, П.Г. Харитонова МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПЛЕНОК $CdS$ , МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЖЕЛЕЗОМ.....	68
М.Д. Москвитин, Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова ИК СПЕКТРЫ И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ 2-БЕНЗИЛФЕНОЛА .....	72
М.В. Ветринцев, В. Ф. Кабанов, А.И. Михайлов АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК АНТИМОНИДА ИНДИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ COMSOL MULTIPHYSICS .....	76
Д.С. Финашкин, Л.М. Бабков СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ Н-КОМПЛЕКСОВ ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ. ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ.....	79
Л. М. Бабков, Н.А. Давыдова, И. В. Ивлиева (Перетоккина) ПРОЯВЛЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ, ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ И АНГАРМОНИЗМА КОЛЕБАНИЙ В ИК СПЕКТРАХ ТРИФЕНИЛФОСФИТА.....	84
И.О. Кожевников, А.И. Михайлов ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СТРУКТУР ПОЛУИЗОЛИРУЮЩЕГО АРСЕНИДА ГАЛЛИЛИЯ С ОМИЧЕСКИМИ КОНТАКТАМИ .....	88
Д.О. Кочнев, Д.П. Зайцев, М. Е. Селезнев, Д.В. Терин ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ СТРУКТУР ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ В ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ.....	92
<b><u>2 ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ</u></b> .....	97
А.Р. Насыбуллин, Т.М. Ишкаев, Р.Ф. Шакиров НЕПЛАНАРНЫЕ МИКРОПОЛОСКОВЫЕ ЛИНИИ КАК ОСНОВА БРЭГГОВСКИХ СВЧ- СТРУКТУР.....	97
А.Р. Насыбуллин, Р.В. Фархутдинов, Э.Н. Гайфуллин, В.А. Ефимов БРЭГГОВСКИЕ СВЧ-СТРУКТУРЫ В КОАКСИАЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ С ВНЕШНИМ ПРОВОДНИКОМ В ВИДЕ ПРОДОЛЬНЫХ СТЕРЖНЕЙ.....	102
Р.А. Эшпай, О.Г. Морозов, В.И. Артемьев, Л.М. Сарварова, А.А. Тяжелова ОПТОМЕХАНИКА ВОЛОКОННЫХ ДАТЧИКОВ ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОЛОЖЕНИЯ ПАЦИЕНТА В ИНВАЛИДНОЙ КОЛЯСКЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНО- ЧИРПИРОВАННЫХ РЕШЕТОК БРЭГГА .....	107
Р.А. Эшпай, В.И. Артемьев, А.А. Тяжелова, О.Г. Морозов, Л.М. Сарварова РАДИОФОТОННАЯ СИСТЕМА СБОРА ИНФОРМАЦИИ О ПОЛОЖЕНИИ ПАЦИЕНТА В ИНВАЛИДНОЙ КОЛЯСКЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНО-ЧИРПИРОВАННЫХ РЕШЕТОК БРЭГГА С ФАЗОВЫМ СДВИГОМ .....	112
А.В. Скрипаль, Д.В. Пономарев, М.А. Трифонова ФОТОННЫЕ ТАММОВСКИЕ РЕЗОНАНСЫ В СТРУКТУРЕ ОДНОМЕРНОЙ СВЧ ФОТОННОЙ КРИСТАЛЛ/ СЛОЙ ПОЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ .....	117
А.В. Скрипаль, Д.В. Пономарев, А.А. Комаров, В.Е. Шаронов ИССЛЕДОВАНИЕ ТАММОВСКИХ РЕЗОНАНСОВ В ОДНОМЕРНОМ СВЧ ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ БУФЕРНОГО СЛОЯ .....	121

<i>А.Э. Постельга, Ал.В. Скрипаль, С.В. Игонин, Е. П. Простак</i> ПРИМЕНЕНИЕ УПРАВЛЯЕМОГО МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА СВЧ-ДИАПАЗОНА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ СРЕД.	126
<b>3 МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ</b>	130
<i>А.А. Наумов, А.А. Захаров, И.Л. Пластун</i> АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КАПСУЛ С МИТОКСАНТРОНОМ В ХОДЕ ЕГО АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ.....	130
<i>А.А. Захаров, И.Л. Пластун, А.А. Наумов</i> РОЛЬ МЕТИЛЛИЗИНА В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА СЕРЕБРА МЕТОДОМ БАКТЕРИАЛЬНОГО СИНТЕЗА: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ .....	134
<i>Н.В. Короневский, Е.А. Рябов, Р.А. Щипцов, К.А. Зыков, В.А. Кильдишева, И.В. Хайрушев, А.А. Андреев, И.С. Великанов, Б.В. Сергеева</i> МЕТОДЫ СИНТЕЗА КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ.....	139
<i>Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л.</i> МЕТОДЫ СИНТЕЗА КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ_МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ ЦИНКА И МОЛЕКУЛЫ ФЛАГЕЛЛИНА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. ....	144
<i>Н.В. Булкина, О.Ю. Гусева, В.М. Моргунова, Е.Н. Полосухина</i> АНАЛИЗ ИЗМЕНЕНИЯ СВЕТОПРОНИЦАЕМОСТИ ТВЕРДЫХ ТКАНЕЙ ЗУБА НА ЭТАПЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОТБЕЛИВАНИЯ.....	148
<i>Н.В. Булкина, А.В. Зеленова, В.М. Моргунова, О.Ю. Гусева</i> ИЗМЕНЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРОВИ У БОЛЬНЫХ С БЫСТРОПРОГРЕССИРУЮЩИМ ПАРОДОНТИТОМ НА ФОНЕ ЛЕЧЕНИЯ ЭМИ ТГЦ- СПЕКТРА НА ЧАСТОТАХ МСИП НОВ СОСТАВЕ КОМПЛЕКСНОЙ ТЕРАПИИ.....	153
<i>В.А. Ханадеев, А.В. Симоненко, О.В. Гришин, Н.Г. Хлебцов</i> ФОТОМОДИФИКАЦИЯ ЗОЛОТЫХ И КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НАНОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРА ПРИ ДВИЖЕНИИ В КАПИЛЛЯРЕ.....	157
<i>И.В.Ивлиева (Перетокина), А.А. Мещерякова, Л.М. Бабков, В.В.Сорокин</i> ИК СПЕКТРЫ И СТРУКТУРА ХРОМЕНОПИРИДИНКАРБОНИТРИЛЬНЫХ СИСТЕМ ...	161
<i>Е.Н. Лазарева, И.Ю. Янина, Ю.В.Кистенев, В.В. Тучин</i> РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЬБУМИНА НА ВЫДЕЛЕННЫХ ДЛИНАХ ВОЛН ПРИ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ.....	166
<i>П.А.Дьяченко, Е.Н. Лазарева, А.Б.Бучарская, В.В. Тучин</i> ИССЛЕДОВАНИЕ СТЕПЕНИ ДЕГИДРАТАЦИИ КОЖИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЖИВОТНЫХ ПУТЕМ АНАЛИЗА СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОТРАЖЕНИЯ КОЖИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ РАСТВОРА ГЛИЦЕРИНА .....	171
<i>П.А.Дьяченко, А.Б.Бучарская, В.В. Тучин</i> АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ГИПЕРОСМОТИЧЕСКОГО АГЕНТА НА МИКРОЦИРКУЛЯЦИЮ КРОВИ В КОЖЕ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТИЯ ПАТОЛОГИИ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ СПЕКТЛ-КОНТРАСТНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ.....	175

Ю.И. Сурков, И.А. Серебрякова, А.Н. Башкатов, Э.А. Генина ОКТ-МОНИТОРИНГ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ КОЖИ ПРИ ОПТИЧЕСКОМ ПРОСВЕТЛЕНИИ EX VIVO.....	178
Н.С. Чикалкин, Д.К. Тучина, Н.А. Шушунова, А.П. Савицкий, А.А. Богданов мл., В. В. Тучин ВЛИЯНИЕ КОНТРАСТНЫХ ВЕЩЕСТВ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ МРТ И КТ, НА ОПТИЧЕСКИЕ И ВЕСОВЫЕ ПАРАМЕТРЫ КОЖИ IN VITRO.....	183
Е.И. Гераськин, А.П. Четвериков, А.С. Шигаев, В.Д. Лахно ЗАВИСИМОСТЬ ДЛИНЫ ТРАЕКТОРИИ БРИЗЕРА ОТ ЕГО ЭНЕРГИИ В ГЕТЕРОГЕННОЙ ДНК.....	188
А.П. Четвериков, Е.И. Казакова, В.Д. Лахно ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНА МЕЖДУ СТАЦИОНАРНОЙ И ДВИЖУЩЕЙСЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ ЯМАМИ В МОЛЕКУЛЕ ДНК.....	193
<b><u>4 ТВЕРДОТЕЛЬНАЯ СВЧ-ЭЛЕКТРОНИКА</u></b> .....	197
Н. А. Бабкина, А.П. Рытик, А.М Палагуца СПОСОБ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ИЗОТРОПНОМ ВОДНОМ РАСТВОРЕ ХЛОРОФИЛЛА.....	197
Д.С. Клюев, А.М. Нещерет, Ю.В. Соколова ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПОЛОСКОВЫХ ИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР С КИРАЛЬНЫМИ ПОДЛОЖКАМИ.....	203
Яфаров Р.К., Шабунин Н.О. НАНОУГЛЕРОДНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПОДАВЛЕНИЯ ЭМИССИИ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ КАТОДНО-СЕТОЧНЫХ УЗЛОВ МОЩНЫХ ЭВП СВЧ И СУБТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНОВ.....	208
В.Т.Ерофеев РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ЭКРАНИРОВАНИЯ ШИРОКОПОЛОСНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ СИГНАЛОВ МАГНИТОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ОДНОСЛОЙНЫМ ПЛОСКИМ ЭКРАНОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АТОМАРНЫХ ФУНКЦИЙ.....	214
С.Ю. Молчанов, Н.М. Ушаков, И.Д. Кособудский СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В МАТРИЦЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ.....	219
А.В. Богомолова, С.В. Гришин «ЛЕВЫЕ» СРЕДЫ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ.....	226
А.С. Бир, Д.В. Романенко, С.В. Гришин ГЕНЕРАЦИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ПРИ ТРЕХВОЛНОВЫХ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ.....	231
И.В.Матвеев, О.В.Осипов, Д.Н. Панин МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕОДНОРОДНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ВЛАЖНОЙ ПОЧВЫ С УЧЕТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ.....	237
О.В.Осипов, М.К. Троицкая МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСНОГО КИРАЛЬНОГО МЕТАМАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ 2-Х СОРТОВ МНОГОЗАХОДНЫХ ГАММАДИОНОВ.....	241

<i>Р.К. Яфаров, А.В. Сторублев</i> <i>ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ЭМИССИОННОЙ СПОСОБНОСТИ</i> <i>СИЛЬНОТОЧНЫХ ПОЛЕВЫХ АЛМАЗОГРАФИТОВЫХ КАТОДОВ.....</i>	246
<i>Туркин С.Д., Диканский Ю.И.</i> <i>ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН СВЧ-</i> <i>ДИАПАЗОНА С КОМПОЗИЦИОННЫМИ НАМАГНИЧИВАЮЩИМИСЯ СРЕДАМИ .....</i>	250
<i>М.А.Прасолова, В.И.Занин, В.Б. Феклистов</i> <i>ВОЛНОВОДНО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В РАСШИРЕНИИ</i> <i>ПРЯМОУГОЛЬНОГО ВОЛНОВОДА.....</i>	252
<i>Е.В.Баканов, В.И.Занин, В.Б. Феклистов</i> <i>ИССЛЕДОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЙ ВОЛНЫ ОСНОВНОГО ТИПА .....</i>	256
<i>М.Е. Селезнев, Ю.В. Никулин, В.К. Сахаров, Ю.В. Хивинцев, А.В.Кожевников, С.Л.</i> <i>Высоцкий, Ю.А. Филимонов</i> <i>ГЕНЕРАЦИЯ ЭДС ЗА СЧЕТ ВОЗБУЖДЕНИЯ СПИНОВЫХ ВОЛН В УСЛОВИЯХ</i> <i>СУЩЕСТВОВАНИЯ ДИПОЛЬНО-ОБМЕННЫХ И МАГНИТОУПРУГИХ РЕЗОНАНСОВ В</i> <i>СТРУКТУРЕ <math>RtYIG</math>.....</i>	261
<b><u>5 ТЕРАГЕРЦОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ</u>.....</b>	266
<i>М.Д. Амельченко, С.В. Гришин</i> <i>ГИРОМАГНИТНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ГИГАГЕРЦОВОГО И ТЕРАГЕРЦОВОГО</i> <i>ДИАПАЗОНОВ ЧАСТОТ .....</i>	266
<i>А.Р.Сафин, Д.В. Калябин, С.А. Никитов, А.И. Кирилюк</i> <i>ВЫПРЯМЛЕНИЕ СУБТЕРАГЕРЦОВЫХ КОЛЕБАНИЙ С ПОМОЩЬЮ</i> <i>ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК-ТЯЖЕЛЫЙ МЕТАЛЛ .....</i>	271
<i>А.А Петрунин, О.Е Глухова</i> <i>КВАНТОВЫЙ ОТКЛИК АТОМНОЙ СИСТЕМЫ КОЛОННОГО ГРАФЕНА НА ВНЕШНЕЕ</i> <i>ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ: ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ .....</i>	275

## **ВВЕДЕНИЕ**

Всероссийская научная школа-семинар «Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами» посвящена 60-летию первого полёта человека в космос и году науки и технологий в Российской Федерации.

В докладах восьмой школы-семинара представлены результаты перспективных разработок по направлениям исследования фотонных кристаллов и метаматериалов, полупроводниковой микро- и наноэлектронике, твердотельной СВЧ-электронике, терагерцовым технологиям, по проблемам взаимодействия электромагнитного излучения с медико-биологическими системами.

В 2021 году 146 участниками представлено 58 докладов из 12 городов России и других стран. Известные специалисты в области полупроводниковой, СВЧ-, микро-, нано- и оптоэлектроники представили лекции для молодых ученых, аспирантов и студентов по современным проблемам взаимодействия электромагнитного излучения с полупроводниковыми микро-, наноструктурами, метаматериалами и биообъектами, и применению соответствующих физических эффектов в современной полупроводниковой микро- и наноэлектронике, в системах радиолокации, медицинской технике и устройствах неразрушающего контроля.

## 60-ЛЕТИЮ ПЕРВОГО ПОЛЁТА ЧЕЛОВЕКА В КОСМОС

### КОСМИЧЕСКИЕ СТРАНИЦЫ БИОГРАФИЙ ВЫПУСКНИКОВ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

*В. М. Аникин*

Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н. Г. Чернышевского  
E-mail: AnikinVM@sgu.ru

Приводятся данные о выпускниках физического факультета Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, принимавших непосредственное участие в сфере космических исследований и разработок. Среди них – сотрудница Особого конструкторского бюро ОКБ-1 под руководством С. П. Королева Э. А. Лукьянова, космонавт-исследователь АН СССР О. П. Коломийцев, конструктор спутникового оборудования Ю. А. Скляр, инициатор радиоастрономических исследований Солнца А. В. Хохлов, выполнившие работы в области космического материаловедения Д. А. Усанов, Ал. В. Скрипаль и сотрудники кафедры физики твердого тела, сотрудники лаборатории астрономии и геофизики НИИ механики и физики СГУ.

**Ключевые слова:** Саратовский университет, физический факультет, НИИ механики и физики СГУ, космические разработки и исследования.

Основанный в 1945 г. Физический факультет Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского за 75 лет подготовил десятки тысяч специалистов по актуальным для своего времени направлениям физики и техники. Выпускники факультета составили, прежде всего, основной кадровый состав предприятий и исследовательских организаций Саратова, заслужившего титул «электронной столицы» страны. Кроме того, места распределения выпускников факультета на работу отличались широкой географией. И везде они находили успешное приложение своим знаниям, достигали производственных и научных высот, в частности, в области атомной промышленности, физики твердого тела, теоретической физики, оптики и лазерной физики, химической физики и т.д. (см. библиографию в [1–3]).

В год 60-летия первого пилотируемого космического полета, совершенного Ю. А. Гагариным, естественно вспомнить выпускников Саратовского университета, заслуживших признание в сфере деятельности по освоению и исследованию космического пространства.

#### **Проектирование баллистических ракет и космических аппаратов.**

*Эльвира Александровна Лукьянова (Арбузова)* проработала в космической отрасли около 60 лет. По ее биографии можно проследить вехи истории космических исследований в нашей стране. Родилась она 22

марта 1931 г. в пос. Ровное (бывш. Зельман) Саратовской области. В 1948–1953 годах училась на физическом факультете – I, на кафедре общей физики, специализировалась по теплофизике у заведующего лабораторией молекулярной физики Степана Ивановича Сорокина. По окончании СГУ получила распределение в Подмоскowie, в НИИ-88. В состав НИИ-88 входило конструкторское бюро ОКБ-1 (руководитель – Сергей Павлович Королев), преобразованное впоследствии в Центральное конструкторское бюро экспериментального машиностроения (ЦКБЭМ), затем – в НПО «Энергия» имени С. П. Королева, а в 1994 г. – в Ракетно-космическая корпорацию «Энергия» им. С.П. Королева (РКК «Энергия»). С августа 1953 г. Эльвира Александровна начала работать инженером-теплофизиком в 3-м отделе ОКБ-1, который был основным проектным отделом по ракетам-носителям и головным частям.

Э. А. Лукьянова принимала непосредственное участие в проектировании и экспериментальной отработке Первого искусственного спутника Земли (1957), космического корабля «Восток» (1961), головных частей баллистических ракет-носителей 8К11, 8К11ФМ, 8К51, 8К71.

Именно она рассчитывала теплозащиту спускаемого аппарата корабля «Восток» с первым космонавтом мира Юрием Алексеевичем Гагариным на борту. В то время она работала в отделе, руководимом В. Ф. Рошиным и А. Г. Решетиным. В целях обеспечения гарантированной безопасности полета были просчитаны два варианта теплообменных режимов – при ламинарном и турбулентном характере обтекании воздухом спускаемого аппарата. За творческий и грамотный подход к делу Э. А. Лукьянова и ее коллега А. А. Михеева получили похвалу лично от С. П. Королева: «Какие же вы у меня умницы!».



Э. А. Лукьянова на праздновании 10-летия со дня запуска первого ИСЗ, 1967

Эльвира Александровна занималась также проектированием и участвовала в стендовых и летно-конструкторских испытаниях ракеты-носителя Н1 (110 м, 2500 т, по «лунной» программе ЛЗ) и многоцветной космической транспортной системы (МТКС) «Энергия-Буран». В «послужном списке» Эльвиры Александровны – непосредственное участие в проектировании и в стендовых и летно-конструкторских испытаниях кислородно-водородных разгонных блоков С и СР, разгонных блоков ДМ (по 10 программам Л1, ЛЗ), ДМ-SL (по программе плавающего космодрома «Морской Старт» – «Sea Launch»), ДМ-SLB (по программе «Наземный Старт»).

За 60-летнюю работу в ОКБ-1 / ЦКБЭМ / НПО «Энергия» / РКК «Энергия» и личные достижения в развитии ракетно-космической техники

Эльвира Александровна Лукьянова награждена Орденом Дружбы, медалями «За трудовое отличие» и «За доблестный труд», Почетной грамотой Федерального космического агентства (Роскосмоса), удостоена званий «Ветеран труда», «Заслуженный специалист НПО «Энергия», занесена в Книгу почета РКК «Энергия».

Муж Эльвиры Александровны, *Лукьянов Нинель Александрович*, также является выпускником Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского: он в 1951 г. окончил кафедру газовой динамики, которой заведовал профессор С. В. Фалькович, и был направлен в НИИ-88. В 1956 г. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата технических наук.

В 1956 г. некоторые выпускники физического факультета–II были распределены в подмосковный НИИ-4 Министерства обороны СССР. Среди них были *Георгий Яковлевич Кузнецов* и *Александр Федорович Голубенцев (1933–2003)*, будущий профессор и заведующий кафедрой физического факультета Саратовского университета [4]. Постановлением Совета Министров СССР от 3 сентября 1956 года НИИ-4 был определён головной организацией по созданию командно-измерительного комплекса и баллистического обеспечения запусков искусственных спутников Земли (ИСЗ) [5]. Вскоре на базе института был создан первый ЦУП – центр управления полетами.

### **Космическое материаловедение.**

В 1980-х годах в СГУ был проведён комплекс НИР (ОКР) по разработке методов неразрушающего контроля эрозионностойкого покрытия на теплозащитном слое космического корабля многоразового использования «Буран» и информационно-измерительной системы для определения параметров собственной внешней атмосферы космических аппаратов. Научный руководитель работ – заслуженный деятель науки РФ, заслуженный изобретатель РФ, заведующий кафедрой физики твёрдого тела *Дмитрий Александрович Усанов (1943–2019)*, ответственный исполнитель работ – профессор кафедры физики твёрдого тела *Александр Владимирович Скрипаль*.



Дмитрий  
Александрович  
Усанов

Работы завершились разработкой СВЧ-измерителей для контроля толщины эрозионностойких покрытий, определения конденсированной и заряженной составляющих собственной внешней атмосферы космических аппаратов в стендовых и орбитальных условиях, контроля уровня вибрационных и деформационных нагрузок при испытаниях элементов контура охлаждения космических аппаратов.

Результаты работ были внедрены в головном разработчике корабля «Буран» – НПО «Молния» (г. Москва) и в НПО «Энергия» (г. Королев). За успешную деятельность Д. А. Усанову и А. В. Скрипалю были вручены нагрудные знаки «Изобретатель СССР».

### **Космонавт Академии наук СССР.**

Ординард Пантелеймонович Коломийцев (29.01.1933–16.07.2012) – один из немногих людей, прошедших подготовку к космическому полету как космонавт Академии наук СССР, человек уникальной биографии [6,7]. Он окончил физический факультет–II (радиофизический факультет) Саратовского университета вместе со своей женой Г. И. Рыжакиной в 1956 г. По распределению Коломийцевы были направлены в Научно-исследовательский институт земного магнетизма под Москвой (ныне Институт земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н. В. Пушкова РАН (г. Троицк). Здесь О. П. Коломийцев прошел путь от младшего научного сотрудника до доктора физико-математических наук, профессора, ученого секретаря ИЗМИРАН, главного научного сотрудника.

В первый же месяц своей работы О. П. Коломийцев был командирован в приполярный Салехард для установки станции ионосферных наблюдений. А вскоре О. П. и Г. И. Коломийцевы стали участниками программы Международного геофизического года, проводившегося с 1 июля 1957 г. по 31 декабря 1958 г., и последовавших затем антарктических экспедиций. В 1957–1963 гг. Ординард Пантелеймонович принял участие в трех антарктических экспедициях – третьей, пятой и восьмой общей продолжительностью 4 года и 4 месяца. Он зимовал на внутриконтинентальной станции «Восток», расположенной в центре материка на высоте 3500 метров, самой сложной по природным условиям из антарктических станций, где был отмечен рекорд отрицательных температур (минус 89,7 градуса). Оригинальные результаты *исследований ионосферы*, проведенных Коломийцевым на станции «Восток» – геомагнитном полюсе Земли, составили впоследствии содержание его кандидатской диссертации.

В мае 1967 г., после жесточайшего медицинского отбора (из 1000 претендентов его прошли 4 человека), О. П. Коломийцев был зачислен в отряд космонавтов Академии наук СССР. Этот отряд был создан для обеспечения, в частности, профессиональной работы в области *солнечно-земной физики* при осуществлении долговременных космических полетов. В Центре подготовки космонавтов для космических новобранцев читались лекции по ракетно-космической технике, проводились сложные тренировки.



О. П. Коломийцев перед прыжком с парашютом

Программа занятий мало чем уступала программе подготовки космонавтов «гагаринского отряда»: кресло Кориолиса, качели К. Л. Хилова, барокамера (в том числе с эффектом разгерметизации), термокамера, сурдокамера, катапульта, центрифуга, полеты на невесомость, прыжки с парашютом и многое другое.

У О. П. Коломийцева сложились дружеские отношения с Юрием Алексеевичем Гагариным, памяти которого и своей жены Галины Ильиничны он посвятил книгу «Антарктика – Космонавтика: Экстремальная тональность жизни» [6]. Как отмечал О. П. Коломийцев, годы обучения в СГУ (1951–1956) оказались для него бесценными, определили «суть и особенности» его жизни и навсегда остались в памяти как «лучшие годы молодости и возмужания, понимания жизни и своего места в ней».

### **Исследования ионосферы и околоземного космического пространства.**

По разным причинам космонавтам Академии наук не удалось осуществить космические полеты. О. П. Коломийцев в 1969 г. защитил кандидатскую диссертацию, а в 1994 г. стал доктором физико-математических наук после защиты диссертации «Расслоение верхней экваториальной ионосферы и его влияние на распространение дециметровых волн» (специальность геофизика). К числу своих «пионерских» работ О. П. Коломийцев относил [8]: исследование влияния секторной структуры межпланетного магнитного поля на электронную концентрацию верхней ионосферы Земли в планетарном масштабе; использование экспериментальных данных поглощения коротковолнового излучения Солнца в верхней атмосфере по измерениям с борта искусственного спутника Земли (ИСЗ) в расчетах концентрации составляющих нейтральной атмосферы; исследования неоднородных долгоживущих крупномасштабных образований в ионосферной плазме с пониженной электронной концентрацией – ионосферных дыр, их диагностика (аэрономический и радиофизический аспекты); изучение

проблемы влияния солнечной активности на вариации плотности верхней атмосферы Земли. Поработал О. П. Коломийцев в 2001 г. и в Центре управления полетами, когда решалась сложная задача завершения орбитального полета пилотируемого комплекса «Мир».

В 1957 г. в СГУ была организована **Станция наблюдения искусственных спутников Земли** (№ 1044) [9]. Её возглавил *Павел Васильевич Вьюшков* (1900–1969), выпускник и сотрудник университета с 1921 г., долгие годы проработавший на кафедре астрономии, её заведующий в 1930–1954 гг. [10]. П. В. Вьюшкову принадлежит идея оригинального измерителя солнечной энергии (пиргелиометра), которая нашла практическое воплощение. В 1969 г. начальником станции наблюдения ИСЗ стал *Юрий Андреевич Скляр* (1931–2014), ученик П. В. Вьюшкова, с отличием окончивший физический факультет в 1953 г. по специальности астрономия.

Со временем станция наблюдения ИСЗ была преобразована в лабораторию астрономии и геофизики НИИ механики и физики СГУ, в число сотрудников которой входили, в частности, *Михаил Борисович Богданов*, *Юрий Иванович Бричков* (1946–2008), *Леонид Николаевич Бердников*, *Артур Вениаминович Хохлов*.

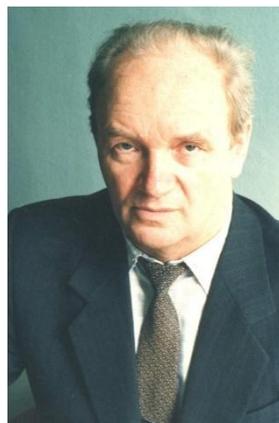
Под руководством Ю. А. Склярова развернулись астрометрические, астрофизические и геофизические исследования, работы в области пиргелиометрии и актинометрии.

Проводилось конструирование измерительной аппаратуры для исследования солнечной радиации и радиационного баланса Земли: в 1980-х годах на одном из спутников серии «Космос» работал «склярковский» измеритель солнечной постоянной (ИСП); в 1990-е годы на спутниках «Метеор-2», «Ресурс-01» № 4 были установлены радиометры – измерители коротковолновой отраженной радиации ИКОР; на запущенных в сентябре 2009 г. и в июле 2014 г. ИСЗ «Метеор-М» №1 и № 2 в состав аппаратуры гелиогеофизического комплекса вошли модифицированные радиометры – измерители коротковолновой отраженной радиации ИКОР-М [11, 12].

С 1974 г. по инициативе *Артура Вениаминовича Хохлова*, будущего профессора кафедры радиофизики, при поддержке Ю. А. Склярова началась разработка радиофизических методов *исследования солнечной активности*. Радионаблюдения Солнца проводились с 1979 г. на базе созданной оригинальной аппаратуры и оригинального метода, обеспечивающих автоматическое наведение антенн малых



Павел Васильевич  
Вьюшков



Юрий Андреевич  
Скляр

радиотелескопов на Солнце. А. В. Хохловым был разработан оригинальный дифференциально-коммутиционный метод радиополяриметрии, отличающийся высокой точностью, что позволяло получать ежедневные ряды значений характеристик солнечного радиоизлучения, выявить его многочисленные всплески, соотнести полученные данные с физическими процессами, происходящими на Солнце и в околоземном космическом пространстве [13].



Коллектив лаборатории астрономии и геофизики НИИ механики и физики СГУ, 1977 г.

### **Лицензия Роскосмоса.**

В 2007 г. Саратовский университет получил лицензию Федерального космического агентства (№ 622К от 19 марта 2007 г.) на право осуществления космической деятельности в течение 5 лет.

### **Библиографический список**

1. *Аникин В. М.* «Бифуркационная летопись» физико-математического факультета Саратовского университета. 1917–1945 // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2018. Т. 26, № 6. С. 5–19. DOI : 10.18500/0869-6632-2018-26-6-5-19
2. *Усанов Д.А., Аникин В.М.* Саратовские научные и педагогические школы по физике (к 80-летию образования Саратовской области) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2016. Т. 16, вып. 3. С. 178-190. DOI: 10.18500/1817-3020-2016-3-178-190.
3. *Аникин В.М.* Послесловие к юбилею физического факультета СГУ // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 248-252. DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-4-248-252
4. *Аникин В. М.* Александр Федорович Голубенцев. Эскиз к портрету // Вопросы прикладной физики: межвузовский науч. сб. 2004. Вып. 11. Памяти А. Ф. Голубенцева / под ред. Ю.В. Гуляева, Н. И. Синицына, В. М. Аникина. С. 6 – 14.

5. Роль НИИ-4 / ЦНИИ-50 / ЦНИИ-4 в подготовке и обеспечении запусков первых спутников, лунников и пилотируемых полётов. URL : [https://www.kik-sssr.ru/0.6\\_НИИ-4\\_Moscow.htm](https://www.kik-sssr.ru/0.6_НИИ-4_Moscow.htm) (дата обращения 30.04.2021).
6. *Коломийцев О. П.* Антарктика – Космонавтика: Экстремальная тональность жизни. Троицк: изд-во «Тривант», 2011. 96 с.
7. *Аникин В. М.* Ординард Пантелеймонович Коломийцев // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2011, вып. 2. С. 79-81.
8. *Коломийцев О. П.* 55 лет в науке // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2011, вып. 2. С. 82–85.
9. *Скляр Ю. А., Бричков Ю. И.* Астрономические и геофизические исследования в СГУ // Изв. Саратов. ун-та, 2002. Т. 2, вып. 2. С. 27–32.
10. *Аникин В. М.* Профессор астрономии Саратовского университета Иосиф Фёдорович Полак (1881 – 1954) // // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2020. Т. 20, вып. 2. С. 144–159. DOI : 10.18500/1817-3020-2020-20-2-144-159
11. *Богданов М. Б., Полянская Е. А.* Памяти профессора Ю. А. Склярова (1931–2014) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер. Науки о Земле. 2015. Т. 15, вып. 1. С. 80– 88.
12. Так сошлись звёзды... 90 лет со дня рождения Юрия Андреевича Склярова. URL : <https://www.sgu.ru/news/2021-01-27/tak-soshlis-zvyozdy-90-let-so-dnya-rozhdeniya-yuriya> (дата обращения 30.04.2021).
13. *Хохлов А. В.* Становление и развитие солнечной радиоастрономии в Саратове // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2019. Т. 19, вып. 3. С. 223–236. DOI: 10.18500/1817-3020-2019-19-3-223-236

# 1 ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

## СКАНИРУЮЩАЯ ЗОНДОВАЯ МИКРОСКОПИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ НАНОМЕТРОВОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ – ОТ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ДО МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИАГНОСТИКИ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

*В.А. Быков<sup>1,2</sup>, Ан.В. Быков<sup>1</sup>, Ю.А.Бобров<sup>1</sup>, В.В.Котов<sup>1</sup>, С.И. Леесмент<sup>1</sup>,  
В.В. Поляков<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>НТ-МДТ Спектрум Инструментс, г. Москва

<sup>2</sup>ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный  
исследовательский университет)»

E-mail: vbykov@ntmdt-si.com

Изложены современные возможности сканирующих зондовых микроскопов для исследования свойств и метрологического контроля поверхностей и наноструктур, в том числе, изделий микро и нанoeлектроники и наноструктур, для диагностики и изучения свойств живых клеток и вирусов, для медицинской диагностики.

**Ключевые слова:** сканирующий зондовый микроскоп, СЗМ, СТМ, АСМ, комбинационное рассеяние, Рамановская спектроскопия, Рамановская микроскопия сверхвысокого разрешения, ближнепольная оптическая микроскопия (БОМ), безапертурная сканирующая зондовая микроскопия ближнего поля, кантилевер, нанотехнология, метрология, нанометрология, нанoeлектроника, медицина, диагностика, онкология, вирусы.

### Введение

К настоящему времени сканирующая зондовая микроскопия вошла в состав классических методов исследования наноструктур и широко используется для качественной оценки физико-химических, геометрических, электрических, магнитных параметров поверхностей, биологических объектов, в том числе, живых клеток и их реакцию на состав и параметры окружающей среды.

Интерес к методам СЗМ обусловлен тем, что кроме топографии высокого пространственного разрешения, сканирующие зондовые микроскопы позволяют измерять целый ряд физических свойств поверхностных структур:

распределение сил трения между зондом и поверхностью в процессе сканирования; распределение поверхностного электрического потенциала (Кельвин-мода);

распределение поверхностной проводимости; распределение электрической емкости системы зонд-поверхность  $C(x,y)$ , а также  $dC/dz$ ,  $dC/dV$ ;

распределение магнитных сил в системе зонд с заданной намагниченностью – поверхность;

распределение пьезоэлектрических свойств; распределение теплопроводности;

распределение механических свойств (модуля Юнга, твердости);

распределение адгезионных свойств;

исследовать электрические свойства поверхностей, плотность поверхностных состояний;

исследовать строение и свойства приповерхностных двойных слоев на границе – изучаемый объект, адсорбированный на твердой подложке – проводящая жидкость;

изучать и диагностировать живые клетки и образцы тканей, изучать взаимодействия вирусов и лекарственных препаратов с клетками конкретного организма;

изучать с разрешением, значительно превышающим дифракционный предел оптические свойства поверхностей, проводить исследования в режимах Рамановской, инфракрасной, терагерцовой спектроскопии поверхностей с пространственным разрешением до 10 нм;

методами безапертурной БОМ регистрировать и идентифицировать поверхностные функциональные группы;

производить модификацию поверхности, замещать химические функциональные группы в режимах СЗМ литографии.

Для реализации этих возможностей интенсивно развиваются т.н. комбинированные методы, позволяющие одновременно работать в режимах атомно силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния (Рамановскую), люминесцентной спектроскопии, безапертурной ближнепольной микроскопии с возможностью визуализации распределение модулированного вибрирующим зондом рассеянного излучения в видимом, ИК и терагерцовом диапазонах длин волн с разрешением до 10 нм.

В результате интенсивного развития микроэлектроники появились новые, мощные микропроцессоры, программируемые логические интегральные схемы, появляются схемы адаптивной логики, позволяющие создавать приборы с элементами искусственного интеллекта, что существенно снижает требования к уровню пользователя приборов. Уже в настоящее время в функциях приборов введена возможность быстрого,

автоматического подбора параметров сканирования в «Теплинг» моде, что делает атомно-силовые микроскопы нашей компании доступными для технологов, материаловедов и, даже, школьников, дает возможность получать высококачественное изображение топографии поверхности.

Появившаяся новая элементная база позволила сделать контроллеры, обеспечивающие скорость сканирования до 20 Гц, а на частотах сканирования 2 Гц на строку регистрировать силовые кривые из 3000 измерений в каждой точке. Реализация этой возможности и позволила реализовать режим сканирующей зондовой спектроскопии – HybriD™ mode – Прыжковая АСМ, что позволило одновременно, за одно сканирование измерять: рельеф поверхности в режимах притяжения и отталкивания; модуль Юнга; адгезию и работу адгезии; проводимость; латеральный и вертикальный пьезоотклик; распределение температуры и теплопроводности; термоэлектрические свойства; электростатические свойства: потенциал поверхности, работу выхода, диэлектрическую проницаемость и т.д.

Дальнейшее развитие HybriD™ mode позволило создать новые, очень информативно-емкие методы, позволяющие измерять пьезоэлектрические свойства материалов. В этом режиме в процессе измерения силовой кривой в нужный момент между зондом и образцом подается переменный электрический сигнал заданной амплитуды и частоты, что позволяет исследовать пьезоэлектрические материалы. Поскольку зонд АСМ отводится от поверхности в каждой точке сканирования, сила латерального взаимодействия зонда и образца значительно уменьшается по сравнению с обычным контактным методом.

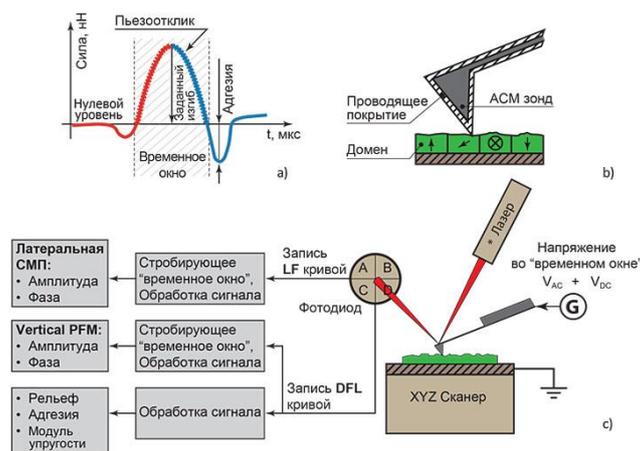


Рисунок. 1. «Прыжковая» АСМ пьезоотклика

Дальнейшее развитие HybriD™ mode позволило создать новые, очень информативно-емкие методы, позволяющие измерять пьезоэлектрические свойства материалов (Рис.1). В этом режиме в

процессе измерения силовой кривой в нужный момент между зондом и образцом подается переменный электрический сигнал заданной амплитуды и частоты, что позволяет исследовать пьезоэлектрические материалы. Поскольку зонд АСМ отводится от поверхности в каждой точке сканирования, сила латерального взаимодействия зонда и образца значительно уменьшается по сравнению с обычным контактным методом.

Это дает новые возможности для исследований пьезоотклика мягких, плохо закрепленных и хрупких объектов, таких как биологические образцы, наночастицы и т.д.

Кроме того, становится возможным использование зонда АСМ с более высокой жесткостью и резонансной частотой. Благодаря этому была реализована возможность двухпроходных резонансных электростатических измерений: Кельвин-зондовая Силовая Микроскопия или Электростатическая Силовая Микроскопия могут использоваться одновременно с измерениями рельефа, адгезии, модуля упругости и исследованиями пьезоотклика.

### **Капиллярная микроскопия**

Еще в 1989 году американским физиком, профессором Паулем Хансма было предложено при исследованиях поверхностей в растворах электролита в качестве зонда использовать капилляр с внутренним электродом. Измеряется ионный ток между электродом, помещенным внутрь капилляра с изолирующими стенками и электродом в растворе электролита.

При этом ионы – переносчики тока, проходят только через кончик капилляра (материалом капилляра является диэлектрик, как правило, стекло) диаметр которого может быть до единиц нанометров. При приближении к исследуемой поверхности ионный ток начинает изменяться. Сканирование производится в плоскости образца с использованием системы обратной связи при помощи 3-х координатного сканера с поддержанием изменения тока на заданном уровне (как правило изменение тока составляет доли процента, а сам ток порядка пикоампера). Электроды могут быть, как правило, хлорсеребряные или платиновые. В настоящее время работы по капиллярной микроскопии получили серьезное развитие благодаря работам группы специалистов под руководством проф. Ю. Е. Корчева. Капиллярная микроскопия становится мощным методом исследования, позволяющим работать, в том числе, с «живыми» объектами и при этом влиять на них.

К настоящему времени при поддержке фонда содействия инновациям разработана система NTEGRA Marlin (<https://www.ntmdt-si.ru/products/features/ntegra-marlin>).

В настоящее время разработана методика быстрого и надежного изготовления капиллярных систем для СМИП с диаметром выходного отверстия 10 – 20 нм, что позволяет с высоким разрешением проводить измерения.

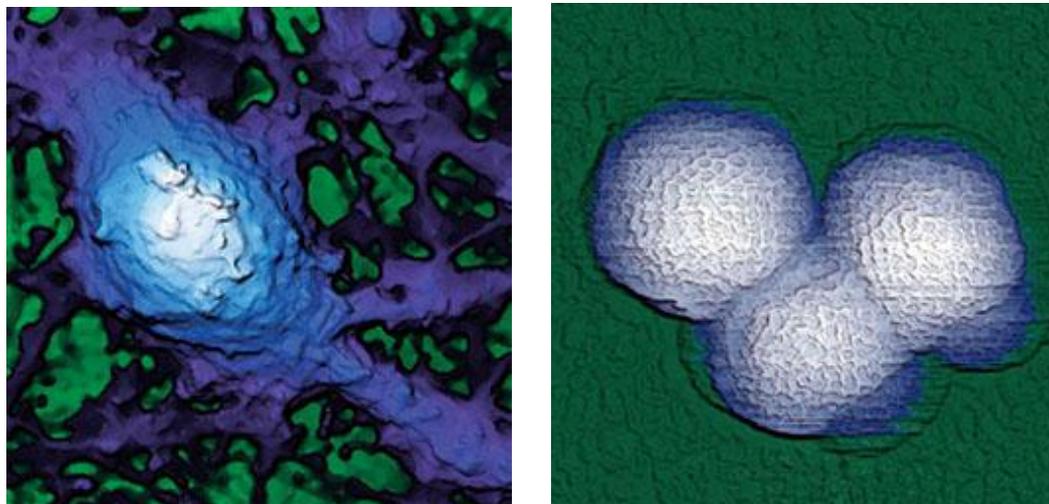


Рис.2. РСМИП изображения нейрона из гиппокампа мыши (10x10x6,3мкм) и изображение рельефа риновируса (200x200x100нм), полученных методами капиллярной микроскопии ( <https://www.ntmdt-si.ru/products/features/ntegra-marlin>).

Комбинация СМИП и Hybrid™ метода АСМ расширяет область применимости количественного наномеханического картирования модуля упругости в реальном времени до 10 порядков (от единиц Па до десятков ГПа), сохраняя возможность проведения экспериментов с использованием одноточечной силовой спектроскопии. Слабое или неинвазивное взаимодействие острия зонда с образцом позволяет исследовать мягкие биологические и гелеобразные образцы, в т.ч. слабо прикрепленные к субстрату.

### **Сканирующая многофункциональная спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская) в комбинации с АСМ.**

Представляет исключительный интерес интегрировать АСМ и методы спектроскопии. Для реализации этой идеи с конца 90-х годов нашей группой компаний были предприняты разработки соответствующих систем – были созданы приборы линии СЗМ СПЕКТРА, включающие как атомно-силовую, так и сканирующую Рамановскую и люминесцентную спектроскопию. Разработка зондов со специальными покрытиями, способными концентрировать оптические плазмоны, позволило создать приборы на основе эффекта гигантского усиления Рамановского рассеяния – создать методы Tip Enhanced Raman Scatterings (TERS).

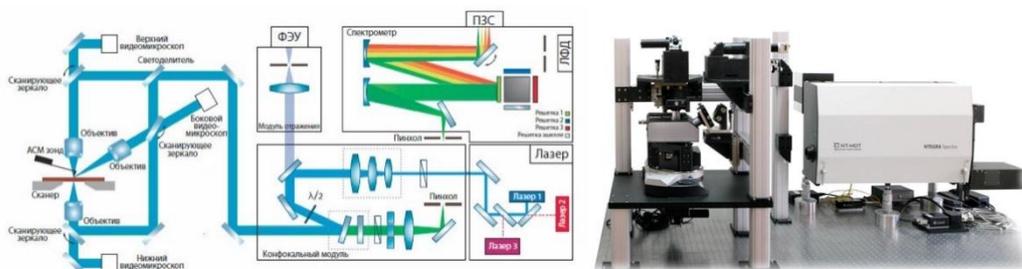


Рис.4. Схема и фотография системы СЗМ СПЕКТРА II разработки и производства НТ-МДТ Спектрум Инструментс

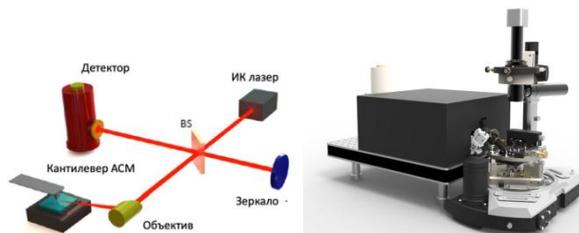


Рис.5. Схема и фотография системы ИТРЕГРА ИК разработки и производства НТ-МДТ Спектрум Инструментс

## Выводы

Можно уверенно констатировать, что к настоящему времени в России выполнены разработки и организовано производство практически полного, за исключением сверхвысоковакуумных СЗМ, комплекса приборов и методов для исследования микро и наноструктур с использованием сканирующих зондовых микроскопов. Для лабораторий – созданы приборы линии ИНТЕГРА, для системы образования в школах и колледжах - бюджетные, но достаточно мощные НАНОЭДЬЮКАТОРЫ и СОЛВЕР-НАНО (<https://www.ntmdt-si.ru/products>), а для исследовательских работ – приборы кратко описанные в настоящей статье. Следует отметить, что развитие нанoeлектроники, создание новой элементной базы дают возможность дальнейшего совершенствования приборов, все более и более внедрять системы искусственного интеллекта в программное обеспечение с раскрытием возможностей развивающейся элементной базы контроллеров срок морального старения которых сегодня составляет около 5 лет.

К настоящему времени более 4000 систем разработки и производства компании успешно работают в более, чем 60 странах по всему миру (<https://www.ntmdt-si.ru/about>). Специфика бизнеса делает необходимым постоянно разрабатывать и создавать системы с новыми возможностями, что и делает этот бизнес тесно связанным с университетами и исследовательскими центрами по всему миру.

## НАНОПРОФИЛОМЕТРИЯ ПРИ ТОКОВОЙ МОДУЛЯЦИИ ЛАЗЕРНОГО АВТОДИНА

*А.В. Джафаров, М.Г. Инкин, С.Ю. Добдин, А.В. Скрипаль*  
Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: [skripalav@info.sgu.ru](mailto:skripalav@info.sgu.ru)

В работе анализируется автодинный метод измерения рельефа поверхности при частотной модуляции лазерного автодина. Рассматривается случай учета изменения фазы во внешнем резонаторе лазерного автодина и спектрального представления автодинного сигнала. Показано, что на расстояниях от активной среды лазерного автодина до отражающей поверхности, на которых выполняется условие равенства целого количества полуволен длине внешнего резонатора как на нижней, так и верхней границах диапазона девиации длины волны лазерного диода, наблюдается линейная зависимость амплитуд спектральных составляющих от величины наносмещений поверхности. Компьютерное моделирование показало, что, задавая погрешность измерения амплитуд спектральных составляющих равную 10%, максимальная точность измерения наносмещений в этом случае не хуже 10 нм.

**Ключевые слова:** лазерный автодин, лазерная интерферометрия, полупроводниковый лазер, частотная модуляция, нанопрофилометрия, спектральный анализ.

Измерения величин наносмещений и высот неровностей поверхности в нанодиапазоне актуально для различных областей применения лазерных автодинов: измерение напряжений в кремниевых транзисторах последнего поколения [1], фазовая интерферометрическая визуализация частиц и изменений их размеров в наноразмерном масштабе [2], наноразмерная топография и измерение изменяющейся во времени фазовой задержки жидкокристаллических ячеек [3], контроль процессов изготовления полупроводников в реальном времени с нанометровым разрешением [4].

В настоящее время актуально развитие зондовых лазерных профилометров с точки зрения возможности их совмещения с СВЧ зондовыми методами, которые оказываются чувствительными не только к высотным размерам профиля поверхности, но и неоднородностям материала и его внутренней структуры. В работах [5,6] показано, что такое совмещение может быть реализовано частотной модуляцией сигнала лазерного диода по гармоническому закону.

Более перспективным является метод частотной модуляции сигнала лазерного автодина по треугольному закону, в спектре которого частота интерференционного сигнала [7] пропорциональна расстоянию до отражающей поверхности.

В работе рассматривается возможность достижения нанометровой точности измерения высот рельефа поверхности по прямым измерениям амплитуд спектральных составляющих автодинного сигнала при модуляции тока питания лазерного диода по треугольному закону.

## Расчет спектра автодинного сигнала

Выражение для автодинного сигнала при модуляции тока питания лазерного диода может быть представлено в виде [8]:

$$P(j(t)) = P_1(j(t)) + P_2 \cos(\omega(j(t))\tau) \quad (1)$$

где  $P_1(j(t))$  – составляющая мощности, независимая от фазы лазерного излучения,  $P_2$  – амплитуда интерференционных осцилляций автодинного сигнала,  $\tau$  – время обхода лазерным излучением внешнего резонатора, образованного областью между активной средой лазерного автодина и отражающей поверхностью,  $\omega(j(t))$  – мгновенная циклическая частота излучения полупроводникового лазера, зависящая от плотности тока накачки  $j(t)$ .

В автодинном сигнале можно выделить следующую нормированную величину, зависящую только от фазы автодинного сигнала:

$$p = \cos(\theta), \quad (2)$$

где  $\theta = \omega(j(t))\tau$  – фаза автодинного сигнала. При модуляции тока питания лазера  $j(t)$ , во внешнем резонаторе автодина могут выполняться условия равенства целого количества полуволен длине внешнего резонатора лазерного диода, совпадающей с расстоянием от активной среды лазерного автодина до отражающей поверхности. Как было показано ранее существуют так называемые равнофазные расстояния, точность измерения в которых имеет максимальную величину [9]. Эти расстояния соответствуют условиям равенства количества полуволен – длине внешнего резонатора и определяются соотношением

$$L = \frac{\lambda^2}{4\Delta\lambda} \cdot n \quad (3)$$

где  $\Delta\lambda$  – девиации длины волны лазера,  $n$  – количество интерференционных максимумов на величине девиации.

Расчет автодинного сигнала и его спектра проводился при треугольной форме изменения  $P_1(j(t))$  составляющей мощности лазерного автодина и  $\omega(j(t))$  частоты излучения полупроводникового лазера, а также следующих параметрах: длина волны лазерного излучения  $\lambda = 650$  нм, девиация частоты излучения полупроводникового лазерного диода  $\Delta\lambda = 0.07$  нм.

При  $n = 32$  соотношение (7) дает для равнофазного расстояния следующую величину  $L = 48.3$  мм. При частоте модуляции лазера  $f = 170$  Гц на рис.1. приведены спектры автодинного сигнала на равнофазном расстоянии (7) при различных фазах  $\delta\theta$ , где  $\delta\theta$  – фаза из основного интервала изменения фаз автодинного сигнала  $\theta$ :

$$\theta = 2\pi m + \delta\theta, \text{ при } m = 0,1,2,3,\dots$$

При фазе  $\delta\theta=0$  в спектре автодинного сигнала (рис.1 *a*) наблюдается интерференционная спектральная составляющая  $S_0$ , частота которой соответствует частоте изменения интерференционных осцилляций автодинного сигнала. При фазах  $\delta\theta = 0.2\pi$  и  $\delta\theta = 0.4\pi$  в спектре (рис.1 *b,c*) появляются спутники интерференционной составляющей спектра автодинного сигнала, что обусловлено свойствами фурье-спектра при изменении начальной фазы автодинного сигнала.

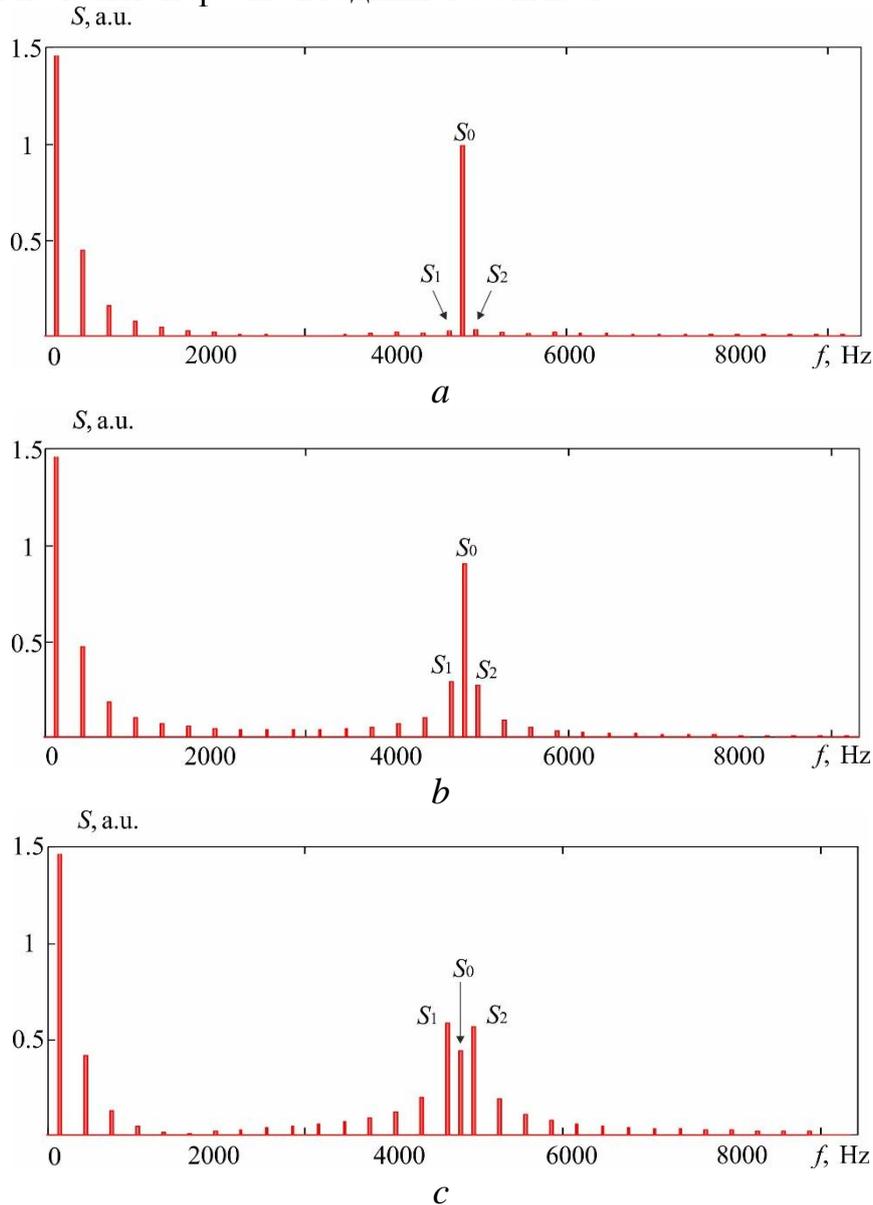


Рисунок 1. Спектры автодинного сигнала на равнофазном расстоянии при различных фазах  $\delta\theta$ : *a* –  $\delta\theta = 0$ , *b* –  $\delta\theta = 0.2\pi$ , *c* –  $\delta\theta = 0.4\pi$

Зависимость амплитуд спектральных составляющих  $S_0$ ,  $S_1$ ,  $S_2$  от фазы автодинного сигнала  $\delta\theta$  представлена на рис. 2. Как видно из рис.2, наблюдается нелинейная зависимость этих амплитуд от фазы автодинного сигнала.

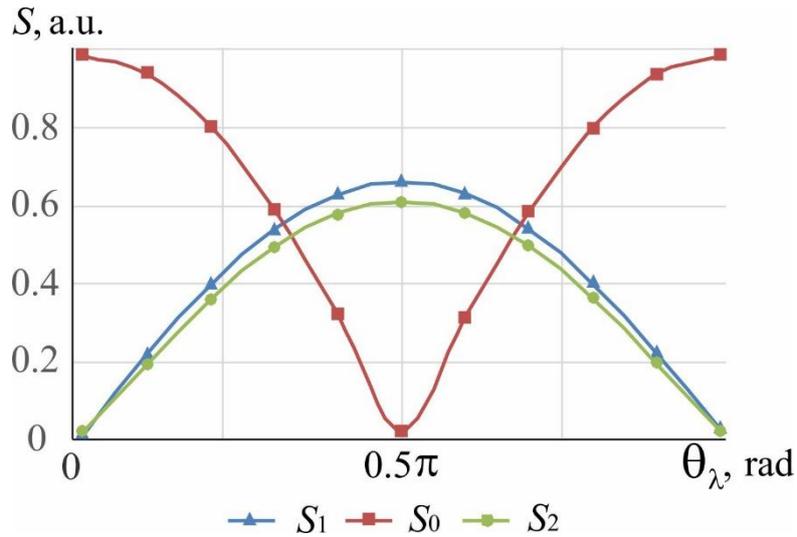


Рисунок 2. Зависимость амплитуд спектральных составляющих  $S_0$ ,  $S_1$ ,  $S_2$  от фазы  $\delta\theta$

На рис. 3 приведена зависимость разности спектральных составляющих  $S_0 - (S_1 + S_2)/2$  от фазы  $\delta\theta$ .

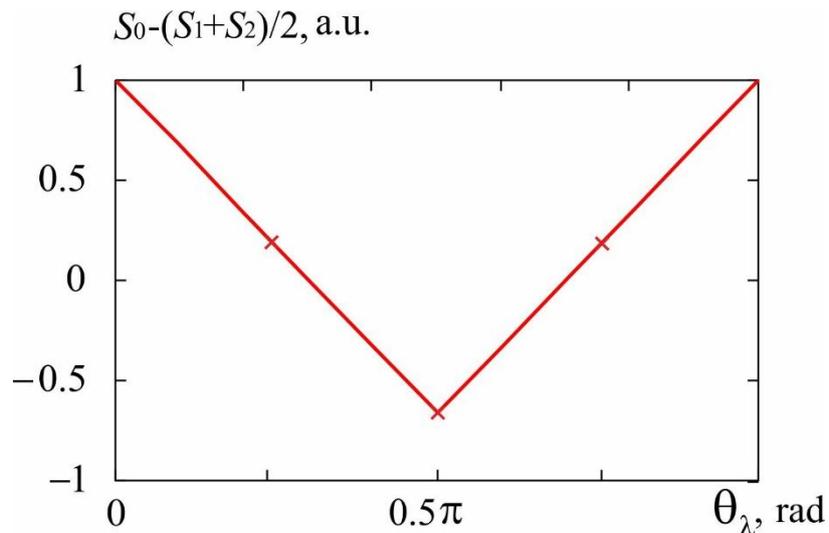


Рисунок 3. Зависимость разности спектральных составляющих  $S_0 - (S_1 + S_2)/2$  от фазы  $\delta\theta$

Как следует из рис. 3, разность амплитуд спектральных составляющих  $S_0 - (S_1 + S_2)/2$  линейно зависит от фазы автодинного сигнала и, следовательно, от расстояния до отражающей поверхности. Компьютерное моделирование показало, что, задавая погрешность измерения амплитуд спектральных составляющих равную 10%, максимальная точность измерения наносмещений в этом случае не хуже 10 нм.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-00122).*

#### **Библиографический список**

1. Hÿtch M., Houdellier F., Hÿe F., Snoeck E. Nanoscale holographic interferometry for strain measurements in electronic devices // *Nature*. 2008. V.453(7198), P.1086–1089. DOI: 10.1038/nature07049.
2. Wu Y., Li H., Brunel M., Chen J., Gréhan G., Mädler L. Phase interferometric particle imaging for simultaneous measurements of evaporating micron-sized droplet and nanoscale size changes // *Appl. Phys. Lett.* 2017. V.111(4). P.041905. DOI: 10.1063/1.4996363
3. Rajshekhar G., Bhaduri B., Edwards C., Zhou R., Goddard L., Popescu G. Nanoscale topography and spatial light modulator characterization using wide-field quantitative phase imaging // *Optics Express*. 2014. V.22(3). P.3432–3438. DOI: 10.1364/OE.22.003432.
4. Edwards C., Arbabi A., Popescu G., Goddard L. Optically monitoring and controlling nanoscale topography during semiconductor etching // *Light Sci. Appl.* 2012. V.1(9). P.e30. DOI: 10.1038/lsa.2012.30
5. Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Астахов Е. И., Добдин С. Ю. Регистрация наноперемещений зонда ближнеполевого СВЧ микроскопа с помощью полупроводникового лазерного автодина // *Нано- и микросистемная техника*. 2018. Т. 20. № 1. С. 3–10.
6. Usanov D. A., Skripal An. V., Astakhov E., Dobdin S. Yu. Self-mixing laser diode included in scanning microwave microscope to the control of probe nanodisplacement // *Proc. SPIE. Saratov Fall Meeting 2017: Laser Physics and Photonics XVIII*. 2018. P.1071708. DOI: 10.1117/12.2315231.
7. Amann M. C., Bosch T. M., Lescure M., Myllylae R. A., Rioux M. Laser ranging: a critical review of usual technique for distance measurement // *Optical Engineering*. 2001. V. 40(1). P.10–19.
8. Усанов Д.А., Скрипаль А.В. Полупроводниковые лазерные автодины для измерения параметров движения при микро- и наносмещениях. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2014. 136 с.
9. Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Добдин С. Ю., Джафаров А. В., Соколенко И. С. Предельные возможности автодиной интерферометрии расстояния пилообразной модуляции длины волны полупроводникового лазера // *Компьютерная оптика*. 2019. том 43. №5. С.797–803.

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИКРОКРИСТАЛЛИТОВ InSb В ШИРОКОМ СПЕКТРАЛЬНОМ ДИАПАЗОНЕ

*М.И. Шишкин, Ю.В. Никулин, А.Г. Роках*

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: shishkin1mikhail@gmail.com

Продемонстрированы спектры отражения пленок и слоев осажденных частиц InSb и проанализированы их особенности. Показано влияние подложки на поглощение и отражение в длинноволновой инфракрасной области спектра и аналогичное влияние оболочки наночастиц.

**Ключевые слова:** полупроводниковые пленки, наночастицы, плазменное отражение.

Одной из особенностей получения поликристаллических пленок InSb термическим напылением из механически измельченных монокристаллов заключается в том, что, свойства исходного монокристалла будут переданы частицам создаваемого порошка. В данном случае для измельчения был выбран монокристалл InSb n-типа проводимости с концентрацией носителей  $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Такая концентрация позволяет наблюдать спектр отражения с формой характерной для плазменного резонанса в средней инфракрасной области (рис.1). Подобная характерная форма спектра отражения позволяет не только получить представление о важных свойствах монокристалла, но и наглядно показать насколько меняется спектр отражения при измельчении монокристалла на шаровой мельнице. Из рис.1 видно, что коротковолновая часть спектра отражения измельченного монокристалла InSb стала существенно больше длинноволновой, чего не наблюдалось до измельчения.

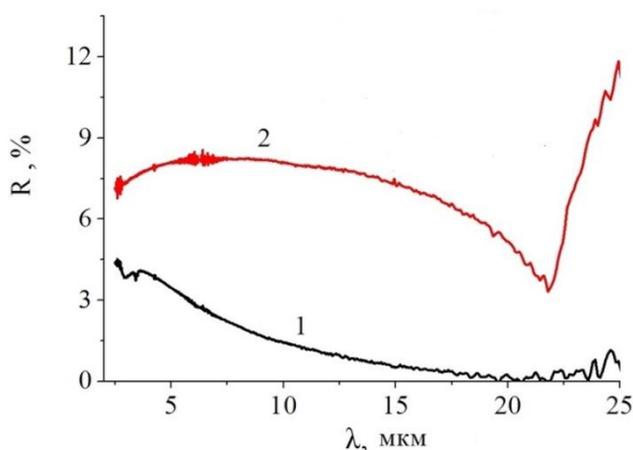


Рисунок 1. Спектр отражения, измельченного в порошок (1) и исходного монокристалла InSb (2).

Образцы пленок InSb толщиной 550 нм получали термическим испарением порошка указанного материала в соответствии с методикой,

описанной в [1], на стекле и на монокристалле CdS, обладающем прозрачностью до 17 мкм и не имеющем полос остаточных лучей до 30 мкм. Ранее было показано, что получение пленок InSb на таких подложках может способствовать их пассивации [2]. На рис. 2. представлены спектр отражения исходного монокристалла InSb, спектр отражения пленки InSb на CdS и спектр разности значений коэффициентов отражения для пленки InSb на стеклянной подложке и самой подложки ( $\Delta R = R_{\text{InSb}} - R_{\text{стекло}}$ ).

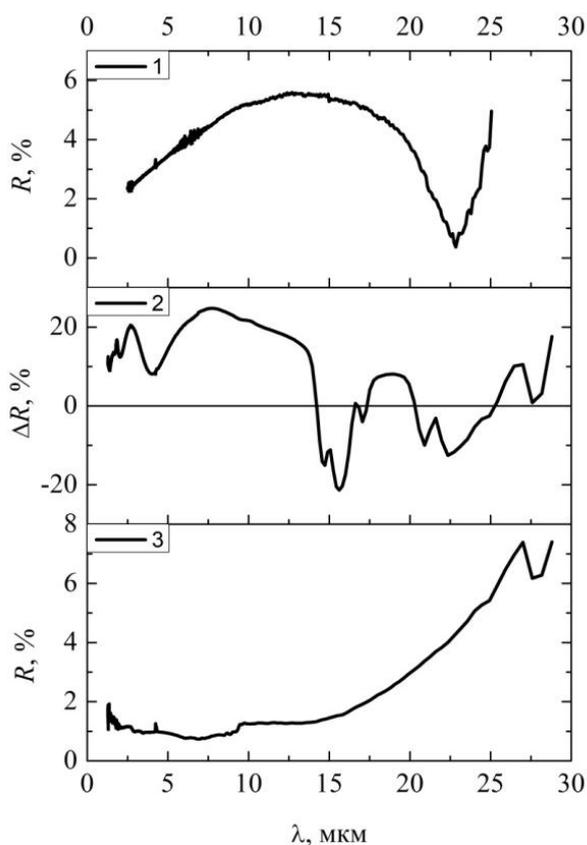


Рисунок 2. Спектр отражения монокристалла InSb (1); спектр разности значений  $\Delta R$  коэффициентов отражения для пленки InSb на стекле и самой стеклянной подложки (линия  $\Delta R=0$  обозначена для того чтобы показать, излучение каких длин волн пленка поглощает) (2); спектр отражения пленки InSb на CdS (3)

Форма представления последнего спектра была обусловлена сложной формой дисперсии коэффициента отражения стекла, при этом отрицательные участки графика (14-17 мкм и 20-25 мкм), очевидно, связаны с поглощением непосредственно в пленке. Из рис.2 видно, что для пленок InSb на стекле (кривая 2) по сравнению с монокристаллом InSb (кривая 1) появился дополнительный минимум в диапазоне 14-17 мкм; в то же время для пленок InSb на CdS коэффициент отражения после 15 мкм начинает резко расти (кривая 3). В совокупности это напоминает спектр отражения, характерный для плазменного резонанса в монокристаллах, например, для того же монокристалла InSb (кривая 1), где плазменный резонанс наблюдался в области длин волн более 22 мкм.

Для сравнения с пленками InSb по соответствующим спектрам отражения оценивалось поглощение слоев (по упрощенной формуле  $A = -\Delta R = R_{\text{образец}} - R_{\text{стекло}}$ ) осажденных из коллоидного раствора частиц InSb без оболочки, а также InSb в оболочке InP и CdS, синтезированных в соответствии с [3]. Размер частиц, определенный методом динамического рассеяния, находился в интервале 10-50 нм, причем наибольшее число частиц имело размер порядка 20 нм. На рис.3, где представлена наиболее интересная для пленок InSb область спектра 10 – 20 мкм, видно, что поглощение для слоев частиц InSb и InSb – InP было выше, чем у чистой подложки. При этом необходимо отметить, что при длинах волн короче 10 мкм для этих образцов (на рис.3 не показаны), спектр образцов практически полностью определялся спектром подложки. Напротив, слою частиц InSb - CdS в указанной области спектра соответствовало отрицательное поглощение, т.е. коэффициент отражения от данного слоя был выше, чем у подложки.

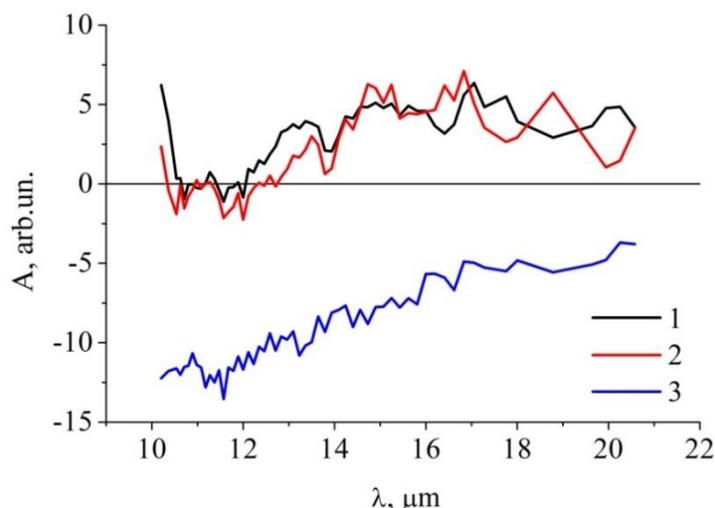


Рисунок 3. Спектр разности значений коэффициентов отражения  $\Delta R$  для слоев частиц InSb (1), InSb – InP (2) и InSb – CdS (3)

Указанные особенности оптических спектров разных по своей структуре и методам получения образцов, позволяют говорить о наличии определенной закономерности взаимодействия кристаллитов InSb с излучением длинноволнового инфракрасного диапазона. По аналогии с пленками InSb, в слоях на основе осажденных частиц InSb присутствие компоненты CdS (в данном случае в виде оболочки) приводит к существенному изменению отражения в области длин волн 10-20 мкм.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 19-07-00595 а.*

#### Библиографический список

1. Koswathage C., Okada T., Noguchi T., Taniguchi S., Yoshitome S. Ultra-high carrier mobility InSb film by rapid thermal annealing on glass substrate // AIP Advances. 2016. V. 6. No.11. P. 115303.

2. Шикин М.И., Никулин Ю.В., Прихожденко Е.С. Свойства пленок на основе наноразмерных и субмикронных частиц InSb, пассивированных CdS // Письма в ЖТФ. 2020, Т. 46, № 20, С. 7-10.
3. Крыльский Д.В., Н.Д. Жуков. Синтез, состав, фотолюминесценция, стабильность свойств коллоидных квантовых точек на основе антимионида индия // Письма в ЖТФ. 2019. Т. 45. № 16. С. 10-13.

## **МОДЕЛИ ТРОИЧНЫХ ЛОГИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В СХЕМОТЕХНИКЕ ПРОЦЕССОРОВ**

*А.С.Дронкин, А.А.Семёнов*

Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: dronkin.alexei@mail.ru

Разработаны аналоговые модели логических элементов троичной логики, совместимые по характеристикам с современными сериями элементов двоичной КМОП–логики. Предложены цифровые модели троичных логических элементов, позволяющие значительно повысить скорость моделирования цифровых схем, содержащих такие элементы. На основе предложенных моделей сконструировано арифметико-логическое устройство троичного процессора. Выполнен действующий макет разработанного арифметико-логического устройства на типовых дискретных электронных компонентах, подтвердивший корректность и эффективность разработанных моделей элементов троичной логики.

**Ключевые слова:** логические элементы, троичная логика, троичный логический базис, цифровые модели, повышение производительности, арифметико-логическое устройство, микропроцессор.

Тактовые частоты современных микропроцессоров успешно преодолели барьер в 5 ГГц, а разработчики и производители уверенно продвигаются к взятию следующего барьера в 6 ГГц [1-3]. Ещё сравнительно недавно такие цифры представлялись фантастикой — нижний край диапазона СВЧ, длины волн 6...5 см! Тем не менее, уже сегодня можно видеть, что быстродействие микропроцессоров приближается к своему пределу. Нарастивать тактовую частоту микропроцессоров и повышать быстродействие входящих в их состав транзисторов за счет уменьшения их размеров становится все сложнее из-за фундаментальных физических ограничений [4]. Развитие же в рамках архитектуры микропроцессора, которое во многом опирается на принципы распараллеливания, ограничено, поскольку суммарное время выполнения разделенной на фрагменты задачи не может быть меньше времени выполнения самого медленного фрагмента [5].

Возможные способы повышения производительности микропроцессоров могут быть найдены на путях внедрения

принципиально новых материалов и технологий, что связано с необходимостью частичного или полного отказа от современной технологии производства электронных компонентов [6,7]. Но существует и вариант, позволяющий повысить производительность микропроцессоров без отказа от привычных и отлаженных технологий, как в области создания интегральных схем, так и микроархитектуры.

Переход цифровой техники от двоичной основы к троичной системе счисления, то есть использованию в рамках одного разряда трёх возможных состояний — ложь/неопределенность/истина — то есть  $-1$ ,  $0$  и  $1$ , позволяет получить целый ряд преимуществ: более плотную запись информации, простое и естественное представление отрицательных чисел, ускоренное выполнение операций ветвления и сложения, а также сокращение количества межсоединений, что в целом должно повысить производительность микропроцессора при прочих равных условиях.

Преимущества троичной системы известны давно [8], но широкое её применение сдерживалось отсутствием технологически удачных схемотехнических решений для базовых логических элементов, что в значительной мере было связано с несовершенством технологии производства комплементарных МОП–транзисторов, которые лежат в основе современной микропроцессорной техники. Так в известных конструкциях [9,10] не удавалось использовать МОП–транзисторы обогащенного типа с необходимыми порогами переключения, хотя схемотехника троичных логических элементов была проработана на вполне приемлемом для практического применения уровне.

Здесь следует отметить, что процесс разработки и исследования цифровых систем на основе элементов троичной логики сдерживается также отсутствием работоспособных моделей таких элементов в распространенных популярных пакетах САПР.

Современный уровень развития технологии производства комплементарных МОП–транзисторов как обедненного, так и обогащенного типа позволяет создавать в едином технологическом процессе полупроводниковые приборы с необходимыми заданными параметрами [11]. Это дало нам возможность детально разработать аналоговые модели троичных логических элементов, позволяющие объективно исследовать особенности работы реальных устройств на их основе: процессы переключения, характерные задержки, нагрузочную способность, взаимодействие логических элементов и их сложную динамику в многоэлементных цифровых схемах.

В их основу были заложены специально разработанные SPICE-модели транзисторов, идентичные реальным МОП–транзисторам, применяемым в интегральных структурах логических микросхем.

Троичные логические элементы, построенные с использованием данных моделей, продемонстрировали способность работать на емкостную нагрузку в 10..50 пФ без заметного искажения формы выходного сигнала, обеспечивая при этом выходной ток порядка 1 мА, что соответствует стандартным параметрам логических элементов КМОП распространенных двоичных серий.

Были реализованы следующие модели троичных логических элементов: инвертор или функция троичного отрицания, «И-НЕ» (в привычной терминологии, или «INV-MIN» — в неустоявшейся окончательно терминологии троичной логики), «ИЛИ-НЕ» («INV-MAX»), элементы циклического троичного отрицания, а также характеристические логические функции. Данный набор функций в троичной логике образует базисную систему, обладающую свойством полноты, то есть их суперпозиция позволяет получить любую другую троичную логическую функцию.

На рис. 1 приведена принципиальная электрическая схема элемента «INV-MIN» и осциллограмма его выходного сигнала при воздействии на один из входов напряжения симметричной пилообразной формы и подаче логической единицы на второй вход.

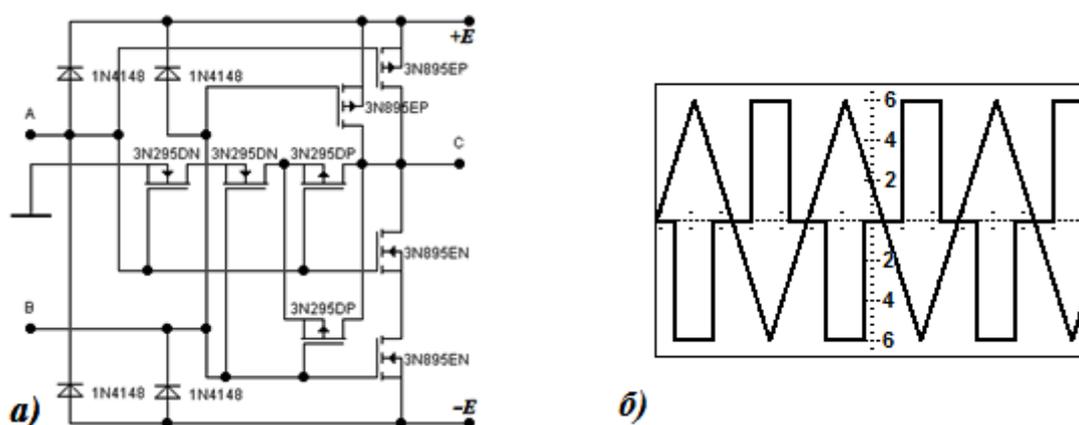


Рисунок 1. Принципиальная электрическая схема троичного логического элемента «INV-MIN» (а) и осциллограмма его выходного сигнала (б)

На основе аналоговых моделей были успешно разработаны троичные схемы последовательной логики: триггеры (в том числе и двухступенчатые), регистры, счетчики. Исследованы переходные процессы их переключения, условия возникновения «иголок» и логических «гонок». Выявлены режимы устойчивой работы и способы устранения нежелательных состояний.

Несмотря на эффективность аналоговых моделей с точки зрения объективного отражения работы реальных устройств, процесс их симуляция в реальном времени предъявляет высокие требования к вычислительной мощности, поскольку при расчете формируется сложная система нелинейных дифференциальных уравнений, решаемая численными методами. Так как особенности поведения устройств троичной логики были нами подробно исследованы на основе аналоговых моделей, было принято решение перейти к цифровым моделям, которые полностью отражают логику работы троичных элементов, опуская из рассмотрения подробности схемотехники устройств и аналоговые переходные процессы переключения.

Для создания цифровых моделей был выбран пакет САПР «Proteus» компании Labcenter Electronics [12], отличительной чертой которого является возможность разработки собственных моделей элементов на уровне открытого программного интерфейса. Основой цифровых моделей в данном пакете является динамическая библиотека, описывающая логику работы самой модели, реализуемой программно на языке C++.

Для цифровых моделей троичных элементов, разработанных в рамках данного пакета САПР, было найдено оригинальное и элегантное решение реализации неопределенного логического состояния — использовать в качестве троичного логического «0» состояние «цифровой конфликт» (CON — contention). Это состояние трактуется как среднее (Mid voltage) между двоичным «0» и двоичной «1», которое ядро симулятора, тем не менее, умеет распознавать как логический уровень, равноправный с точки зрения программы с уровнями двоичных «0» и «1».

Для выбранного пакета САПР было разработано 27 цифровых моделей троичных логических микросхем, в названии которых там, где это было возможно, использовался порядок, характерный для существующих микросхем двоичной логики серии 74НС. Так если 74НС00 – 4 двоичных элемента типа «И-НЕ», то 30НС00 – его троичный аналог, содержащий 4 троичных элемента «INV-MIN». Подобная маркировка должна позволить разработчикам, незнакомым с троичной логикой, уверенно использовать в своих конструкциях троичные элементы, исходя из сходства с их двоичными аналогами.

Анализ модели сумматора, разработанного нами на основе аналоговых моделей троичных элементов, показал, что расчет в аналоговой форме схемы подобной сложности, содержащей в совокупности 314 транзисторов, находится на пределе возможностей пакета САПР. Поэтому, учитывая положительный результат проведенного расчета, схему полного одноразрядного троичного арифметико-логического устройства (АЛУ) было решено разработать на основе

предложенных цифровых моделей. Такой переход вполне корректен в силу того, что АЛУ является устройством комбинационной логики, а каких-либо необычных особенностей поведения у входящих в его состав моделей троичных логических элементов ранее выявлено не было.

АЛУ является сердцем троичного процессора и предназначено для выполнения арифметических и логических операций над данными в троичной форме. В модели АЛУ были реализованы следующие троичные функции: отрицание «NOT», конъюнкция «MIN», дизъюнкция «MAX», строгая дизъюнкция (аналог двоичного «XOR»), суммирование, два циклических отрицания («Rotate Up» и «Rotate Down»), суммирование по модулю 3. Отдельная схема фиксировала признаки («флаги») результата: «знак результата – Sign», «нулевой результат – Zero», «перенос в старший разряд – Carry».

Разработанное устройство наглядно продемонстрировало преимущества троичной системы: перенос в старший разряд в троичном сумматоре происходит только в 8 случаях из 27, а не в 4 из 8, как в двоичном. Также он способен выполнять операции с отрицательными числами, не прибегая к дополнительному или обратному кодированию: операция вычитания выполняется суммированием, если один из аргументов поразрядно инвертировать.

Модель троичного АЛУ была протестирована на макете с применением аналоговых мультиплексоров в качестве элементной базы, поскольку на троичном мультиплексоре «3 в 1» возможно реализовать любую троичную функцию от одного аргумента, используя четыре мультиплексора «3 в 1» можно реализовать любую троичную функцию от двух аргументов.

Тестирование действующего макета троичного АЛУ продемонстрировало его полное соответствие своей цифровой модели.

Таким образом, результаты проделанной работы позволили не только практически убедиться в корректности и эффективности разработанных моделей троичных логических элементов, но и создать на их основе центральный блок троичного процессора — арифметико-логическое устройство.

#### Библиографический список

1. Интернет-ресурс: <https://ark.intel.com/content/www/ru/ru/ark/products/148263/intel-core-i7-8086k-processor-12m-cache-up-to-5-00-ghz.html>
2. Интернет-ресурс: <https://www.intel.ru/content/www/ru/ru/products/sku/199332/intel-core-i910900k-processor-20m-cache-up-to-5-30-ghz/specifications.html>
3. Интернет-ресурс: <https://hyperpc.ru/hardware/processors/intel-core-i9-10900k>
4. Семёнов А.А., Усанов Д.А., Дронкин А.С. Активный аппаратный стек процессора // Известия высших учебных заведений. Электроника. 2019. Т. 24. № 3. С. 219-229.

5. Интернет-ресурс: <https://www.osp.ru/os/2009/04/9288815>. Закон Амдала и будущее многоядерных процессоров «Открытые системы. СУБД» 2009, № 04. Издательство «Открытые системы». Обращение к ресурсу 30.04.2021.
6. Интернет-ресурс: <https://nplus1.ru/news/2016/02/04/moor>
7. Интернет-ресурс: <https://nplus1.ru/news/2015/10/05/ibm-breakthrough-nanotubes>
8. Брусенцов Н.П., Маслов С.П., Розин В.П., Тишулина А.М. Малая цифровая вычислительная машина «Сетунь». – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1965. 145 с.
9. Heung A. Depletion/Enhancement CMOS For a Low Power Family of Three-Valued Logic Circuits // A. Heung. H. T. Mouftah / IEEE Journal of solid-state circuits. – Vol. SC-20, №2. – 1985. – April. – pp. 609-616.
10. Макаров Д.А. Исследование трехуровневых логических устройств: дипломная работа // Д.А. Макаров; науч. рук. Никитин В.М. – Санкт Петербургский Государственный Университет аэрокосмического приборостроения, 2000. – 159 с.
11. Интернет-ресурс: [https://ru.mouser.com/Semiconductors/Discrete-Semiconductors/MOSFET/\\_/N-ax1sf? Keyword=Discrete+Semiconductors+Transistors+MOSFET](https://ru.mouser.com/Semiconductors/Discrete-Semiconductors/MOSFET/_/N-ax1sf? Keyword=Discrete+Semiconductors+Transistors+MOSFET)
12. Интернет-ресурс: <https://www.labcenter.com>

## **УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ УСТРОЙСТВА ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ LORAWAN**

*К.А. Зыков, Р.А. Щипцов, И.В. Хайрушев, В.А. Кильдишева, И.С. Великанов, А.А. Андреев, Н.В. Короневский, Е.А. Рябов, Б.В. Сергеева*  
Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского  
E-mail [semicond@yandex.ru](mailto:semicond@yandex.ru)

Разработана колодка для контроля качества, разработки прошивки, а также упрощения тестирования и сокращения затрат времени на программирование устройства геопозиционирования, использующего технологию LoRaWAN.

**Ключевые слова:** СВЧ излучение, геопозиционирование.

Колебательным и волновым процессам уже достаточно давно уделяется внимание при подготовке студентов в Саратовском государственном университете имени Н.Г. Чернышевского (СГУ) на практических и лабораторных занятиях по физике полупроводников и полупроводниковых приборов [1–7] или в современном прочтении – по физическим основам твердотельной электроники [8–10].

Целью данного исследования было создание для устройства геопозиционирования [11–14] колодки для развития устройства в перспективе и изготовления продукта в мелкосерийном производстве.

Для контроля качества устройства, разработки прошивки, упрощения тестирования и сокращения затрат времени на программирование была разработана дополнительная плата с корпусом для закрепления основной платы устройства (рис. 1).

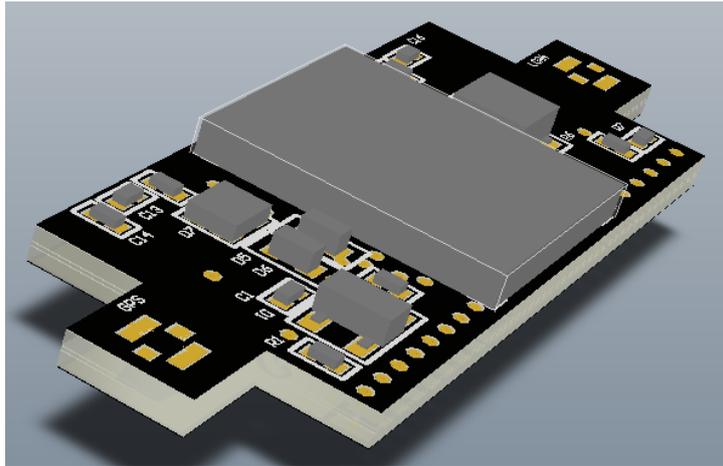


Рисунок 1. Основная плата устройства геопозиционирования

Основная сложность возникла при выборе контактов для прошивки: система крепления должна была обеспечить надёжный контакт между программатором, компонентами для тестирования, аккумулятором и самой платой. Было решено использовать подпружиненный контакт (рис. 2).



Рисунок 2. Подпружиненный контакт

Разработана концепция платы для колодки с USB-TTL конвертером и кнопкой переключения режимов работы и прошивки (рис. 3).

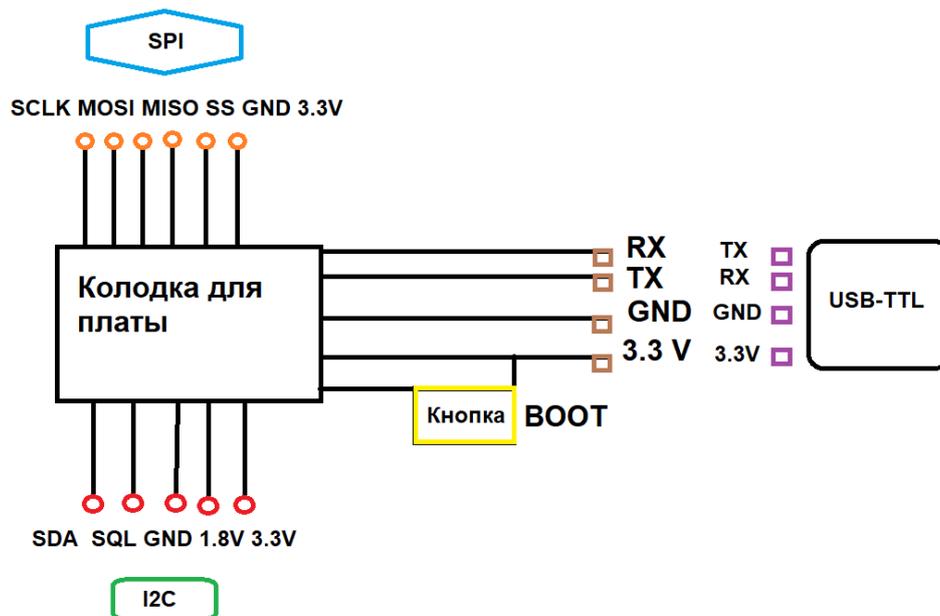


Рисунок 3. Блок схема колодки

В системе проектирования печатных плат «Altium designer» была спроектирована и выполнена трассировка платы для колодки (рис. 4, а), на основе которой была создана 3D модель корпуса для прошивки (рис. 4, б).

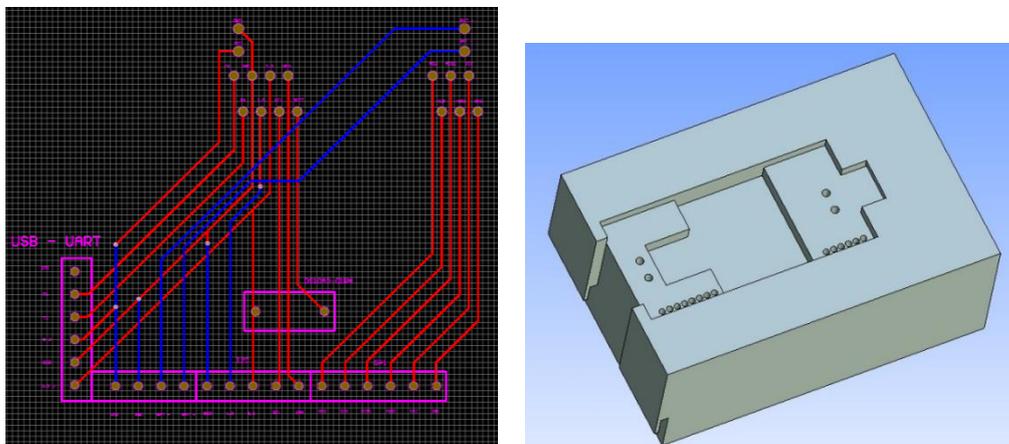


Рисунок 4. Трассировка платы (а) и корпус для прошивки (б)

В результате было изготовлено устройство, позволяющие проводить прошивку платы для устройства геопозиционирования (рис. 5).

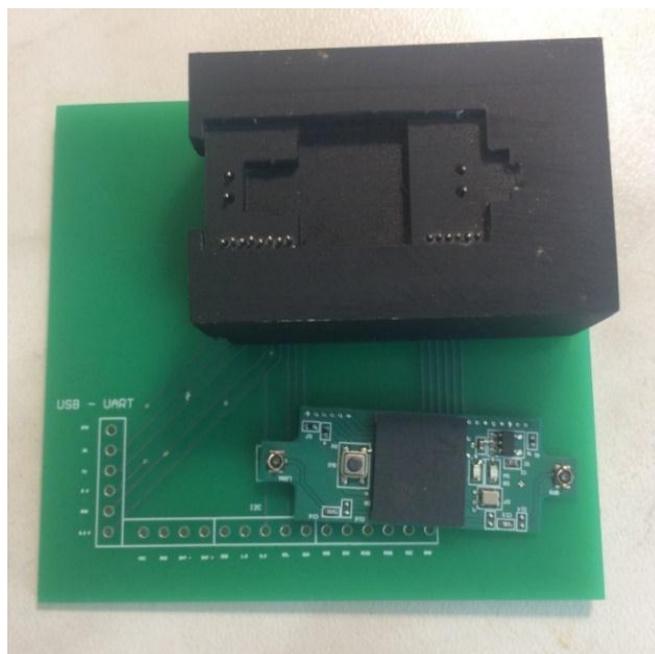


Рисунок 5. Колодка в сборе

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-07-00233).*

### Библиографический список

1. *Биленко Д.И., Демидов В.К., Котелков В.Н. и др.* Руководство к практическим занятиям по физике полупроводников: Учеб. пособие / Под ред. доц. З.И. Кирьяшкиной. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1964. 116 с.
2. *Биленко Д.И., Демидов В.К., Котелков В.Н. и др.* Руководство к практическим занятиям по физике полупроводников: Учеб. пособие; Изд. 2-е доп. / Под ред. проф. З.И. Кирьяшкиной. - Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1968. 179 с.
3. *Михайлов А.И., Стецюра С.В., Сергеев С.А.* Лабораторный практикум по физике полупроводниковых приборов: Уч. пос. В 2-х ч. Ч. 1. Под общ. ред. Б.Н. Климова и А.И. Михайлова. - Саратов: Изд-во ГосУНЦ «Колледж», 2002. 72 с.
4. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Феклистов В.Б., Вениг С.Б.* Измерение параметров полупроводников, микро- и наноструктур на СВЧ: Лабораторный практикум: учеб. пособие. – Саратов: Электр. издание Саратов. ун-та, 2012. 91 с.
5. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Феклистов В.Б., Вениг С.Б.* Измерение параметров полупроводников, микро- и наноструктур на СВЧ: учеб. пособие. – Саратов: Электронное издание Саратов. ун-та, 2012. 55 с.
6. *Трубецков Д.И., Храмов А.Е.* Лекции по сверхвысокочастотной электронике для физиков. Т. 1. – М.: Физматлит, 2003. 495 с.
7. *Трубецков Д.И., Храмов А.Е.* Лекции по сверхвысокочастотной электронике для физиков. Т. 2. – М.: Физматлит, 2004. 646 с.
8. *Михайлов А.И., Сергеев С.А., Глуховской Е.Г.* Физические основы твердотельной электроники и микроэлектроники: Планы семинарских занятий: Учеб. пособие. – Саратов: Редакция журнала «Промышленность Поволжья», 2008. 116 с.
9. *Михайлов А.И., Сергеев С.А.* Физические основы твердотельной электроники: Учеб. пособие. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2007. 164 с.
10. *Михайлов А.И., Сергеев С.А.* Физические основы твердотельной электроники: Учеб. пособие. 2-е изд. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2020. 192 с.
11. *Рябов Е.А., Короневский Н.В., Зыков К.А. и др.* Установка для измерения спектров КСВН и пропускания жидких диэлектриков // Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика: тез. докл. – Саратов: Техно-Декор, 2019. С. 214.
12. *Зыков К.А., Короневский Н.В., Стародубов А.В. и др.* Изучение зависимости диэлектрической проницаемости водных растворов этилового спирта от частоты // Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика: тез. докл. – Саратов: Техно-Декор, 2019. С. 93-95.
13. *Зыков К.А., Короневский Н.В., Рябов Е.А. и др.* Разработка устройства позиционирования с применением технологии LoRaWAN // Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика: тез. докл. – Саратов: Техно-Декор, 2020. С. 97.
14. *Зыков К.А., Короневский Н.В., Рябов Е.А. и др.* Разработка прототипа устройства геопозиционирования с применением технологии LoRaWAN // Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами: сборник статей седьмой Всероссийской научной школы-семинара / под ред. проф. Ал.В. Скрипаля. – Саратов: Саратовский источник, 2020. С. 141-145.

## ОСОБЕННОСТИ ОДНОМЕРНОГО РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА МНОГОЯМНЫХ БАРЬЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ

*М. В. Давидович<sup>1</sup>, О. Е. Глухова<sup>1,2</sup>, И. С. Нефедов<sup>1</sup>, М. М. Слепченко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Первый Московский государственный медицинский  
университет им. И.М. Сеченова

Рассмотрены особенности одномерного туннелирования и вычисления туннельного тока в барьерных квантовых структурах с одной и двумя потенциальными ямами. Двухямная структура с двойной сеткой позволяет получать полное резонансное туннелирование и на порядки увеличить туннельный ток.

**Ключевые слова:** резонансное туннелирование, уравнение Шредингера

Одноямные барьерные потенциалы рис. 1 возникают в ряде одномерных задач квантового туннелирования, дифракции плоских электромагнитных волн на слоистых структурах, в моделях резонансно-туннельных диодов [1–3], транзисторов и квантово-каскадных лазеров. Вакуумные туннельные нанотриоды являются интересными объектами исследования для вакуумной микроэлектроники [4], поскольку не требуют для работы накала, а эмиссионная структура может быть весьма компактной и при этом создавать весьма большие необходимые для работы приборов токи. При пролетной длине до сотен нм (существенно меньшей длины свободного пробега электронов в воздухе) и напряжениях порядка 10–20 В они могут работать как активные ТГц устройства без вакуума. Вакуумные автоэмиссионные источники без сеток для получения большой плотности тока требуют весьма больших полей (существенно больше величины  $10^{10}$  В/м). При таких полях имеет место разогрев катода, обратная бомбардировка, взрывная эмиссия, сильное пондеромоторное воздействие на поверхность [5,6]. При этом коэффициент прозрачности  $D^+(E_k)$  все еще существенно меньше единицы, а интегральная плотность тока существенно меньше предельно достижимых значений порядка  $J \sim 10^{15}$  А/м<sup>2</sup> [5,6] (для вакуумного туннелирования из металлов). Резонансное туннелирование (РТ) позволяет получить значения  $D^+(E_k)=1$  при некоторых кинетических энергиях  $E_k$  набегающих на барьер электронов [1–3,7] и тем самым приблизиться к предельно достижимой плотности тока при значениях нормальной компоненты электрического поля  $E_x < 10^{10}$  В/м [5,7]. Анализ туннелирования через барьерные профили квантового потенциала  $V(x)$  важен для создания сильноточных автоэмиссионных источников с тянущей сеткой.

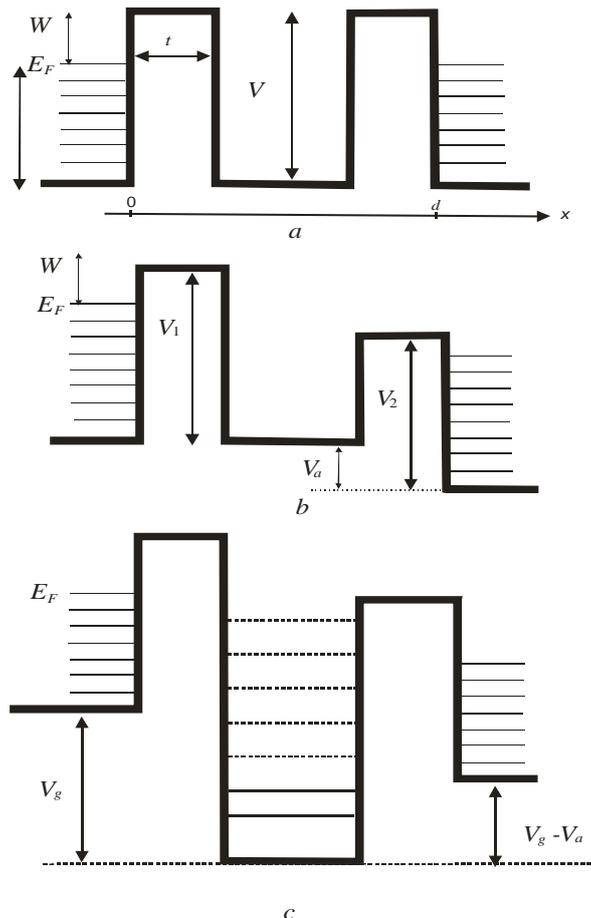


Рисунок 1. Модельный вид одноямого барьерного потенциала в вакуумном нанотриоде

В одномерном случае в автоэмиссионной электронике решается стационарное уравнение Шредингера (УШ)  $(-\hbar^2 \mu \partial_x^2 + V(x) - E_k) \psi(x) = 0$ , в котором  $\mu = 2m_e$ ,  $m_e$  – масса электрона,  $\hat{p}_x = \hbar \partial_x = k\hbar = \sqrt{\mu(E_k - V(x))}$  – его импульс, а волновая функция представляется суперпозицией плоских волн  $\psi(x) = a \exp(\pm ikx)$  [1–13]. Неоднородный потенциал приводит к наличию волн обоих направлений в каждой точке, при этом в области барьеров  $E_k < V(x)$  импульс становится мнимым. В потенциальном поле можно ввести силу  $F(x) = -\partial_x V(x) = -eE_x(x) = e\partial_x U(x)$ , где  $U(x) = -V(x)/e$  – электростатический потенциал,  $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$  К – заряд электрона. При вакуумном туннелировании потенциальный барьер и электростатический потенциал определяются методом многократных изображений относительно поверхностей электродов [8–10]. Учет потенциала электронного пучка как решение уравнения Пуассона приводит к изменению  $V(x)$ . Такое решение целесообразно при большой плотности пучка. Пример точного вычисления профиля барьеров методом изображений дан на рис. 2. Строгое решение УШ получаем методом матриц передачи (переноса). Профиль барьера близок к трапецеидальному с трапецией в виде треугольника на прямоугольном основании.

Увеличение напряжений на электродах все более приближает профили барьеров к треугольным. Для аналитического исследования заменим сложные барьеры прямоугольными, подбирая их высоту так, чтобы сохранялась площадь. При туннелировании одной частицы удобна нормировка волновой функции на дельта-функцию [11,13]. В задачах же эмиссионной электроники обычно имеется падающий поток частиц, описываемый волновой функцией  $\psi^+(x)=a(x)\exp(ik_0x)$ , поэтому можно ввести плотность тока  $J^+(x)$  через плотность потока вероятности [1–3]. Вне барьерной структуры  $V(x)=0$ ,  $k_0=\sqrt{\mu E_k}/\hbar$ ,  $a=a_0=const$ , и удобна нормировка на падающий поток с единичной плотностью частиц  $\rho^+(x)=|\psi^+(x)|^2=a_0^2=1$ ,  $x<0$  [1–3,8–12]. Поскольку от структуры есть отраженная волна, полная плотность слева от барьера  $\rho(x)=|\exp(ik_0x)+R\exp(-ik_0x)|^2=1+|R|^2+2|R|\cos(2k_0x-\varphi_R)$ . Здесь введены фаза  $\varphi_R$  и модуль  $|R|$  коэффициента отражения. При РТ возможен нулевой коэффициент отражения  $R$ . Наличие большой плотности электронов в области структуры требует решения там уравнения Пуассона  $\partial_x^2\Phi(x)=e\rho(x)/\varepsilon_0$ . Результат решения следует налагать на электрический потенциал:  $\tilde{U}(x)=U(x)+\Phi(x)$ .

Заметим, что УШ есть, по сути, уравнение Гельмгольца, и квантовое туннелирование эквивалентно электромагнитному рассеянию плоской волны на диэлектрической структуре с диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\varepsilon(x)=\sqrt{1-V(x)/E_k}$  [12]. Случай  $V=0$  соответствует движению волны с частотой  $\omega=E_k/\hbar$  в вакууме. Случай  $E_k<V(x)$  (рассеяние на яме или над барьером) соответствует движению через бесстолкновительную плазму с  $\varepsilon(x)<0$  при  $\omega<\omega_p$ , а случай  $E_k>V(x)$  – движению через слой диэлектрика  $\varepsilon(x)>0$ . Пусть барьер симметричный рис. 1, *a*. Туннелирования с катода и анода одинаковы, поэтому полный ток равен нулю. Ток с катода возникает при положительном напряжении  $U_a=-V_a/e$  на аноде для несимметричной структуры (рис. 1, *b*, *c*). Набегающую на барьер волновую функцию потока электронов обозначим как  $\psi_0^+(x)=a_0\exp(ik_0x)$ , а прошедший на анод поток как  $\psi_a^+(x)=a_0T\exp(ik_a(x-d))$ , где  $k_a=\sqrt{\mu(E_k+V_a)}/\hbar$ . Прошедшие барьеры электроны не теряют энергию, однако при попадании на анод они движутся классически и ускоряются. Избыточную энергию  $eU_a$  они передают фононам кристалла катода на малой длине свободного пробега, приобретая распределение энергии по Ферми на аноде. Для падающих на поверхность анода из его глубины электронов прозрачность барьера при существенном напряжении  $U_a$  экспоненциально меньше  $D^-(E_k)\ll D^+(E_k)$ , и обратный ток ничтожно мал при анодных напряжениях порядка Вольт.

Введем импедансы  $z_0 = 1/k_0$ ,  $z_n = 1/k_n$ ,  $z_g = 1/k_g$ ,  $z_a = 1/k_a$  (отметим, что в [7] за импедансы взяты обратные им величины) и обозначим  $\theta_n = \tan(k_n t_n)$ ,  $\theta_g = \tan(k_g t_g)$ . Здесь  $t_n$  – ширины барьеров, которые могут в общем случае быть разными, а  $t_g$  – ширина ямы, соответствующая области сетки. Для симметричного случая  $t_{1,2} = t$  из условия отсутствия коэффициента отражения  $R=0$  или равенства входного нормированного импеданса единице следует  $\theta_g \theta = 2Z/(1+Z^2)$ , или с обозначением  $Z = z/z_0 = k_0/k = -i\eta$  трансцендентное уравнение [7]. Определяя матрицу передачи, оно приобретает вид

$$k_0 = \frac{iT_{21} - k_a T_{22}}{iT_{11} - k_a T_{12}} = \frac{iT_{21} - T_{22} \sqrt{k_0^2 + \mu V_a / \hbar^2}}{iT_{11} - T_{12} \sqrt{k_0^2 + \mu V_a / \hbar^2}}. \quad (1)$$

Наличие корней  $E_n > 0$  уравнения (1) означает РТ через симметричный барьер при совпадении кинетической энергии с уровнем:  $E_k = E_n$ .

При квантовом туннелировании электроны набегают из глубины катода на границу под всевозможными углами, но определяется плотность электронов, имеющих значение нормальной компоненты скорости в заданных пределах  $n(v_x) = 2\pi\hbar^{-3} m_e^3 v_x (v_F^2 - v_x^2) dv_x$  [5]. При РТ условие  $R=0$  приводит к возникновению электронных волн вдоль поверхностей, если предположить поперечную неограниченность структуры, но эти волны движутся под всевозможными углами. При туннелировании поперечные компоненты скорости малы, поскольку оно идет в основном для больших нормальных компонент скорости. При РТ возможно увеличение разброса электронов по поперечным скоростям.

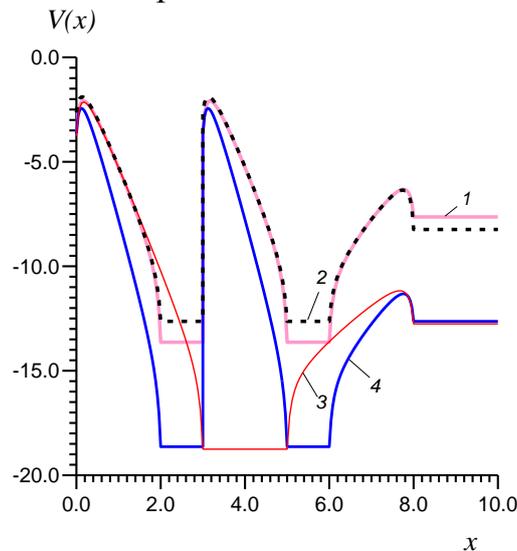


Рисунок 2. Профили сложных барьеров (эВ) в двухямных (кривые 1, 2, 4) и одноямной (3) структурах с двумя сетками под одинаковым потенциалом. Параметры структур (эВ):  $V_g = 10$ ,  $V_a = 5$  (кривые 1, 2);  $V_g = 15$ ,  $V_a = 10$  (3, 4);  $W_k=3$ ,  $W_g=4$  (кривые 1, 3, 4);  $W_k=3.6$ ,  $W_g=3$  (2);  $t_1=t_2=t_3=2$  нм,  $t_g=1$  нм (1, 2, 4);  $t_1=t_2=3$  нм,  $t_g=2$  нм (3);  $W_a=4.5$

Рассмотренные выше модельные задачи позволяют качественно оценивать туннелирование. Близкие к реальным барьерные структуры  $V(x)$  получаются с использованием метода многократных изображений [8–10]. Профили потенциала с одной и двумя ямами для структуры катод-сетка-анод и катод-сетка-сетка-анод приведены на рис. 2. Для их вычисления использован подход, изложенный в [9,10] и учитывающий работы выхода из электродов (катода, анода и сеток). Работа выхода с катода определяется как  $W_k = e^2 / (16\pi\epsilon_0\delta_k)$ . Здесь малый размер  $\delta_k$  (порядка  $\text{\AA}$ ) соответствует расстоянию, на котором перестают действовать силы изображений из-за атомной структуры вещества. Он хорошо коррелирует с радиусом иона кристаллической решетки в случае, когда один атом отдает один электрон в зону проводимости. В приведенных примерах рис. 2, 3 использованы различающиеся работы выхода с катода  $W_k$ , анода  $W_a$  и из материала сетки  $W_g$ . В областях сеток, катода и анода потенциал постоянен, а между ними появляются барьеры. Следует отметить, что высота барьера зависит не только от работ выхода, но и от его протяженности, а именно уменьшается при сближении электродов. В случае, когда потенциал сетки больше потенциала анода, ей соответствует яма, при этом возможно РТ рис. 3. Расчет туннелирования произведен матричным методом с использованием матриц передачи (переноса).

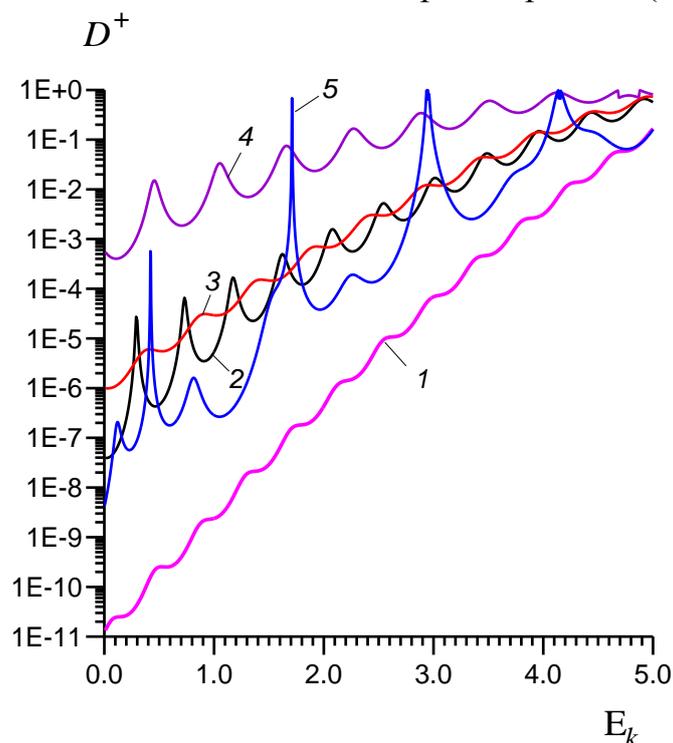


Рисунок 3. Коэффициент туннелирования с катода в зависимости от кинетической энергии электронов (эВ) в одноямных структурах (кривые 1–4) и двухямной структуре (5) одинаковой длины 8 нм. Параметры структур (в эВ):  $W_k=3$ ,  $W_g=4$  эВ,  $W_a=4.5$ ;  $V_a=5$  (кривые 1, 4, 5);  $V_a=10$  (2, 3);  $V_g=25$  (1, 2, 5);  $V_g=25$  (3);  $V_g=45$  (4)

На рис. 3 приведены расчеты прозрачности  $D^+(E)$  для одноямного и двухямного потенциалов. Двухямный потенциал создается двойной сеткой, электроды которой разделены вакуумным или заполненным диэлектриком зазором и находятся при одинаковом потенциале  $V_g = -U_g/e$ . Удобно задавать  $U_g > U_a$ . Наличие второй ямы приводит к удвоению уровней [7] и к увеличению полного тока. Наличие квазипериодической гетероструктуры может привести к возникновению зон, содержащих много близко расположенных уровней. Однако использование таких структур ограничено тем обстоятельством, что их общая длина должна быть существенно меньше длины свободного пробега в материале сетки, поэтому желательны сверхнизкие температуры.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-19-00226).*

#### Библиографический список

1. *К.С. Гришаков, В.Ф. Елесин*, Времена перехода резонансно-туннельного диода между экстремальными точками гистерезисной вольт-амперной характеристики, ФТП 50(8), 1113 (2016).
2. *В.Ф. Елесин*, Переходные процессы в двухбарьерных наноструктурах, ЖЭТФ 145(6), 1078 (2014).
3. *М.В. Давидович*, Нестационарное резонансное туннелирование в диодной двухбарьерной структуре, Письма в ЖЭТФ 110(6), 414 (2019).
4. *Д.И. Трубецков, А.Г. Рожнев, Д.В. Соколов*, Лекции по сверхвысокочастотной вакуумной микроэлектронике, Изд-во ГосУНЦ "Колледж", Саратов (1996).
5. *Д.И. Проскуровский*, Эмиссионная электроника. ТГУ, Томск (2010).
6. *G.N. Fursey*, Field emission in vacuum microelectronics, Kluwer Academic/Plenum Publishers, N.Y. (2005).
7. *Е.А. Нелин*, Импедансная модель для барьерных задач квантовой механики, УФН 177(3), 309 (2007).
8. *J.G. Simmons*, Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film, J. Appl. Phys. 34(6), 1793 (1963).
9. *М.В. Давидович, Р.К. Яфаров*, Автоэмиссионная шахматная структура на основе алмазо-графитовых кластеров, ЖТФ 88(2), 283 (2018).
10. *М.В. Давидович, Р.К. Яфаров*, Импульсные и статические автоэмиссионные ВАХ углеродных нанокластерных структур: эксперимент и его интерпретация, ЖТФ 89(8), 1282 (2019).
11. *А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов*, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, Наука, М. (1971).
12. *М.В. Давидович*, О временах и скоростях нестационарного квантового и электромагнитного туннелирования, ЖЭТФ, 157(1), 44 (2020).
13. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Квантовая механика. Нерелятивистская теория, ГИФМЛ, М. (1963).

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ, ИНДУЦИРОВАННЫХ АДсорБИРОВАННЫМИ ЧАСТИЦАМИ КИСЛОРОДА И ПРОПАНОЛ-2, НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОВИСКЕРОВ ДИОКСИДА ОЛОВА

*Д.А. Тимошенко, И.В. Синёв, В.В. Симаков, Н.А. Клычков*  
ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г.Чернышевского»,  
E-mail : da\_timoshenko@mail.ru

Методом осаждения из паровой фазы были выращены нитевидные нанокристаллы диоксида олова и созданы на их основе газочувствительные сенсоры. Исследована концентрационная зависимость газочувствительности полученных сенсоров к парам пропанол-2 при разных температурах. Произведен расчет положения в запрещенной зоне донорного уровня пропанол-2 относительно акцепторного уровня кислорода, локализованных на поверхности SnO<sub>2</sub>.

**Ключевые слова:** нитевидные нанокристаллы, диоксид олова, сенсоры газа, газочувствительность, распознавание газов.

Создание простых систем для распознавания газов является одной из важных задач в области полупроводниковых сенсоров [1-2]. Наряду с подходом, основанным на использовании мультисенсорных систем, перспективным направлением является реализация виртуальной мультисенсорной системы на основе одного сенсора, работающего в режиме вариации рабочей температуры, измерительного напряжения и т.п. [3].

В работе [4] показано, что на основе измерения концентрационной зависимости проводимости сенсора в атмосфере газов-восстановителей можно определить энергию десорбции частиц газа-восстановителя  $dW$ , а также положение донорного уровня газа-восстановителя относительно акцепторного уровня кислорода  $dE$  [4].

В литературе взаимодействие паров спиртов с адсорбированными частицами кислорода описывается химической реакцией, в результате которой происходит десорбция продуктов реакции, сопровождающаяся возвращением локализованного на частице кислорода электрона в зону проводимости. Этот процесс можно рассмотреть с точки зрения формирования донорных поверхностных центров, характеризующихся глубиной залегания. Таким образом, возникает возможность распознавать донорный газ путем определения этого параметра.

Целью данной работы является определение энергетических параметров поверхностных состояний, индуцированных адсорбированными частицами кислорода и пропанол-2, на поверхности нитевидных нанокристаллов диоксида олова.

## Экспериментальная часть

В качестве объекта исследования был использован сенсор газа на основе нитевидных нанокристаллов диоксида олова [5].

Газочувствительность сенсора исследовалась с помощью автоматизированного измерительного комплекса, управление которым осуществлялось при помощи программы разработанной в LabVIEW [6]. Формирование пробы происходило путем барботирования пропанол-2 сухим воздухом при температуре 40 °С. Концентрация пробы измерялась в процентах от насыщенного пара.

Были измерены концентрационные зависимости проводимости сенсора газа при воздействии паров пропанол-2 при разных температурах. На рисунке 1 представлены результаты измерения, где газочувствительность сенсора  $S$  рассчитывалась:

$$S = \frac{G_n - G_B}{G_B}, \quad (1)$$

где  $G_n$  – проводимость сенсора при воздействии пробы, См;  $G_B$  – проводимость сенсора в чистом воздухе, См.

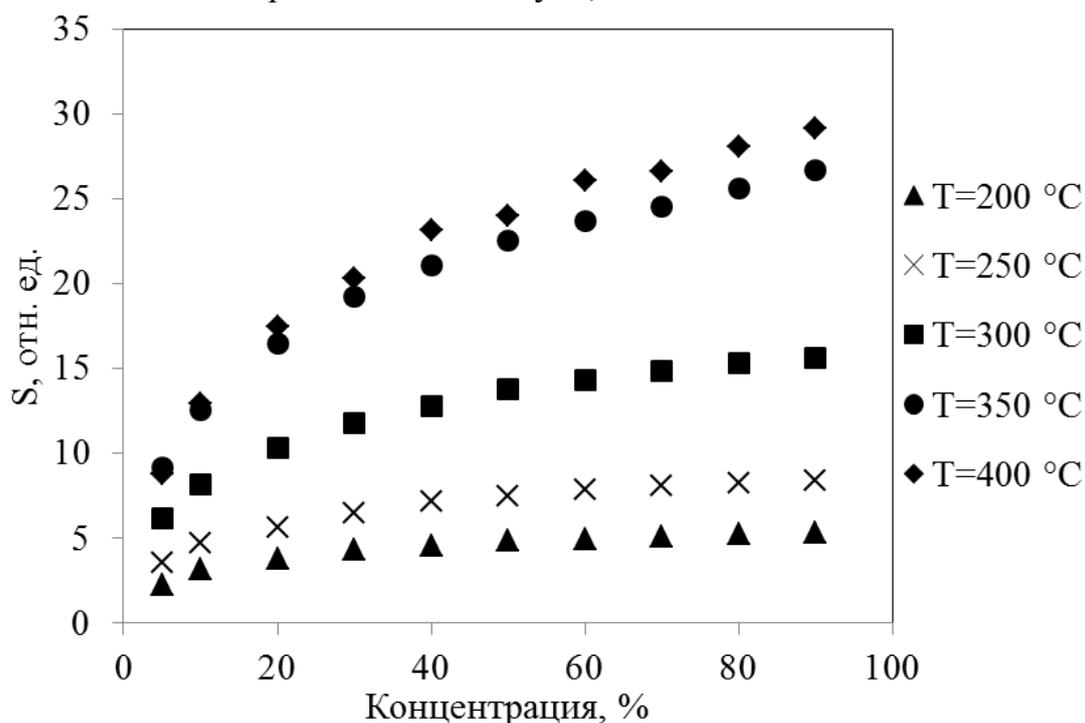


Рисунок 1. Концентрационная зависимость газочувствительности сенсора к парам пропанол-2 при различных рабочих температурах

Из графика видно, что увеличение концентрации пропанол-2 приводит к сублинейному росту газочувствительности. Повышение рабочей температуры сенсора также приводит к увеличению чувствительности.

Для расчета параметра  $dE$ , как показано в [5], полученные данные

были перестроены в спрямляющих координатах (рис. 2):

$$X = \frac{1}{C'} \quad (2)$$

$$Y = \frac{1}{S \cdot (S + 1)}, \quad (3)$$

где  $X$  и  $Y$  – новые переменные в спрямляющих координатах;  
 $C$  – концентрация, %.

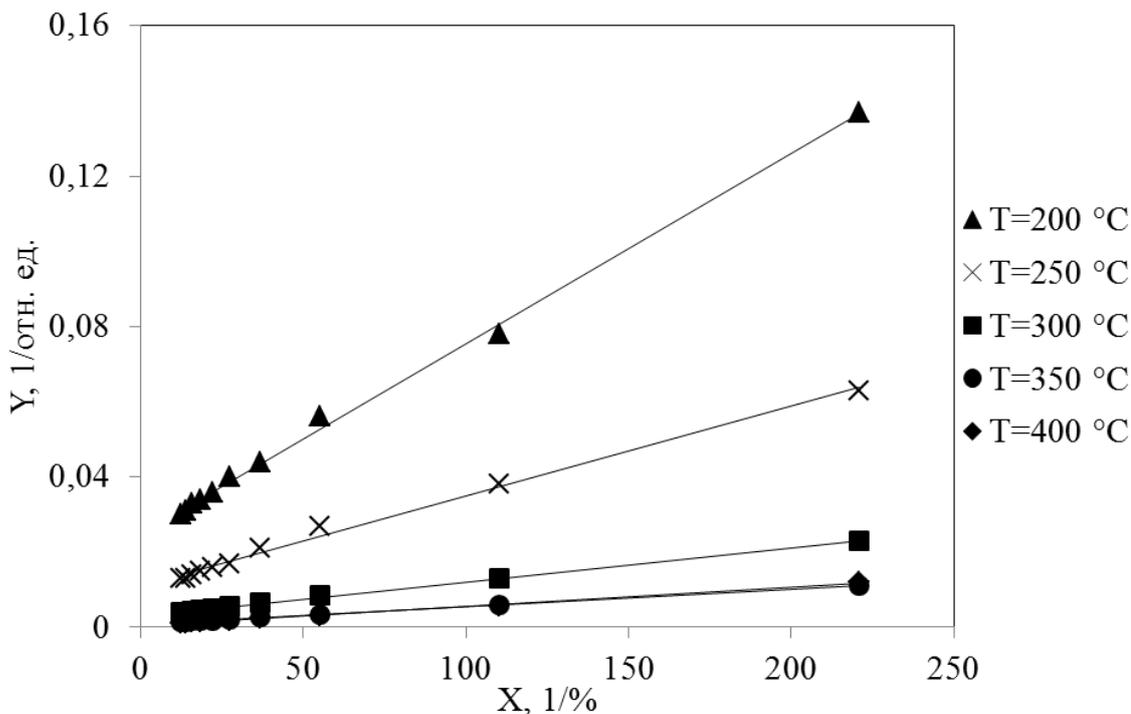


Рисунок 2. Концентрационная зависимость проводимости сенсора к парам пропанола в спрямляющих координатах, при различных рабочих температурах

Из рисунка 2 видно, что данные аппроксимации удовлетворительно описываются моделью  $Y = b \cdot X + a$ . Коэффициент корреляции  $R^2$  составил 0,99. Расчет характерных параметров положения донорного уровня относительно акцепторного уровня кислорода  $dE$  произведем по формуле:

$$dE = \ln(\delta \cdot a) \cdot k \cdot T, \quad (4)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана, Дж/К;

$T$  – температура, К;

$a$  – коэффициент, получаемый из уравнения прямой;

$\delta = \frac{2 \cdot N_s}{R \cdot N_d}$  – дисперсность материала;

$N_s$  – концентрация центров адсорбции на поверхности нитевидных нанокристаллов,  $1/\text{м}^2$ ;

$N_d$  – концентрация доноров в объеме полупроводника,  $1/\text{м}^3$ ;

$R$  – радиус нитевидных нанокристаллов.

Исходя из полученных результатов, по формуле 4 было рассчитано

положение донорного уровня относительно акцепторного уровня кислорода при различных температурах (рис. 3).

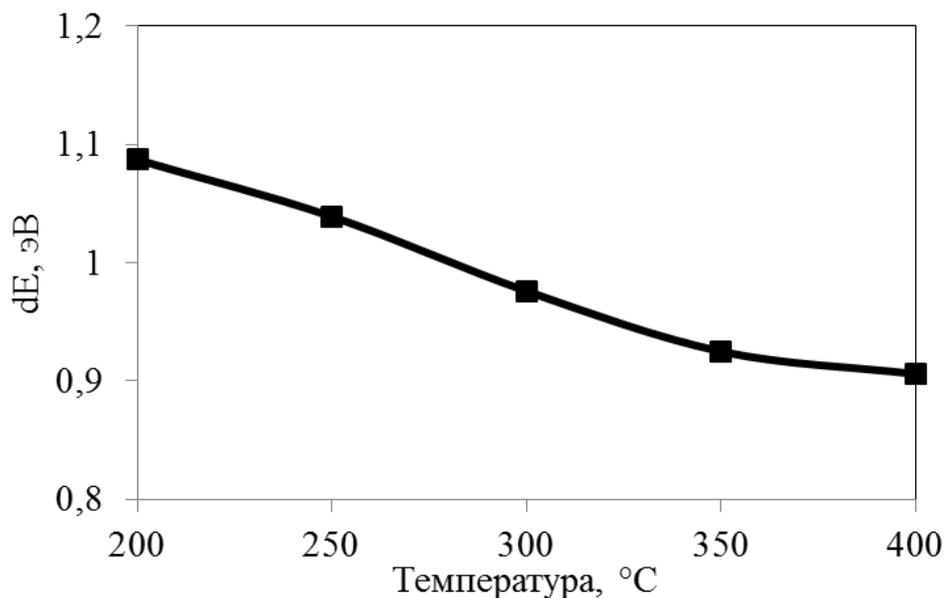


Рисунок. 3. График зависимости положения донорного уровня относительно акцепторного уровня кислорода от рабочей температуры сенсора

Из графика видно, что положение донорного уровня относительно акцепторного уровня кислорода слабо зависит от температуры и составляет  $1 \pm 0,05$  эВ.

Показано, что положение донорного уровня относительно акцепторного уровня кислорода при адсорбции пропанол-2 слабо зависит от рабочей температуры сенсора и этот параметр может быть использован при распознавании сорта газа.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-07-00602.*

#### Библиографический список:

1. *Krivetskiy V. et al.* Selective detection of individual gases and CO/H<sub>2</sub> mixture at low concentrations in air by single semiconductor metal oxide sensors working in dynamic temperature mode // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2018. Т. 254. С. 502–513.
2. *Simakov V. V. et al.* Variation of the conductivity of a thin film of tin dioxide in response to stepwise gas sampling // *Technical physics letters*. 2006. Т. 32. № 8. С. 725–728.
3. *Simakov V. et al.* I–V characteristics of gas-sensitive structures based on tin oxide thin films // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2006. Т. 116. № 1–2. С. 221–225.
4. *Simakov V. et al.* Gas identification by quantitative analysis of conductivity-vs-concentration dependence for SnO<sub>2</sub> sensors // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2009. Т. 137. № 2. С. 456–461.
5. *Тимошенко Д. А., Синёв И. В., Симаков В. В.* Создание сенсора газа на основе нитевидных нанокристаллов диоксида олова // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2020. № 12. С. 731–737.

6. Синёв И. В., Симаков В. В., Никитина Л. В. Аппаратно-программный комплекс многопараметрического распознавания многокомпонентных газовых смесей на основе мультисенсорных микросистем / И. В. Синёв, В. В. Симаков, Л. В. Никитина // Башкирский химический журнал. 2010. Т. 17. № 5. С. 125–127.

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ ВЫГОДНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОРАХ НАНОСЕТЧАТОГО ГРАФЕНА

*В.В.Шунаев<sup>1</sup>, О.Е. Глухова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: vshunaev@list.ru

Методами математического моделирования найдены наиболее выгодные атомные структуры композитов, представляющих собой графеновые монослои с вертикально ориентированными однослойными углеродными нанотрубками с индексами киральности (12,6), (16,0), (14,4), (11,10), (6,5). Для рассмотренных соединений определена зависимость энергетического профиля роста от размеров элементарных ячеек. Полученные результаты могут быть использованы для эффективного экспериментального синтеза 3D-композитов на основе углеродных нанотрубок и наносетчатого графена.

**Ключевые слова:** однослойные углеродные нанотрубки, поры наносетчатого графена

В последнее время все большую популярность приобретает гибридный 3D-материал, представляющий собой графеновые монослои с вертикально ориентированными однослойными углеродными нанотрубками (графен/ВОУНТ). Синергия графена и УНТ обеспечивает данный материал свойствами, востребованными в суперконденсаторах, биосенсорах, а также в устройствах нанoeлектроники и термотранспорта [1-4]. Вместе с тем композит графен/ВОУНТ является еще недостаточно исследованным, в связи с чем актуальной задачей является оценка потенциальной возможности роста вертикально ориентированных однослойных нанотрубок различных киральностей в отверстиях наносетчатого графена с бесшовным типом соединения.

В нашем исследовании компонентами атомистических структур графен/ВОУНТ выступили графеновая наночастица размерами  $34 \times 34 \text{ \AA}^2$ , а также УНТ с индексами киральности (12,6), (16,0), (14,4), (11,10), (6,5) как наиболее часто синтезируемые [5-6]. Для создания бесшовных соединений использовался оригинальный метод построения атомистических моделей разветвленных конструкций бесшовных соединений из углеродных наноструктур [7]. Рассмотрим процесс построения атомных суперъячеек на примере бесшовного соединения графен/УНТ (14,4). На начальном этапе в графеновой наночастице вырезалось отверстие в виде эллипса с осями  $2a = 18.5 \text{ \AA}$  и  $2b = 19.64 \text{ \AA}$ . В области полученного отверстия, а также на конце присоединяемой УНТ выделялись имеющие две ковалентные связи атомы

(рис. 1а), между которыми случайным образом генерировались координаты новых атомов (рис. 1б). После этого координаты полученной структуры уточнялись методом SCC DFTB [8], с помощью которого и проводились дальнейшие расчеты энергетических свойств. Для каждого соединения было построено 5 вариантов атомного скелета, из которых для дальнейших расчетов было выбрано по одному – с минимальной энергией.

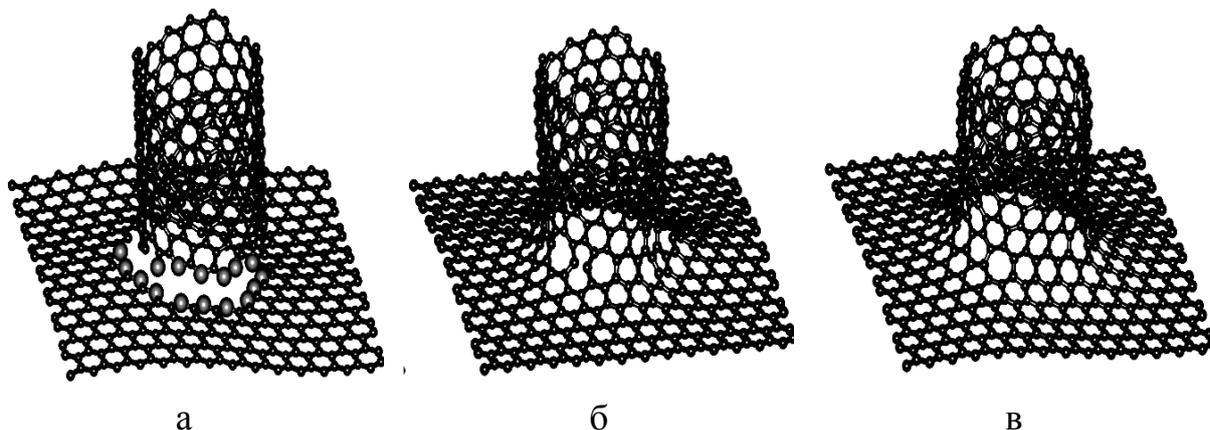


Рисунок 1. Процесс построения бесшовных соединений графен/ВОУНТ (14,4): а) выделение атомов с двумя ковалентными связями на конце УНТ и в районе отверстия графена; б) генерация атомов в пространстве между УНТ и графеном; в) конечный вид суперъячейки после оптимизации методом SCC DFTB.

На следующем этапе проводилось построение энергетического профиля роста заданных соединений с помощью разработанной авторами методики “виртуального выращивания”, которая была ранее успешно апробирована для бесшовных соединений на основе наносетчатого графена и УНТ типа «кресло» [9]. Для этого с конца УНТ, входящей в состав композита, шаг за шагом удалялся верхний слой атомов углерода, пока структура не принимала форму исходного наносетчатого графена, обладающего энергией  $E_0$ . Рис 2 демонстрирует заключительные этапы удаления верхних слоев атомистической структуры графен/ВОУНТ (14,4). На каждом шаге структура реоптимизировалась методом SCC DFTB и рассчитывалась энергия на атом  $E_i$ . В итоге после удаления каждого нового слоя энергия  $E_0 - E_i$  изображалась на диаграмме энергетического профиля роста графен/ВОУНТ (Рис. 3). Как видно из Рис. 3, формирование всех рассмотренных соединений является энергетически выгодным, так как  $E_0 - E_i$  ни в одном из случаев не превышает нуля. В момент завершения формирования 3-5 слоев композитов отмечается всплеск энергии, однако затем энергия убывает.

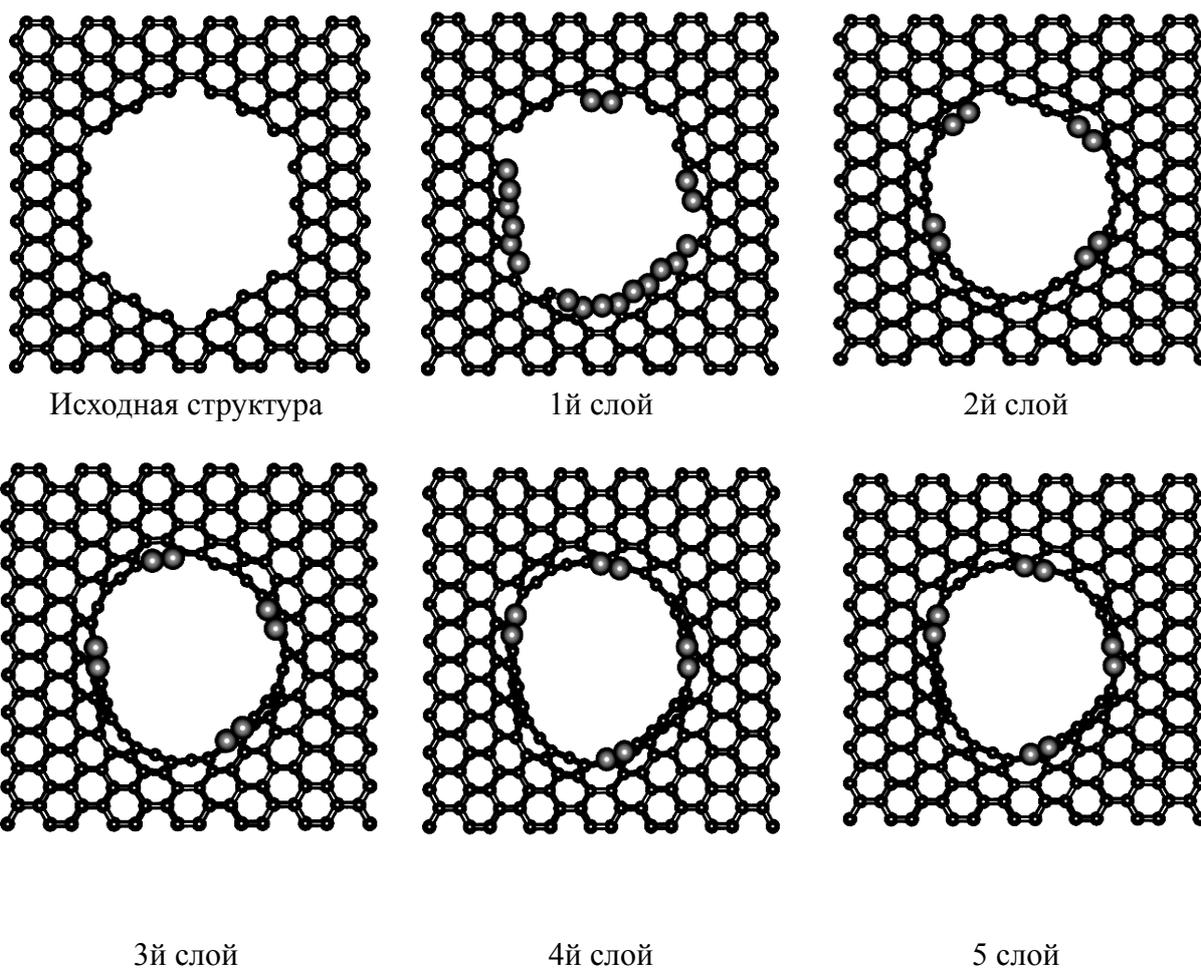


Рисунок 2. «Виртуальное выращивание» композита графен/ВОУНТ(14,4). Выделены атомы, относящиеся к новому добавленному слою.

С целью поиска оптимальных размеров суперъячейки были дополнительно построены энергетические профили роста атомистических структур графен/ВОУНТ(14,4) размерами  $44 \times 44$  и  $50 \times 50 \text{ \AA}^2$  (Рис. 3б). Как видно из рисунка, рост композитов с такими размерами суперъячейки также является возможным, однако менее энергетически выгодным в сравнении со случаем «34x34». Это объясняется тем, что для наносетчатого графена с размерами «34x34» заряды по Малликену на атомах вблизи отверстия значительно превышают заряды на атомах вблизи отверстия наносетчатого графена с большими размерами. Следовательно, данные атомы являются более химически активными, что и объясняет более выгодный рост ВОУНТ(14,4) именно из наносетчатого графена с такими размерами.

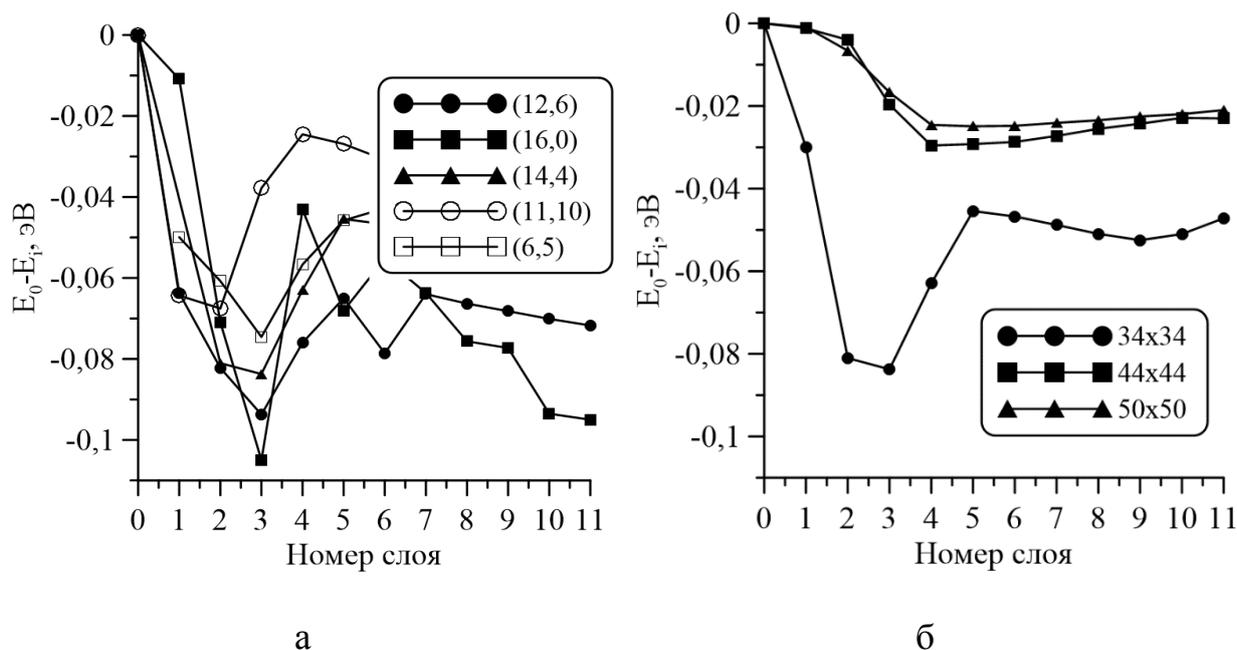


Рисунок 3. Энергетические профили роста композитов: а) графен/ВОУНТ с нанотрубками различных киральностей: (16,0), (14,4), (11,10), (12,6), (6,5); б) графен/ВОУНТ(14,4) с различными векторами трансляции.

Сделанные в результате проведенной работы выводы могут быть использованы экспериментаторами, синтезирующими 3D-материалы на основе наносетчатого графена и углеродных нанотрубок.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRР-2020-0004).*

#### Библиографический список

1. Tylianakis E, Psfogiannakis G.M., Froudakis G.E. Li-doped pillared graphene oxide: a graphene-based nanostructured material for hydrogen storage // J Phys Chem Lett. 2010. V.1. P.2459–2464.
2. Wu C-D., Fang T-H., Lo J-Y. Effects of pressure, temperature, and geometric structure of pillared graphene on hydrogen storage capacity // Int. J. Hydrog. Energy. 2012. V.37. P.14211–142163.
3. Lin J.; Zhang C.; Yan Z. et al. Dimensional graphene carbon nanotube carpet-based microsupercapacitors with high electrochemical performance // Nano Lett. 2013. Vol. 13, P.72–78.
4. Park J, Prakash V. Thermal transport in 3D pillared SWCNT–graphene nanostructures // J Mater Res. 2013. V.28 P.940–951.
5. Li M., Liu X., Zhao X. et al. Metallic Catalysts for Structure-Controlled Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes // Top. Curr. Chem. 2017. V.375(29).
6. Zhao, X., Zhang, S., Zhu, Z. et al Catalysts for single-wall carbon nanotube synthesis—From surface growth to bulk preparation // MRS Bull. 2017. V.42. P. 809–818.
7. Zhang G., Glukhova O.E. New automatic method for generating atomistic models of multi-branched and arbitrary-shaped seamless junctions of carbon nanostructures // Comput. Mater. Sci. 2020. V.184. P.109943.

8. *Elstner M., Porezag D., Jungnickel et al.* Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties // *Phys. Rev. B.* 1998, V.58, P. 7260–7268.
9. *Slepchenkov M.M., Shmygin D.S., Zhang G., Glukhova O.E.* Controlling anisotropic electrical conductivity in porous graphene-nanotube thin films // *Carbon* 2020, V.165, P.139–149.

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА К ПАРАМ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

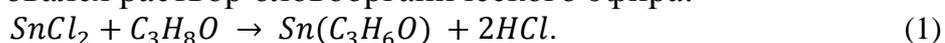
*Н. А. Клычков, Д.А. Тимошенко, И.В. Синёв, В.В. Симаков*  
Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail : nklychkov@mail.ru

Представлены результаты исследований температурных зависимостей газочувствительности тонкой полупроводниковой наноструктурированной плёнки SnO<sub>2</sub> к парам органических веществ различной концентрацией. Показано, что в исследуемом температурном диапазоне максимальная газочувствительность пленки диоксида олова к парам изопропанола достигается при температуре 350 °С. Полученные экспериментальные результаты интерпретируются в рамках модели диссоциативной адсорбции кислорода на поверхности полупроводника.

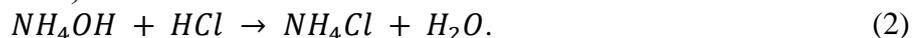
**Ключевые слова:** полупроводниковый сенсор, тонкие наноструктурированные пленки, газочувствительность, диоксид олова, золь-гель метод, диссоциативная адсорбция.

Диоксид олова является широкозонным полупроводником с электронным типом проводимости, обладающий газочувствительными свойствами [1-5]. Ввиду сочетания уникальных физико-химических свойств, диоксид олова широко используется в производстве газоаналитических сенсоров и устройств на их основе [6-8]. Детектирование газов, как правило, осуществляется при повышенных рабочих температурах ~300 °С. Это связано с необходимостью активации гетерогенных химических реакции на поверхности газочувствительного слоя сенсора, а также процессов десорбции продуктов реакции с их поверхности [4]. Поэтому, установление критериев выбора рабочей температуры сенсора является важной научно-прикладной задачей.

Газочувствительные образцы тонких пленок диоксида олова формировались золь-гель методом: изопропиловый спирт (объем 12 мл) предварительно нагревался до 80 °С, а затем смешивался с порошком хлорида олова ( $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ ) массой 1,2 г. В процессе химической реакции синтезировался раствор оловоорганического эфира:



Регулирование кислотности (pH) полученного раствора осуществлялось путем нейтрализации соляной кислоты водным раствором аммиака (объем 3,75 мл):



Полученный раствор перемешивался с помощью магнитной мешалки в течение 20 минут до формирования золя, который созревал при комнатной температуре в течение 24 часов. Кислотность полученного раствора прекурсора контролировалась универсальным индикатором и составляла  $\text{pH} = 7$ . Полученный гель методом центрифугирования наносился на подложку полированной пластины поликора с последующим отжигом в атмосфере кислорода при  $500\text{ }^\circ\text{C}$  в течение 1 часа. По данным сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) плёнка диоксида олова состояла из агломератов частиц эллипсоидальной формы нанометровых размеров. СЭМ-изображение поверхности полученных плёнок  $\text{SnO}_2$  представлено на рисунке 1.

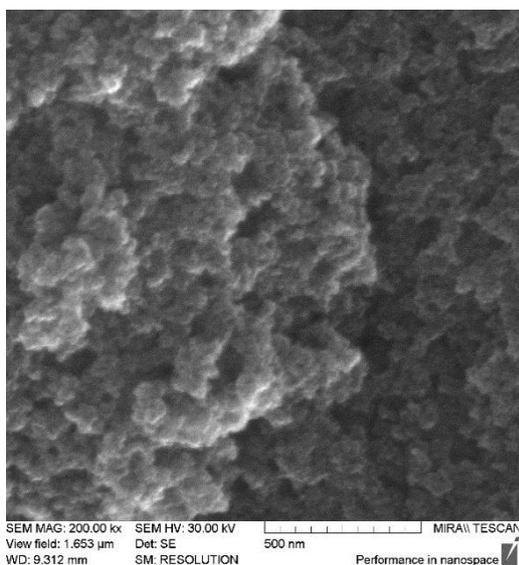


Рисунок 1 – СЭМ-изображение поверхности тонкой пленки диоксида олова, синтезированной золь-гель методом

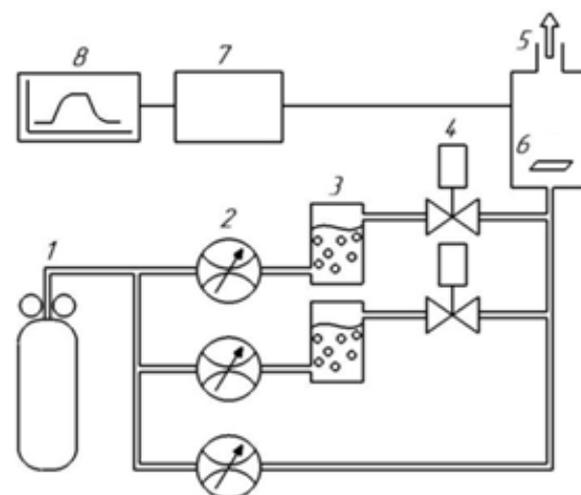


Рисунок 2 – Схема экспериментальной установки для исследования газочувствительных свойств образцов

Контактная система газового сенсора формировалась методом термического испарения сплава X20H80 с последующим осаждением через маску материала контактов на поликоровую подложку с нанесенным слоем диоксида олова.

Исследования температурной зависимости проводимости тонкой наноструктурированной пленки диоксида олова и влияния паров органических веществ на её проводимость осуществлялись с помощью экспериментальной установки [5], схема которой изображена на рисунке 2. Установка для исследования газочувствительных свойств состоит из баллона с синтетическим воздухом – 1, регуляторов расхода газа – 2,

барботёра – 3, электромагнитного клапана – 4, рабочей камеры – 5, сенсора – 6, расположенного в микротермостате, мультиметра – 7, компьютера – 8.

Из баллона 1 при помощи регуляторов расхода газа 2 подавался синтетический воздух в газопроводную систему измерительной установки. Для получения газовых проб синтетический воздух поступал в барботер 3, где пузырьки воздуха насыщались парами изопропанола. Через электромагнитный клапан 4 паро-воздушная смесь (газовая проба) поступала в рабочую камеру 5, в которой располагался газовый сенсор.

Температурная зависимость проводимости плёнки диоксида олова в атмосфере синтетического воздуха представлена на рисунке 3. На температурной зависимости наблюдался локальный минимум в диапазоне рабочих температур 300...350 °С, что может быть связано с термоактивированной диссоциативной адсорбцией кислорода в атомарной форме [6]:

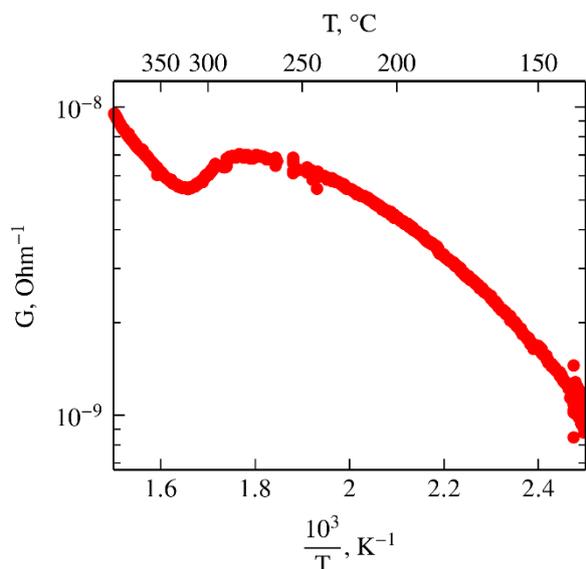


Рисунок 3 – Температурная зависимость проводимости плёнки диоксида олова в атмосфере синтетического воздуха

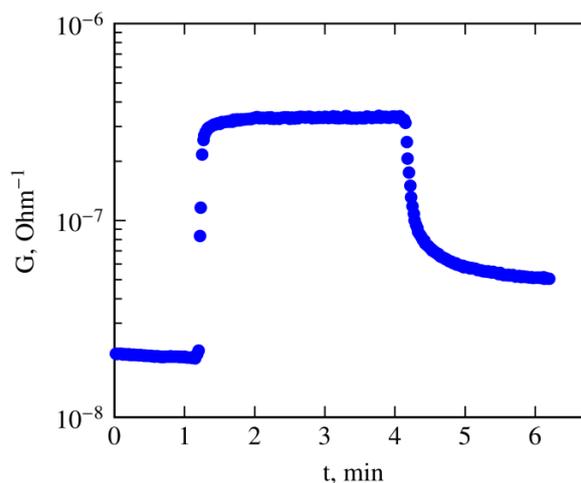


Рисунок 4 – Динамика изменения проводимости пленки диоксида олова при напуске газовой пробы, содержащей пары изопропилового спирта с концентрацией 30% от насыщенного пара

Исследование влияния паров изопропанола на проводимость пленки диоксида олова проводилось путём последовательных напусков пробы заданной концентрации в измерительную камеру в течение 3 минут. После каждого напуска газовой пробы осуществлялась продувка измерительной камеры синтетическим воздухом до восстановления проводимости образца. На рисунке 4 изображен фрагмент экспериментальных данных по динамике изменения проводимости плёнки SnO<sub>2</sub> при напуске газовой пробы, содержащей пары изопропанола.

Отклик газочувствительного образца  $S$  на воздействия газовых проб определялся как относительное изменение его проводимости:

$$S = \frac{G - G_0}{G_0}, \quad (4)$$

где  $G_0$  – проводимость образца в синтетическом воздухе;  $G$  – стационарное значение проводимости образца при напуске газовой пробы в измерительную камеру.

Измерения концентрационной зависимости газочувствительности пленки диоксида олова производились при рабочих температурах 150...400 °С в диапазоне концентраций проб от 5% до 90% насыщенного пара. Результаты измерений представлены на рисунке 5.

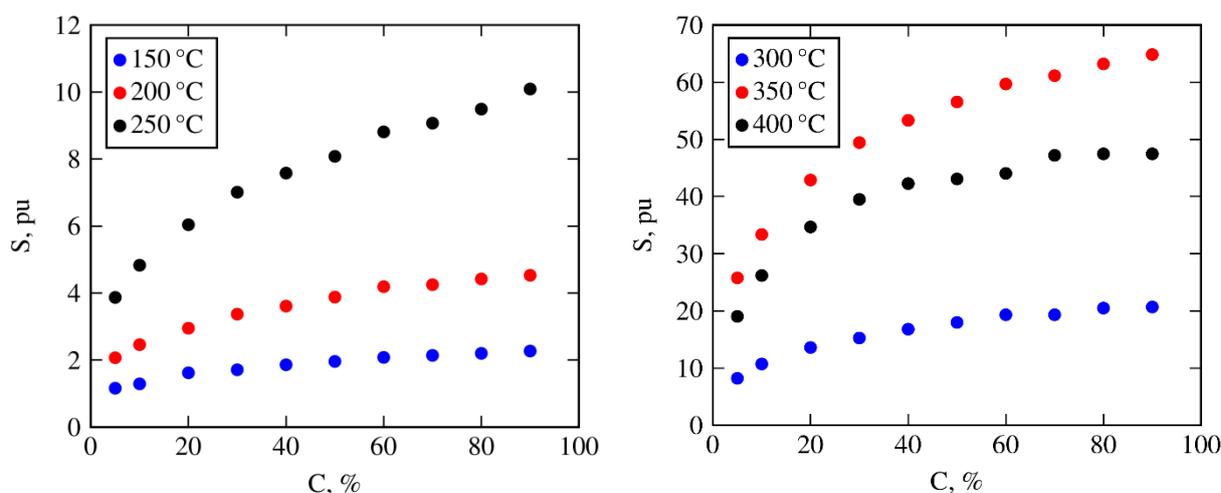
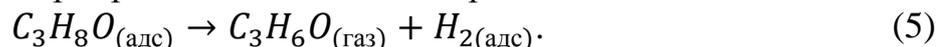
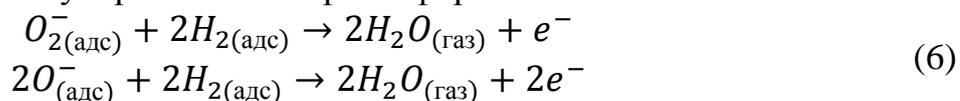


Рисунок 5 – Концентрационная зависимость отклика пленок диоксида олова к парам изопропанола при разной рабочей температуре

Анализ полученных экспериментальных результатов показал, что максимальные значения отклика газочувствительных образцов в исследуемом температурном диапазоне достигаются при рабочей температуре ~ 350 °С. По-видимому, высокая чувствительность при данной температуре обусловлена преобладанием на поверхности пленки диоксида олова хемосорбированного кислорода в атомарной форме [7]. При напуске газовой пробы содержащей пары изопропанола, на поверхности газочувствительной пленки диоксида олова происходит дегидрирование адсорбированных частиц изопропанола:



Затем водород вступает в химическую реакцию с адсорбированным кислородом в молекулярной и атомарной формах:



Увеличение рабочей температуры газочувствительного образца выше 350 °С приводит к десорбции кислорода с его поверхности. При этом

в объеме зёрен пленки образуется шунтирующий проводящий канал, что приводит к снижению её газочувствительности.

*Проведенные в работе исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-07-00602.*

#### **Библиографический список**

- 1 Симаков В.В., Якушева О.В., Гребенников А.И., Кисин В.В. Вольтамперные характеристики тонкопленочных газочувствительных структур на основе оксида олова // Письма в Журнал технической физики. 2005. Т. 31. № 8. С. 52-56.
- 2 Пономарева А. А. Иерархически организованные пористые газочувствительные слои системы SnO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>, полученные золь-гель методом; автореф. дис. канд. технич. наук / В. А. Мошников. СПб.: – 2013. – 16 с.
- 3 Синёв, И. В. Влияние освещения на распознавательную способность мультисенсорных микросистем на основе нитевидных нанокристаллов диоксида олова / И. В. Синёв, Н. А. Клычков, Д. А. Тимошенко, В. В. Симаков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – № 12. – С. 713-721.
- 4 Kisin V.V., Voroshilov S.A., Sysoev V.V., Simakov V.V. A Three-electrode gas sensor // Pribory i Tekhnika Eksperimenta. 1995. Т. 38. № 5. С. 178-181.
- 5 Синёв И. В. Аппаратно-программный комплекс многопараметрического распознавания многокомпонентных газовых смесей на основе мультисенсорных микросистем / И. В. Синёв, В. В. Симаков, Л. В. Никитина // Башкирский химический журнал. – 2010. – Т. 17. – № 5. – С. 125-127.
- 6 Синёв, И.В. Температурная зависимость сопротивления тонкопленочных резисторов на основе диоксида олова: дис. канд. физ.-мат. наук: 05.27.01: защищена 23.10.2014: утв. 03.03.2015 / Синев Илья Владимирович. - Саратов: Саратовский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, – 2014. – 209 с.
- 7 Симаков В.В., Якушева О.В., Ворошилов А.С., Гребенников А.И., Кисин В.В. Изменение проводимости тонкой пленки оксида олова при ступенчатом воздействии газовой пробы // Письма в Журнал технической физики. 2006. Т. 32. № 16. С. 75-83.
- 8 Barsan, N. Conduction model of metal oxide gas sensors / N. Barsan, U. Weimar // Journal of electroceramics. – 2001. – № 7. – С. 143-167.
- 9 Шикунов Д. А. Распознавание паров органических веществ в воздухе с помощью вариации режима работы газового сенсора / Д. А. Шикунов, В. В. Симаков, И. В. Синёв, Е. А. Щербакова, Д. А. Тимошенко // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – № 11. – С. 665-669.
- 10 Корабель, М. Д. Принципы создания виртуальной мультисенсорной системы для распознавания газовых смесей / М. Д. Корабель, И. В. Синёв, Д. А. Шикунов, Н. А. Клычков, Д. А. Тимошенко, В. В. Симаков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – № 12. – С. 827-835.

## ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ СВЕТОАДРЕСУЕМЫХ БИОСЕНСОРОВ С СУБМИКРОНЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

*А.В.Козловский, Д.Р. Байбикова, С.В. Стецюра*

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: baybikova.daniya@mail.ru

Изучена проблема низкой разрешающей способности светоадресуемых потенциометрических датчиков и предлагаемые пути её решения, а также обоснована возможность решения указанной проблемы посредством применения аморфного кремния в качестве верхнего слоя преобразователя сигнала. Показано, что увеличение длительности релаксации заряда поверхностных электронных состояний после выключения освещения, достигнутое при формировании на поверхности монокристаллического n-Si наноразмерного слоя a-Si позволяет проводить фотостимуляцию до погружения в раствор полиэлектролита, что актуально при необходимости локальной фотостимуляции полупроводниковой подложки, поскольку исключает рассеяние светового луча раствором электролита.

**Ключевые слова:** светоадресуемый биосенсор, аморфный кремний, фотостимулированная адсорбция.

Несмотря на достаточно хорошо разработанную теорию фотопроводимости неорганических и органических материалов и структур на их основе, продолжается работа над созданием новых фоточувствительных материалов и приборов. В частности, актуальной является проблема создания светоадресуемых потенциометрических датчиков (САПД) и секвенаторов с высоким разрешением [1]. Под пространственным разрешением здесь понимается расстояние между соседними участками-мишенями на полупроводниковом электронном преобразователе, для которого возможно разделение сигнала от отдельных областей. Двумя основными факторами, ограничивающими разрешение САПД, являются боковая диффузия неосновных носителей заряда из освещенной области в полупроводниковой подложке и качество светового фокуса для возбуждения носителей заряда. В данном исследовании была изучена проблема низкой разрешающей способности САПД и предлагаемые пути её решения, а также обоснована возможность решения указанной проблемы посредством применения аморфного кремния в качестве преобразователя сигнала.

На рис. 1 представлена классификация методов, предлагаемых в настоящее время для решения проблемы низкого разрешения САПД. Каждая группа методов имеет свою специфику. Так использование сетчатого рабочего электрода позволяет сдерживать боковую диффузию и повышать стабильность сигнала, но при этом скорость изменения фототока замедляется в 2,5 – 3,7 раза и происходит существенное уменьшение амплитуды фототока, что приводит к потере чувствительности [2]. При

уменьшении толщины Si от 300 до 5 мкм можно улучшить пространственное разрешение от 500 до 0,5 мкм. Но пластина Si тоньше 100 мкм является весьма хрупкой. Проблема хрупкости решается созданием структуры типа «кремний на сапфире», которая помимо этого обеспечивает высокий коэффициент пропускания света и пространственное разрешение до 1,5 мкм на длине волны 405 нм [3]. Но несоответствие коэффициентов теплового расширения Si и сапфира приводит к высокой плотности поверхностных состояний и высоким токам утечки.

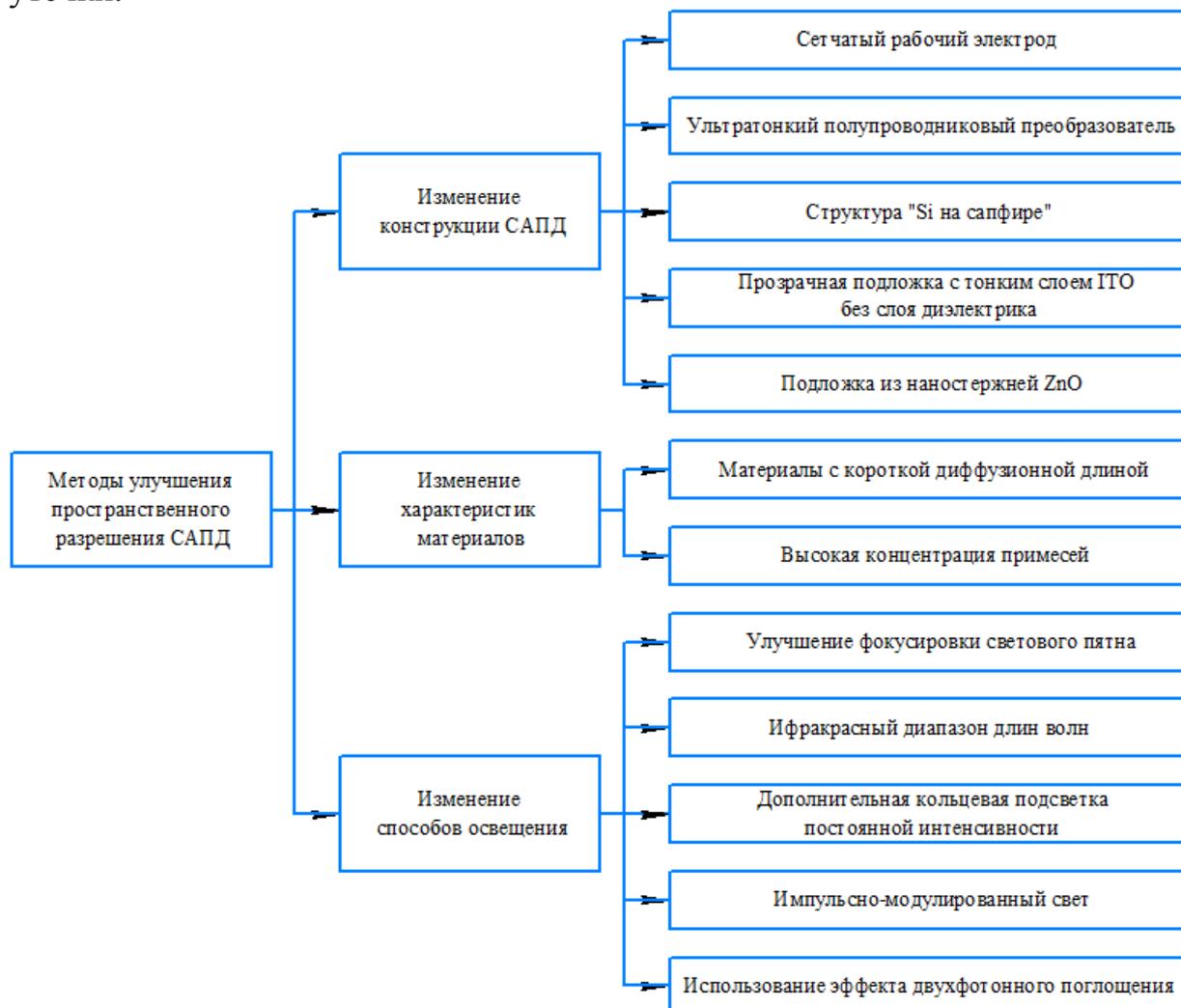


Рисунок 1. Методы улучшения пространственного разрешения САПД

Для решения этой проблемы в изолирующий слой предлагают заменить хорошим оксидом или самоорганизующимся монослоем. Авторы [4] предложили использовать оксид индия-олова (ИТО) на стекле. Несомненными достоинствами разработки являются низкая стоимость, надежность, стабильность и простота модификации. Пространственное разрешение достигает здесь 2,3 мкм на длине волны 405 нм. Но сенсоры на стекле с покрытием ИТО обладают сверхгернеровской чувствительностью к рН, что существенно ухудшает соотношение сигнал/шум. Кроме того,

согласно [1], селективность такой структуры к ионам пока не проверялась.

Авторы [5] предложили использовать массив наностержней ZnO в качестве сенсорной подложки. Длина диффузии неосновных носителей заряда в ZnO составляет 0,13 – 0,44 мкм, что на несколько порядков меньше, чем в Si. Диаметр наностержней ZnO значительно меньший, чем длина волны света, что делает пренебрежимо малым эффект рассеяния света и приводит к лучшему разрешению – до 2 мкм.

Попытка применить высоколегированные полупроводниковые преобразователи сигнала привела к увеличению скорости рекомбинации неосновных носителей заряда, генерированных освещением. Это уменьшило диффузионную длину и дало незначительное улучшение разрешения (< 30 мкм) [1]. Но высокая скорость рекомбинации одновременно ведет к снижению фототока и, следовательно, к низкой чувствительности [3]. Была предпринята попытка использования материалов с короткой диффузионной длиной (GaAs, GaN). Так на эпитаксиальном слое GaAs толщиной 8 мкм было достигнуто пространственное разрешение 3,1 мкм.

Значительное количество работ посвящено способам уменьшения размера пятна источника света, как прямому способу повысить разрешение САПД [6]. В частности, использование ближнего инфракрасного облучения с тыльной стороны кремниевых подложек толщиной до 20 мкм позволяет получить пространственное разрешение менее 10 мкм. Использование дополнительной подсветки фиксированной интенсивности в форме кольца, предлагаемое авторами [3] для кремниевых подложек толщиной до 200 мкм, увеличивает концентрацию фотоносителей, а усиленная рекомбинация вдоль кольца блокирует боковую диффузию, индуцированную модулированным светом зонда. Использование короткого светового импульса с высокой интенсивностью также может эффективно устранять влияние рассеянных фотоносителей, а более короткое время интегрирования светового импульса способствует улучшению пространственного разрешения в 6 и более раз. Этот метод также приводит к более низкому отношению сигнал/шум. Авторы [3] также показали, что улучшение разрешения до 0,8 мкм возможно при использовании двухфотонного эффекта при возбуждении носителей заряда фемтосекундным лазером с длиной волны 1250 нм.

В дополнение к указанным способам нами предложен способ уменьшения пространственного разрешения САПД за счет формирования субмикронных полиэлектролитных областей-мишеней на поверхности полупроводникового преобразователя с использованием фотостимулированного осаждения [7]. Чтобы луч света не рассеивался раствором электролита, предлагается метод предварительной (до погружения в раствор) фотостимуляции процесса адсорбции полиэлектролитных молекул, в результате которой происходит

перезарядка поверхностных электронных состояний в Si на освещаемых субмикронных участках, сохраняющаяся длительное время. Реализовать метод позволил слой аморфного кремния (*a*-Si) толщиной 100 нм на поверхности монокристаллической пластины Si. *a*-Si увеличивает время релаксации поверхностного потенциала структуры Si/*a*-Si после её освещения (рис. 2) и изменяет влияние освещения на результат нанесения на её поверхность заряженных полиэлектролитных молекул [8]. Время релаксации поверхностного потенциала кремниевых подложек после выключения освещения оценивалось по изменению контактной разности потенциалов ( $\phi_{\text{КРП}}$ ), измеренной методом зонда Кельвина с использованием сетчатого золотого электрода.

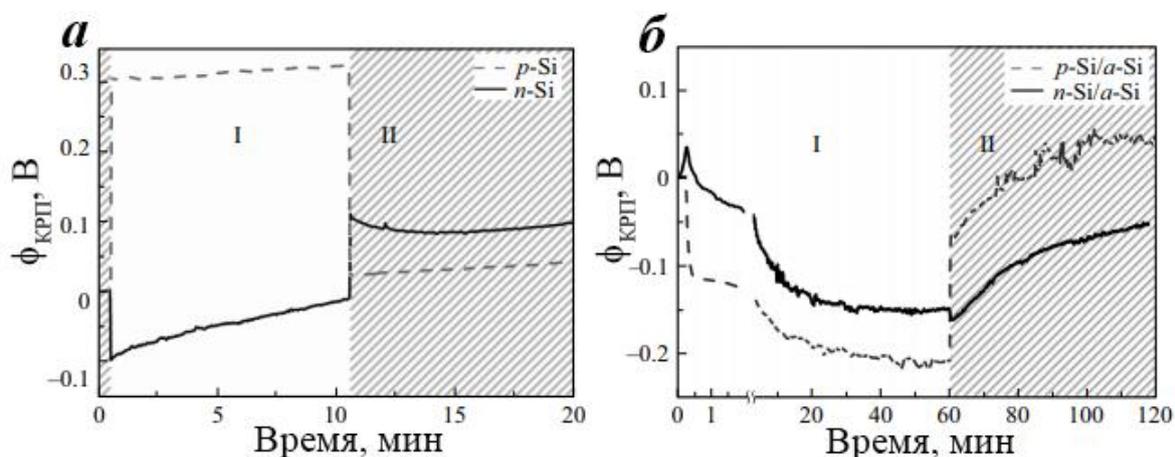


Рисунок 2 Изменение КРП для структур на основе *n*- и *p*-Si без слоя *a*-Si (а) и со слоем *a*-Si (б) при включении (диапазон времени I) и выключении (диапазон времени II) освещения

Таким образом, увеличение длительности релаксации заряда поверхностных электронных состояний после выключения освещения (рис. 2б), достигнутое при формировании на поверхности структуры *n*-Si/SiO<sub>2</sub> наноразмерного слоя *a*-Si позволяет проводить фотостимуляцию кремниевой подложки до погружения в раствор полиэлектролита, что актуально при необходимости локальной фотостимуляции полупроводниковой подложки, поскольку исключает рассеяние светового луча раствором электролита.

#### Библиографический список

1. Liang T., Qiu Y., Gan Y., Sun J., Zhou S., Wan H., Wang P. Recent Developments of High-Resolution Chemical Imaging Systems Based on Light-Addressable Potentiometric Sensors (LAPSs) // *Sensors*. 2019. V.19(19). P.4294.
2. Chen D., Liu S., Yin S., Liang J. Decreasing lateral diffusion of photo-generated carriers for light-addressable potentiometric array by using meshed working electrode // *Optical Engineering*. 2016. V.55(9). P.097104.
3. Wu F., Campos I., Zhang D.-W., Krause S. Biological imaging using light-addressable potentiometric sensors and scanning photo-induced impedance microscopy // *Proceedings A.* 2017. V.473(2201). P.20170130.

4. Wang J., Du L., Krause S., Wu C., Wang P. Surface modification and construction of LAPS towards biosensing applications // *Sensors and Actuators B*. 2018. V.265. P.161–173.
5. Ying T., Ahmad N., Briscoe J., Zhang D.-W., Krause S. Light-Addressable Potentiometric Sensors Using ZnO Nanorods as the Sensor Substrate for Bioanalytical Applications // *Analytical Chemistry*. 2018. V.90(14). P.8708–8715.
6. Yoshinobu T., Krause S., Miyamoto K. et al. (Bio-)chemical Sensing and Imaging by LAPS and SPIM // *Label-Free Biosensing*. 2018. V.16. P.103–132.
7. Стецюра С.В., Козловский А.В., Митин Д.М., Сердобинцев А.А. Структуры для биосенсорики на основе Si/a-Si, полученные с помощью фотостимулированной адсорбции // Сб. мат. X Междунар. науч.-техн. конф. «Микро- и нанотехнологии в электронике». – Нальчик: Изд-во Каб.-Балк. ун-та, 2018. С.350–354.
8. Стецюра С.В., Козловский А.В., Митин Д.М., Сердобинцев А.А. Влияние слоя аморфного кремния на адсорбционные свойства полупроводниковой структуры в условиях фотостимуляции // Письма в журнал технической физики. 2019. Т.45. №2. С.14–17.

## ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ- ПОЛУПРОВОДНИКОВ $TlGaSe_2$ и $TlInS_2$

*Кааби Сабах Абед Дауд<sup>1</sup>, Н.А.Дроздов<sup>2</sup>, А.В.Скрипаль<sup>1</sup>, В.Н. Гусятников<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет,

<sup>3</sup>ФГБОУ ВО «Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.»

E-mail: skripala\_v@info.sgu.ru

Исследована кинетика спада фотопроводимости в легированных кристаллах  $TlGaSe_2$  и  $TlInS_2$  различными примесями. Установлено проявление различий высокого и низкого уровней возбуждения в кинетиках фотопроводимости, образование примесных каналов рекомбинации, описываемых моделью Шокли-Рида-Холла, через примеси: эрбий, тербий, железо (глубокий центр), возникновение центров прилипания носителей заряда в кристаллах, легированных бором, уменьшение время жизни неравновесных носителей заряда до 0,65 мс при 70 К и до 2 мкс при 295 К при легировании образцов  $TlGaSe_2$  железом 0,1 % вследствие возникновения дополнительного канала рекомбинации Шокли-Рида-Холла через глубокие центры, образованные примесью железа.

**Ключевые слова:** тройные полупроводниковые соединения  $TlGaSe_2$ ,  $TlInS_2$ , кинетика спада фотопроводимости, рекомбинация Шокли-Рида-Холла, время жизни неравновесных носителей заряда

Исследования материалов  $TlGaSe_2$  и  $TlInS_2$  ведутся достаточно интенсивно в силу уникальности их оптических и электрофизических свойств и значительных перспектив их практического использования [1]. Активно исследуется влияние дефектно-примесной подсистемы

кристаллов на специфику их физических свойств и особенности низкотемпературных фазовых переходов.

Однако сведений о влиянии конкретных легирующих примесей на свойства таких материалов недостаточно. В связи с этим целью данной работы являлось исследование кинетики спада концентрации неравновесных носителей заряда при импульсном оптическом возбуждении, а также методом нестационарного фототока при СВЧ зондировании.

Измерение времени жизни неравновесных носителей заряда проводилось на кристаллах  $\text{TlGaSe}_2$  и  $\text{TlInS}_2$  разной степени легирования по кинетике спада фотопроводимости. Установлено, что функция кинетики спада концентрации неравновесных носителей заряда в кристаллах  $\text{TlGaSe}$  при температурах 70 К и 295 К близка к гиперболической.

Рассчитанное из набора кинетик спада избыточной проводимости время жизни неравновесных носителей заряда, как функция неравновесной концентрации, показало, что время жизни неравновесных носителей заряда изменяется пропорционально  $\Delta n^2$  при концентрациях свободных носителей заряда выше  $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , что характерно для Оже-рекомбинации.

В области низкого уровня возбуждения ( $\Delta n < 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ) кинетика спада неравновесных носителей заряда дает значение времени жизни неравновесных носителей заряда 5-7 мс для 70 К и 10–15 мкс для 295 К.

Легирование образцов  $\text{TlGaSe}_2$  железом на порядок уменьшает время жизни носителей заряда до 0,65 мс при 70 К (рис. 5.13,б) и до 2 мкс при 295 К и уровне возбуждения менее  $10^{15} \text{ см}^{-3}$  (рис. 1,а), что свидетельствует о возникновении дополнительного канала рекомбинации Шокли-Рида-Холла через глубокие центры, образованные примесью Fe. Однако на время жизни носителей заряда существенное влияние могут оказывать процессы, связанные с уровнем прилипания.

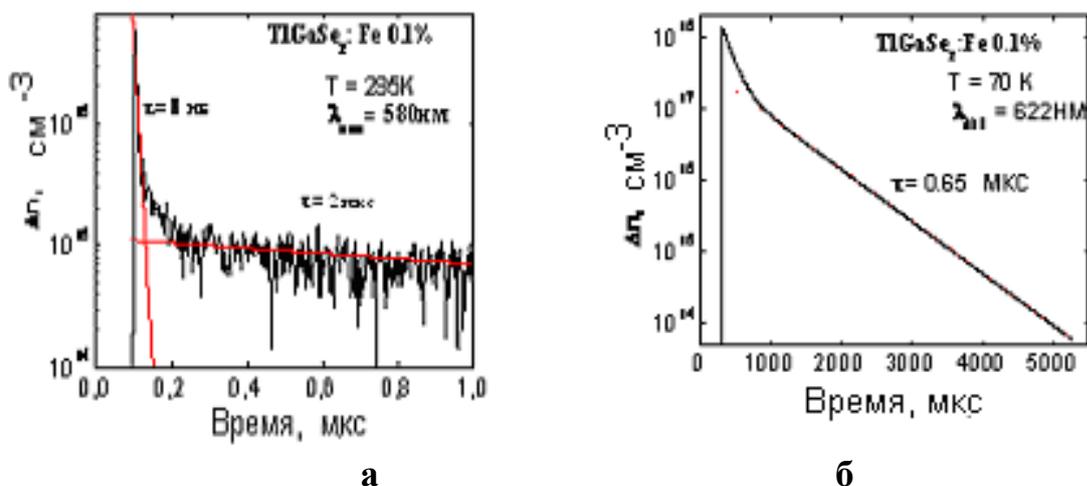


Рисунок 1 – Кинетики спада неравновесных носителей заряда в кристаллах  $\text{TlGaSe}_2$ : а – для  $T = 295 \text{ K}$ ; б – для  $T = 70 \text{ K}$ .

В этом случае увеличение концентрации неравновесных носителей заряда может привести к ограничению влияния центров прилипания. Этим и объясняется сильное уменьшение времени жизни носителей заряда до 8 нс в области возбуждения более  $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  при комнатной температуре, (рис. 1,а).

Отсутствие подобного процесса при 70 К, (см. рис. 1,б) можно объяснить необходимостью преодоления потенциального барьера дыркой, чтобы попасть на центр рекомбинации. При низкой температуре тепловой энергии носителей заряда для такого процесса недостаточно.

Таким образом, время жизни неравновесных носителей заряда в нелегированных кристаллах при высоких уровнях возбуждения ( $> 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ) определяется Оже-процессами, а при низких – рекомбинацией через локальные центры. При этом, легирование кристаллов  $\text{TlGaSe}_2$  железом приводит к появлению дополнительных глубоких ловушек, являющихся эффективными центрами рекомбинации.

Кроме указанных измерений времени жизни неравновесных носителей заряда по кинетике спада фотопроводимости бесконтактным способом, время жизни также определялось методом нестационарного фототока при СВЧ зондировании [2, 3].

Результаты измерения времен жизни из начальных (быстрых)  $\tau_1$  и асимптотических (длинновременных)  $\tau_2$  компонент кинетик спада нестационарного фототока при длинах волн возбуждающего света 532 нм и 1064 нм в легированных кристаллах  $\text{TlGaSe}_2$  и  $\text{TlInS}_2$  представлены на рис. 2 – 4.

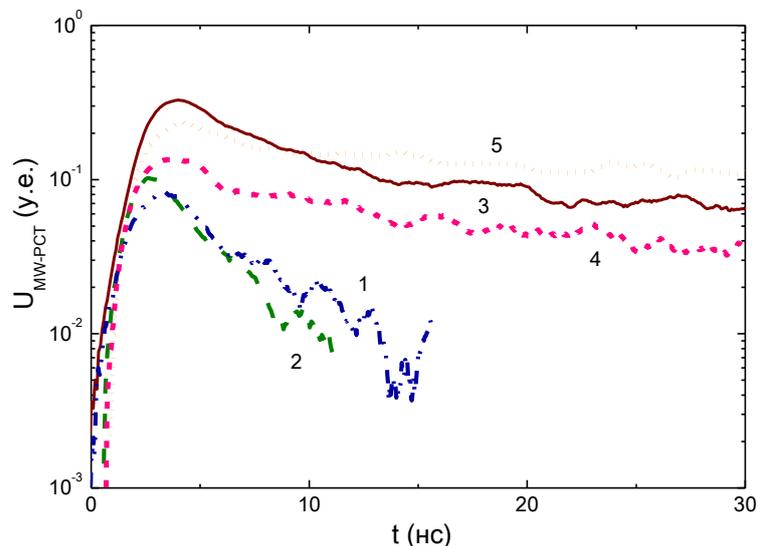


Рисунок 2 Начальные компоненты кинетики спадов нестационарного фототока в кристаллах  $\text{TlGaSe}_2$ , легированных бором (1), алюминием (2), серебром (3), тербием (4) и неодимом (5)

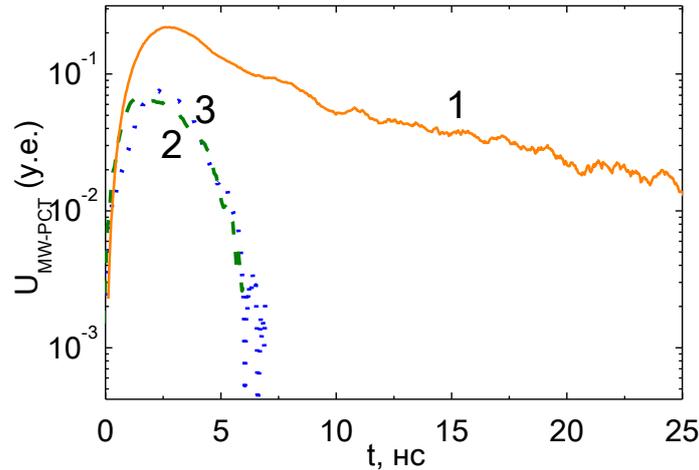


Рисунок 3 Начальные компоненты кинетики спадов нестационарного фототока в кристаллах TlInS<sub>2</sub>, легированных бором (1), тербием (2) и эрбием (3)

Основной причиной наличия длинновременного спада является присутствие в исследуемом материале центров прилипания носителей заряда.

Определенные на основе этих измерений нестационарные времена жизни носителей заряда приведены в табл.1.

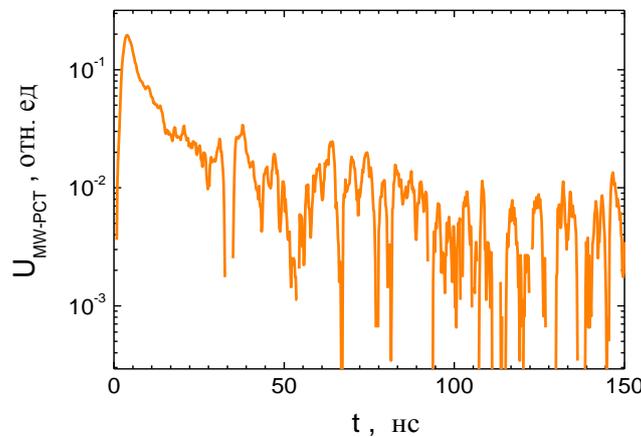


Рисунок 4 Асимптотическая (долговременная) компонента спада неравновесной проводимости в TlInS<sub>2</sub> с примесью бора.

Таблица 1 Времена жизни носителей, определенные из кинетик спада нестационарного фототока при СВЧ зондировании

Элемент	Al	B	Tb	Ag	Nd	Er
TlGaSe <sub>2</sub>						
$\tau_1$ (нс)	3.8	5	5.5	11	11	-
$\tau_2$ (нс)			7,3	380	9100	
TlInS <sub>2</sub>						
$\tau_1$ (нс)	-	5	1.2	-	-	0.8
$\tau_2$ (нс)	-	30	-	-	-	-

Анализируя кинетики спадов неравновесной проводимости, можно сделать следующее заключение. В кристаллах  $\text{TlInS}_2$ , легированных Er и Tb, наблюдаются дефекты с примерно одинаковыми энергетическими уровнями и наблюдаются близкие кинетики спада неравновесной проводимости и времена  $\tau_1$  равны 1,2 нс и 8 нс для  $\text{TlInS}_2$ , легированного Tb и Er соответственно. При этом длинновременная компонента кинетики в данном типе кристаллов отсутствует. Для  $\text{TlInS}_2$ , легированного бором, наблюдается более широкий спектр уровней дефектов, что и обуславливает наличие как быстрой, так медленной компоненты спада неравновесной проводимости.

Можно констатировать, что рекомбинационные параметры легированных разными примесями образцов  $\text{TlGaSe}_2$  и  $\text{TlInS}_2$  достаточно сильно различаются в зависимости от уровня возбуждения и легирующей примеси.

Время жизни неравновесных носителей заряда при высоких уровнях возбуждения ( $> 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ) определяется Оже-процессами, а при низких – рекомбинацией через локальные центры. При этом легирование кристаллов  $\text{TlGaSe}_2$  железом приводит к появлению глубоких центров, являющихся эффективными каналами рекомбинации. В кристаллах  $\text{TlInS}_2$ , легированных Er и Tb, идет рекомбинация через локальные центры. В кристаллах, легированных бором, помимо этого появляются достаточно эффективные центры прилипания природа которых пока неизвестна. Это может быть связано с возникновением доменных образований (автосолитонов) вблизи фотостимулированного фазового перехода вследствие сильного взаимного влияния электронной и решеточной подсистем, проявляющееся в формировании мощных уровней прилипания [4].

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания 8.7628.2017/БЧ.*

#### **Библиографический список**

1. Кааби С. А., Дроздов Н. А., Королик О. В. Оптическое поглощение и комбинационное рассеяние света в легированных кристаллах  $\text{TlGaSe}_2$  и  $\text{TlInS}_2$  // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2018. Т. 18, вып. 2. С. 112–122.
2. Gaubas E. Transient absorption techniques for investigation of recombination properties in semiconductor materials. // Lith. Journ. Phys. vol. 43 (2003) 145–165.
3. Gaubas E., Bauža M., Vaitkus J., Li Z., Härkönen J. and Fretwurst E. Study of carrier recombination and trapping processes in the  $\gamma$ -rays and proton irradiated silicon. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol. 552 pp. 66–70 (2005).
4. Мамин Р.Ф. Новый вид доменной структуры вблизи фотостимулированного фазового перехода, автосолитоны // Письма в ЖЭТФ, 1994, том 60, вып. 1, с.51–55.

# МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПЛЕНОК CdS, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЖЕЛЕЗОМ

*С.В. Стецюра, П.Г. Харитонова*

Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail : haritonovapg@gmail.com

В данной работе исследуются морфология и структура пленочных образцов CdS, легированных атомами железа из ограниченного источника посредством термического отжига. Показано, что полученный материал CdS:Fe имеет ферромагнитные наноразмерные фазы 2-х типов: на поверхности -  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, и в объеме - FeS. За счет наличия однотипных кристаллических решеток у CdS и FeS и малой растворимости компонент образование ферромагнитных фаз в CdS оказывает минимальное влияние на фоточувствительность полученного материала в видимом диапазоне.

**Ключевые слова:** полумагнитный материал, сульфиды кадмия и железа, кристаллическая структура, ферромагнитные включения, магнито-силовая микроскопия.

Развитие электроники тесно связано с привлечением новых материалов. Для различных областей применения требуются материалы с различным набором функциональных свойств, некоторые из которых могут быть уникальными. Полумагнитные материалы, прогнозируемые к применению в современной промышленности, одновременно интересны и для науки благодаря многообразию проявлений их свойств. В настоящее время активно разрабатываются полумагнитные материалы на основе халькогенидов кадмия, легированных атомами магнитных металлов, в основном атомами марганца, имеющему высокую растворимость в CdS в твердом состоянии [1]. Легирование атомами железа представляет не меньший интерес [2,3], т.к. растворимость железа в CdS, напротив, не велика и составляет не более 20 %, что в соответствии с модельными представлениями должно привести к образованию гетерогенных наноразмерных структур на основе фоточувствительной матрицы с ферромагнитными включениями, которые образуются в результате процессов самоорганизации, распада и окисления пересыщенного твердого раствора Cd<sub>x</sub>Fe<sub>1-x</sub>S [4]. Сульфид кадмия в качестве основы для получения полумагнитной гетерогенной структуры перспективен ввиду технологичности и высокой фоточувствительности, позволяющей управлять свойствами структуры с помощью излучения видимого диапазона [5,6].

Таким образом, полумагнитные фоточувствительные полупроводники интересны благодаря значительной управляемости магнитных и оптических свойств этих материалов и магнитным полем, и освещением, что может быть использовано для создания полупроводниковых приборов фотоники и спинтроники. К таким

приборам относятся датчики магнитного поля и тока, запоминающие и логические элементы, спиновые транзисторы, а также магнитоуправляемые оптические элементы, используемые в оптическом диапазоне.

Очевидно, что на магнитные и фотоэлектрические свойства полумагнитного материала типа CdS:Fe будет оказывать влияние кристаллическая структура и морфология поверхности полученных структур, изучение которых является целью данного исследования.

Пленочные образцы CdS, легированные атомами железа были получены из ограниченного источника (наноразмерной пленки) посредством термического отжига при  $550 \pm 5$  °C, а изменения свойств, морфологии и структуры изучалось в сравнении с немодифицированным образцом, полученным в тех же условиях.

Существует две кристаллические модификации пленки CdS: гексагональная и кубическая структуры. С помощью рентгенодифракционного метода (XRD) была определена кристаллическая структура исследуемой пленки CdS (рис.1).

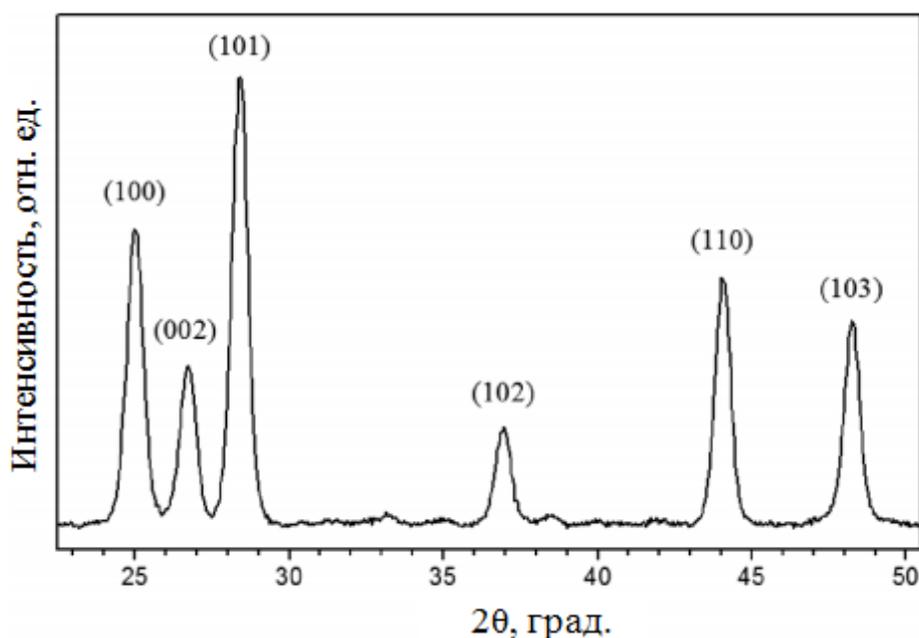


Рисунок 1. Дифрактограмма структуры поликристаллической пленки CdS после отжига пленки при  $550 \pm 5$  °C в течение 15 мин

По данным [7], а также согласно положению пиков на дифрактограмме рисунка 1, кристаллиты CdS имеют структуру вюрцита, то есть гексагональную геометрию расположения атомов в элементарной ячейке. Типичные пики для кубической структуры, такие как  $26,51^\circ$  с ориентацией (111),  $30,71^\circ$  с ориентацией (200),  $43,9^\circ$  (220),  $52,10^\circ$  (311) не наблюдались для отожженной пленки CdS. Таким образом, пленка является однородной по кристаллическому строению, а анализ

дифрактограмм показывает наличие гексагональной фазы CdS с параметрами ячейки  $a = 4,11 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,66 \text{ \AA}$  [8].

При анализе оже-спектров полупроводниковой плёнки CdS, легированной Fe, отчетливо наблюдались пики железа, а также пик оксида железа (рис.2).

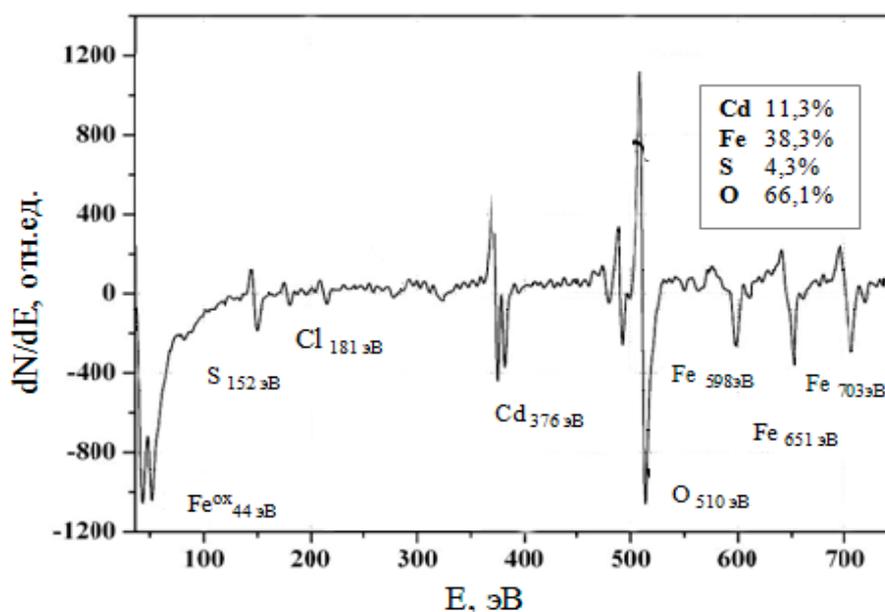


Рисунок 2. Оже-спектр отожженного пленочного образца CdS, легированного Fe в процессе отжига

Для определения химических соединений, образованных в пленке в процессе отжига, был проведен полуколичественный анализ оже-спектра. Начальное предположение заключалось в том, что сера на поверхности образует химические соединения только с кадмием. Избыток атомов кадмия и пик кислорода свидетельствуют о том, что на поверхности есть также фаза CdO. Количество атомов железа соотносится с интенсивностью пиков кислорода, как 2 к 3, что соответствует фазе  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Одна из полиморфных модификаций данного оксида -  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  - известна как материал, используемый в качестве рабочей среды для магнитной записи информации [9].

Для изучения гетерогенности пленки CdS, модифицированной Fe, и одновременно определения магнитных свойств этого материала была применена магнито-силовая микроскопия (МСМ). Измерения проводились по двухпроходной методике. На рисунке 3 представлен график, на котором показано сравнение рельефа поверхности в режиме атомно-силовой микроскопии и изменение взаимодействия зонд-образец в режиме МСМ  $\Delta\phi$  при приложении магнитного поля в 500 Э.

Из представленных результатов на рисунке 3 можно отметить, что наибольшая разность в сигнале МСМ при приложении внешнего

магнитного поля и без него наблюдается в местах минимума рельефа, то есть на границах кристаллитов, где и происходит замещение атомов кадмия с образованием FeS или окисление железа. Послойное исследование материала показало, что процессы окисления преобладают на поверхности пленки, а замещения серы – в объёме.

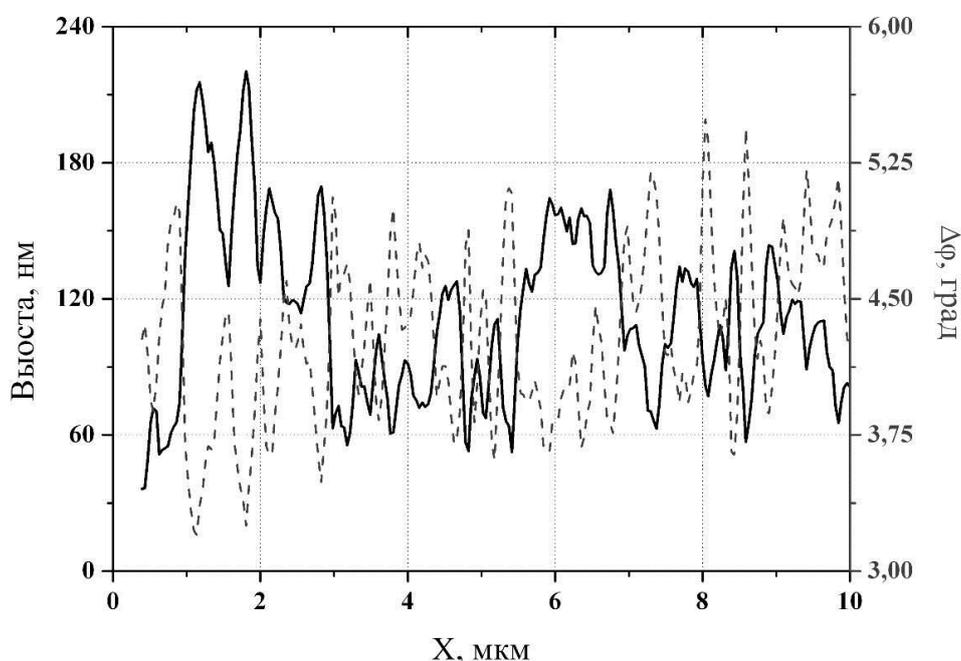


Рисунок 3. Сравнение рельефа поверхности с разностью сигналов MCM при внешнем магнитном поле и без него образцов CdS:Fe

Таким образом, можно ожидать, что материал CdS:Fe будет демонстрировать свойства полумагнитного материала, но с расширенным функционалом за счет наличия ферромагнитных наноразмерных фаз 2-х типов: существование одной ферромагнитной фазы на поверхности  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, а другой – в объёме FeS [10]. Также, можно предположить, что за счет наличия однотипных кристаллических решеток у CdS и FeS (имеют гексагональную решетку, CdS с параметрами ячейки  $a = 4,11 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,66 \text{ \AA}$ , FeS с параметрами ячейки  $a = 3,43 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,79 \text{ \AA}$  [11]), легирование CdS атомами железа, окажет минимальное влияние [12] на фоточувствительность полученного гетерофазного материала.

#### Библиографический список

1. Исаева А.А., Смагин В.П. Синтез и фотолюминесценция наноразмерных структур на основе сульфидов цинка, кадмия и марганца в полиакрилатной матрице // Физика и техника полупроводников. 2020. Т.54. №12. С. 1321-1330.
2. Thirumala Rao G., Ravikumar R.V.S.S.N. Novel Fe-doped ZnO-CdS nanocomposite with enhanced visible light-driven photocatalytic performance // Materials Research Innovations. 2020. pp.1-6.
3. Saha A., Shetty A., Pavan A. R., Chattopadhyay S., Shibata T., Viswanatha R. Uniform Doping in Quantum-Dots-Based Dilute Magnetic Semiconductor // J. Phys. Chem. Lett. 2016. 7(13). P. 2420–2428.

4. *Стецюра С. В., Харитонова П. Г., Маляр И. В.* Полумагнитное пленочное покрытие на основе фоточувствительного полупроводника // Прикладная физика. 2020. №5. С. 66-72.
5. *Кирьяшкина З.И., Роках А.Г., Кац Н.Б. и др.* Фотопроводящие пленки типа CdS. - Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 1979. 193 с.
6. *Роках А.Г., Стецюра С.В.* Влияние неоднородностей на фотоэлектрические характеристики гетерофазных пленок системы  $CdS_xSe_{1-x}$  - PbS // Неорганические материалы. 1997. Т. 33. № 2. С. 198-200.
7. *Moualkia H., Hariach S., Aida M.S.* Structural and optical properties of CdS thin films grown by chemical bath deposition // Thin Solid Films. 2009. 518(4). P.1259–1262.
8. *Strauch D.* New Data and Updates for several III-V (including mixed crystals) and II-VI compounds // Landolt-Börnstein – Group III Condensed Matter. 2012. V. 44E. P. 99–102.
9. *Levy, M., Quarta, A., Espinosa, A., et. al.* Correlating Magneto-Structural Properties to Hyperthermia Performance of Highly Monodisperse Iron Oxide Nanoparticles Prepared by a Seeded-Growth Route // Chemistry of Materials. 2011. 23(18). P. 4170–4180.
10. *Стецюра С.В., Харитонова П.Г., Маляр И.В.* Новый магнитомягкий материал для медицинских применений // Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2020: сборник статей Всероссийской школы-семинара. – Саратов: изд-во Саратовский источник, 2020. С. 108-111.
11. *Брегг У.Л., Кларингбулл Г.Ф.* Кристаллическая структура минералов. – М.: «МИР», 1967. 390 с.
12. *Роках А.Г., Стецюра С.В., Сердобинцев А.А.* Гетерофазные полупроводники под действием излучений // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2005. Т. 5. № 1. С. 92-102.

## ИК СПЕКТРЫ И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ 2-БЕНЗИЛФЕНОЛА

*М.Д. Москвитин<sup>1</sup>, Л.М. Бабков<sup>1</sup>, Н.А. Давыдова<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Институт физики НАН Украины, Киев

E-mail: moskvitinmixail@mail.ru

В статье представлены результаты комплексных исследований структуры и колебательного ИК спектра 2-бензилфенола. В области  $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$  в интервале температур  $11 - 335 \text{ К}$  в стабильной метастабильной и жидкой фазах измерены ИК спектры 2-бензилфенола. С помощью метода теории функционала плотности B3LYP/6-31g(d) построены структурно-динамические модели молекулы 2-бензилфенола в гармоническом и ангармоническом приближениях. Проведено сравнение рассчитанных и измеренных спектров и дана их интерпретация.

**Ключевые слова:** 2-бензилфенол, ИК спектр, структура, молекула, молекулярное моделирование, нормальное колебание, частота, интенсивность

2-бензилфенол на протяжении ряда лет является объектом теоретических и экспериментальных исследований, предмет которых разнообразен. Его вводят в состав супрамолекулярных ансамблей, с помощью которых распознают цезий [1]: эксперименты по экстракции показывают, что 2-бензилфенол является эффективным и селективным

экстрагентом цезия. Структура и ИК спектры 2-бензилфенола исследовались в работе [2]: показано, что в твердокристаллической фазе конформация молекулы 2-бензилфенола соответствует одному из четырех минимумов потенциальной энергии, предсказанных неэмпирическими квантово-химическими расчетами для изолированной молекулы. В работе [3] экспериментально исследованы кристаллический полиморфизм и водородная связь в 2-бензилфеноле.

В данной работе впервые решена задача построения структурно-динамических моделей молекулы 2-бензилфенола в гармоническом и ангармоническом приближениях с целью оптимизации результатов моделирования и предложена интерпретация измеренного ИК спектра этого соединения. Исследования носили комплексный характер и основывались на методах квантовой химии и колебательной ИК спектроскопии (эксперимент, теория).

ИК спектры 2-бензилфенола измерены в области  $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$  в интервале температур  $11 - 335 \text{ К}$  в стабильной метастабильной и жидкой фазах. В моделировании использован метод теории функционала плотности, ТФП, B3LYP/6-31g(d) [4,5], реализованный в программном пакете GAUSSIAN'09. Минимизирована энергия, оптимизирована геометрия, вычислены механические и электрооптические параметры молекулы 2-бензилфенола, рассчитаны частоты и формы ее нормальных колебаний и их интенсивности в ИК спектре.

Минимизированная энергия молекулы составила  $806,87963952$  Хартри. Строение молекулы, соответствующее этой энергии приведено на рис. 1. Геометрические параметры молекулы находятся в пределах, установленных структурной химией и согласуются с данными работы [2].

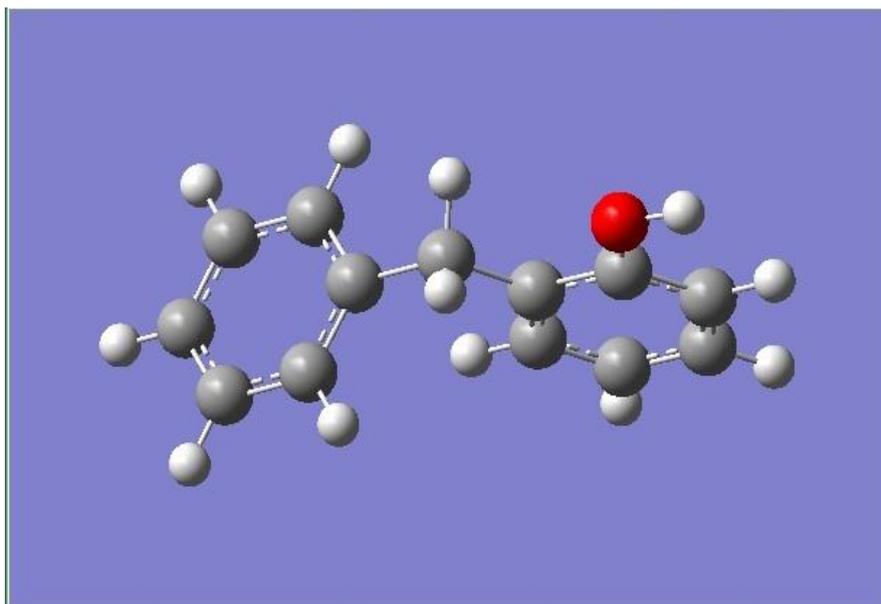


Рисунок.1. Строение молекулы 2-бензилфенола

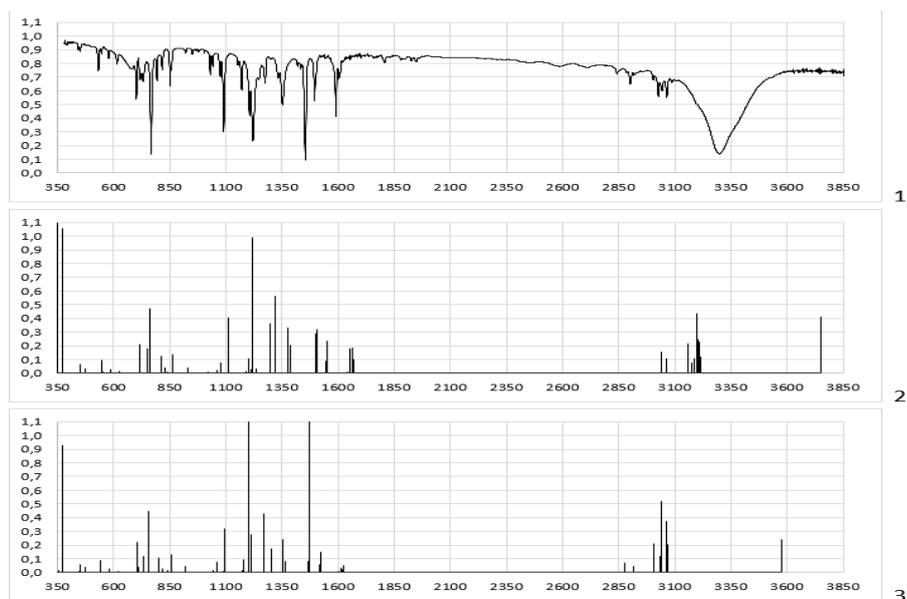


Рисунок 2. ИК спектры 2-бензилфенола: измеренный -1; рассчитанные в гармоническом – 2 и ангармоническом – 3 приближениях

Основное внимание в исследовании было уделено анализу измеренных и рассчитанных ИК спектров 2-бензилфенола, в которых отражены особенности структуры и ангармонизм колебаний. Измеренный в твердокристаллической стабильной фазе в области  $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$  и рассчитанные ИК спектры 2-бензилфенола приведены на рис. 2. Их предварительный анализ указывает в целом на факт значительного улучшения согласия измеренного спектра с рассчитанным при учете ангармонизма колебаний. Более детально этот факт проявляется при анализе ИК спектров по конкретным областям.

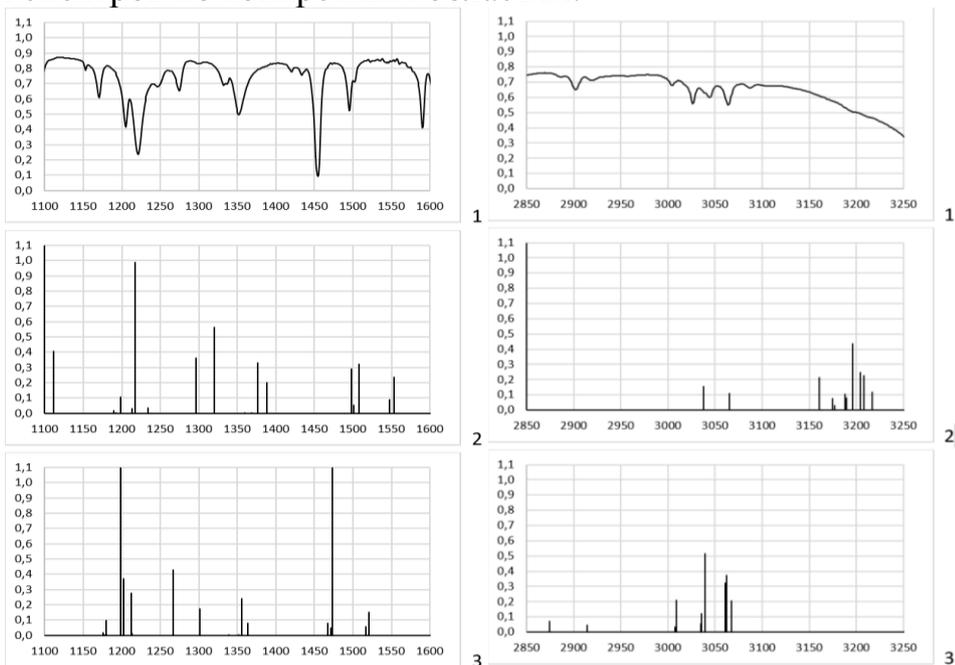


Рисунок 3. Измеренный-1 и рассчитанные -2, 3 ИК спектры 2-бензилфенола в областях  $1100-1600$  и  $2850-3250 \text{ см}^{-1}$

На рис. 3. приведены измеренный и рассчитанные ИК спектры в двух областях: 1100-1600 и 2850-3250  $\text{см}^{-1}$ . Из анализа этих областей ИК спектра видно, что существенные улучшения имеют место в области проявления колебаний легких атомов (валентные колебания связей С-Н) 2850-3250  $\text{см}^{-1}$ . Здесь сдвиги частот в длинноволновую сторону достигают 150 – 200  $\text{см}^{-1}$ . Интенсивности также изменяются, но не столь значительно, как, например, в области 1100 - 1600  $\text{см}^{-1}$ . В указанной области проявляются валентные колебания фенильных колец, смешанные с деформационными плоскими колебаниями, нормальные колебания сильно делокализованы. Их интенсивности значительно изменяются, частоты сдвигаются в длинноволновую область, но не столь значительно по сравнению частотами в области 2850-3250  $\text{см}^{-1}$ : ангармонизм затрагивает их в меньшей степени. Спектр, рассчитанный с учетом ангармонизма, гораздо ближе к экспериментальному.

В измеренном ИК спектре обращает на себя внимание широкая полоса, интерпретировать которую не удастся на основе результатов проведенного моделирования. Она проявляется в виде широкого контура аномально большой интенсивности. Ее центр тяжести соответствует положению  $\approx 3200 \text{ см}^{-1}$ . Ее наличие в спектре указывает на образование в образце 2-бензилфенола комплексов с водородной связью. Согласно данным работы [1] в твердокристаллическом образце могут реализовываться Н-комплексы в виде тетрамеров. В работе [3] на основе анализа измеренных ИК спектров высказано предположение о возможности образования цепочечных Н-ассоциатов. Образование Н-комплексов в 2-бензилфеноле приводит к существенному сдвигу полосы, соответствующей валентному колебанию связи О-Н, в длинноволновую сторону спектра. В соответствие с расчетом частота этого колебания в молекуле составляет 3760 или 3570  $\text{см}^{-1}$  (в гармоническом или ангармоническом приближении соответственно). Анализ этой области спектра требует привлечения данных молекулярного моделирования 2-бензилфенола с учетом водородной связи. Эта задача поставлена нами и будет решена в ближайшее время.

Основной вывод, следующий из результатов проведенных исследований, состоит в том, что построение структурно-динамической модели 2-бензилфенола в ангармоническом приближении оказался возможным и эффективным. Он позволил приблизить рассчитанный ИК спектр молекулы к спектру измеренного образца и избежать часто используемой в подобной ситуации процедуры масштабирования рассчитанных частот, улучшающей их согласие с измеренными частотами, но лишенной физического смысла.

#### **Библиографический список**

1. Bryan J.C., Delmau L.H., Hay B.P., Nicholas J.B., Rogers L.M., Rogers R.D., Moyer B.A. Cesium Recognition by Supramolecular Assemblies of 2-Benzylphenol and 2-

- Benzylphenolate// Structural Chemistry. 1999, V. 10, No. 3. P. 187-203.
2. *Katsyuba S., Chernova A., Schmutzler R.* Vibrational spectra and conformational isomerism of calixarene building blocks: 2-benzylphenol// Org. Biomol. Chem. 2003. № 1. P. 714-719.
  3. *Baran J., Davydova N. A., Drozd M.* Hydrogen-bonded 2-benzylphenol and its crystalline polymorphism// Phys. Scr. 2019. №94. 085403 (7pp).
  4. *Кон В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности// УФН. 2002, Т.172, №3. С. 336–348.
  5. *Попл Дж. А.* Квантово – химические модели// УФН. 2002, Т.172, №3. С. 349–356.

## АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК АНТИМОНИДА ИНДИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ COMSOL MULTIPHYSICS

*М.В. Ветринцев<sup>1</sup>, В. Ф. Кабанов<sup>1</sup>, А.И. Михайлов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: [mvetrincev@mail.ru](mailto:mvetrincev@mail.ru)

Проведено исследование энергетических спектров электронов квантовых ям (КЯ) с использованием программного пакета Comsol Multiphysics. При использовании данной модели можно анализировать энергетические уровни электрона проводимости в прямоугольной квантовой яме с модулируемым потенциалом. Частота модуляции выбрана в соответствии с постоянной решётки InSb (~6.45 Å). Рассмотрены два случая локализации примесных атомов в КЯ: в центре КЯ и вблизи поверхности КЯ (у края ямы).

**Ключевые слова:** квантовые точки, квантовая яма, антимонид индия.

Электронные и оптические свойства полупроводниковых КТ и содержащих их полупроводниковых макрообъектов (в частности, длина волны излучения и поглощения, коэффициент экстинкции) существенно зависят от материала, характерных размеров полупроводниковых КТ и их формы [1]. С практической точки зрения важные оптические диапазоны - видимый 400-750 нм, ближний ИК 800-900 нм - окно прозрачности крови, 1300-1550 нм – телекоммуникационный диапазон.

Очевидно, что выбор материала полупроводниковых КТ и характерного размера (в случае определенной формы) будет существенно влиять на энергетический спектр электронов проводимости и, соответственно, на оптические и электрические свойства этих нанобъектов и содержащих их структур. В ряде работ [2, 3] указывается, что различного рода дефекты, в частности, атомы примеси, также оказывает существенное влияние на спектр носителей заряда [4].

Квантовые точки на основе InSb вызывают особый интерес благодаря уникальным свойствам антимонида индия: высокая подвижность электронов ( $\square 78000 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ ), прямая и узкая запрещенная

зона ( $\approx 0.17$  эВ), малая эффективная масса электронов ( $\approx 0.013 m_0$ ,  $m_0$  – масса свободного электрона) [5], большая длина волны де Бройля – до 55 нм. Все это позволяет использовать данный материал в разнообразных устройствах оптоэлектроники: транзисторах, сенсорах, ИК детекторах и др.

В первом приближении энергия кванта поглощенного излучения в квантовой точке может быть представлена в виде:

$$\varepsilon_{hv} = \varepsilon_{g_0} + \varepsilon_{c_1} + \varepsilon_{v_1}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{hv}$  – энергия кванта в области максимума поглощения,  $\varepsilon_{g_0}$  – ширина запрещенной зоны объемного материала,  $\varepsilon_{c_1}$  – величина первого уровня энергии электрона квантовой точки, отсчитываемой от дна зоны проводимости объемного материала,  $\varepsilon_{v_1}$  – величина первого уровня энергии дырки, отсчитываемой от потолка валентной зоны объемного материала.

В диапазоне изменяемых размеров КТ от 25 до 5 нм величина энергетического зазора  $\varepsilon_{c_1} - \varepsilon_{v_1}$  с учетом ширины запрещенной зоны объемного материала будет изменяться в диапазоне от 0.3 до 2.8 эВ (или положение максимума коэффициента поглощения или люминесценции от 1.2 до 4.1 мкм). Это позволяет обоснованно предполагать возможность значительного влияния на оптические и электрические свойства КТ InSb в широком диапазоне при управляемом изменении характерных размеров КТ.

Исследование спектров электронов КЯ проведено с использованием программного пакета Comsol Multiphysics, базирующегося на методе конечных элементов [6]. Программа «double bound» из библиотек Comsol Multiphysics позволяет решать одномерную задачу по нахождению положения квантовых дискретных энергетических уровней и их волновых функций для носителей заряда.

При использовании данной модели можно анализировать энергетические уровни электрона проводимости в прямоугольной квантовой яме с модулируемым потенциалом. Частота модуляции выбрана в соответствии с постоянной решётки InSb ( $\sim 6.45$  Å) [7]. Высота области (5 эВ) выбрана в соответствии со значением работы выхода электронов из объёмного материала. Ширина ямы 4.6 нм. Рассмотрены два случая локализации примесного атома в КЯ: в середине КЯ и вблизи поверхности КЯ (у края ямы).

Поскольку максимум волновой функции для первого энергетического дискретного уровня расположен в центре ямы, рост потенциального барьера, создаваемого примесным атомом, действует на него, в то время как второй уровень остается неизменным. Энергия первого уровня увеличивается на 0.3 эВ при введении в центр квантовой

ямы примеси, которая создаёт для электронов проводимости туннельно-прозрачный потенциальный барьер величиной 3 эВ.

Введение дополнительного атома вблизи края ямы искусственно уменьшает ширину КЯ и, как следствие, увеличивает энергию электронов. Энергия 1-го квантового уровня растёт на 0.2 эВ, энергия второго квантового уровня увеличивается на 0.5 эВ при введении вблизи края ямы примеси, которая создаёт для электронов проводимости туннельно-прозрачный потенциальный барьер величиной 3 эВ (рис. 1).

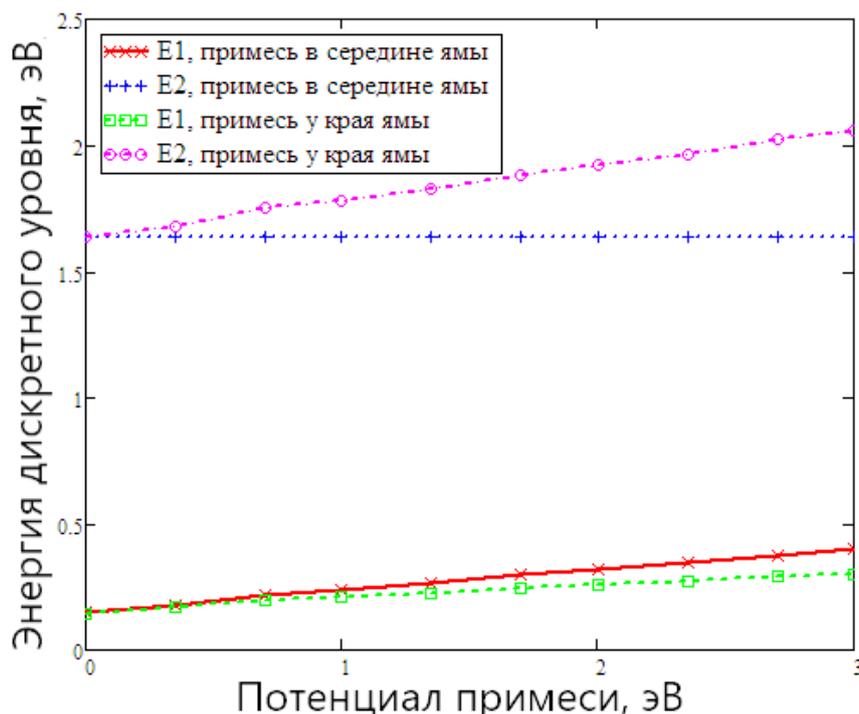


Рисунок 1. Спектр электронов проводимости в прямоугольной КЯ антимионида индия

Приведенные результаты показывают заметное влияние примесного атома на энергетический спектр электронов в КЯ InSb, которое может быть обнаружено экспериментально с использованием доступного инструментария. Есть основания полагать, что и для КТ InSb такое влияние должно быть не менее (а, может, и более) значимым. Эти данные говорят также и о том, что контролируемое введение примесного атома в КТ InSb можно рассматривать как эффективный способ управления энергетическими спектрами КТ и интегральными характеристиками содержащих их макрообъектов, используемых в реальных приборах и устройствах нано- и оптоэлектроники.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №19-07-00086.*

### Библиографический список

1. Михайлов А.И., Кабанов В.Ф., Гавриков М.В. Исследование электрофизических свойств коллоидных квантовых точек антимонида индия // Письма в ЖТФ, 2020, Т. 46, вып. 7., С. 36-38.
2. David M., Guy C., Jonathan S., Oded M., Eran R. and Uri B. Heavily Doped Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots.// Science, 2011, mVol. 332, N 6025. P. 77–81.
3. Сергеев А.А., Сергеева К.А., Леонов А.А. Синтез и люминесценция допированных марганцем квантовых точек сульфида цинка // МНИЖ. 2018. №9-1 (75).
4. Tselikov, G.I., Dorofeev, S.G., Tananaev, P.N. et al. Specific features of photoluminescence properties of copper-doped cadmium selenide quantum dots.// Semiconductors 45, P.1173, 2011.
5. Кревчик В. Д., Левашов А. В. Энергетический спектр и оптические свойства примесного комплекса в структурах с квантовыми точками // Известия ВУЗов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2007. №3.
6. Интернет-ресурс: <https://www.comsol.ru/events/webinars>
7. Виллардсон Р., Геринг Х. Полупроводниковые соединения //  $A_{III}B_V$ , под ред. а, пер. с англ., М., 1967, С. 327–42, 476–83.
8. Gaponenko, S., Demir, H. Applied Nanophotonics. In Applied Nanophotonics 2018 Cambridge: Cambridge University Press.

## СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ Н-КОМПЛЕКСОВ ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ. ТЕОРИЯ, ЭКСПЕРИМЕНТ

*Д.С. Финашкин, Л.М. Бабков*

Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: denis.finashkin@mail.ru

Методом теории функционала плотности B3LYP/6-31G(d) проведено моделирование структуры и колебательных спектров димеров молекул дигидроксибензойной кислоты: рассчитаны минимальная энергия, геометрическая структура, составляющие дипольного момента, частоты нормальных колебаний, их интенсивности в ИК спектре.

**Ключевые слова:** дигидроксибензойная кислота, моделирование, метод теории функционала плотности, ИК спектр, колебательный спектр, частота, интенсивность.

Дигидроксибензойные кислоты (ДГОбК) являются подклассом гидроксibenзойных кислот, обладающих двумя гидроксильными группами, относительное положение которых определяет свойства молекул. Существует 6 структурных изомеров ДГОбК, отличающихся положением ОН-групп: 2,3-ДГОбК (пирокатеховая кислота), 2,4-ДГОбК ( $\beta$ -резорциловая кислота), 2,5-ДГОбК (гентизиновая кислота), 2,6-ДГОбК ( $\gamma$ -резорциловая кислота), 3,4-ДГОбК (протокатеховая кислота), 3,5-

ДГОбК ( $\alpha$ -резорцило-вая кислота). Структура молекул ДГОбК показана на рис. 1.

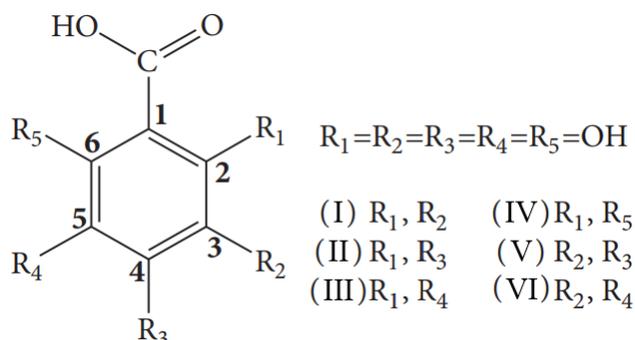


Рисунок 1. Структурные формулы ДГОбК (I, II, III, IV, V и VI) с указанием атомной маркировки и их тривиальных названий [1]

Данные кислоты имеют широкое применение в различных областях: от пищевой сферы и косметической промышленности, до производства пластмасс и фармации, поэтому так важно знать свойства различных изомеров этой кислоты и уметь предугадывать их исходя из результатов компьютерного моделирования.

Так как в природе мономеры этих кислот встречаются куда реже димеров, целесообразно построение структурно-динамических моделей их Н-комплексов, представленных димерами молекул ДГОбК, образовавшихся с помощью внешних водородных связей. При образовании комплекса карбоксильные группы двух мономеров соединяются в плоское димерное кольцо, являющееся обязательным условием образования димера. Моделирование проводилось с помощью программного комплекса GAUSSIAN [2] с использованием метода теории функционала плотности (ТФП), а соответственно функционала плотности B3LYP, и базиса 6-31G(d) [3, 4]. При моделировании рассчитывались основные параметры молекул: минимизированные энергии, геометрии, дипольные моменты, колебательные спектры, интенсивности в инфракрасном (ИК) спектре. Измеренные в результате эксперимента спектры были взяты из базы данных спектров органических веществ, принадлежащей японскому Национальному институту передовой науки и технологии (английская аббревиатура – «AIST») [5].

Дипольные моменты и минимизированные энергии димеров ДГОбК приведены в таблице 1. На рис. 2 приведено строение ядер Н-комплексов ДГОбК, образованных в результате объединения молекул в димеры за счет обобществления протонов карбоксильных групп, и указаны их рассчитанные геометрические параметры. Дополнительно проведено

моделирование димера конформера 2,5-ДГОВК', отличающегося от исходной молекулы.

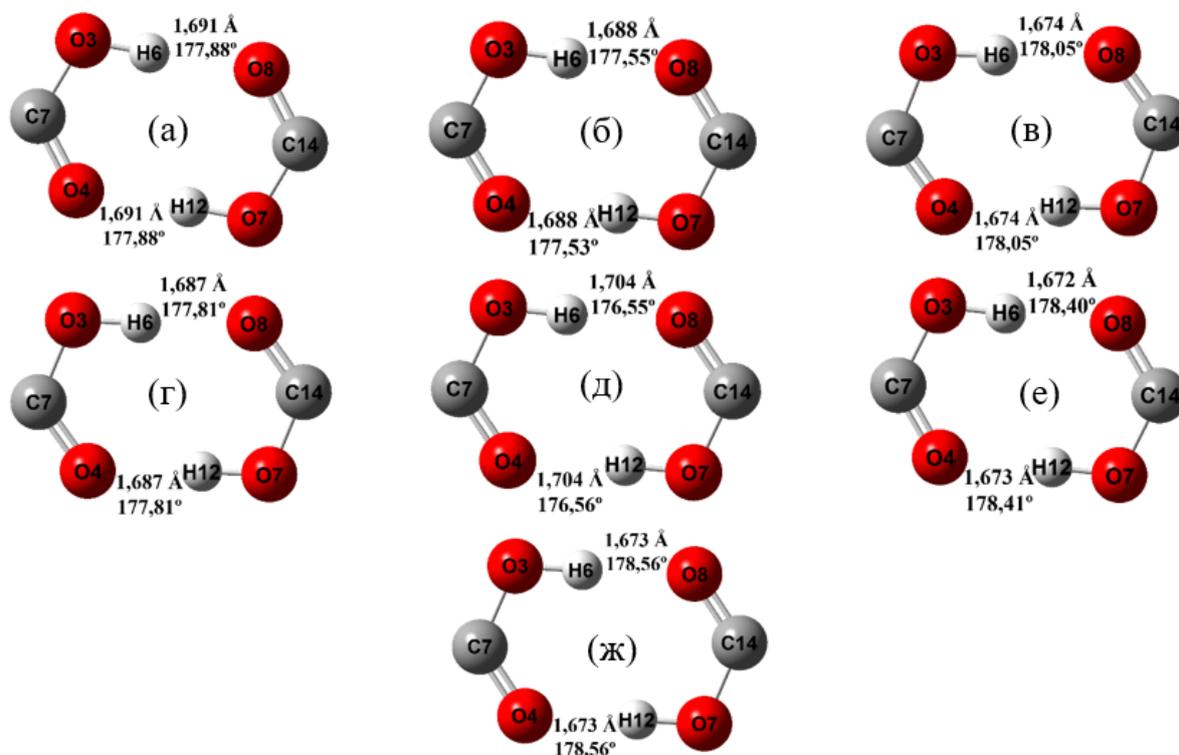


Рисунок. 2. Комплексы карбоксильных групп и геометрические параметры димеров ДГОВК: а) 2,3-ДГОВК, б) 2,4-ДГОВК, в) 2,5-ДГОВК, г) 2,5-ДГОВК' (конформер), д) 2,6-ДГОВК, е) 3,4-ДГОВК, ж) 3,5-ДГОВК

2,5-ДГОВК поворотом связи O1-H4 по направлению к атому кислорода O4 (помечен штрихом ') и образованием внутренней водородной связи, что ярко проявляется в спектре в области свыше 3000 см<sup>-1</sup>. Отличия структур 2,5-ДГОВК и конформера 2,5-ДГОВК' показаны на рис. 4.

Таблица 1. Дипольные моменты и энергии димеров ДГОВК

Димер	$d_x$	$d_y$	$d_z$	$d_{total}$	E, Хартри
2,3-ДГОВК	0,0012	-0,0001	0,0006	0,0013	-1142,56595091
2,4-ДГОВК	0,0035	-0,0003	-0,0008	0,0036	-1142,57065622
2,5-ДГОВК	0,0004	-0,0006	-0,0001	0,0007	-1142,52202446
2,5-ДГОВК'	0,0005	0,0001	-0,0001	0,0005	-1142,55719452
2,6-ДГОВК	-0,0010	-0,0001	0,0004	0,0011	-1142,55081695
3,4-ДГОВК	0,0012	0,0001	0,0008	0,0014	-1142,54440461
3,5-ДГОВК	0,0007	-0,0001	0,0001	0,0007	-1142,54047583

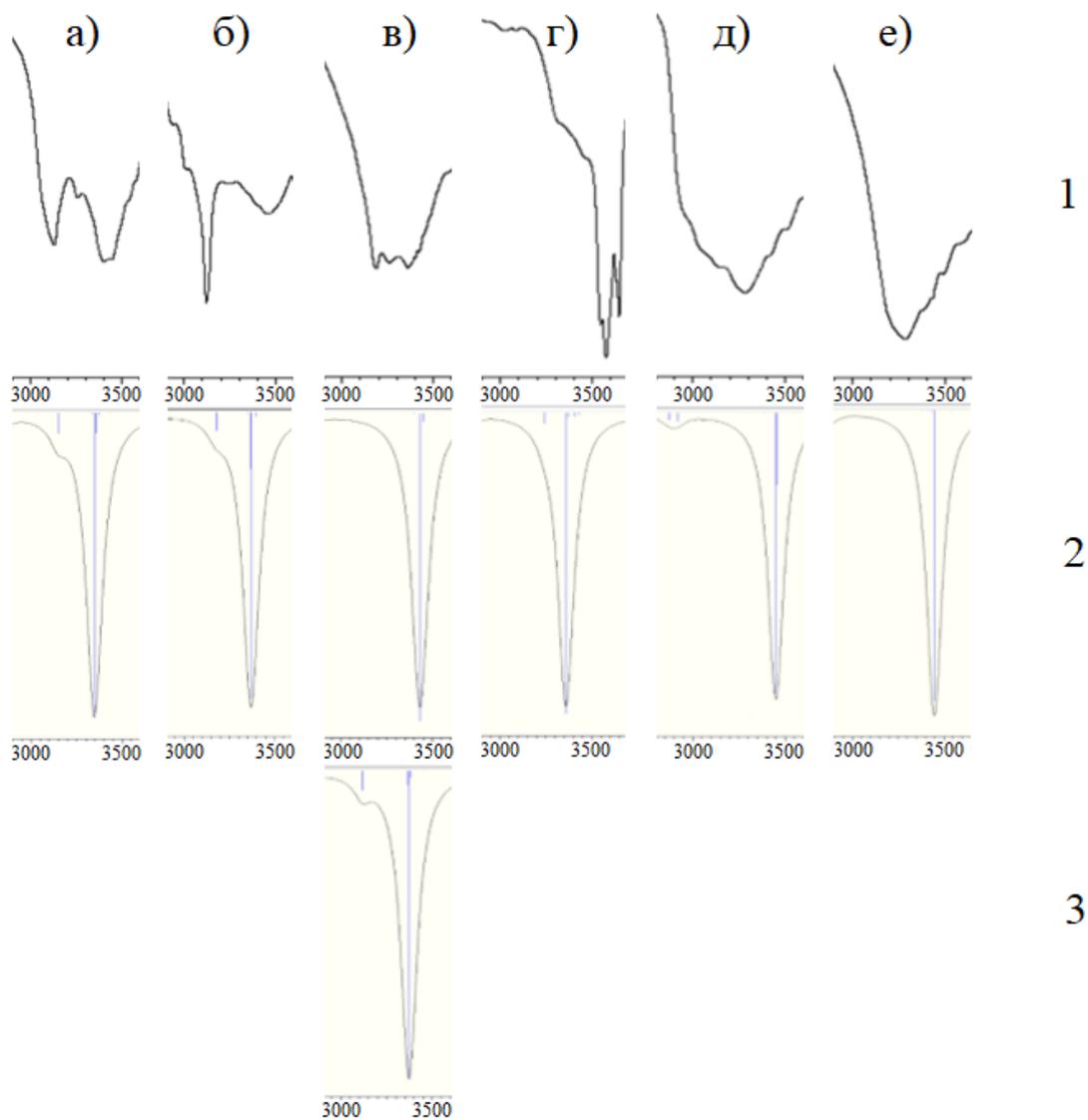


Рисунок 3. Экспериментальные (1) и рассчитанные (2,3) интенсивности в ИК спектре димеров ДГОБК: а) 2,3-ДГОБК; б) 2,4-ДГОБК; в) 2,5-ДГОБК (2) и её конформера (3); г) 2,6-ДГОБК; д) 3,4-ДГОБК; е) 3,5-ДГОБК

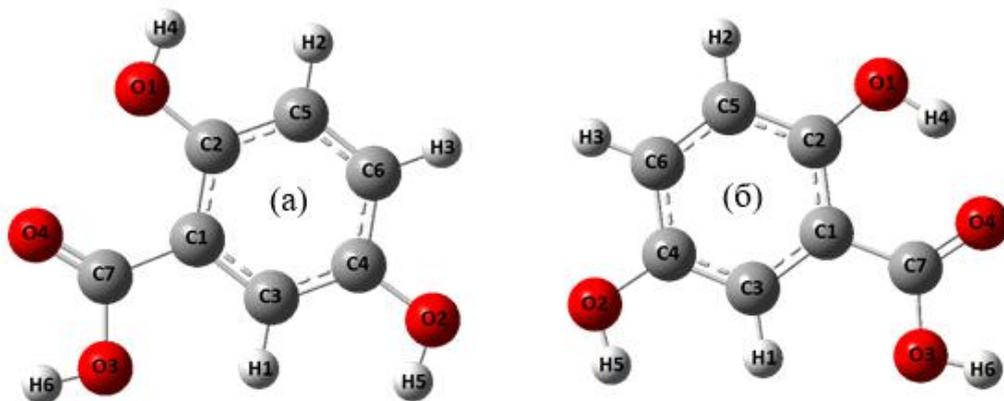


Рисунок 4. Структуры молекул 2,5-ДГОБК (а) и конформера 2,5-ДГОБК' (б)

С помощью процедуры масштабирования рассчитанных частот, широко используемой в мировой практике, см., например, [6], минимизированы расхождения между измеренными и рассчитанными частотами, обусловленные ограниченностью гармонического приближения. В диапазоне от  $3000\text{ см}^{-1}$  и выше рассчитанные частоты колебаний превышают измеренные на  $150\text{-}200\text{ см}^{-1}$ , и масштабирующий множитель для этой области равен 0,95. Масштабирование рассчитанных частот позволило устранить обусловленную гармоническим приближением систематическую ошибку, неявно учтя механический ангармонизм. Использование масштабирования признано целесообразным в мировом научном сообществе: оно делает удобным анализ и сравнение измеренного и рассчитанного спектров, с целью интерпретации спектров соединений гомологического ряда какого-либо соединения или ряда его замещённых.

Результаты моделирования явно показывают сильное влияние на ИК спектр образовавшихся в димерном кольце межмолекулярных водородных связей Н6--О8 и Н12--О4, проявляющихся в аномальном уширении полос и увеличении интенсивности от  $4888\text{ км/моль}$  в димере 3,4-ДГОВК до  $6071\text{ км/моль}$  в димере 2,6-ДГОВК. Частоты колебаний ОН-связей димеров молекул ДГОВК отличаются друг от друга незначительно, находясь в диапазоне  $3050\pm 35\text{ см}^{-1}$ . На формирование структуры полос измеренных ИК спектров в данной области влияют и внутренние водородные связи Н4--О4. Их наличие проявляется в спектрах димеров 2,3-, 2,4-, 2,6-ДГОВК и 2,5-ДГОВК' менее широкими полосами по сравнению с полосами, обусловленными внешними ОН-связями, но тоже довольно заметными по интенсивности – от  $226\text{ км/моль}$  у 2,6-ДГОВК до  $421\text{ км/моль}$  у 2,3-ДГОВК.

Исходя из полученных результатов можно сделать вывод, что различные изомеры ДГОВК можно идентифицировать на основе анализа их ИК спектров и в зависимости от этого предполагать возможные свойства той или иной молекулы, а также её дальнейшее применение в различных областях.

#### Библиографический список

1. D. Milenković, J. Đorović, S. Jeremić, J. M. Dimitrić Marković, E. H. Avdović, Z. Marko-vić. Free Radical Scavenging Potency of Dihydroxybenzoic Acids. // Journal of Chemistry 2017. 2017.
2. Frisch J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.
3. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. 2002, Т.172, №3. С. 336–348.
4. Попл Дж. А. Квантово-химические модели // УФН. 2002, Т.172, №3. С. 349–356.
5. Интернет-ресурс: [https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)

6. Березин К.В., Нечаев В.В., Кривохижина Т.В. Применение метода линейного масштабирования частот в расчетах нормальных колебаний многоатомных молекул // Оптика и спектр. 2003. Т. 94. № 3. С. 398-401.

## ПРОЯВЛЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ, ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ И АНГАРМОНИЗМА КОЛЕБАНИЙ В ИК СПЕКТРАХ ТРИФЕНИЛФОСФИТА

Бабков Л. М.<sup>1</sup>, Давыдова Н.А.<sup>2</sup>, Ивлиева (Перетоккина) И. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Институт физики НАН Украины, Киев

E-mail: Irine09@yandex.ru

Измерены ИК спектры трифенилфосфита в кристаллических (стабильном и метастабильном), "глассиал", аморфном и жидком состояниях при 12 и 320 К. Методом V3LYP/6-31G(d) построены структурно-динамические модели наиболее устойчивых его конформеров и димера, образованного водородной связью. Установлено наличие в образце спектрально различимых конформеров, комплексов со слабой Н-связью. На основе результатов моделирования проведён колебательный анализ измеренных спектров. Дана их интерпретация. Выделены обертоны и составные частоты в измеренных ИК спектрах.

**Ключевые слова:** трифенилфосфит, ИК спектр, конформер, водородная связь, молекулярное моделирование, нормальное колебание, частота, интенсивность, обертоны, составная частота

Трифенилфосфит ( $P(O C_6H_5)_3$ , сокращённо – ТФФ) обладает набором уникальных свойств, из-за чего он стал объектом исследований, предметом которых явились структура, полиморфизм, фазовые переходы, конформационная подвижность [1-5] и т.д. В исследованиях использовались как экспериментальные методы (рентгеноструктурный анализ, нейтронография, колебательная спектроскопия), так и теоретические, в частности, метод теории функционала плотности (ТФП).

В работах [3-5] достаточно обстоятельно исследовано влияние конформационных изменений и водородной связи на ИК спектр ТФФ. В проведённых исследованиях использовался ТФФ фирмы Aldrich, очищенный до 99%. ИК спектры образцов в жидком, стеклофазе, "глассиал" и двух кристаллических (моноклинной, метастабильной и гексагональной, стабильной) состояниях измерены в области 600 - 4000  $cm^{-1}$  на Фурье-спектрометре модели IFS-88 фирмы Bruker с разрешением 2  $cm^{-1}$ . Методом ТФП V3LYP/6-31G(d) [6,7], реализованным в программном комплексе GAUSSIAN-03 [8], были построены структурно-динамические модели пяти конформеров и Н-комплекса ТФФ, представленного димером молекул, устойчивым в ТК модификации. На рис.1 приведено строение конформера молекулы ТФФ, и димера, образованного за счёт контакта

атомов водорода связи С-Н фенильного кольца одной молекулы и кислорода О4 группы  $\text{PO}_3$  – другой. Вычислены параметры адиабатических потенциалов конформеров и димера: минимумы энергий, оптимизированные геометрии, силовые постоянные и дипольные моменты, использованные при решении механической и электрооптической задач.

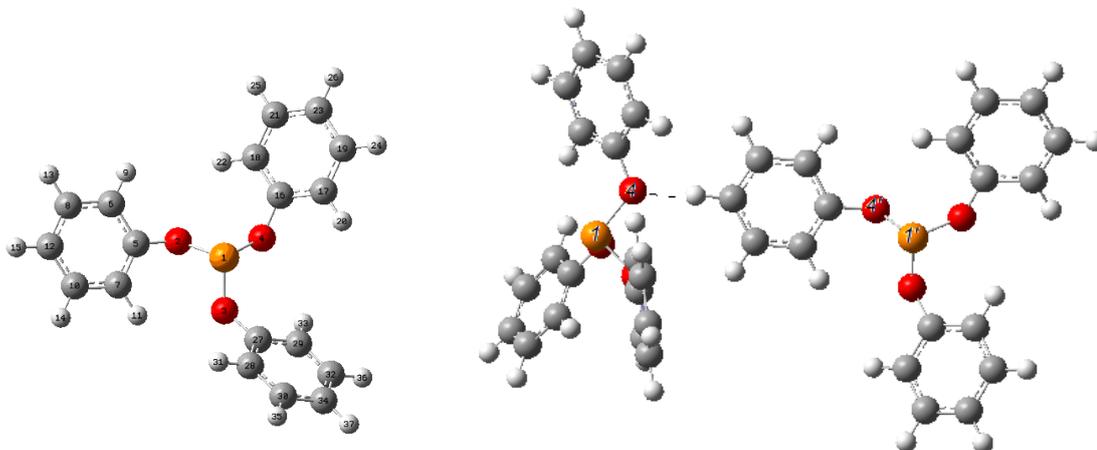


Рисунок 1. Строение изолированной молекулы и димера ТФФ

Рассчитаны частоты и формы нормальных колебаний в гармоническом приближении и их интенсивности в ИК спектре.

Вычисленные геометрические параметры конформеров и димера, как было установлено, лежат в пределах, допустимых структурной химией, согласуются с экспериментальными значениями из [1] и рассчитанными в [2]. Изменения длин связей при переходе от одного конформера к другому не превышает  $0,03 \text{ \AA}$  (в частности, для связи  $\text{P}_1\text{-O}_4$ ). Энергия водородной связи составила  $1,3 \text{ ккал/моль}$ , что характерно для слабого ее типа. Её влияние на геометрию молекул ТФФ, образующих димер, не велико и сказывается лишь на окрестности водородного мостика  $\text{C-H}\cdots\text{O}_4$ , длина которого составляет  $2,963 \text{ \AA}$ . Согласие измеренных и рассчитанных спектров в целом удовлетворительное, с учетом того факта, что расчёт проведён для изолированной молекулы в гармоническом приближении. Имеет место характеристичность фундаментальных колебаний фенильных колец по частоте, форме и смещениям, типичная для монозамещённого бензола. Установлено, что конформеры ТФФ спектрально различимы, а водородная связь не сильно, но влияет на их ИК спектры. Выделены спектрально-структурные признаки ТФФ. Это - полосы ИКС в областях  $700\text{-}750$ ,  $860\text{-}880$ ,  $1180\text{-}1220 \text{ см}^{-1}$ , соответствующие колебаниям фрагмента  $\text{P}(\text{OC})_3$  молекулы. Структура этих полос сложная. Влияние водородной связи на колебания данного фрагмента в указанных областях не велико для частот и более заметно для интенсивностей. Анализ спектров приводит к заключению о том, что измеренные ИК спектры жидкости, стекла, "глассиал" и ТК фаз являются суперпозицией спектров конформеров и димеров. Область  $3000\text{-}3100 \text{ см}^{-1}$  представляет интерес с точки зрения

влияния Н-связи на ИК спектр ТФФ. Установлено, что образование димера сопровождается небольшим сдвигом частоты валентного колебания С-Н в низкочастотную сторону и к возрастанию интенсивности более, чем в пять раз. Сдвиг частоты, пусть и небольшой, и сильное увеличение интенсивности согласуется с выводом о наличии слабой водородной связи в образце, сделанном на основе результатов квантово-механического расчёта параметров адиабатических потенциалов мономера и димера ТФФ.

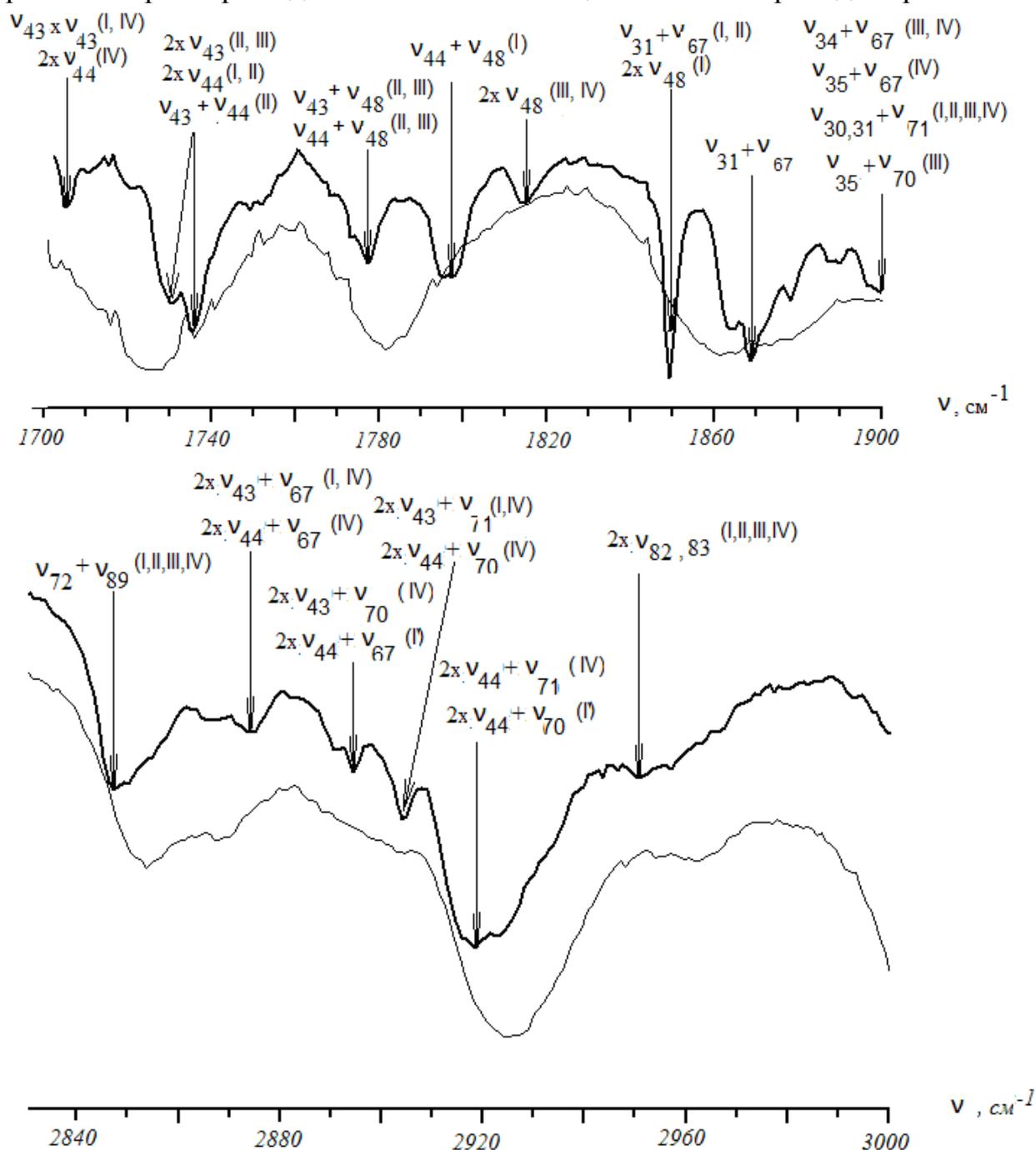


Рисунок. 1. ИК спектры ТФФ в областях 1700-1900 и 2800-3000  $\text{cm}^{-1}$ :  
снизу- стабильная, сверху – метастабильная фазы

Полосы слабой и средней интенсивности в областях 1730-1900 и

2830-3000  $\text{cm}^{-1}$  измеренного ИК спектра (рис.1) не относятся к фундаментальным колебаниям. Их происхождение может быть понято, если выйти за рамки гармонического приближения. Известно, что механизмом взаимодействия колебаний является ангармонизм, благодаря которому в спектре возникают полосы, соответствующие обертонам, колебаниям с составными частотами и резонансам. С позиций этой модели проведен колебательный анализ в указанных областях измеренного ИКС. Результатом анализа стала интерпретация полос в данных областях ИК спектра ТФФ (см. также рис. 1):

1705о.сл.=2×851пл.(2xv<sub>43</sub>); 1735сл.=2x869о.с.(2xv<sub>43</sub>); 1780сл.=2×879о.с.(2xv<sub>44</sub>);  
 1796сл.=879о.с.+914о.с.(v<sub>44</sub>+v<sub>48</sub>); 1812сл.=2×909с.(2xv<sub>48</sub>);  
 1850сл.=687с.+1173с.(v<sub>30</sub>+v<sub>67</sub>); 1870сл.=693с.+1184о.с.(v<sub>31</sub>+v<sub>70</sub>); 1900сл.=  
 693с.+1212о.с.(v<sub>31</sub>+v<sub>71</sub>); 2845ср.=1225ср.+1605о.с.(v<sub>72</sub>+v<sub>89</sub>);  
 2874о.сл.=4×717ср.(4x v<sub>34</sub>); 2892о.сл.=2x1451ср.(2x v<sub>79</sub>); 2902о.сл.=2x1451ср.  
 (2x v<sub>79</sub>); 2920ср.=2×1455ср.(2xv<sub>81</sub>);  
 2950о.сл.=2×1483о.с.(2xv<sub>82</sub>) или (и) 1494о.с.+1455ср.(v<sub>83</sub>+v<sub>81</sub>).

Более обоснованную интерпретацию этой области спектра можно было бы дать на основе моделирования ИК спектра конформера ТФФ в ангармоническом приближении. Эта задача технически пока трудно выполнима.

Вывод обобщающего характера, следующий из анализа результатов проведенных исследований структуры и ИК спектров ТФФ, заключается в том, что его образцы в жидком, аморфном, "глассиал" состояниях и в ТК модификациях (моноклинной и гексагональной) являются смесью трёх спектрально различимых устойчивых конформеров, переходящих друг в друга, и их Н-комплексов со слабой водородной связью (димеров и, возможно, тримеров). Наличие конформеров, слабая водородная связь и ангармонизм колебаний в ТФФ формирует его ИК спектры.

#### Библиографический список

1. *Hernandez, O.J., Boucekkine, A, Hedoux, A.* Density Functional Theory Study of Triphenyl Phosphite: Molecular Flexibility and Weak Intermolecular Hydrogen Bonding// J. Phys. Chem. A. 2007, V.111. P. 6952-6958.
2. *Mei Q., Ghalsasi P., Benmore C. J., Yarger J.L.* The Local Structure of Triphenyl Phosphite Studied Using Spallation Neutron and High-energy X-ray Diffraction //J. Phys. Chem. B., 2004, V.108 P. 20076-20082.
3. *Babkov L.M, Baran J., Davydova N.A., Ivlieva I.V, Ponezha E.A., Reznichenko V.Ya.* Infrared spectra of triphenyl phosphate and their interpretation on the basis of quantum chemistry calculation. Ukr.J.Phys. 2016. Vol.61, №6. P. 471-476.

4. *Бабков Л.М., Давыдова Н.А., Ивлиева И.В.* ИК спектры трифенилфосфита и их интерпретация на основе молекулярного моделирования. Изв. Саратов. ун-та. Новая сер. Сер. Физика. 2017. Т. 17, вып.1. С. 11-19.
5. *Бабков Л.М., Давыдова Н.А., Ивлиева-Перетокина И.В.* Влияние водородной связи на структуру и ИК спектр трифенилфосфита // Изв. Саратов. ун-та. Новая сер. Сер. Физика. Т. 19, вып.2. 2019. С.132-139.
6. *ПоплДж.А.* Квантово-химические модели // УФН. 2002. Т.172, №3. С. 349–356.
7. *Кон В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. 2002. Т.172, №3. С. 336–348.
8. *Frisch J., Trucks G.W., Schlegel H.B.* Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СТРУКТУР ПОЛУИЗОЛИРУЮЩЕГО АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ С ОМИЧЕСКИМИ КОНТАКТАМИ

*И.О. Кожевников, А.И. Михайлов*

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
г. Саратов

E-mail: kozhevnikov\_io@mail.ru

В работе представлены результаты экспериментального исследования зависимости частоты выходного сигнала планарных структур полуизолирующего GaAs с омическими контактами от интенсивности освещения. Проведена оценка динамического диапазона перестройки частоты выходного сигнала. Также проведена оценки влияния освещения образца на вольт-фарадные характеристики структуры.

**Ключевые слова:** полуизолирующий арсенид галлия, отрицательная дифференциальная проводимость, рекомбинационная неустойчивость тока, функциональная электроника.

Функциональная микроэлектроника, основанная на использовании динамических неоднородностей, взаимодействии потоков электронов с волновыми процессами в твердых телах, свойствах полупроводников, диэлектриков, магнетиков и сверхпроводников в электрическом и магнитном полях и др. обеспечивает несхемотехнические принципы работы устройств и является одним из перспективных направлений современной микроэлектроники [1]. Полуизолирующий *n*-GaAs интересен как яркий представитель материалов функциональной электроники, в котором возможно наблюдение характерной неустойчивости тока, обусловленной механизмом захвата электронов глубокими примесными центрами под действием сильного электрического поля – рекомбинационной неустойчивости тока [2-5].

Ранее было установлено, что в планарных эпитаксиальных структурах на основе высокоомного GaAs с омическими контактами при пороговой напряженности электрического поля порядка 4000 В/см

возникают токовые колебания большой амплитуды, частота которых возрастает при освещении межконтактной области структуры [6]. Также для данных структур была установлена чувствительность к магнитному полю [7].

В данной работе определен динамический диапазон перестройки частоты выходного сигнала планарных структур полуизолирующего GaAs с омическими контактами от интенсивности освещения межконтактной области структуры величиной 60 мкм лазерным диодом с длиной волны 650 нм (рис. 1). Согласно полученным экспериментальным данным, диапазон перестройки зависит от приложенного напряжения и качества поверхности межконтактной области и может достигать 20-ти кратного значения. Сама же зависимость хорошо аппроксимируется линейной функцией (рис. 2).

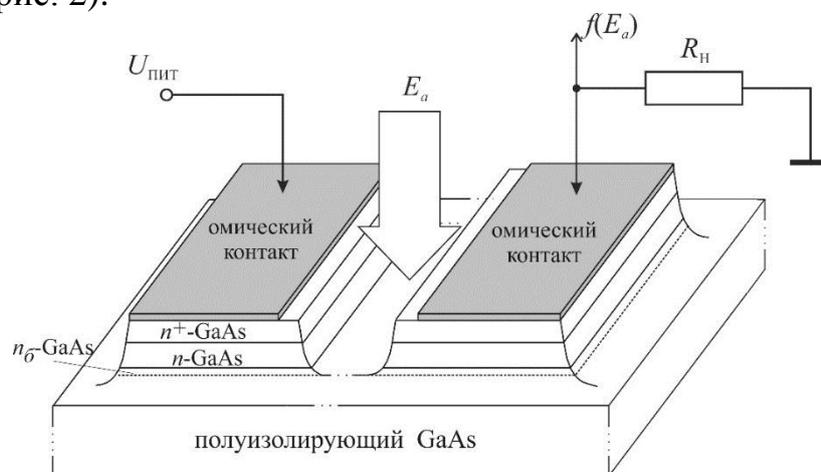


Рисунок 1. Изображение исследуемой планарной структуры полуизолирующего GaAs и измерительной схемы.

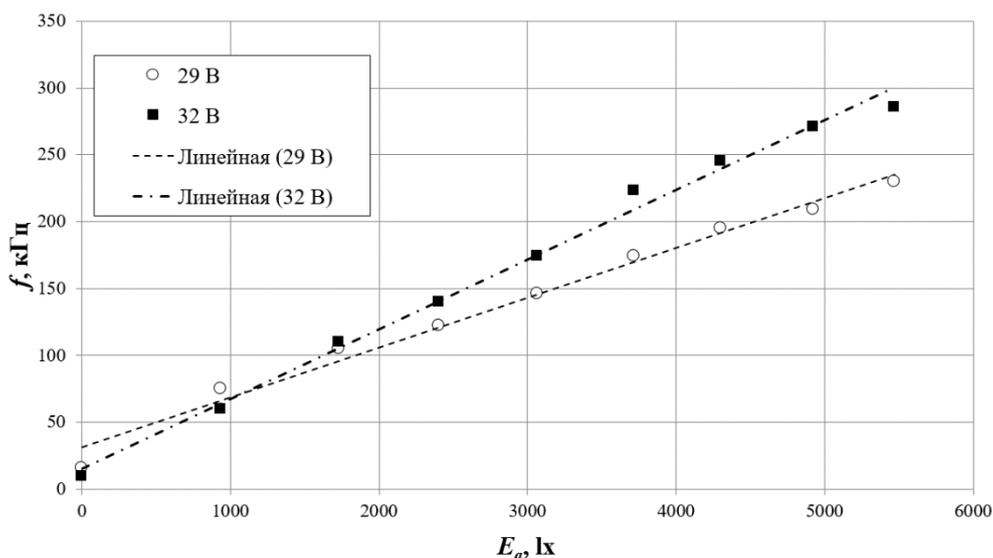


Рисунок 2. Зависимости частоты токовых колебаний исследуемых планарных структур от интенсивности освещения межконтактной области при разных приложенных напряжениях.

Проведена оценка зависимости нестабильности частоты токовых колебаний от интенсивности освещения. Согласно экспериментальным данным, этот параметр имеет тенденцию к уменьшению и с ростом освещения уменьшается от 0,1 до 0,03 относительных единиц (рис. 3).

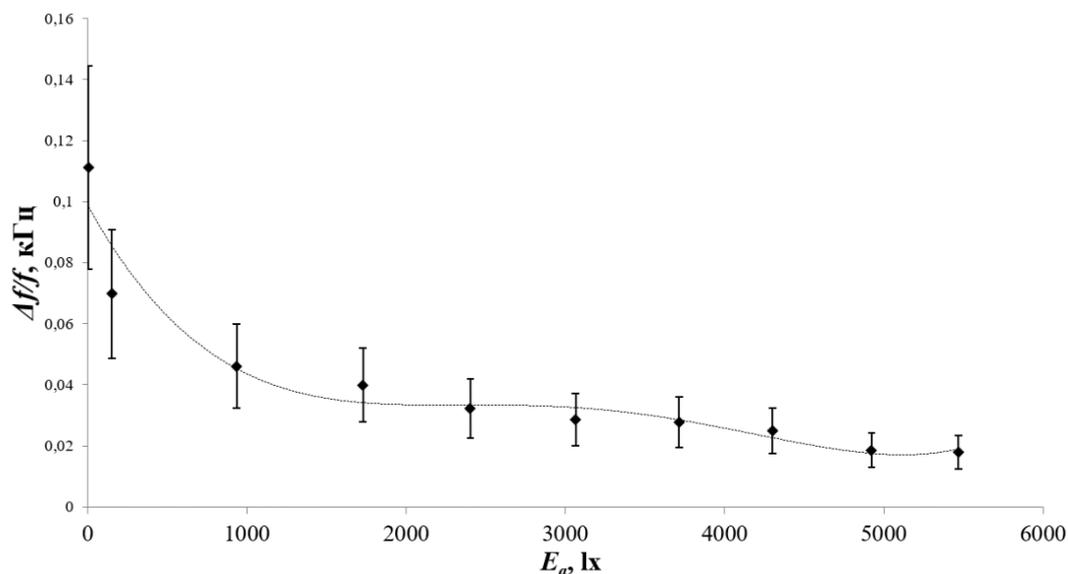


Рисунок 3. Зависимости нестабильности частоты токовых колебаний от интенсивности освещения межконтактной области исследуемой структуры

В работе также проводилась оценка влияния освещения межконтактной области структуры лазерным диодом с длиной волны 650 нм на ее вольт-фарадную характеристику. Установлено что при напряжении, соответствующем участку отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), на вольт-амперной характеристике происходит резкий рост общей емкости структуры, что свидетельствует об образовании домена сильного поля. Установлено, что при допороговом напряжении на структуре воздействие освещения немонотонно влияет на емкость структуры (рис. 4), а при напряжении близком к пороговому приводит к образованию домена и резкому росту емкости, что, вероятнее всего, связано со сдвигом порогового напряжения в меньшую сторону. Наличие максимума на зависимости, приведенной на рис. 4, вероятно связано с перераспределением электрического поля в межконтактной области структуры под действием света. При освещении в результате образования дополнительных носителей происходит изменение суммарной емкости двух  $n-i$  переходов, образованных контактами  $n$ -областей омических контактов к высокоомной подложке GaAs (рис.1), один из которых при наличии внешнего напряжения смещен в прямом, а второй в обратном направлении.

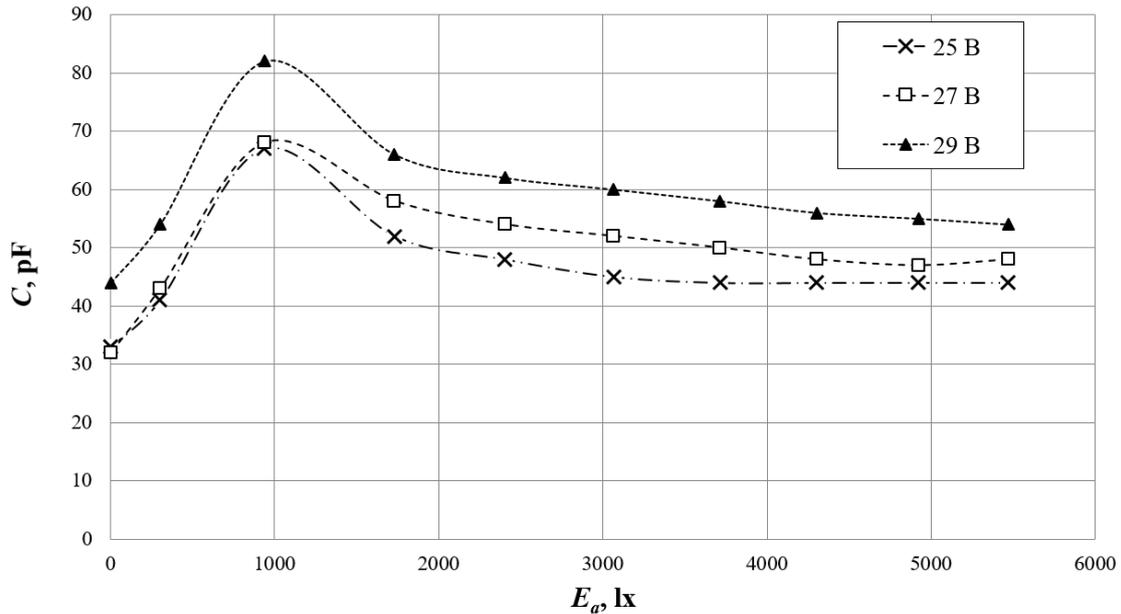


Рисунок 4. Зависимости емкости структуры от интенсивности освещения межконтактной области при разных приложенных напряжениях.

Полученные данные могут помочь в дальнейшем при изучении влияния внешних факторов на неустойчивости тока, возникающие в планарных эпитаксиальных структурах на основе высокоомного GaAs с омическими контактами. Подобные исследования имеют как высокой научный, так и прикладной интерес.

#### Библиографический список

1. *Щука А.А.* Функциональная электроника М.: МИРЭА, 1998. 259 с.
2. *Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г.* Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 416 с.
3. *Neumann A.* Slow domains in semi-insulating GaAs / A. Neumann // J. Appl. Phys. — 2001. — Vol. 90, No. 1. — P. 1–26.
4. *de Oliveira A. G., Ribeiro G. M., Albuquerque H. A.* Blockade of free carriers by hopping carriers leading to the low-frequency current oscillations in semi-insulating GaAs // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 74, No. 3. — P. 035204.
5. *Муравский Б. С., Григорьян Л. Р., Рубцов Г. П., Черный В. Н.* Перспективы использования рекомбинационной неустойчивости тока в функциональной электронике // Актуальные проблемы твердотельной электроники и микроэлектроники: VII Всерос. науч.-техн. конф. : труды. — Таганрог, 2000. — С. 69.
6. *Михайлов А.И., Митин А.В., Кожевников И.О.* Функциональный однокристалльный преобразователь свет-частота на основе высокоомного n-GaAs // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. - 2014. - Т. 17, № 4. - С. 64-69.
7. *Кожевников И.О., Митин А.В., Михайлов А.И.* Влияние магнитного поля на токовую неустойчивость в планарно-эпитаксиальных структурах на основе полуизолирующего арсенида галлия // Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы. Сборник научных статей. – Саратов, СГУ. 2016. С. 33–41.

8. Михайлов, А.И., Митин, А.В., Кожевников, И. О. Особенности возникновения устойчивых колебаний тока большой амплитуды в длинных высокоомных планарно-эпитаксиальных структурах на основе арсенида галлия // Известия вузов. Радиоэлектроника. – 2015. – Т. 58, № 4. – С. 59-64.

## ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ СТРУКТУР ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ В ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ

*Д.О. Кочнев<sup>1</sup>, Д.П. Зайцев<sup>1</sup>, М. Е. Селезнев<sup>1,2</sup>, Д.В. Терин<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Саратовский филиал института радиоэлектроники им. В.А. Котельникова

<sup>3</sup>Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина

E-mail: [kochnevdo@mail.ru](mailto:kochnevdo@mail.ru)

Исследованы спектры зеркального отражения структур на основе пористого кремния, полученных методом анодного травления на предварительно легированных подложках. Получен прототип солнечного элемента с антиотражающим покрытием на основе слоев пористого кремния n-типа, исследованы его темновая и световая вольт-амперные характеристики. По световой вольт-амперной рассчитана вольт-ваттная характеристика, определены максимальная мощность, КПД и фактор заполнения для полученных структур. По темновой вольт-амперной характеристике определен коэффициент неидеальности и наиболее вероятные механизмы рекомбинации носителей зарядов в полученных структурах.

**Ключевые слова:** пористый кремний, антиотражающее покрытие, фотовольтаика, солнечный элемент.

Несмотря на успешное развитие ряда альтернативных технологий с применением других материалов, в настоящее время традиционные солнечные элементы на монокристаллическом кремнии продолжают занимать ведущее место на мировом рынке [1,2]. Поскольку показатель преломления полированного монокристаллического кремния составляет 3,5, формирование на фронтальной поверхности покрытия, уменьшающего потери на отражение, является обязательным технологическим процессом в производстве солнечных элементов. Традиционным решением является осаждение пленок ряда оксидов ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ ,  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ) или  $\text{Si}_3\text{N}_4$  плазмохимическим и магнетронным методами. Благодаря эффекту «moth-eye» (англ. «глаз мотылька»), создающему градиент показателя преломления в наноразмерном пористом материале от 1 (воздух) до 3,5 (монокристаллический кремний), пористый кремний является одним из перспективных и экономичных решений проблемы потерь на отражение и, тем самым, повышения КПД солнечных элементов, в том числе на гибких подложках.

В качестве исходных подложек использовался монокристаллический кремний p-типа, легированный бором с удельным сопротивлением 4,5

Ом×см. С целью создания *p-n*-перехода для получения экспериментального образца солнечного элемента одна из сторон подложки была легирована фосфором. Для этого методом анодного окисления на поверхности кремния была выращена легирующая анодная оксидная пленка, представляющая собой слой SiO<sub>2</sub> с включениями P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и элементарного Р. Анодное окисление происходило в течение 40 минут при плотности тока 5 мА/см<sup>2</sup> в электролите 10% Н<sub>3</sub>РO<sub>4</sub>:Н<sub>2</sub>С<sub>6</sub>О<sub>2</sub> (1:1). Термическая диффузия фосфора из пленки в подложку проводилась при 1100°С в печи в течение 60 минут. Глубина залегания *p-n* перехода составила 0,7±0,1 мкм. Затем, на легированных подложках методом анодного травления с контролем *in situ* [3] был получен слой пористого кремния при плотности тока 10 мА/см<sup>2</sup> в электролите 48% НF:С<sub>3</sub>Н<sub>8</sub>О (1:1). Время травления варьировалось от 2 до 10 минут. Толщина полученных пористых слоев находилась в диапазоне 0,5-4 мкм и была прямо пропорциональна времени травления.

Исследование оптических свойств проводилось на спектрофотометре СФ-2000 в диапазоне длин волн 400–1100 нм.

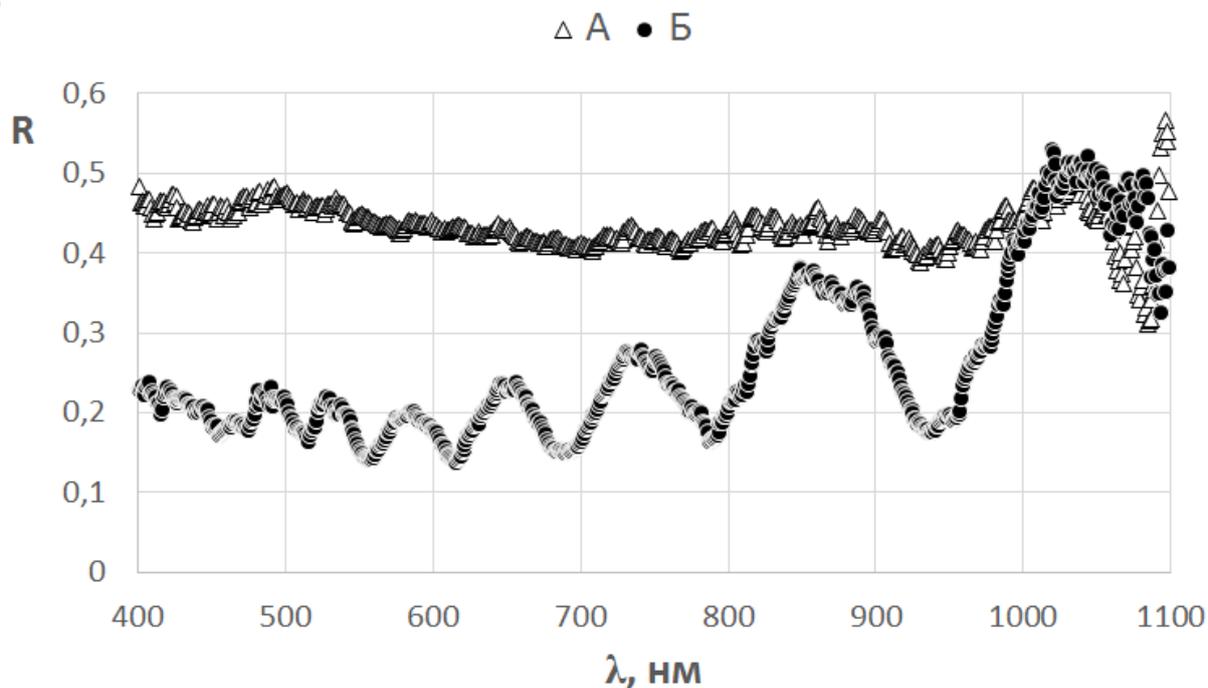


Рисунок 1. Спектры зеркального отражения слоев пористого кремния, полученных на предварительно легированных подложках. А) Слой со временем травления  $t = 2$  мин.; Б) Слой со временем травления  $t = 10$  мин.

Получены спектры зеркального отражения под углом падения в 20° и углом 20° для отраженного излучения относительно нормали к подложке, приведенные на рис. 1. Исследования оптических свойств проводили относительно кремниевого эталона (исходной кремниевой подложки). Зависимость спектрального коэффициента отражения для образца со

временем травления 10 минут имеет интерференционный характер. Интерференция может быть обусловлена наличием большого числа центров рассеяния, например, на границах: воздух-кремний, кремний-окись кремния, легированный кремний- монокристаллическая подложка. Получаемый слой представляет сложную композитную неупорядоченную среду содержащую хаотично распределенные: островки кремния, оксида кремния, аморфного кремния, вкраплений воздуха и остатков продуктов химической реакции анодного травления.

Для исследования электрофизических свойств на рабочей и тыльной сторонах образцов были сформированы омические контакты. На рис. 2 представлены характерные темновые и световые ВАХ образцов.

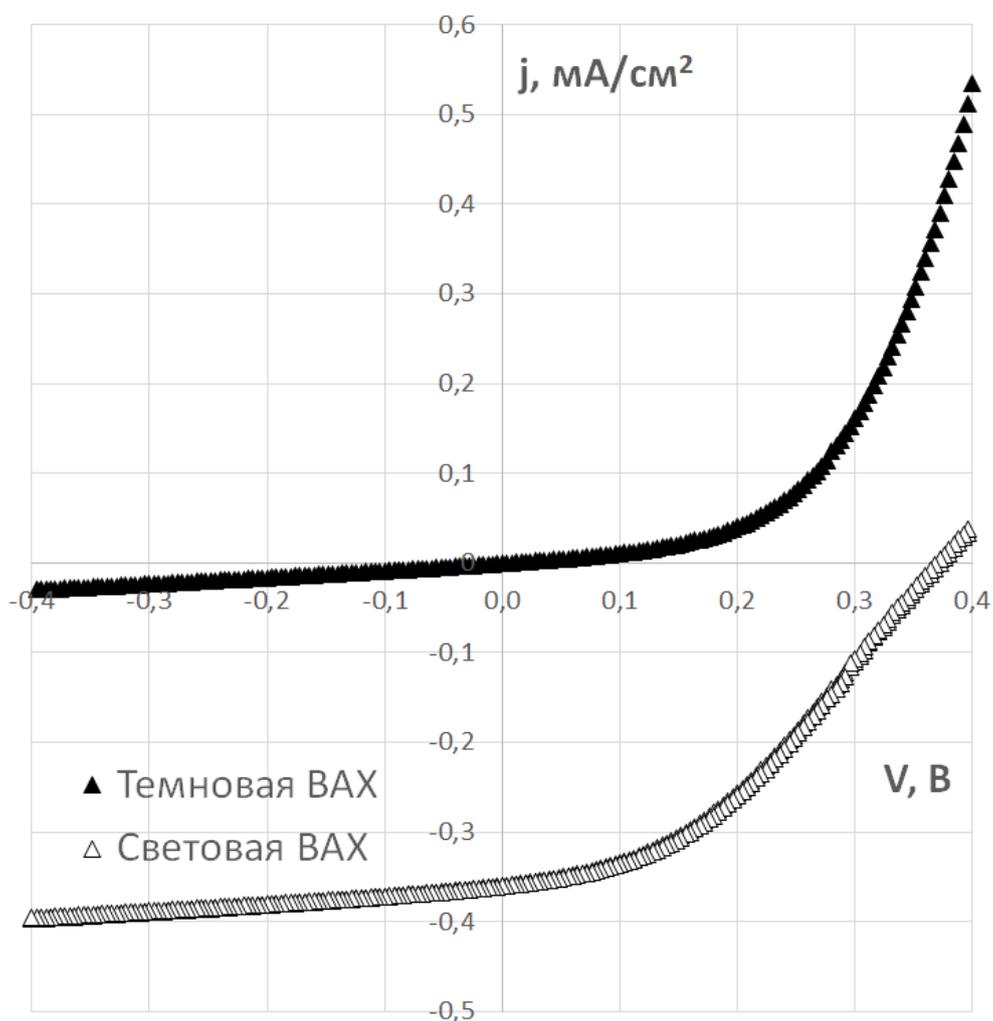


Рисунок 2. ВАХ прототипа солнечного элемента

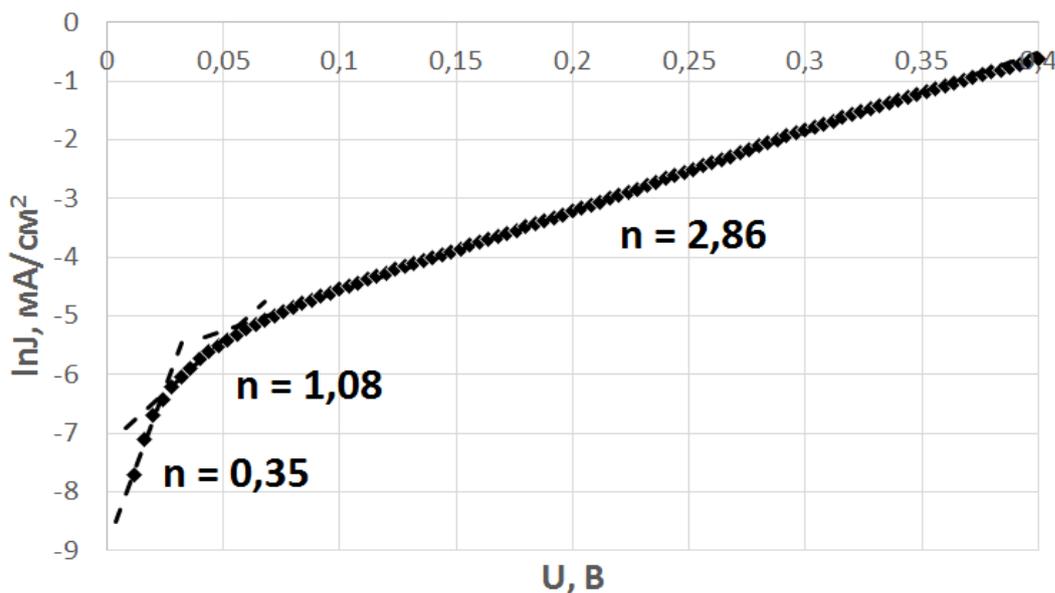


Рисунок 3. Прямая ветвь темновой ВАХ для определения коэффициента неидеальности

На рис. 3. представлена прямая ветвь темновой ВАХ структур, позволившая определить коэффициент неидеальности и провести анализ наиболее вероятных механизмов рекомбинации в полученных структурах (рис. 3). Прямую ветвь темновой ВАХ можно разделить на 3 линейно аппроксимируемых участка с величинами коэффициентов детерминации  $R^2_1 = 0,968$ ,  $R^2_2 = 0,992$  и  $R^2_3 = 0,999$ . Первый участок находится в диапазоне напряжений 0-0,025 В, его коэффициент неидеальности  $n_1 = 0,35$ , что может свидетельствовать о диффузионном механизме протекания тока через p-n переход. Возможность существования  $n < 1$  у солнечных элементов в диапазоне 0-0,05 В отмечалась в работе [4]. Второй участок с  $n_2 = 1,08$  лежит в диапазоне 0,025-0,05 В. Данный участок по своим свойствам близок к модели идеального диода Шокли и доминирующим механизмом рекомбинации на нем является рекомбинация в нейтральных областях (вне обедненного слоя). Третий участок с  $n_3 = 2,86$  находится в диапазоне 0,05-0,4 В, так как  $n > 2$ , преимущественным механизмом его рекомбинации является поверхностная рекомбинация [5].

Для полученных структур по зависимости выходного тока от напряжения были определены напряжение холостого хода  $V_{oc} = 0,372$  В и ток короткого замыкания  $I_{sc} = 0,321$  мА (см. рис. 4). По полученной ВАХ фототока была рассчитана вольт-ваттная характеристика и определена точка максимальной мощности, которая составила  $P_m = 4,58 \times 10^{-2}$  мВт при напряжении  $U_m = 0,201$  В и плотности тока  $j_m = 0,247$  мА/см<sup>2</sup>. Полученные результаты позволили рассчитать КПД и фактор заполнения, которые составили  $\eta = 5,19\%$  и  $FF = 0,384$ .

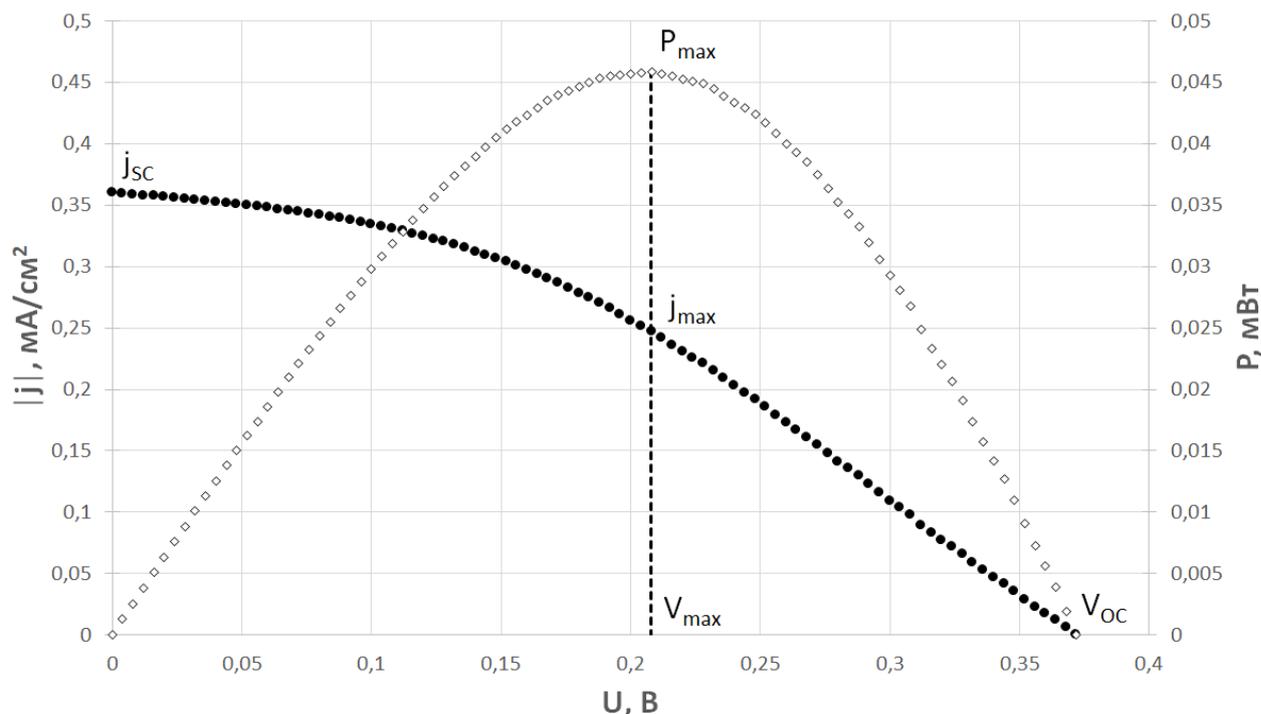


Рисунок 4. Зависимость выходного тока от напряжения и вольт-ваттная характеристика прототипа солнечного элемента

Полученные результаты свидетельствуют о перспективности применения пористого кремния в качестве материала для антиотражающего покрытия солнечных элементов [6]. Важной задачей дальнейших исследований является оптимизация глубины залегания  $p$ - $n$ -перехода и толщины слоя пористого кремния для повышения фактора заполнения и КПД следующих прототипов солнечных элементов.

#### Библиографический список

1. Милучко В.А. и др. Солнечная фотовольтаика: современное состояние и тенденции развития // Успехи физических наук. 2016. Т.186. №8. С.801-852.
2. Jäger-Waldau A. Snapshot of Photovoltaics – February 2020 // Energies. 2020. 13(4):930. P.1-8.
3. Bilenko D.I. et al. In Situ Measurement of Porous Silicon and the Influence of Ambient Gas on Its Properties // Sensors and Actuators A: Physical. 2000. – Vol. 79. Issue 2. P.147-152.
4. Meyer E.L. Extraction of Saturation Current and Ideality Factor from Measuring Voc and Isc of Photovoltaic Modules // Int. J. of Photoenergy. Volume 2017. 2017. P. 1-9.
5. Зу С.М. Физика полупроводниковых приборов. – М.: Энергия. 1973. 656 с.
6. Dzhaifarov T., Bayramov A. Porous Silicon and Solar Cells // Handbook of Porous Silicon. Springer International Publishing AG. Cham. 2017. P.1-14.

# 2 ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ

## НЕПЛАНАРНЫЕ МИКРОПОЛОСКОВЫЕ ЛИНИИ КАК ОСНОВА БРЭГГОВСКИХ СВЧ-СТРУКТУР

*А.Р. Насыбуллин, Т.М. Ишкеев, Р.Ф. Шакиров*  
Казанский Национальный Исследовательский Технический  
Университет им. А.Н. Туполева — КАИ  
E-mail: [timur.ishk.kai@gmail.com](mailto:timur.ishk.kai@gmail.com)

В работе представлены результаты моделирования элементарной ячейки непланарной микрополосковой линии. Описан метод упрощенного моделирования периодической структуры на основе непланарной микрополосковой линии в программе Mathcad. Проведен сравнительный анализ результатов полного и упрощенного методов моделирования, а также приводятся характеристики компьютерных моделей элементарной ячейки непланарной периодической структуры для разных типов линий передач.

**Ключевые слова:** непланарные микрополосковые линии, периодические структуры, брэгговские структуры, сенсорики, чувствительный элемент.

СВЧ устройства, которые можно обобщить определением структуры с периодическими неоднородностями, широко известны в теории и технике направляющих и излучающих систем. Подобные устройства, принцип действия которых основан на резонансном взаимодействии прямых и многократно отраженных от неоднородностей электромагнитных волн, нашли применение при создании фильтрующих схем, формирователей и преобразователей радиочастотных сигналов. В последнее время интерес к подобным структурам возобновился в связи с развитием новых направлений их применения [1]. Подобные структуры по аналогии с оптическими аналогами начали называть брэгговскими СВЧ-структурами или фотонными СВЧ кристаллами [1,2]. Брэгговские СВЧ-структуры – это периодические геометрии, построенные путем повторения элементарной ячейки или конструктивного элемента в одном, двух или трех измерениях. Такие системы называют одномерными, двумерными и трехмерными фотонными кристаллами соответственно. Электрические размеры таких ячеек сравнимы с длиной волны в СВЧ диапазоне. Наибольшее применение нашли одномерные брэгговские СВЧ-структуры. Одним из перспективных направлений в области их практического использования становится измерительная техника и, в частности,

устройства для измерения диэлектрических параметров материалов и сред [1,2].

Планарные линии передачи, создаваемые на основе печатных технологий, получили широкое применение в устройствах СВЧ диапазона. Этому поспособствовали малые габаритные размеры, незначительная масса, возможность унификации, а также обеспечение интеграции с активными элементами СВЧ со сосредоточенными параметрами. К планарным относят разные виды микрополосковых и щелевых линий передач, а также компланарную линию. Однако планарным линиям передачи свойственны некоторые недостатки, которые связаны с излучением в открытое пространство, особенно в области сантиметровых и миллиметровых длин волн. Полосковые брэгговские структуры в качестве датчиков для измерения диэлектрической проницаемости имеют ряд преимуществ, по сравнению с другими линиями передачи, такие как простота изготовления, полуоткрытая конфигурация, способность анализировать плоские объекты [3]. Тем не менее, когда рабочие частоты становятся относительно небольшими (0,7-3 ГГц) линейные размеры датчиков на основе периодических планарных структур могут становиться недопустимо большими.

Для преодоления этой проблемы в работе предлагается конфигурация непланарной полосковой структуры, в которой уменьшение продольных размеров происходит за счет волнообразной формы линии. Внешний вид исследуемой структуры представлен на рис. 1.

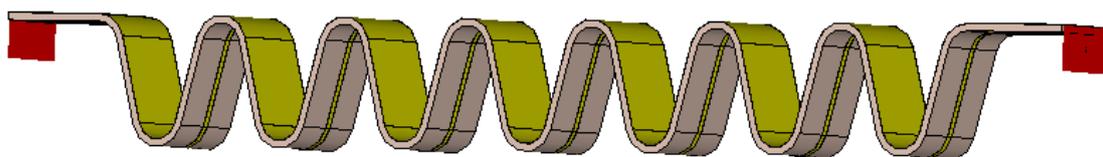


Рисунок 1. Внешний вид непланарной брэгговской СВЧ-структуры

Присущая такой линии периодичность приводит к формированию слабо выраженных брэгговских резонансов. Компьютерное моделирование структуры было реализовано на базе программы CST Studio Suite. Частотные характеристики структуры приведены на рис. 2.

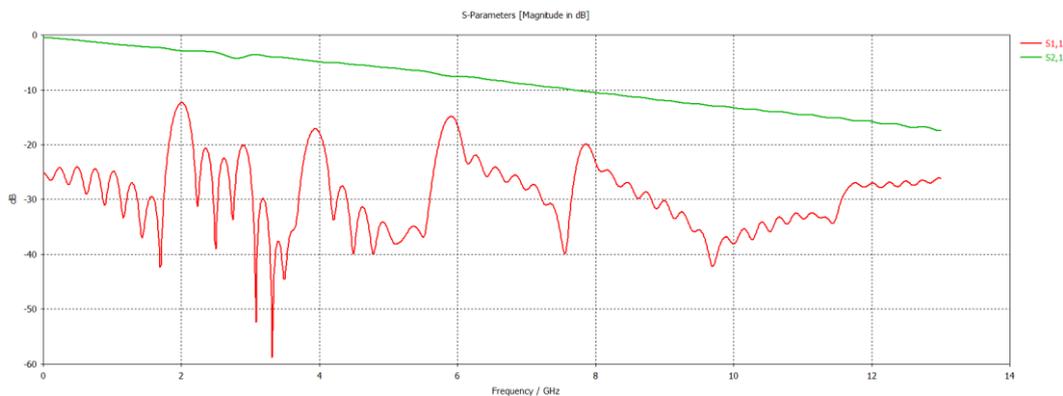


Рисунок 2. Частотные зависимости коэффициента передачи и коэффициента отражения непланарной брэгговской СВЧ-структуры

Применение подобной структуры при измерении диэлектрических параметров плоского объекта, когда его поверхность касается криволинейных участков линии, приводит к усилению брэгговских резонансов, форма которых может быть использована для определения искомых параметров (рис.3).

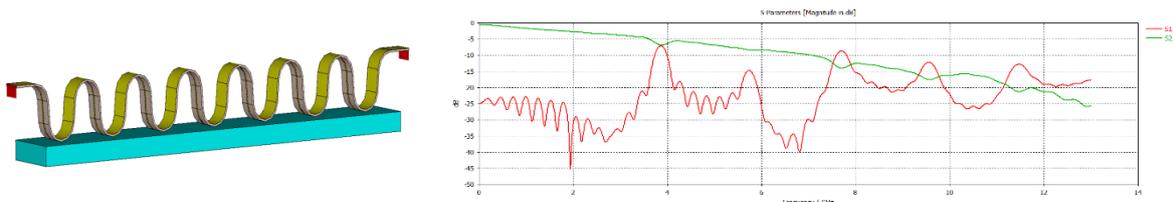


Рисунок 3. Модель применения непланарной брэгговской СВЧ-структуры для определения параметров диэлектриков и ее частотные зависимости коэффициента отражения и коэффициента передачи

Сложность формы рассматриваемой структуры, обладающей криволинейные границы, приводит к значительным вычислительным затратам при расчете в программах численного моделирования. Еще одним недостатком при компьютерном моделировании всей структуры является сложность анализа распространения волн в таких линиях, особенно выявление паразитных связей между расположенными рядом областями. Для решения этой задачи была построена математическая модель подобной структуры в среде Mathcad. За основу были взяты результаты вычислений CST Studio Suite для единичной «ячейки» микрополосковой непланарной брэгговской структуры с подводящими линиями. В программе Mathcad была сформирована S-матрица рассеяния для элементарной ячейки путем исключения подводящих линий. Для проведения вычислений каскадной структуры за основу был взят метод ABCD-матриц, следовательно, были проведены преобразования из S-матрицы в ABCD-матрицу, а после каскадного умножения матриц обратно из ABCD матрицы в S-матрицу. После всех преобразований были

проведены сравнения рассчитанной структуры в среде Mathcad и модели периодической структуры из CST Studio Suite. График сравнения приведен на рис. 5.

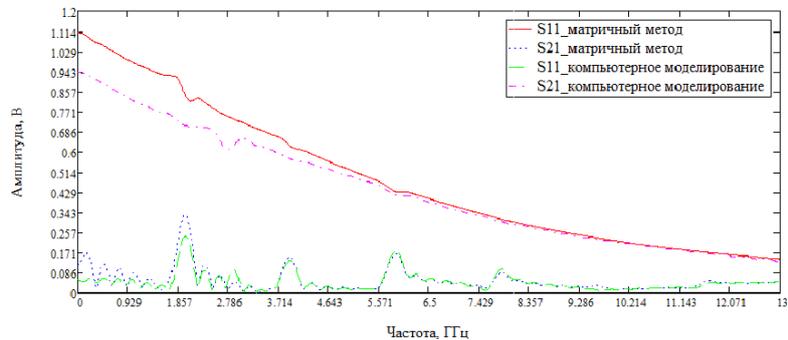
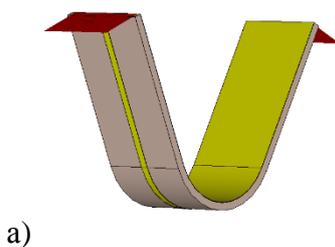


Рисунок 5. График сравнения частотных характеристик

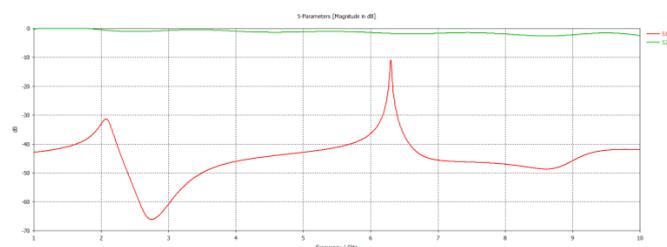
Результаты показали высокую точность метода, основанного на использовании ABCD матриц, в высокочастотной области рассматриваемого диапазона. Расхождение в нижней части диапазона объясняется наличием паразитных связей в линии. Следовательно, при матричном расчете непланарных брэгговских структур требуется введение дополнительных сведений об эффектах взаимных связей.

Проведем рассмотрение особенностей элементарных ячеек исследуемых структур. При компьютерном моделировании, описанным выше, использовался Time Domain Setup Solver (Временной решатель). Особенностью данного решателя является невозможность расположения излучающих портов не ортогонально по отношению к осям. Для решения данного вопроса было решено использовать частотный решатель (Frequency Domain Setup Solver). Для более глубокого понимания проходящих процессов в рассматриваемой структуре, были проанализированы также компланарная линия без земляного проводника и компланарная линия с земляным проводником. Коэффициент отражения и передачи для элементарной ячейки непланарной периодической структуры, а также модели рассматриваемых линий передач приведены на рис. 6.

Компьютерная модель элементарной ячейки



Коэффициент отражения и передачи



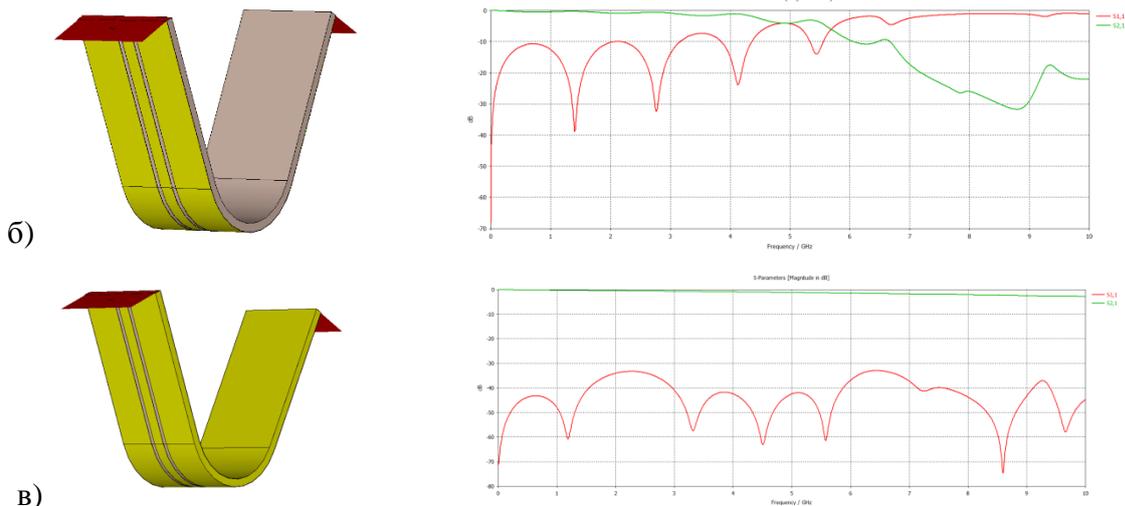


Рисунок 6. Сравнение характеристик разных моделей элементарных ячеек непланарной структуры: а – элементарная ячейка на основе микрополосковой линии; б – компланарная линия без земляного проводника; в – компланарная линия с земляным проводником

Из полученных результатов, представленных на рис. 6 можно утверждать, что элементарная ячейка на основе компланарной линии с земляным проводником показывает минимальное отражение. Коэффициент отражения не превышает минус 30 дБ. Минимальное отражение от элементарной ячейки является одним из требований для уменьшения влияния параметров структуры на формирование брэгговского резонанса при касании исследуемого плоского диэлектрика с непланарной СВЧ-структурой.

#### Библиографический список

1. Усанов Д.А., Никитов С.А., Скрипаль А.В., Пономарев Д.В. Одномерные СВЧ фотонные кристаллы Новые области применения.// М.:Физматлит, 2018.
2. Севастьянов А.А. Брэгговские СВЧ-структуры в коаксиальном кабеле для систем контроля уровня жидких сред: диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук // Самара, 2014. 175 с.
3. Ишкаев Т.М., Насыбуллин А.Р., Вазиев Т.О. Полосковые брэгговские СВЧ структуры с двойной периодичностью // Материалы XVII Международной научно-технической конференции. — Казань, 2019. с. 180-181

## БРЭГГОВСКИЕ СВЧ-СТРУКТУРЫ В КООКСИАЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ С ВНЕШНИМ ПРОВОДНИКОМ В ВИДЕ ПРОДОЛЬНЫХ СТЕРЖНЕЙ

*А.Р. Насыбуллин<sup>1</sup>, Р.В. Фархутдинов<sup>1</sup>, Э.Н. Гайфуллин<sup>1</sup> В.А. Ефимов<sup>1</sup>*  
<sup>1</sup>Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. А.Н. Туполева – КАИ  
E-mail: [aydar.nasybullin@mail.ru](mailto:aydar.nasybullin@mail.ru)

Брэгговские СВЧ структуры в коаксиальной линии нашли применение в качестве преобразовательных элементов устройств диэлектрического контроля. В докладе рассматривается модификация конструкции брэгговской структуры, заключающаяся в замене сплошного внешнего проводника совокупностью продольных стержней. По результатам моделирования брэгговских СВЧ структур формируются рекомендации к построению преобразовательных элементов на их основе.

**Ключевые слова:** брэгговские СВЧ структуры, коаксиальная линия, СВЧ датчики, диэлектрическая проницаемость, метод моментов.

В задачах измерения диэлектрических параметров материалов и веществ находят широкое применение периодические СВЧ структуры в коаксиальных линиях при анализе их характеристик в диапазоне частот брэгговского рассеяния [1,2]. Измерительный преобразователь в виде брэгговской СВЧ структуры предполагает косвенное определение параметров материалов по измеренному первичному информационному сигналу, в качестве которого могут выступать модуль или фаза коэффициента отражения или передачи структуры. Достижение требуемой чувствительности преобразования приводит к необходимости заполнения линии или её части исследуемой средой. Для введения исследуемого вещества в чувствительную область датчика предлагается использование отверстий во внешнем проводнике. На выбор формы и размеров отверстий влияет величина возмущения электромагнитного поля в линии, уровень паразитного излучения, обеспечение беспрепятственного заполнения и высвобождения исследуемого вещества. Альтернативой малым отверстиям во внешнем проводнике является полуоткрытая коаксиальная линия, состоящая из внешнего проводника в виде продольно расположенных проводящих стержней. В такой линии также, как и в коаксиальной, будет существовать основной тип волны в виде плоской электромагнитной волны (ТЕМ-волны). При относительно большом количестве стержней электромагнитное поле не значительно отличается от поля в закрытой коаксиальной линии, поэтому причисление таких волноводных систем к коаксиальным оправдано. Основной трудностью при проектировании брэгговских СВЧ структур с внешним проводником в виде стержней является необходимость расчета волнового сопротивления возмущенной коаксиальной линии. Волновое сопротивление закрытой коаксиальной линии определяется известным выражением:

$$Z_{close} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}} \ln\left(\frac{b}{a}\right), \quad (1)$$

где  $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная,  $\varepsilon_r$  – диэлектрическая проницаемость не магнитного диэлектрика коаксиальной линии,  $b$  – внутренний радиус внешнего проводника,  $a$  – радиус центрального проводника. Если диэлектрик в линии имеет потери, то  $\varepsilon_r$  становится комплексной величиной. На рис. 1а показано поперечное сечение закрытой коаксиальной линии с обозначением всех внутренних параметров.

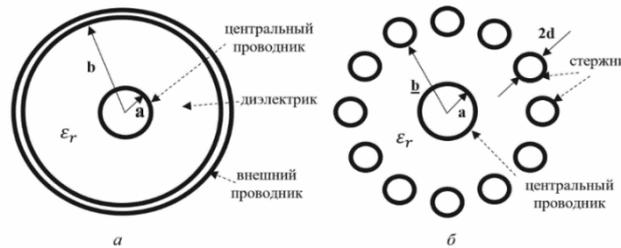


Рисунок 1. Поперечное сечение коаксиальных линий: а) – закрытая коаксиальная линия, б) – полуоткрытая коаксиальная линия с внешним проводником в виде стержней

Рассмотрим конфигурацию поперечного сечения коаксиальной линии со стержнями (рис. 1б), в которой все стержни идентичны. Естественно предположить, что волновое сопротивление такой линии будет зависеть от радиуса центрального проводника  $a$ , расстояния от центра линии до края стержней  $\underline{b}$ , радиуса стержня  $d$ , количества стержней  $N$  и диэлектрической проницаемости внутреннего диэлектрика  $\varepsilon_r$ , границы которого простираются до бесконечности. Вывести точную формулу для расчета волнового сопротивления, зависящего от этих параметров, на подобии выражения (1) крайне трудно. Поэтому обычно находят приближенное выражение для волнового сопротивления на основе численных или численно-аналитических расчетов электромагнитных параметров таких линий.

В работе [3] предлагается численный расчет полуоткрытой коаксиальной линии со стержнями методом моментов. В [3] показано, что при равенстве радиуса  $b$  внешнего проводника закрытого коаксиала расстоянию  $\underline{b}$  от центра до края стержня для коаксиала со стержнями, то волновое сопротивление последнего будет всегда больше волнового сопротивления закрытого коаксиала. Это значит, что линия со стержнями эквивалентна закрытой коаксиальной линии с радиусом  $b_{эkv}$  несколько большим, чем  $\underline{b}$  у линии со стержнями.

Радиус эквивалентной закрытой коаксиальной линии зависит от количества стержней  $N$ , а именно при увеличении  $N$  радиус  $b_{эkv}$  эквивалентной линии приближается к  $\underline{b}$  линии со стержнями. Также можно наблюдать, что существует зависимость  $b_{эkv}$  от  $\underline{b}$ . При неизменном  $N$  при

увеличении  $\underline{b}$  видно, что  $b_{экс}$  постепенно увеличивается, это наблюдается как отклонение формы зависимости от характерной для закрытой линии при больших  $\underline{b}$ . При этом для малого  $\underline{b}$  формы зависимостей почти совпадают.

Так как характер зависимости волнового сопротивления полуоткрытой коаксиальной линии от отношения  $\underline{b}/a$  имеет схожесть с аналогичной зависимостью для закрытой линии, то приближенную формулу для волнового сопротивления  $Z_{open}$  можно задать в виде суммы выражения (1) с дополнительным слагаемым, выражающим зависимость от параметров линии и представляющим собой, представленным, например, в виде полинома:

$$Z_{open} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}} \left( \frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{b}{a} \right) + A_0 + A_1 \frac{b}{a} + A_2 N + A_3 N^2 + A_4 \frac{d}{a} + A_5 \left( \frac{d}{a} \right)^2 + A_6 N \frac{d}{a} \right), \quad (2)$$

где  $A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$  – постоянные коэффициенты, определяемые по результатам вычислительного эксперимента.

Обладая значением волнового сопротивления для полуоткрытой коаксиальной линии, можно производить расчеты брэгговских СВЧ-структур, реализованных на их основе. Для этого удобно использовать модели, представляющие собой каскадное соединение отрезков линий передачи с различным волновым сопротивлением. Обычно с помощью перечисленных методов описывают распространение основной волны в волноводной линии, не учитывая при этом высших распространяющихся типов волн. Назовем такие модели одноволновыми. Расчет характеристик брэгговской структуры был проведен рекуррентным методом (методом трансформации импеданса). Отметим, что в нем возможно учитывать отрезки линий передачи, заполненные диэлектриком с потерями, посредством использования комплексного волнового сопротивления. В случае коаксиальной линии с внешним проводником в виде ряда стержней оно будет задаваться формулой (2), в которой  $\varepsilon_r$  будет определяться диэлектриком в секции брэгговской структуры.

Брэгговская структура может представлять собой линию с периодическим скачкообразным изменением диэлектрической проницаемости заполнения. В качестве повторяющейся ячейки брэгговской структуры выберем последовательно соединенные секции, заполненные диэлектриком и воздухом, где в качестве диэлектрика будет выступать фторопласт. В данном случае длина ячейки будет являться периодом брэгговской структуры. Анализируя изменение частотных характеристик структуры определяются искомые параметры. Внешний вид структуры показан на рис. 2.

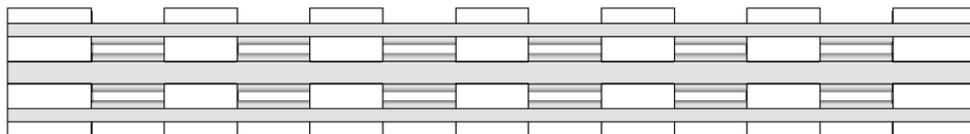


Рисунок 2. Внешний вид в разрезе брэгговской коаксиальной структуры с кусочно-однородно заполнением

Проведем сравнение результатов одноволнового расчета коэффициента отражения брэгговской структуры рекуррентным методом и полноволнового расчета в CST STUDIO SUITE. На рис. 3 показаны результаты обоих расчетов.

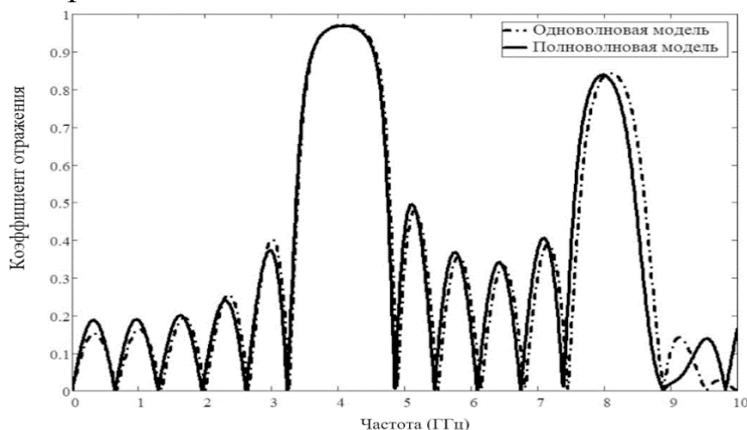


Рисунок 3. Сравнение одноволнового и полноволнового расчета коэффициента отражения коаксиальной брэгговской структуры с неоднородностями диэлектрика

Из графиков видно, что хорошая сходимость у графиков на частотах первого резонанса брэгговской структуры, но при дальнейшем увеличении частоты сказываются эффекты возникновения высших волн и излучения из линии во внешнее пространство, что обуславливает различие между графиками.

Рассмотрим следующий вариант брэгговской СВЧ структуры, основанной на полуоткрытой коаксиальной линии и обладающей ступенчатыми неоднородностями диэлектрического заполнения и ступенчатыми нерегулярностями радиуса центрального проводника. Для этого в ранее рассмотренную структуру введем скачкообразное увеличение радиуса центрального проводника в секциях с воздухом. Внешний вид коаксиальной брэгговской структуры в разрезе показан на рис. 4.

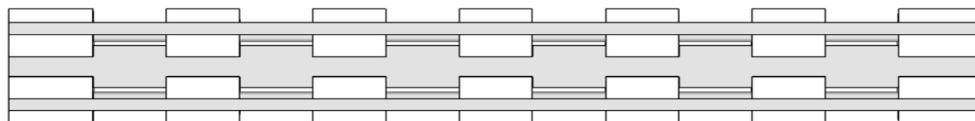


Рисунок 4. Внешний вид в разрезе брэгговской коаксиальной структуры с неоднородностями диэлектрика и нерегулярностями центрального проводника

Аналогично предыдущему случаю проведем сравнение одноволнового расчета коэффициента отражения рекуррентным методом и полноволнового расчета в CST STUDIO SUITE. На рис. 5 показаны результаты обоих расчетов.

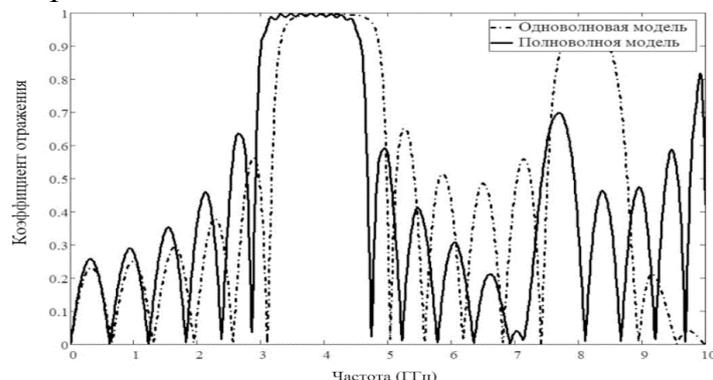


Рисунок 5. Сравнение одноволнового и полноволнового расчета коэффициента отражения коаксиальной брэгговской структуры с неоднородностями диэлектрика и нерегулярностями центрального проводника

Из рис. 5 можно наблюдать, что различие наблюдается уже с частот первого резонанса. Это объясняется тем, что нерегулярности центрального проводника приводят к возбуждению высших мод, которые не учитывались в одноволновом приближении.

#### Библиографический список

1. Усанов Д.А., Никитов С.А., Скрипаль А.В., Пономарев Д.В., Рузанов О.М., Тимофеев И.О. Измерение параметров диэлектриков с использованием СВЧ коаксиальной брэгговской структуры // Радиотехника. 2019. Т.83, №7. С. 6-12.
2. Фархутдинов Р.В., Насыбуллин А.Р., Морозов О.Г., Вазиев Т.О., Ишкаев Т.М., Садчиков В.В. Брэгговская СВЧ-структура в коаксиальном волноводе как датчик контроля диэлектрических параметров жидких сред // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Том 22, № 4. С.114-120.
3. Насыбуллин А.Р., Морозов О.Г., Фархутдинов Р.В., Ишкаев Т.М. Сверхвысокочастотные брэгговские структуры в полуоткрытой коаксиальной линии. // Вопросы радиоэлектроники. 2021. № 1(1). С.4–12.

# ОПТОМЕХАНИКА ВОЛОКОННЫХ ДАТЧИКОВ ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОЛОЖЕНИЯ ПАЦИЕНТА В ИНВАЛИДНОЙ КОЛЯСКЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНО-ЧИРПИРОВАННЫХ РЕШЕТОК БРЭГГА

*Р.А. Эштай, О.Г. Морозов, В.И. Артемьев,  
Л.М. Сарварова, А.А. Тяжелова*

Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. А.Н. Туполева-КАИ  
E-mail: OGMorozov@kai.ru

В работе представлены результаты проектирования системы сбора информации, предназначенной для предотвращения пролежней у пациентов, большую часть времени, находящихся в инвалидной коляске. В основе сенсорной части системы используются датчики давления на основе линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток. Применение таких решеток и радиофотонных подсистем их опроса с помощью ЛЧМ-зондирования позволит снизить стоимость системы в целом, которая ограничивает применение волоконно-оптических систем указанного назначения в медицинской практике.

**Ключевые слова:** инвалидная коляска, пролежни, система контроля состояния пациента, датчик давления, линейно-чирпированная волоконная брэгговская решетка, система ЛЧМ-опроса датчиков.

**Введение.** Предложенная в [1] система контроля состояния пациентов включает шесть датчиков давления на основе классической волоконной брэгговской решетки (ВБР), установленных в упругой капсуле трансформации приложенного давления в линейную деформацию длины решетки. Капсулы закреплены в стратегических зонах инвалидной коляски с обеих сторон (спинка – зона лопатки, сиденье – сидалищная зона и подставка для ног – зона пяток) и соединены со спектральным оптико-электронным интеррогатором (СОЭИ). Информация, полученная с помощью системы, позволяет контролировать давление, с которым пациент давит на указанные зоны коляски, длительность нахождения в коляске, движения пациента и, кроме того, оценить частоту дыхания, возможную потерю сознания и другую информацию для раннего выявления пролежней и других дисфункций организма.

В [2, 3] нами было предложено в таких системах использовать в качестве датчиков давления линейно чирпированные ВБР (ЛЧВБР), в силу ряда их конструктивных преимуществ и возможности получения более высоких метрологических характеристик, по сравнению с ВБР [4]. Кроме того, были показаны радиофотонные принципы интеррогации единичных ЛЧВБР, которые существенно дешевле, проще конструктивно и имеют более низкий вес и меньшие габаритные показатели по сравнению с СОЭИ.

**Модельные исследование оптомеханики ЛЧВБР.** Для модельных исследований использовались два структурных описания ЛЧВБР: дискретно-элементный (рис. 1,а) и дискретно-секционный (рис. 1,б).

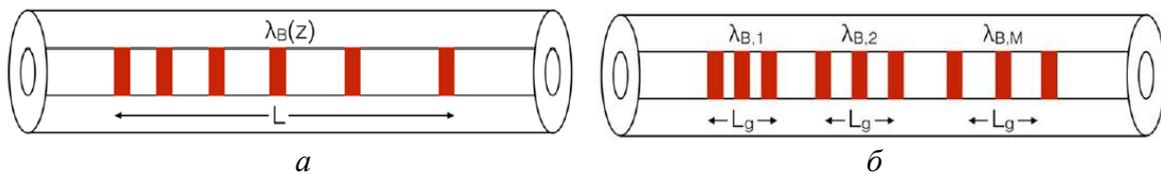


Рисунок 1. Структура ЛЧВБР, описываемая дискретно-элементной (а) и дискретно-секционной (б) моделями

Дискретно-элементная модель подразумевает, что каждый элемент решетки отражает свою брэгговскую длину волны и общий спектр отражения ЛЧВБР является суммарным результатом отражения от каждого участка. Дискретно-секционная модель представляет собой цепочку  $N$  однородных ВБР (секций), каждая из которых имеет различную брэгговскую длину волны и не имеет внутренних связей между секциями.

Общий спектр ЛЧВБР для второй модели может быть получен путем последовательного перемножения спектров отражения каждой секции:

$$R_{LCFBG} = 1 - \prod_{i=1}^5 [1 - R_i(\lambda)], \quad (1)$$

где  $i$  – номер секции – однородной ВБР.

Из уравнения (1) видно, что взаимосвязь между каждым из слоев, составляющих решетку отсутствует.

Математическое моделирование проводилось в программной среде Mathcad 15. Были выбраны следующие параметры секций ЛЧВБР: эффективный показатель преломления основной моды и коэффициент связи каждой из секций ЛЧВБР были выбраны равными  $n_{eff} = 1.5$ ,  $k = 400$ . Период первой секции ЛЧВБР  $\Lambda_1$  составляет 0.5 мкм, что соответствует центральной длине волны первой секции  $\lambda_{B,1} = 1500$  нм. Период каждой следующей секции ЛЧВБР увеличивался от предыдущей на 0.067 нм, что соответствует смещению центральной длины волны секций ЛЧВБР на 0.2 нм. Таким образом, были приняты следующие значения периода и центральной длины волны пяти секций ЧВБР (табл. 1).

Табл. 1. Параметры секций ЛЧВБР

№ секции	Период, $\Lambda$ (мкм)	Длина волны, $\lambda$ (нм)
1	0.5	1500
2	0.500067	1500.2
3	0.500133	1500.4
4	0.5002	1500.6
5	0.500267	1500.8

На рис. 2 представлены профили спектра отражения секций (а) и ЛЧВБР (б).

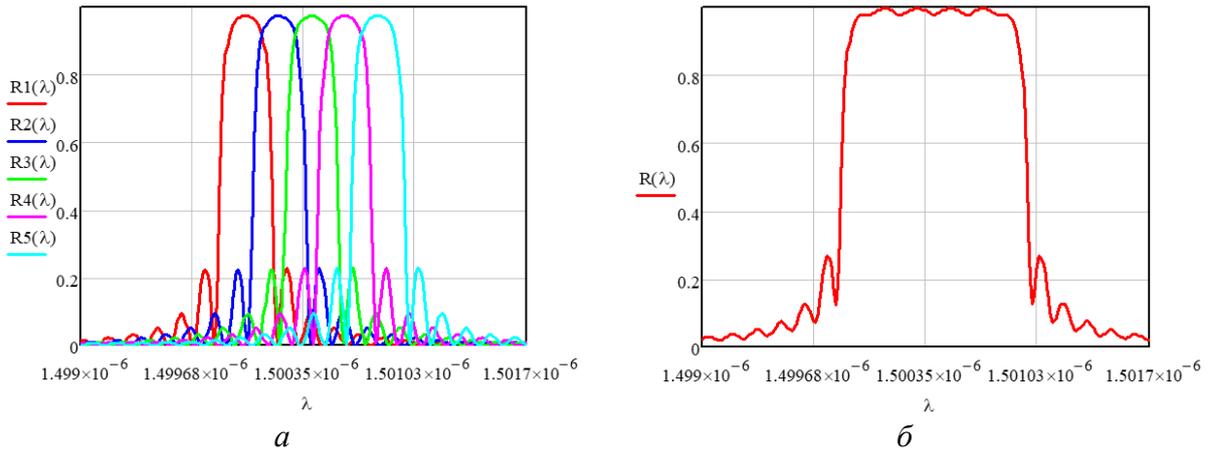


Рисунок 2. Профили спектра отражения секций (а) и ЛЧВБР (б)

Из [4] известно, что коэффициент чувствительности ЛЧВБР зависит от сложности изготовления абсолютно идентичных секций датчиков, поэтому чувствительность в разных зонах соприкосновения тела пациента с поверхностью датчика может отличаться, тем не менее это не влияет на окончательные результаты, так как в итоге каждая секция калибруется индивидуально перед использованием. Сдвиг центральной длины волны ЛЧВБР при воздействии давления в ходе расчетов составила 18 пм/кПа.

**Опрос датчиков одного плеча системы с использование зондирующего ЛЧМ сигнала.** Структурная схема опроса одного датчика представлена нами в [2, 3] и опиралась на решения, полученные в [5].

В лазерном диоде генерируется ЛЧМ-излучение, которое поступает на четыре идентичные ЛЧВБР, где первая ЛЧВБР используется в качестве опорной (2), а вторая-четвертая (4) – датчики давления, установленные соответственно в зонах пятки, сидалища и лопатки. Все решетки идентичны по структуре и полосе отражения. Отличие заключается в их коэффициентах отражения, которые равны 25, 50, 75 и 100% соответственно, что может быть достигнуто при различном времени записи (рис. 3,а).

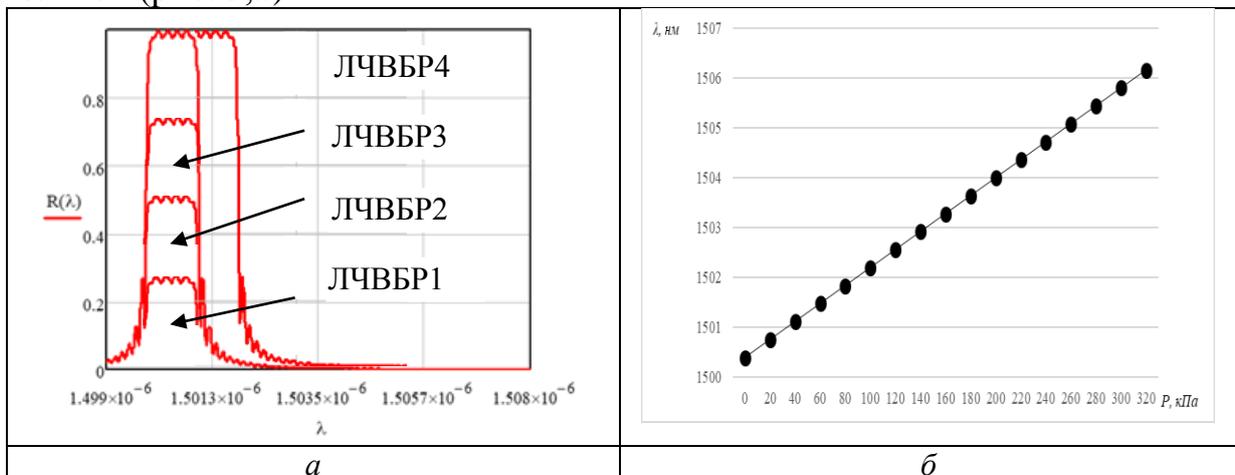


Рисунок 3. Профили спектра отражения несмещенных и четвертого смещенного (40 кПа) датчиков (а) и зависимость центральной длины волны любого из трех измерительных датчиков при равномерном приложении давления на ЛЧВБР (б)

Отражение ЛЧМ излучения от четырех ЛЧВБР приводит к формированию четырех отраженных ЛЧМ сигналов (3), (5) с различной амплитудой и задержкой во времени (4), которые далее через циркулятор поступают на фотодетектор ФД. На выходе ФД генерируются три микроволновых сигнала биений (6) с частотами (7), пропорциональной разнице во времени задержки между четырьмя отраженными сигналами, которая меняется от своего начального значения при сдвиге центральной длины волны секций под воздействием давления (8).

Система сигналов для описания процесса зондирования датчиков представлена ниже:

$$\omega_1(t) = \omega_0 - \alpha t, \quad (2)$$

$$E_1(t) = A_1 \exp\left[j\left(\omega_0 t + (1/2)\alpha t^2 + \varphi_0\right)\right], \quad (3)$$

$$\omega_i(t) = \omega_0 + \alpha(t - \tau_{i-1}), \quad i = 2, 3, 4, \quad \tau_{i-1} = 2nL_{i-1}/c \quad (4)$$

$$E_i(t) = A_i \exp\left[j\left(\omega_0(t - \tau_{i-1}) + (1/2)\alpha(t - \tau_{i-1})^2 + \varphi_0\right)\right], \quad (5)$$

$$I(t, \tau_{i-1}) = \Re\left|E_1(t) + \sum_i E_i(t - \tau_{i-1})\right|^2 =$$

$$= \Re\left[I_1 + \sum_i I_i + 2\sum_i \sqrt{I_1 I_i} \cos(\alpha\tau_{i-1}t + \omega_0 t - (1/2)\alpha\tau_{i-1}) + \mathfrak{I}_i\right], \quad (6)$$

$$f_{b(i-1)} = \alpha\tau_{i-1}/2\pi, \quad (7)$$

$$\Delta f_{b(i-1)} = \alpha n\lambda_0(1 - P_e)\Delta\varepsilon / \pi c C_{\text{chirp}}. \quad (8)$$

Путем измерения с помощью электронного векторного анализатора спектра (ЭВАС) сдвига частоты сигнала биений (8), вызванного изменением временной задержки (9) можно определить величину приложенной деформации  $\Delta\varepsilon$  и соответствующему ей давлению с каким пациент опирается на контрольные зоны коляски:

$$\Delta\tau = 2n\lambda_0(1 - P_e)\Delta\varepsilon / c C_{\text{chirp}}. \quad (9)$$

Дополнительным преимуществом является тот факт, что схема не чувствительна к температуре, в силу близкого расположения решеток друг к другу [5].

На рис. 3,б представлена зависимость сдвига центральной длины волны датчиков, при равномерном воздействии давления на все секции ЛЧВБР. При полном весе человека в 320 кПа отклик ФД лежит в терагерцовой области. Однако, в реальной ситуации изменение давления составляет  $\pm 20$  кПа, что по полосе составляет около 100 ГГц, а сам ФД может быть реализован на стандартном телекоммуникационном ресивере.

## Заключение

Несмотря на полученные преимущества схемы радиофотонной интеррогации и возможностью получить погрешность измерения давления с разрешением  $0,25 \text{ мк}$  по вызванной им деформации, схема достаточно сложна в реализации и конструктивно позволяет опрашивать только один датчик.

В работе представлены результаты проектирования системы сбора информации, предназначенной для предотвращения пролежней у пациента, находящихся в инвалидной коляске. В основе сенсорной части системы впервые используются датчики давления на основе ЛЧВБР. Применение таких решеток и разработанных радиофотонных ЛЧМ-методов их опроса позволило как увеличить точность контроля положения пациента, так и снизить стоимость системы опроса датчиков на 2-3 порядка.

Ключевые особенности предлагаемого подхода - высокая скорость, высокое разрешение и высокая стабильность работы. Кроме того, частота биений зависит только от разницы во времени задержки между парами ЛЧВБР, а абсолютное расстояние может быть большим, что делает подход пригодным для дистанционного зондирования с минимумом перекрестных искажений  $\mathfrak{I}_i$ .

Несмотря на указанные преимущества данного радиофотонного метода опроса, есть и существенные недостатки, к которым можно отнести широкую полосу пропускания приемника, наличие перекрестных высокочастотных составляющих в спектре биений, наличие нелинейных искажений в формируемом широкополосном зондирующем излучении.

## Библиографический список

1. *Tavares C., Domingues F.M., Paixao T., Alberto N., Silva H., and Antunes P.* Wheelchair pressure ulcer prevention using FBG based sensing devices // *Sensors*. 2020. V. 20. P. 212.
2. *Tosi D.* Review of chirped fiber Bragg grating (CFBG) fiber-optic sensors and their applications // *Sensors*. 2018. V. 18. P. 2147.
3. *Салихова М.А., Степущенко О.А., Эшпай Р.А., Морозов О.Г.* Система сбора информации о положении пациента в инвалидной коляске на основе линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток с фазовым  $\pi$ -сдвигом // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2020. № 5. С. 30-33.
4. *Салихова М.А., Степущенко О.А., Эшпай Р.А., Морозов О.Г., Сахабутдинов А.Ж., Нуреев И.И.* Радиофотонная система сбора информации о положении пациента в инвалидной коляске на основе адресных линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток с двумя фазовыми  $\pi$ -сдвигами // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2020. № 5. С. 34-37.
5. *Wang Y. Zhang J., Coutinho O. and Yao J.* Interrogation of a linearly chirped fiber Bragg grating sensor with high resolution using a linearly chirped optical waveform // *Opt. Lett.* 2015. V. 40(21). P. 4923-4926.

# РАДИОФОТОННАЯ СИСТЕМА СБОРА ИНФОРМАЦИИ О ПОЛОЖЕНИИ ПАЦИЕНТА В ИНВАЛИДНОЙ КОЛЯСКЕ НА ОСНОВЕ ЛИНЕЙНО-ЧИРПИРОВАННЫХ РЕШЕТОК БРЭГГА С ФАЗОВЫМ СДВИГОМ

*Р.А. Эшпай, В.И. Артемьев, А.А. Тяжелова, О.Г. Морозов, Л.М. Сарварова*  
Казанский национальный исследовательский технический университет  
им. А.Н. Туполева-КАИ  
E-mail: OGMorozov@kai.ru

В основе сенсорной части системы сбора информации, предназначенной для предотвращения пролежней у неподвижных пациентов, находящихся в инвалидной коляске, впервые используются датчики давления на основе дискретно-секционных линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток с фазовыми  $\pi$ -сдвигами. Применение таких систем позволит решить проблемы высоких по стоимости опико-электронных интеррогаторов и сложных в реализации радиофотонных интеррогаторов с ЛЧМ опросом.

**Ключевые слова:** инвалидная коляска, пролежни, система контроля состояния пациента, датчик давления, линейно-чирпированная волоконная брэгговская решетка с фазовым сдвигом, система широкополосного опроса датчиков.

## Введение

Пролежни являются серьезной проблемой для людей с травмами спинного мозга (ТСМ). Статистика показывает, что более 50% людей с ТСМ страдают от пролежней в период их жизни [1]. Снизить стоимость лечения и улучшить качество жизни людей с ТСМ, можно с помощью профилактических и мониторинговых мероприятий.

Предложенные недавно системы на классических волоконных брэгговских решетках (ВБР) [1] и линейно-чирпированных (ЛЧВБР) [2, 3] позволяют частично решить указанные проблемы. Однако, в их арсенале присутствуют либо сложный и дорогой опико-электронный интеррогатор (ОЭИ), либо сложная с высоким уровнем нелинейности и перекрестных искажений подсистема ЛЧМ-опроса радиофотонного интеррогатора (РФИ). Даже для шести измерительных датчиков давления, установленных в зонах лопаток, сидалища, пяток с обеих сторон тела, и двух опорных решеток в каждом из каналов наблюдается существенное количество коллизий по определению центральной длины волны каждой из решеток [1-3].

В данной статье будут исследованы принципы построения и работы гибридной системы, которая содержит широкополосный источник зондирующего излучения из ОЭИ, и принципы измерения давления на радиочастотах биений оптических компонент, полученных с каждого измерительного датчика и опорной решетки. Такая система становится

реализуемой, если в качестве датчиков будут использованы дискретно-секционные ЛЧВБР, которые позволяют записать фазовый  $\pi$ -сдвиг, в любой секции [4].

### Сенсорная часть

Для реализации в датчиках давления радиофотонных принципов измерений при записи ЛЧВБР необходимо предусмотреть запись фазовых сдвигов с разностной частотой между ними, лежащей в микроволновом диапазоне. Величина этой разностной частоты может отличаться от датчика к датчику при записи фазового сдвига, например, в первой, второй и четвертой секциях пятисекционной решетки или даже эквидистантно, как показано на рис. 1,а, поскольку дополнительно будет введена амплитудная дискриминация составляющих, как показано на рис. 1,б. При этом такая дискриминация может быть реализована с помощью линейного наклонного фильтра, либо с помощью записи фазовых сдвигов различной величины –  $\pi$ ,  $3\pi/4$ ,  $\pi/2$ ,  $\pi/4$ .

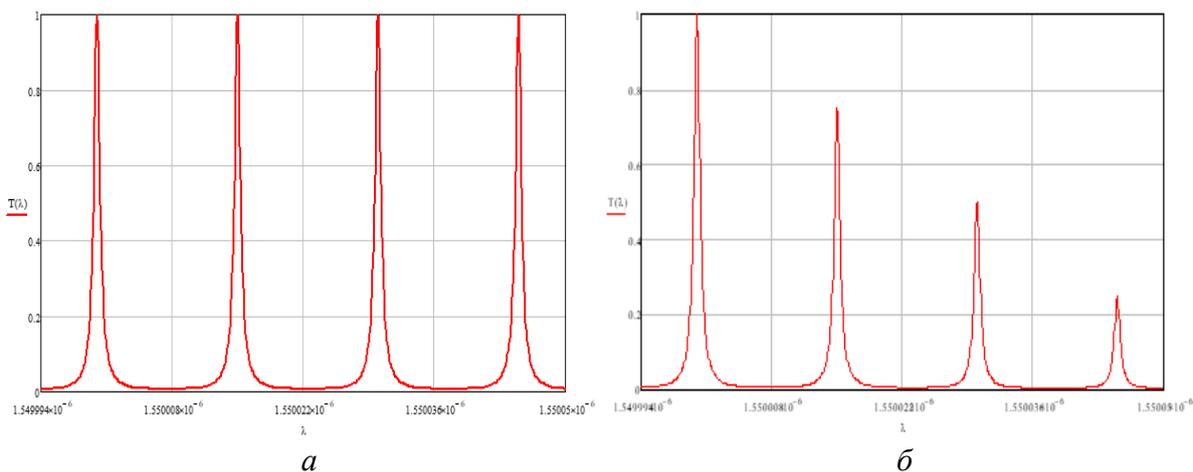


Рисунок 1. Спектр излучения на входе ФД от опорной и трех измерительных решеток без (а) и с (б) амплитудной дискриминацией

### Структурная схема системы

На рис. 2 приведена опико-электронная схема системы сбора информации о положении пациента, включающего в себя внешний модуль, устанавливаемые под сиденьем коляски, и сенсорную часть измерительного зонда с датчиками. Датчики объединены в два канала по три 5.1, 5.2 и 5.N, каждый по месту расположения – в области лопаток, сидалища и пяток, и одной опорной решетки 4.

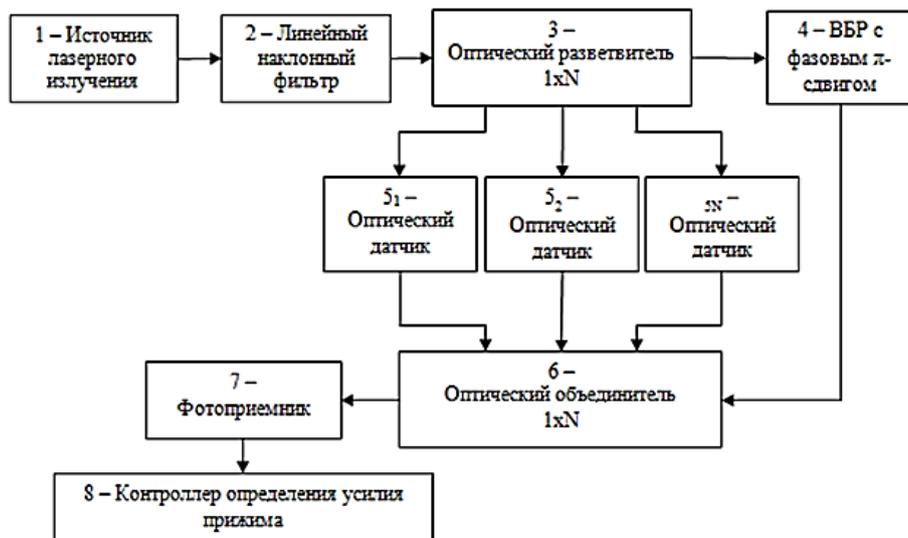


Рисунок 2. Структурная схема одного канала системы

На рис. 3, *a* приведены спектральные характеристики выходного сигнала фотоприемника при увеличении усилия прижима. Алгоритм обработки информации, заложенный в контроллере определения усилия прижима, представлен на рис. 3, *a*.

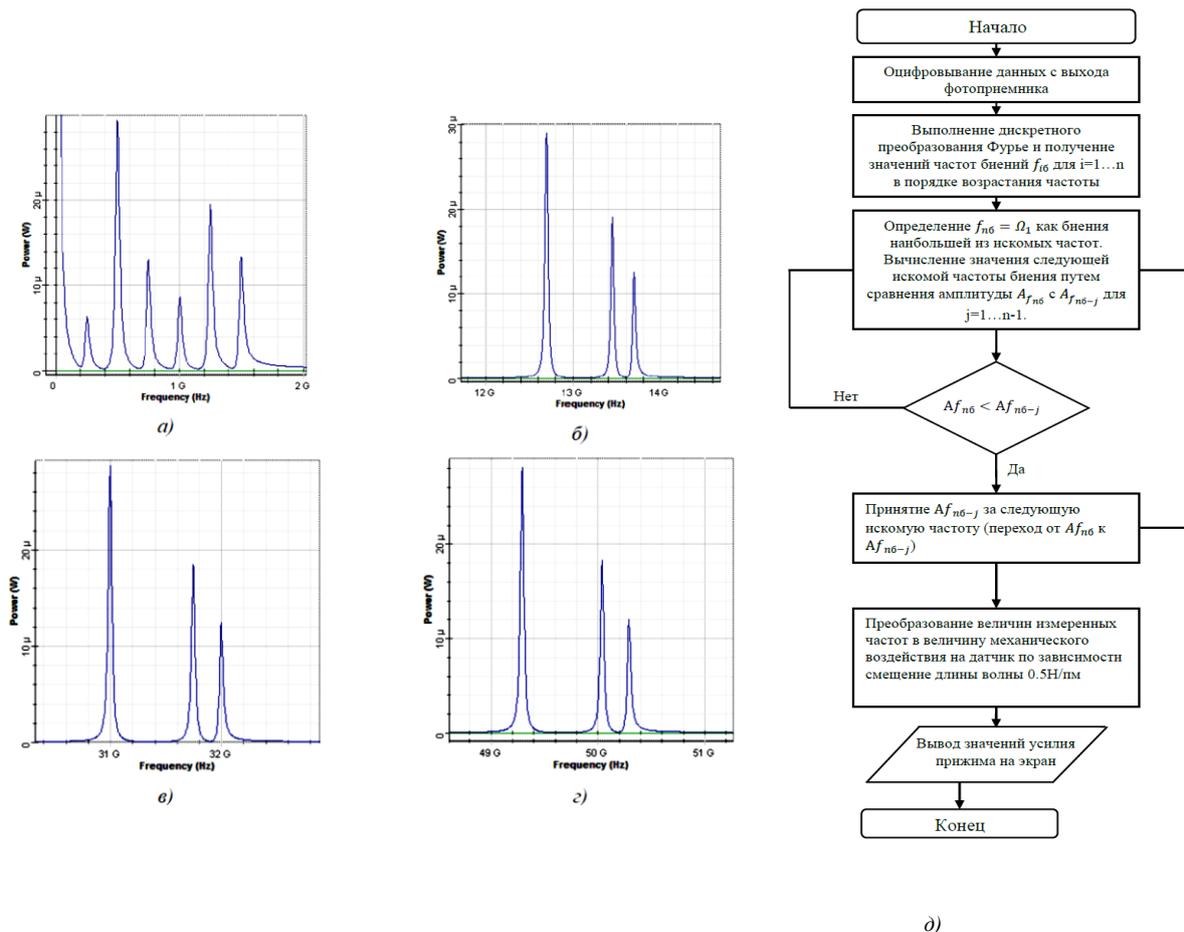


Рисунок 3. Спектральные характеристики выходного сигнала фотоприемника при равномерном увеличении усилия прижима 0 (*a*), 73 (*б*), 122 (*в*), 220 (*г*) кПа и алгоритм обработки информации (*д*).

На рис. 4 приведена зависимость частоты биений сигналов от каждого из датчиков  $S_1, S_2, S_N$  и опорной решеткой при воздействии усилия прижима пациента различной величины от 0 до 220 кПа.

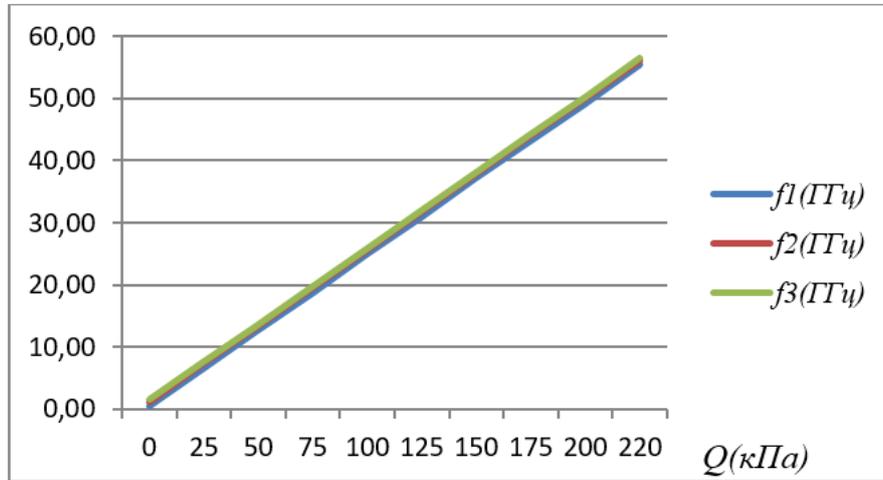


Рисунок 4 – Зависимость частоты биений для датчиков  $S_1, S_2, S_N$  при равномерном увеличении величины усилия прижима Q

### Математическая модель датчика

Аналитическое выражение для коэффициента пропускания ВБР с фазовым сдвигом, как секции ЛЧВБР, можно описать как [5]:

$$T(\lambda) = \frac{\gamma^4}{\Gamma^2 + (D_1 - \Gamma) \{ D_1 - \Gamma [1 - 2 \cos(\Delta\varphi)] \} + D_2 [ D_2 - \Gamma \sin(\Delta\varphi) ]}, \quad (1)$$

где  $\gamma, \Gamma, D_1, D_2$  – структурные параметры решетки, а  $\Delta\varphi$  – значение фазового сдвига.

Таким образом, аналитическое выражение для дискретно-секционной ЛЧВБР с фазовым сдвигом в одной из секций имеет вид:

$$T_{LCFBG}(\lambda) = 1 - \left\{ [1 - T_{k(\Delta\varphi)}(\lambda)] + \sum_{i \neq k; i=1}^5 [1 - T_i(\lambda)] \right\}, \quad (2)$$

где  $T_i(\lambda)$  – коэффициент пропускания каждой секции ЛЧВБР без фазовых сдвигов, который имеет вид:

$$T_i(\lambda) = 1 - \frac{\sinh^2 \left( L_g \sqrt{\kappa^2 - \sigma_i^2} \right)}{\cosh^2 \left( L_g \sqrt{\kappa^2 - \sigma_i^2} \right) - \frac{\sigma_i^2}{\kappa^2}}, \quad (3)$$

где использованы структурные параметры решеток [5].

На рис. 5 представлен спектр пропускания ЛЧВБР с фазовым  $\pi$ -сдвигом, состоящий из пяти секции классических ВБР в центральной секции которых внесен фазовый сдвиг, равный  $\pi$ .

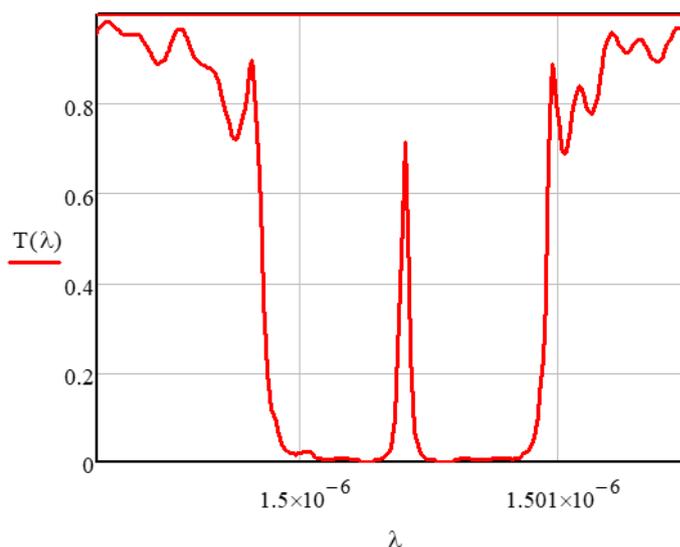


Рисунок 5. Спектр пропускания ЛЧВБР с внесенным фазовым  $\pi$ -сдвигом в ее центральную секцию

Математическое моделирование показало, что при приложении давления на сенсорные ЛЧВБР происходит линейное смещение радиочастотного сигнала на выходе фотоприемника, как показано на рис. 4.

Возможным недостатком разработанной системы можно считать необходимость использования широкополосного фотодетектора. При полном весе человека в 320 кПа отклик ФД лежит в области 100 ГГц. Однако, в реальной ситуации изменение давления составляет  $\pm 20$  кПа, что по полосе составляет около 10 ГГц.

### Заключение

В работе представлены результаты проектирования системы сбора информации, предназначенной для предотвращения пролежней у пациента, находящегося в инвалидной коляске. В основе сенсорной части системы впервые используются датчики давления на основе дискретно-секционных ЛЧВБР с фазовым сдвигом. В каждом датчике фазовый сдвиг прописывается в отличной от другой секции. Применение таких решеток и разработанных радиофотонных методов их опроса при простом широкополосном зондировании, фактически освещении решеток, позволило обеспечить как опрос и идентификацию каждого датчика в зонах лопаток, сидалища и пяток пациента, так и существенно снизить стоимость интеррогатора. Кроме этого использование простейшей системы приема и обработки информации позволяет крепить ее непосредственно на коляске и обеспечить термостатирование ЛЧВБР1, сделав ее опорной для всей информационно-измерительной системы.

### Библиографический список

1. *Tavares C., Domingues F.M., Paixao T., Alberto N., Silva H., and Antunes P.* Wheelchair pressure ulcer prevention using FBG based sensing devices // *Sensors*. 2020. V. 20. P. 212.
2. *Салихова М.А., Степущенко О.А., Эшпай Р.А., Морозов О.Г.* Система сбора информации о положении пациента в инвалидной коляске на основе линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток с фазовым  $\pi$ -сдвигом // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2020. № 5. С. 30-33.
3. *Салихова М.А., Степущенко О.А., Эшпай Р.А., Морозов О.Г., Сахабутдинов А.Ж., Нуреев И.И.* Радиофотонная система сбора информации о положении пациента в инвалидной коляске на основе адресных линейно-чирпированных волоконных брэгговских решеток с двумя фазовыми  $\pi$ -сдвигами // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2020. № 5. С. 34-37.
4. *Tosi D.* Review of chirped fiber Bragg grating (CFBG) fiber-optic sensors and their applications // *Sensors*. 2018. V. 18. P. 2147.
5. *Agraval G.P., Radic S.* Phase-shifted fibre Bragg gratings and their application for wavelength demultiplexing // *IEEE Photonic Technology Letters*. 1994. V. 6(8). P. 995-997.

## ФОТОННЫЕ ТАММОВСКИЕ РЕЗОНАНСЫ В СТРУКТУРЕ ОДНОМЕРНЫЙ СВЧ ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ/ СЛОЙ ПОЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ

*А.В. Скрипаль<sup>1</sup>, Д.В. Пономарев<sup>1</sup>, М.А. Трифонова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Российская Федерация, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83  
E-mail: skripala\_v@info.sgu.ru

Экспериментально обнаружено возникновение аналогов фотонных таммовских резонансов в первой и второй запрещенных зонах одномерного СВЧ фотонного кристалла, контактирующего со слоем полярной жидкости, характеризующейся положительной величиной действительной части комплексной диэлектрической проницаемости и значительной величиной мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости.

**Ключевые слова:** фотонные таммовские резонансы, СВЧ фотонный кристалл, полярная жидкость, комплексная диэлектрическая проницаемость

Известно, что поверхностные электронные состояния Тамма появляются на границе полубесконечного кристалла и характеризуются дискретным энергетическим спектром и волновыми функциями, которые экспоненциально затухают по мере удаления от поверхности в глубину кристалла и в пространство вне его [1].

По аналогии с поверхностными таммовскими состояниями в твердом теле, в фотонных кристаллах, состоящих из периодически чередующихся макроскопических элементов, возможно наблюдение, так называемых, фотонных таммовских состояний.

Возникновение поверхностных таммовских состояний возможно на контакте двух соединенных фотонных кристаллов с различными размерами элементарных ячеек при перекрытии запрещенных зон этих

двух кристаллов [2–4].

Фотонные таммовские состояния наблюдаются также на границе фотонного кристалла и однородного слоя или слоя металлодиэлектрического нанокompозита, характеризующихся отрицательной диэлектрической проницаемостью (проводящая среда на частотах ниже плазменной) и трактуется как поверхностное таммовское плазмон-поляритонное состояние в довольно большом числе работ при рассмотрении свойств фотонных кристаллов в оптическом диапазоне частот [5–7].

Во всех рассмотренных выше случаях фотонное таммовское состояние характеризуется локализацией электрического поля электромагнитной волны на внутренней или внешней границах фотонного кристалла, при этом если амплитуда в пучностях электрического поля на частоте резонанса Тамма в первой запрещенной зоне монотонно уменьшается по мере удаления от границы фотонного кристалла с проводящим нанослоем внутри фотонного кристалла на протяжении всей его длины по закону, близкому к линейному, то с внешней стороны проводящего слоя напряженность электрического поля резко убывает на расстоянии сравнимым с толщиной проводящего слоя и становится незначительной [8].

При этом резкое убывание напряженности электрического поля обеспечивается как вследствие отрицательной величины действительной части комплексной диэлектрической проницаемости контактного слоя, так и значительной величины мнимой её части.

В связи с этим представляет интерес исследование возможности возникновения аналогов фотонных таммовских состояний при контакте фотонного кристалла со средой, характеризующейся положительной величиной действительной части комплексной диэлектрической проницаемости и значительной величиной мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости. К таким средам относятся полярные жидкости [9].

Поскольку при исследовании СВЧ фотонных кристаллов, контактирующих с полярными жидкостями, следует учитывать, что как действительная, так и мнимая части их комплексной диэлектрической проницаемости существенно зависят от частоты зондирующего СВЧ-сигнала, то в зависимости от выбора конкретной области СВЧ-диапазона для достижения определенных значений как действительной, так и мнимой частей их комплексной диэлектрической проницаемости следует выбирать определенной тип полярной жидкости. Так, например, при использовании зондирующего излучения трехсантиметрового СВЧ-диапазона использование полярных жидкостей с большими временами установления дипольной поляризации, к которым относятся такие полярные жидкости как спирты, не является оптимальным. В диапазоне частот от 8 ГГц до 12 ГГц, мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости,

например, этилового спирта не превышает 5 единиц.

В качестве полярной жидкости, используемой, например, в качестве поглощающей среды в трехсантиметровом СВЧ-диапазоне и характеристики которой достаточно хорошо исследованы можно использовать воду, времена установления дипольной поляризации молекул которой составляют  $\sim 10^{-11}$  с при комнатной температуре, при этом величина мнимой части диэлектрической проницаемости достигает значений от 25 до 30 единиц в диапазоне частот от 8 ГГц до 12 ГГц.

Экспериментально исследовался фотонный кристалл, состоящий из одиннадцати слоев в диапазоне частот 7–13 ГГц. Нечетные слои были выполнены из поликора ( $\epsilon = 9.6$ ), четные выполнены из фторопласта ( $\epsilon = 2.0$ ). Длины нечетных и четных отрезков составляли 0.5 и 18 мм соответственно.

Для проведения экспериментальных исследований была изготовлена кювета из полимерного диэлектрика с относительной диэлектрической проницаемостью равной 2.45 единиц, которая примыкала к последнему слою фотонного кристалла. Кювета полностью заполняла поперечное сечение волновода ( $23 \times 10 \text{ мм}^2$ ). Кювета полностью заполнялась исследуемой жидкостью (дистиллированная вода). Толщина слоя воды составляла 0.8 мм.

Частотные зависимости коэффициентов отражения  $R$  (кривая 1) и прохождения  $D$  (кривая 2) фотонного кристалла, контактирующего со слоем дистиллированной воды, и фотонного кристалла при отсутствии кюветы с дистиллированной водой (кривая 3) представлены на рис. 1, исследовались с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA-X Network Analyzer N5242A в диапазоне частот 7 – 13 ГГц.

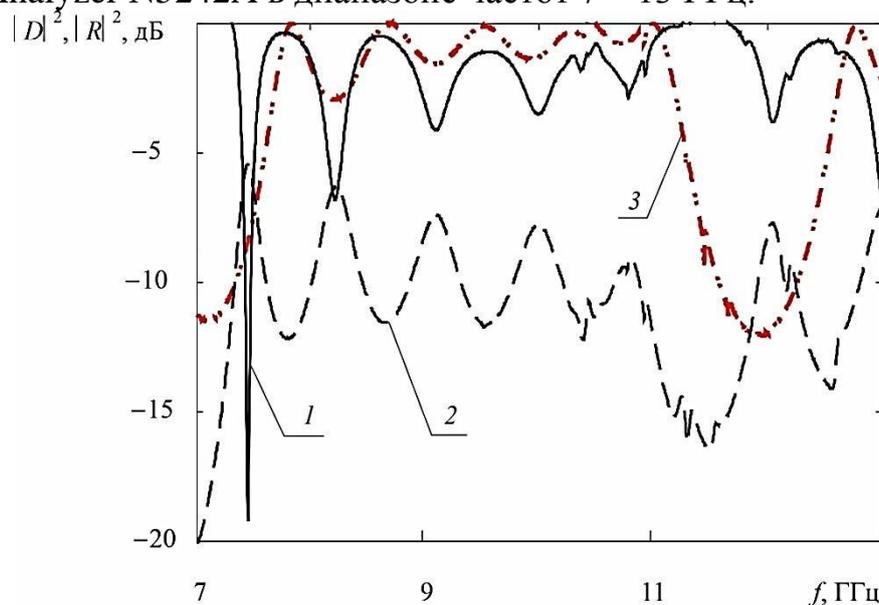


Рисунок 1. Экспериментальные частотные зависимости коэффициентов отражения (кривая 1) и прохождения (кривая 2) фотонного кристалла, контактирующего со слоем дистиллированной воды, и фотонного кристалла при отсутствии кюветы с дистиллированной водой (кривая 3)

Как следует из результатов эксперимента при контакте СВЧ фотонного кристалла со слоем дистиллированной воды на краю как первой, так и второй запрещенных зон возникают достаточно выраженные резонансы. Резонанс в первой запрещенной зоне характеризуется низким значением коэффициента отражения равным  $-18$  дБ.

С использованием метода матрицы передачи были выполнены расчеты коэффициентов отражения  $R$  и прохождения  $D$  электромагнитной волны, взаимодействующей с фотонным кристаллом, контактирующим с кюветой, которая была заполнена дистиллированной водой. Для описания распределения электрического поля  $E(z)$  в одномерном фотонном кристалле было использовано волновое уравнение [10, 11].

Результаты компьютерного моделирования амплитудно-частотных характеристик фотонного кристалла хорошо согласуются с результатами эксперимента и подтверждают возможность существования фотонного таммовского состояния на границе СВЧ фотонного кристалла при его контакте со слоем дистиллированной воды.

Также в результате компьютерного моделирования было подтверждено, что возникающее резонансное состояние в запрещенной зоне фотонного кристалла характеризуется локализацией электрического поля электромагнитной волны СВЧ-диапазона внутри фотонного кристалла вблизи границы фотонного кристалла и слоя дистиллированной воды, что характерно для таммовского состояния, возникающего, например, при контакте фотонного кристалла с проводящим нанослоем [8].

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0005).*

#### **Библиографический список**

1. *Tamm I. E.* On the possible bound states of electrons on a crystal surface// Phys. Z. Sowiet Union. 1932. Vol. 1. No. 6. Pp. 733–746.
2. *Виноградов А.П., Дорофеенко А.В., Мерзликин А.М., Лисянский А.А.* Поверхностные состояния в фотонных кристаллах// Успехи физических наук. 2010. Т. 180. № 3. С. 249–263.
3. *Kavokin A. V., Shelykh I. A., and Malpuech G.* Lossless interface modes at the boundary between two periodic dielectric structures// Phys. Rev. B. Condens. Matter. 2005. vol. 72, Dec., No. 23. Pp. 233102(1)–233102(4).
4. *Усанов Д.А., Никитов С.А., Скрипаль А.В., Рязанов Д.С.* Таммовские состояния в брэгговских гетероструктурах на волноводно-щелевых линиях// Журнал технической физики. 2018. Т. 88, вып. 7. С. 1046–1049.
5. *Brand S., Kaliteevski M. A., Abram R. A.* Optical Tamm states above the bulk plasma frequency at a Bragg stack/metal interface// Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, Feb. No. 8. Pp. 085416(1)–085416(4).
6. *Bikbaev R. G., Vetrov S. Ya. Timofeev I. V.* The optical Tamm states at the interface between a photonic crystal and nanoporous silver// J. Opt. Jan. 2017. Vol. 19. No. 1. Pp. 015104(1)–015104(6).

7. Fang Y.-T., Zhou J., Zhu N. Chen L.-K. Tamm states of onedimensional metal-dielectric photonic crystal// *IET Optoelectron.* 2013. Vol. 7. Feb. No. 1. Pp. 9–13.
8. Skripal A. V., Ponomarev D. V., Komarov A. A. Tamm Resonances in the Structure 1-D Microwave Photonic Crystal/Conducting Nanometer Layer// in *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.* 2020. Vol. 68. Issue: 12. P. 5115–5122. Volume: 68, Issue: 12, Dec. 2020. doi: 10.1109/TMTT.2020.3021412.
9. Sato T., Buchner R. Dielectric Relaxation Processes in Ethanol/ Water Mixtures// *J. Phys. Chem. A.* 2004. Vol. 108, No. 23. P.5007–5015.
10. Усанов Д.А., Никитов С.А., Скрипаль Ал.В., Пономарев Д.В. Одномерные СВЧ фотонные кристаллы. Новые области применения. 2-е изд., доп. и перераб. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2020. – 236 с.
11. Усанов Д.А., Мещанов В.П., Скрипаль А.В., Попова Н.Ф., Пономарев Д.В., Мерданов М.К. Согласованные нагрузки сантиметрового и миллиметрового диапазонов длин волн на СВЧ фотонных кристаллах// *Журнал технической физики.* 2017. Т. 87, вып. 2. С. 216–220.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТАММОВСКИХ РЕЗОНАНСОВ В ОДНОМЕРНОМ СВЧ ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ ПРИ НАЛИЧИИ БУФЕРНОГО СЛОЯ

*А.В.Скрипаль<sup>1</sup>, Д.В. Пономарев<sup>1</sup>, А.А. Комаров<sup>1</sup>, В.Е. Шаронов<sup>1</sup>,*

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

E-mail : skripala\_v@info.sgu.ru

Теоретически обоснована и подтверждена экспериментально, возможность возникновения таммовских резонансов в первой и второй запрещенных зонах одномерного СВЧ фотонного кристалла, граничащего с металлическим нанослоем как при наличии, так и при отсутствии буферного слоя между фотонным кристаллом и нанослоем.

**Ключевые слова:** таммовские резонансы, СВЧ фотонный кристалл, буферный слой, металлический нанослой

По аналогии с поверхностными таммовскими состояниями в твердом теле, в фотонных кристаллах, состоящих из периодически чередующихся макроскопических элементов, возможно наблюдение, так называемых, фотонных таммовских состояний [1, 2].

Возникновение поверхностных таммовских состояний возможно на границе фотонного кристалла и однородного металлического нанослоя или слоя металлodieлектрического нанокompозита характеризующихся отрицательной диэлектрической проницаемостью (проводящая среда на частотах ниже плазменной) и трактуется как поверхностное таммовское плазмон-поляритонное состояние в довольно большом числе работ при рассмотрении свойств фотонных кристаллов в оптическом диапазоне частот [3, 4] и в СВЧ-диапазоне [5, 6].

Возникающее фотонное таммовское состояние характеризуется локализацией электрического поля электромагнитной волны внутри фотонного кристалла вблизи границы фотонного кристалла и высокопроводящего нанослоя. Поскольку с внешней стороны проводящего слоя напряженность электрического поля незначительна, то наиболее эффективно управление таммовским состоянием возможно при изменении параметров буферного слоя, расположенного между фотонным кристаллом и высокопроводящим нанослоем [7].

В связи с этим представляет интерес исследование возникающих таммовских резонансов в одномерном СВЧ фотонном кристалле, граничащем с металлическим нанослоем, при наличии буферного слоя между СВЧ фотонным кристаллом и металлическим нанослоем.

В диапазоне частот 7–13 ГГц исследован СВЧ-фотонный кристалл на основе прямоугольного волновода с диэлектрическим заполнением в виде периодически чередующихся слоев двух типов диэлектриков с разными значениями толщины и диэлектрической проницаемости. Фотонный кристалл состоит из 11 слоев.

Нечетные слои были изготовлены из керамики  $Al_2O_3$  ( $\varepsilon = 9,6$ ), четные – из тефлона ( $\varepsilon = 2,0$ ). Длина нечетного и четного сегментов составляла 0,5 мм и 18 мм соответственно. Нанометровый металлический слой был нанесен на крайний керамический слой  $Al_2O_3$ .

Коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $D$  электромагнитной волны, взаимодействующей со слоистой структурой, определяли через элементы матрицы передачи  $\mathbf{T}_N$  с помощью соотношений

$$R = -\frac{\mathbf{T}_N[2,1]}{\mathbf{T}_N[2,2]}, \quad D = \frac{\mathbf{T}_N[1,1]\mathbf{T}_N[2,2] - \mathbf{T}_N[1,2]\mathbf{T}_N[2,1]}{\mathbf{T}_N[2,2]}.$$

где  $\mathbf{T}_N = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_N[1,1] & \mathbf{T}_N[1,2] \\ \mathbf{T}_N[2,1] & \mathbf{T}_N[2,2] \end{pmatrix} = \prod_{j=N}^0 \mathbf{T}_{j,(j+1)} = \mathbf{T}(z_{N,N+1}) \cdot \mathbf{T}(z_{N-1,N}) \dots \mathbf{T}(z_{1,2}) \cdot \mathbf{T}(z_{0,1})$  –

матрица передачи слоистой структуры, состоящей из  $N$  слоев.

Для описания распределения электрического поля  $E(z)$  в одномерном фотонном кристалле было использовано волновое уравнение вида:

$$\frac{\partial^2 E(z)}{\partial z^2} + \gamma^2(z)E(z) = 0,$$

где  $\gamma(z)$  – постоянная распространения электромагнитной волны.

Были выполнены расчеты коэффициентов прохождения и отражения при падении электромагнитной волны на фотонный кристалл со стороны, противоположной границе фотонного кристалла с нанометровым металлическим слоем.

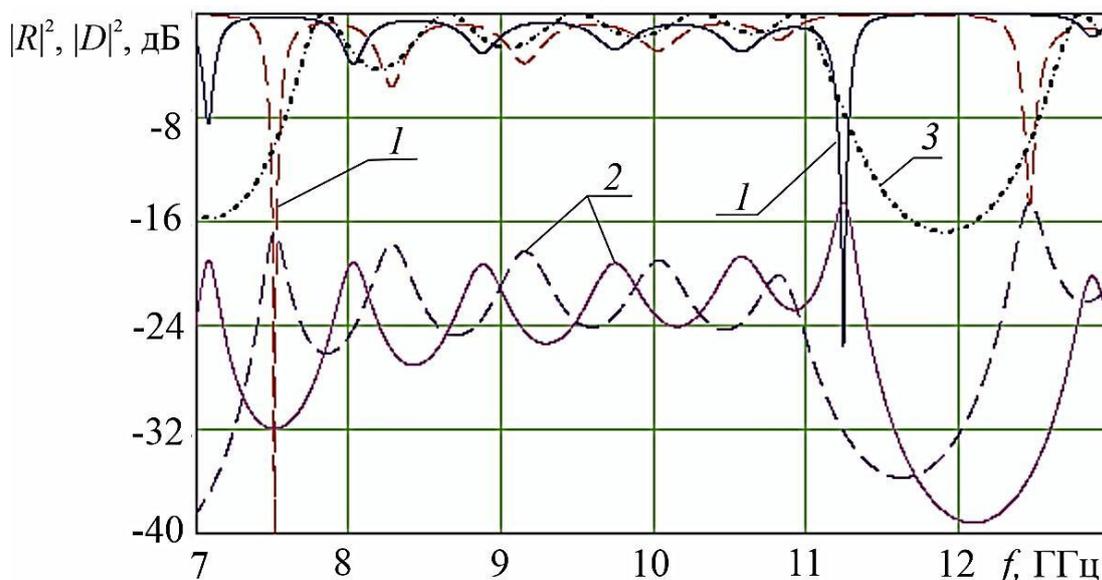


Рисунок 1. АЧХ коэффициентов отражения (кривые 1) и прохождения (кривые 2) электромагнитной волны при толщине нанометрового металлического слоя равной 76 нм с удельной электропроводностью  $0.5 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$  при наличии (сплошные кривые) и отсутствии (пунктирные кривые) буферного слоя и АЧХ коэффициента прохождения фотонного кристалла без металлического нанослоя (кривая 3)

Результаты расчетов коэффициентов прохождения и отражения электромагнитной волны при толщине нанометрового металлического слоя равной 76 нм с удельной электропроводностью  $0.5 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$  при наличии и отсутствии буферного слоя представлены на рис. 1. На этом же рисунке приведены расчеты АЧХ коэффициента прохождения фотонного кристалла без металлического нанослоя.

Как следует из результатов расчета на АЧХ коэффициента отражения фотонной структуры на краю как первой, так и второй запрещенных зон на частотах  $f_{\text{Tamm1}}=7.51 \text{ ГГц}$  и  $f_{\text{Tamm2}}=12.46 \text{ ГГц}$  возникают ярко выраженные резонансы, обусловленные существованием фотонного таммовского состояния на границе фотонного кристалла с металлическим нанослоем.

Зависимости коэффициента отражения  $|R|^2$  на частотах  $f_{\text{Tamm1}}$  и  $f_{\text{Tamm2}}$  и частот  $f_{\text{Tamm1}}$  и  $f_{\text{Tamm2}}$  от толщины буферного слоя  $L$  представлены на рис. 2. Коэффициент отражения на частоте  $f_{\text{Tamm1}}=7.51 \text{ ГГц}$  достигает минимального значения  $|R_{\text{min}}|^2 = -40.0 \text{ дБ}$  при толщине буферного слоя  $L=0 \text{ мм}$  и на частоте  $f_{\text{Tamm2}}=11.27 \text{ ГГц}$   $|R_{\text{min}}|^2 = -42.0 \text{ дБ}$  при толщине буферного слоя  $L=3.75 \text{ мм}$ .

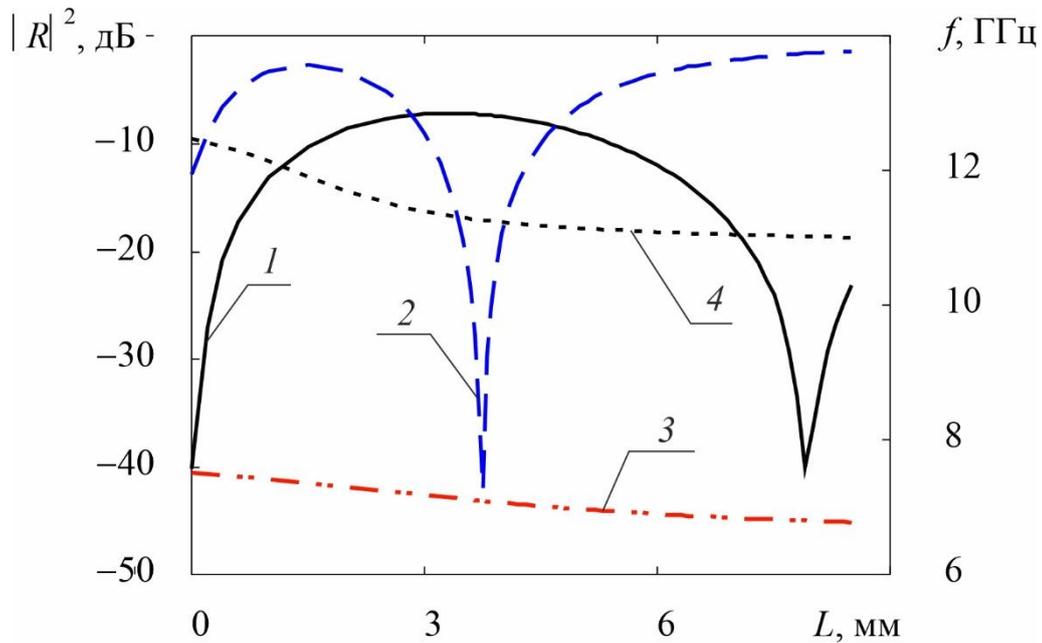


Рисунок 2. Зависимости коэффициента отражения  $|R|^2$  на частотах  $f_{\text{Tamm1}}$  (кривая 1) и  $f_{\text{Tamm2}}$  (кривая 2) и частот  $f_{\text{Tamm1}}$  (кривая 3) и  $f_{\text{Tamm2}}$  (кривая 4) от толщины буферного слоя  $L$

Результаты расчета напряженности электрического поля электромагнитной волны на частоте  $f_{\text{Tamm1}}$  демонстрируют чередование узлов и пучностей внутри фотонной структуры вдоль направления ее распространения. При этом наблюдается локализованная на границе фотонного кристалла с металлическим нанослоем в области буферного слоя пучность распределения электрического поля электромагнитной волны с максимальной напряженностью.

Экспериментально исследовался фотонный кристалл, созданный в соответствии с описанной выше моделью и состоящий из одиннадцати слоев в диапазоне частот 7–13 ГГц. Нечетные слои были выполнены из поликора ( $\epsilon = 9.6$ ), четные выполнены из фторопласта ( $\epsilon = 2.0$ ). Длины нечетных и четных отрезков составляли 0.5 и 18 мм соответственно.

Для проведения экспериментальных исследований крайняя поликоровая ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) пластина фотонного кристалла была выполнена с нанесением сплошного проводящего слоя нихрома (NiCr) толщиной 76 нм. Толщина буферного слоя варьировалась в диапазоне 0–8 мм.

Частотные зависимости коэффициентов отражения и прохождения фотонных кристаллов с нанесенным сплошным нанослоем при наличии и отсутствии буферного слоя исследовались с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA-X Network Analyzer N5242A в диапазоне частот 7–13 ГГц.

Результаты эксперимента хорошо согласуются с результатами компьютерного моделирования и подтверждают возможность

существованием фотонного таммовского состояния на границе СВЧ фотонного кристалла при его контакте с нанесенным сплошным металлическим нанослоем как при наличии, так при и отсутствии буферного слоя.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0005).*

#### **Библиографический список**

1. *Usanov D. A., Nikitov S. A., Skripal A. V., Ponomarev D. V.* One-dimensional microwave photonic crystals: new applications/ Boca Raton, FL, USA, CRC Press, Taylor Francis Group, 2019. 154 p.
2. *Усанов Д.А., Никитов С.А., Скрипаль Ал.В., Пономарев Д.В.* Одномерные СВЧ фотонные кристаллы. Новые области применения /2-е изд., доп. и перераб. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2020. 236 с.
3. *Vinogradov A. P., Dorofeenko A. V., Erokhin S. G., Inoue M. and Lisyansky A. A.* Surface state peculiarities in one-dimensional photonic crystal interfaces// *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74. No. 4. Jul. Pp. 045128(1–8).
4. *Fang Y., Chen L., Zhu N. and Zhou J.* Tamm states of one-dimensional metal-dielectric photonic crystal// *IET Optoelectronics.* 2013.Feb. Vol. 7. No. 1. Pp. 9–13.
5. *Скрипаль А.В., Пономарев Д.В., Комаров А.А.* Использование таммовских резонансов в СВЧ фотонном кристалле для измерения удельной электропроводности металлических нанослоев // Сборник научных трудов 30-ой Международной Крымской конференции «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2020). Севастополь, 6—12 сентября 2020 г. Севастополь: СевГУ, 2020. 491 с. Т. 2. С. 301–302.
6. *Skripal A. V., Ponomarev D. V. and Komarov A. A.* Tamm Resonances in the Structure 1-D Microwave Photonic Crystal/Conducting Nanometer Layer// in *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques.* 2020. Vol. 68. Issue: 12. P. 5115–5122.
7. *Shie-Chang Jeng* Applications of Tamm plasmon-liquid crystal devices// *Liquid Crystals* Taylor Francis Group, 2020. P. 1–9. DOI: 10.1080/02678292.2020.1733114

# ПРИМЕНЕНИЕ УПРАВЛЯЕМОГО МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА СВЧ-ДИАПАЗОНА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ СРЕД

*А.Э. Постельга, Ал.В. Скрипаль, С.В. Игонин, Е. П. Простак*

Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: Apostelga@gmail.com

Проведен модельный эксперимент по определению параметров магнитной жидкости по зависимости амплитуды пика пропускания СВЧ излучения, проходящего через фотонный кристалл с нарушением в виде тонкого слоя магнитной жидкости, от величины приложенного магнитного поля.

**Ключевые слова:** СВЧ фотонный кристалл, магнитная жидкость, дефектная мода, управление магнитным полем

Фотонные кристаллы представляют собой искусственно созданные периодические гетерогенные среды и относятся к классу метаматериалов. Периодические фотонные структуры СВЧ-диапазона находят важное практическое применение в системах связи и телекоммуникации, при создании антенн, радарной техники и измерительного оборудования [1,2]. Возможность электрического управления амплитудно-частотными характеристиками СВЧ фотонных кристаллов экспериментально продемонстрирована в [3]. В [4] показана возможность влияния приложенного к нарушенному слою магнитного поля на характеристики фотонного кристалла такие как коэффициент пропускания ФК и изменение амплитуды и частоты пика. Приложение к нарушенному слою магнитного поля позволяет управлять шириной запрещенной зоны фотонного кристалла.

В настоящей работе исследовалась возможность определения параметров магнитной жидкости по зависимости амплитуды пика пропускания СВЧ излучения, проходящего через фотонный кристалл с нарушением в виде слоя магнитной жидкости, от величины приложенного магнитного поля.

Была построена модель фотонного кристалла, прототип которого подробно описывался в работе [5]. Рассматривались частотные зависимости коэффициента пропускания СВЧ излучения в диапазоне 8-12 ГГц через СВЧ-фотонный кристалл, состоящий из 11 слоев: воздух (13 мм) – поликор (1 мм) с центральным нарушенным слоем. Нарушенный слой представлял собой трехслойную структуру: эпоксидный слой – слой магнитной жидкости – эпоксидный слой. Толщина каждого эпоксидного слоя 1.4 мм, диэлектрическая проницаемость 3, толщина слоя магнитной жидкости 1.9 мм. Были выбраны следующие параметры магнитной

жидкости: радиус частиц 8 нм, объемная доля твердой фазы 0.144, диэлектрическая проницаемость 3.58.

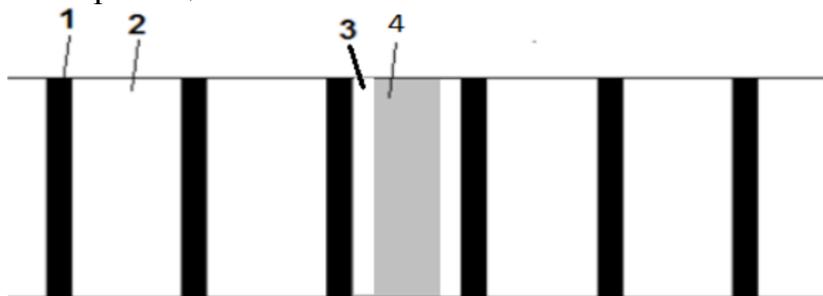


Рисунок 1. Схема заполнения волновода исследуемой структурой: 1 — слой поликора толщиной 1.0 мм, 2 - слой воздуха толщиной 13.0 мм, 3 — слой эпоксидной смолы толщиной 1.4 мм, 4 — слой магнитной жидкости толщиной 1.9 мм

В условиях модельного эксперимента для частотных зависимостей коэффициента пропускания СВЧ излучения через фотонный кристалл была задана 5% погрешность измерения коэффициента пропускания. В ходе работы была определена диэлектрическая проницаемость магнитной жидкости двумя способами.

Первый способ заключался в определении диэлектрической проницаемости по частотной зависимости коэффициента пропускания СВЧ излучения в области пика пропускания в ходе решения обратной задачи. На расположение пика пропускания помимо исследуемых параметров оказывают влияние различные систематические погрешности. Погрешность при определении толщины слоев измеряемой структуры приводит к смещению пика пропускания по амплитуде и частоте (рис. 2), что является источником дополнительной погрешности при определении параметров исследуемого материала.

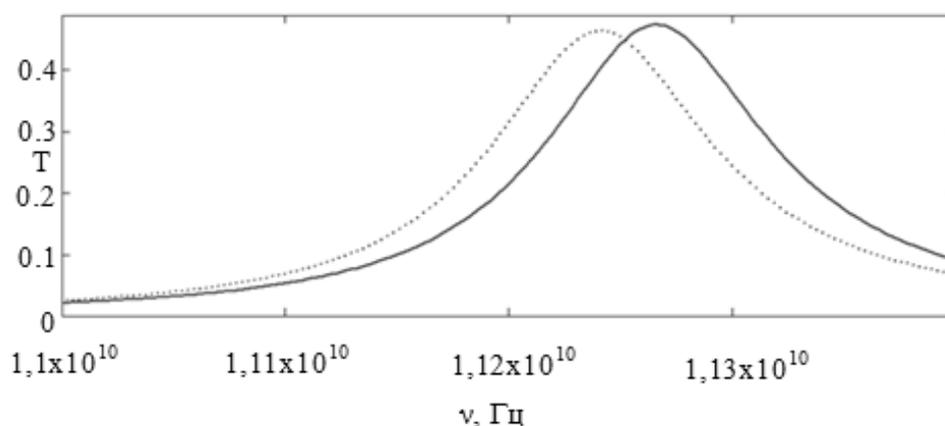


Рисунок 2. Частотные зависимости коэффициента пропускания электромагнитного излучения СВЧ диапазона, проходящего через исследуемую структуру: сплошная кривая – теоретическая зависимость, пунктирная кривая – смоделированная зависимость с учетом систематической погрешности при измерении толщины слоев  $\pm 10$  мкм.

Второй способ основан на определении параметров по зависимости

амплитуды пика пропускания от магнитного поля. На рис. 3. представлены теоретические спектры коэффициента пропускания СВЧ излучения при приложении магнитного поля с различной напряженностью.

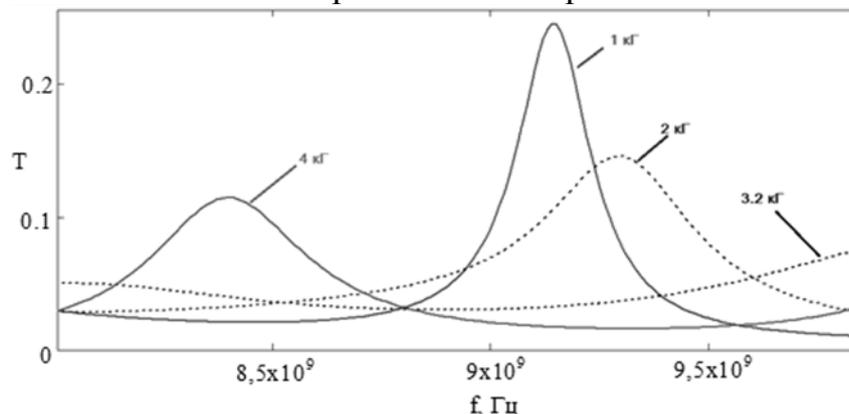


Рисунок 3. Частотные зависимости коэффициента пропускания электромагнитного излучения СВЧ диапазона, проходящего через исследуемую структуру при приложении магнитного поля с напряженностью 1 кГс, 2 кГс, 3.2 кГс, 4 кГс

Зависимости амплитуды пика пропускания от магнитного поля для различных значений диэлектрической проницаемости магнитной жидкости показаны на рис. 4.

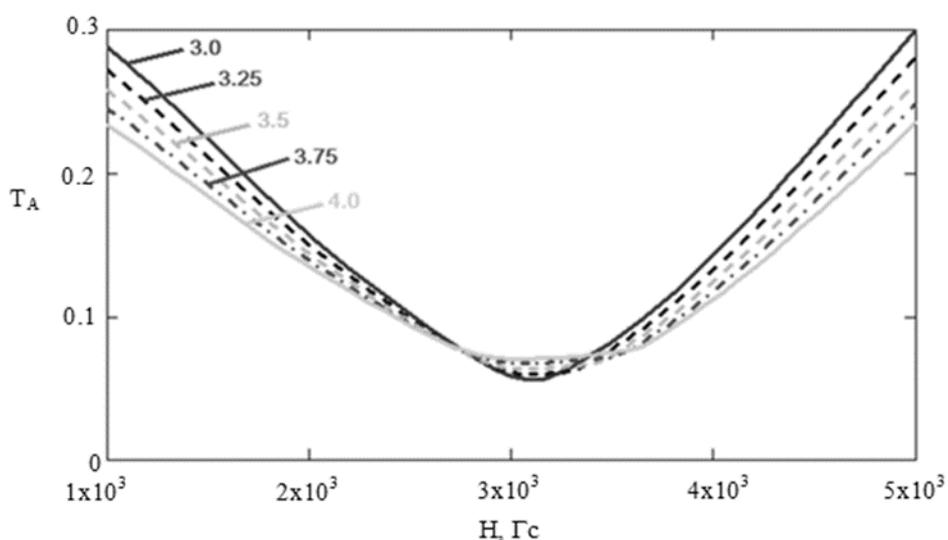


Рисунок 4. Зависимость амплитуды пика пропускания СВЧ излучения от магнитного поля для значений диэлектрической проницаемости магнитной жидкости: 3.0, 3.25, 3.5, 3.75, 4.0

Зависимости относительных погрешностей определения диэлектрической проницаемости магнитной жидкости от величины систематической погрешности для двух способов показаны на рис. 5.

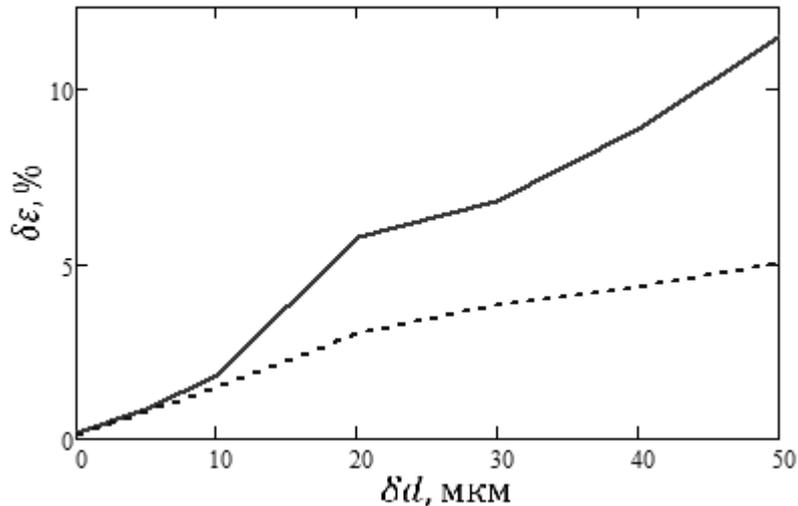


Рисунок 5. Зависимость относительной погрешности определения диэлектрической проницаемости магнитной жидкости от величины систематической погрешности: сплошная кривая – определение параметров по спектру пропускания, пунктирная кривая – определение параметров по зависимости амплитуды пика пропускания от величины напряженности магнитного поля

В результате модельного эксперимента была определена диэлектрическая проницаемость магнитной жидкости. Показано, что способ определения параметров при решении обратной задачи по зависимости пика пропускания от величины магнитного поля является более устойчивым к систематическим погрешностям смещения максимума пика пропускания по величине и частоте, чем способ определения параметров по частотной зависимости.

#### Библиографический список

1. Вендик И.Б., Вендик О.Г. Метаматериалы и их применение в технике сверхвысоких частот (Обзор) // ЖТФ, 2013, Т. 83, Вып. 1, С. 3–28.
2. Никитов С.А., Гуляев Ю.В., Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Пономарев Д.В. // ДАН, 2013, Т. 448, №1, С. 35–37.
3. Усанов Д.А., Мерданов М.К., Скрипаль А.В., Пономарев Д.В. СВЧ фотонные кристаллы. Новые сферы применения. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика, 2015, Т. 15, Вып. 1, С. 57-73.
4. Постельга А.Э., Скрипаль Ал.В., Игонин С.В., Карева А.А. Управляемый магнитным полем фотонный кристалл СВЧ-диапазона // Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами: Сборник статей седьмой Всероссийской научной школы-семинара 2020, Вып. 7, С. 71-74
5. Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Мерданов М.К., Горлицкий В.О. Волноводный фотонный кристалл, выполненный в виде диэлектрических матриц с воздушными включениями. // ЖТФ, 2016, Т. 86, Вып. 7, С. 65–70

# 3 МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

## АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КАПСУЛ С МИТОКСАНТРОНОМ В ХОДЕ ЕГО АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ

*А.А. Наумов, А.А. Захаров, И.Л. Пластун*

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.

E-mail: offhid@mail.ru

На основе теории функционала плотности исследуются молекулярные механизмы взаимодействия многослойных полиэлектролитных капсул с противоопухолевым лекарственным препаратом митоксантроном с целью оптимизации условий его доставки. В качестве исследуемых объектов рассматривались полимеры полиаргинин и декстран сульфат входящие в состав капсул, а также лекарственный препарат митоксантрон. Моделирование проводилось на основе расчета молекулярных структур и ИК-спектров с последующим анализом параметров образующихся водородных связей как основной характеристики комплексообразования.

**Ключевые слова:** Митоксантрон, полиаргинин, декстран сульфат, молекулярное моделирование, ИК-спектр, теория функционала плотности

Применение наночастиц для диагностики и таргетной терапии различных заболеваний в настоящее время является одним из наиболее интенсивно развивающихся направлений в биофизике и медицине. В частности, особое внимание привлекают к себе биоразлагаемые полиэлектролитные капсулы, состоящие из полиаргинина и декстран сульфата, которые могут быть использованы в качестве системы доставки диагностических и лекарственных препаратов [1].

Целью данной работы является исследование механизмов межмолекулярного взаимодействия противоопухолевого лекарственного препарата митоксантрон с веществами полимерной полиэлектролитной капсулы на основе полиаргинина и декстран сульфата применяемой для доставки этого препарата с целью снижения побочных эффектов.

Молекулярное моделирование и расчет спектров молекул и их комплексов проводились на основе метода теории функционала плотности (ТФП) [2] с использованием функционала B3LYP [2,3] и базисного набора 6-31G(d).

Поскольку полиаргинин является большой молекулой с повторяющимися фрагментами то в данной работе мы будем рассматривать межмолекулярное взаимодействие одного звена полиаргинина, а именно аргинина.

На рисунке 1 демонстрируется рассчитанная структура и рассчитанный и экспериментальный ИК спектр митоксантрона. В спектре митоксантрона частоты валентных колебаний связей с участием -NH и -OH групп проявляются на частотах  $3597\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №1),  $3557\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №2,3),  $3573\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №4),  $3309\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №5),  $3290\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №6,7) и  $3311\text{ см}^{-1}$  (рис. 1б №8), что соответствует высокочастотной области спектра. Активными центрами митоксантрона являются связи с азотом и кислородом, которые имеют потенциальную возможность образования N-H $\cdots$ O, N-H $\cdots$ N или O-H $\cdots$ O, O-H $\cdots$ N связей с водородом, приходящим от аргинина и декстран сульфата.

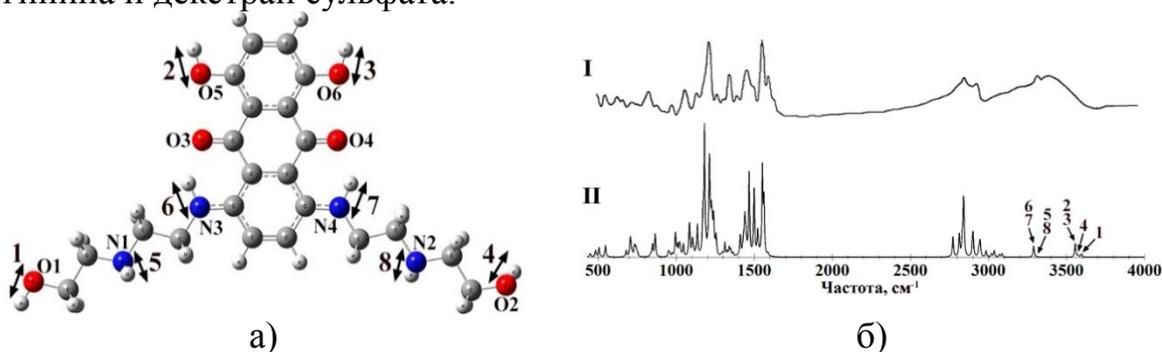


Рисунок 1. Рассчитанная структура (а) и ИК-спектры митоксантрона (б (I) экспериментальный - из статьи [4], (II) рассчитанный)

На рисунке 2 демонстрируется рассчитанная структура и рассчитанный и экспериментальный ИК спектр аргинина. В спектре аргинина частоты валентных колебаний связей с участием -NH и -OH групп проявляются на частотах  $3311\text{ см}^{-1}$  и  $3372\text{ см}^{-1}$  (рис. 2б №1,3 симметричные колебания),  $3342\text{ см}^{-1}$ ,  $3403\text{ см}^{-1}$ ,  $3563\text{ см}^{-1}$  (рис. 2б №2,4,6 валентные колебания), и  $3472\text{ см}^{-1}$  (рис. 2б №5 антисимметричные колебания), что соответствует высокочастотной области спектра. Активными центрами аргинина являются узлы, с азотом и кислородом, которые имеют потенциальную возможность образования N-H $\cdots$ O, N-H $\cdots$ N или O-H $\cdots$ O, O-H $\cdots$ N связей с водородом, приходящим от декстрана сульфата и митоксантрона.

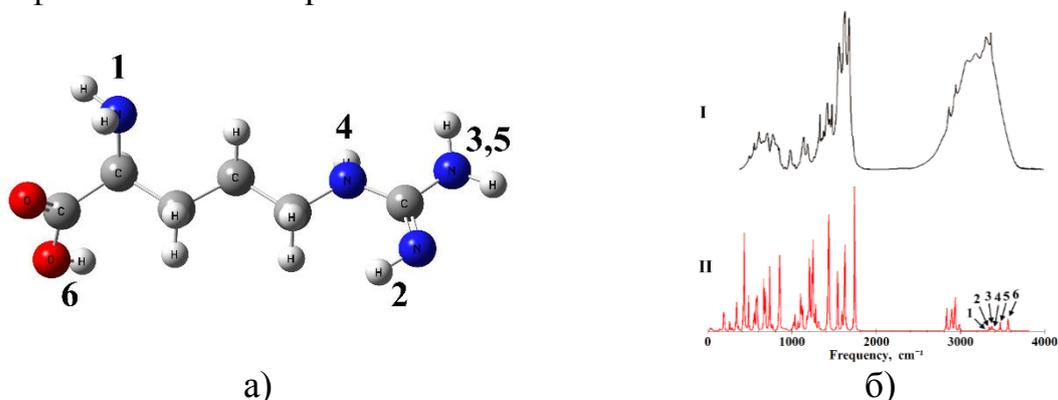


Рисунок 2. Рассчитанная структура (а) и ИК-спектры аргинина (б (I) рассчитанный, (II) экспериментальный - из международной базы данных химических соединений и смесей (PubChem) [5])

На рисунке 3 демонстрируется рассчитанная структура и рассчитанный и экспериментальный ИК спектр декстран сульфата. В спектре декстран сульфата частоты валентных колебаний связей с участием -NH групп проявляются на частотах  $3411\text{ см}^{-1}$  (рис. 3б №1 симметричные колебания) и  $3502\text{ см}^{-1}$  (рис. 3б №2 антисимметричные колебания), что соответствует высокочастотной области спектра. Активным центром декстран сульфата является узел, с азотом, который имеет потенциальную возможность образования N-H...O или N-H...N связи с водородом приходящим от аргинина или митоксантрона.

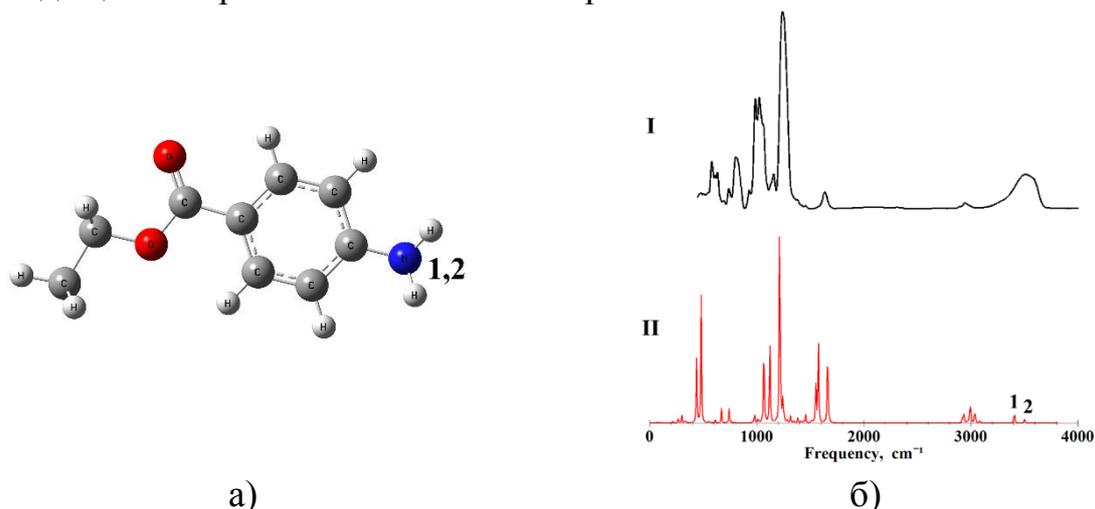


Рисунок 3. Рассчитанная структура (а) и ИК-спектры декстран сульфата (б (I) рассчитанный, (II) экспериментальный - из международной базы данных химических соединений и смесей (PubChem) [6])

На рисунке 4 демонстрируются рассчитанные структура и ИК спектр молекулярного комплекса митоксантрон – аргинин – декстран сульфат. Как видно из рисунка частота  $3175\text{ см}^{-1}$  (рис. 4б №1) соответствует валентным колебаниям связи O-H в аргинине, эта связь участвует в образовании водородной связи с митоксантроном. Частота  $3449\text{ см}^{-1}$  (рис. 4б №2) соответствует валентным колебаниям O-H в митоксантроне, эта связь участвует в образовании водородной связи с декстран сульфатом.

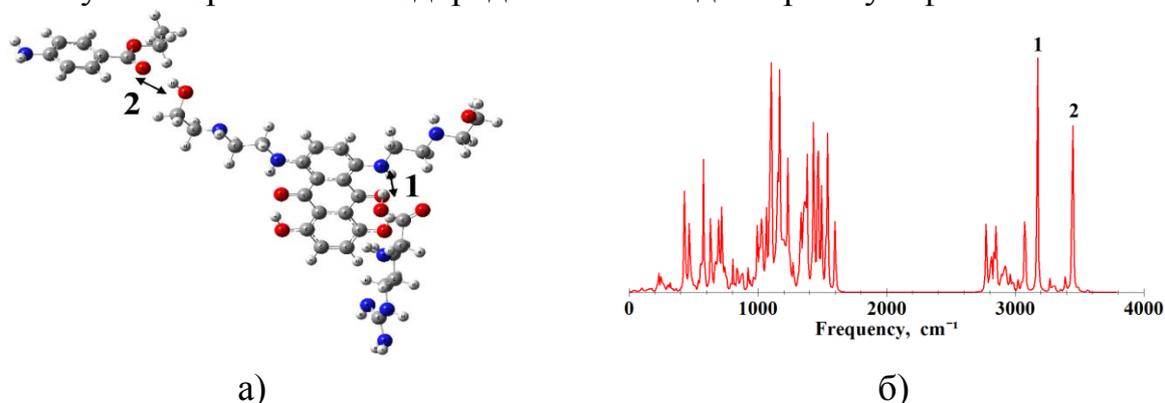


Рисунок 4. Рассчитанные структура и ИК-спектр молекулярного комплекса митоксантрон – аргинин - декстран сульфат

Таблица 1 Рассчитанные параметры водородных связей молекулярного комплекса митоксантрон - аргинин - декстран сульфат

№	Тип связи	Длина водородной связи, R Å	Длина водородного мостика	Частота, $\nu$ , $\text{cm}^{-1}$	Частотный сдвиг $\Delta\nu$ , $\text{cm}^{-1}$	Энергия связи $-\Delta H$ , ккал/моль	Интенсивность $I_{\text{IR}}$ , $\text{km/mol}$
1	O-H...N	1.95	2.90	3175	388	5.59	930
2	O-H...O	1.88	2.83	3449	148	3.11	898

На основе результатов молекулярного моделирования различных вариантов комплексообразования митоксантрона с веществами полимерной капсулы полиаргинином и декстран сульфатом можно сделать вывод о том, что декстран сульфат образует слабые водородные связи как с полиаргинином, так и с митоксантроном, а между митоксантроном и полиаргинином водородные связи сильные и близкие к сильным. Это дает возможность сказать, что ведущую роль в доставке лекарств играет полиаргинин как вещество, удерживающее митоксантрон в капсуле, а декстран сульфат играет роль буферного вещества, которое не участвует в распространении лекарства в организме, но обеспечивает освобождение лекарства порциями по ходу распространения капсулы.

#### Библиографический список

1. Д. Б. Трушина, А. С. Бурова, Т. Н. Бородина, М. А. Солдатов, Т. Ю. Клочко, Т. В. Букреева "Термоиндуцированное сжатие капсул из комплекса "сульфат декстрана/полиаргинин" с магнитными наночастицами в составе оболочки, Коллоидный журнал, том 80, № 6, с. 738–744, 2018
2. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. 2002. Т.172, No 3. С. 336–348
3. Попп Дж. А. Квантово-химические модели // Успехи физических наук. 2002. Т. 172, No 3. С. 349–356.
3. Toh T.B., Lee D.-K., Hou W., Abdullah L.N., Nguyen J., Ho D., Chow E. K.-H. Nanodiamond–Mitoxantrone Complexes Enhance Drug Retention in Chemoresistant Breast Cancer Cells // Molecular Pharmaceutics. – 2014. - V. 11, №8. - P. 2683–2691. DOI: 10.1021/mp5001108.
4. Электронный ресурс. <https://spectrabase.com/spectrum/1at2yD3X1YB>
5. Электронный ресурс. <https://spectrabase.com/spectrum/1E2d4WwETI5>

# РОЛЬ МЕТИЛЛИЗИНА В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА СЕРЕБРА МЕТОДОМ БАКТЕРИАЛЬНОГО СИНТЕЗА: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

*А.А.Захаров, И.Л. Пластун, А.А. Наумов*  
Саратовский государственный технический университет  
имени Ю.А. Гагарина  
E-mail: [wolfserk@mail.ru](mailto:wolfserk@mail.ru)

Методами квантовохимического моделирования исследуются молекулярные механизмы бактериального синтеза наночастиц сульфида серебра. Особенностью получения данных наночастиц методом биосинтеза с помощью бактерий *Bacillus subtilis* 168 является то, что единственным белком, участвующим в процессе синтеза и адсорбирующимся на поверхности частиц, является белок флагеллин. Было обнаружено, что метиллизин, входящий в состав флагеллина образует достаточно устойчивые молекулярные комплексы с нитратом серебра и тиосульфатом натрия.

**Ключевые слова:** сульфид серебра, метиллизин, молекулярное моделирование, электронная плотность, водородные связи, наноматериалы

Использование наночастиц для диагностики и таргетной терапии онкологических заболеваний в настоящее время является одним из наиболее популярных направлений в биофизике и медицине. В частности, большие перспективы в сфере биофизики и медицине могут иметь наночастицы сульфида серебра, получаемые с помощью биосинтеза на основе грамположительных и грамотрицательных бактерий [1]. Получаемые частицы обладают высокой степенью биосовместимости за счёт белковой оболочки, а малый размер позволяет их использовать в полупроводниковых технологиях в качестве квантовых точек, а также в биомедицине как флуоресцентные метки для прижизненной визуализации различных биопроцессов.

В данной работе производится исследование механизмом межмолекулярного взаимодействия белковых структур с солями рабочего раствора, используемого для получения наночастиц сульфида серебра, а именно – с водными растворами солей нитрата серебра  $AgNO_3$  и тиосульфата натрия  $Na_2S_2O_3$ . В качестве исследуемого белка рассматривается бактериальный белок флагеллин, поскольку, как показано в экспериментальном исследовании [2], при биосинтезе с помощью грамположительных бактерий *Bacillus subtilis* 168 только этот белок сорбируется на поверхности наночастиц сульфида серебра  $Ag_2S$  и, таким образом, является одной из важнейших составляющих процесса бактериального синтеза.

Молекулярное моделирование производилось при помощи программного комплекса Gaussian 09 [3] (использовался для оптимизации структур и расчёта ИК-спектров). DFTB+ (применялся для расчёта

относительной электронной плотности), в основе которого лежит метод плотного связывания на основе функционала плотности (DFTB).

Как показали расчёты, для тиосульфата натрия  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  (Рис. 1), так и для нитрата серебра  $\text{AgNO}_3$  (Рис. 3) существует несколько различных вариантов присоединения к молекуле метиллизина.

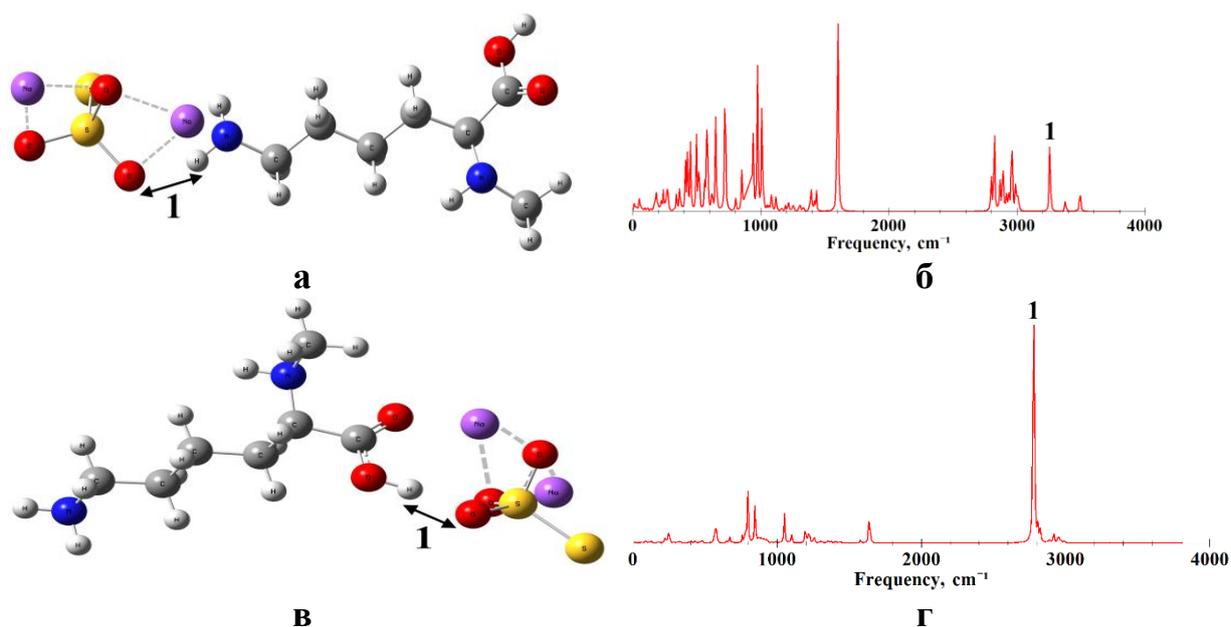


Рисунок 1. Рассчитанные структуры (а,в) и ИК спектры (б,г) для двух различных вариантов (1-а,б), (2-в,г) комплексообразования тиосульфата натрия  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  с метиллизинном с обозначенными О-Н связями (1)

Для тиосульфата натрия  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  были рассмотрены три варианта комплексообразования, в двух из которых образуются водородные связи средней силы (Таблица 1). Был произведен расчёт относительной электронной плотности (Рис. 2), выяснилось, что после добавления тиосульфата натрия происходит изменение электронной плотности метиллизина, она возрастает, что может говорить об увеличении сил связей в образованном комплексе. Также стоит отметить, что максимальное значение электронной плотности выше в варианте комплекса с более сильной водородной связью.

Таблица 1. Рассчитанные параметры водородных связей для двух вариантов молекулярного комплекса  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  –метиллизин

Номер варианта	Длина водородного мостика $R_{\text{OH}} \cdots O$ , Å	Частота, $\nu$ , $\text{cm}^{-1}$	Частотный сдвиг $\Delta\nu$ , $\text{cm}^{-1}$	Энергия связи $-\Delta H$ , ккал/моль	Интенсивность $I_{\text{IR}}$ , км/моль
1	2.83	3256	132	2.87	228
2	2.63	2782	743	8.01	3956

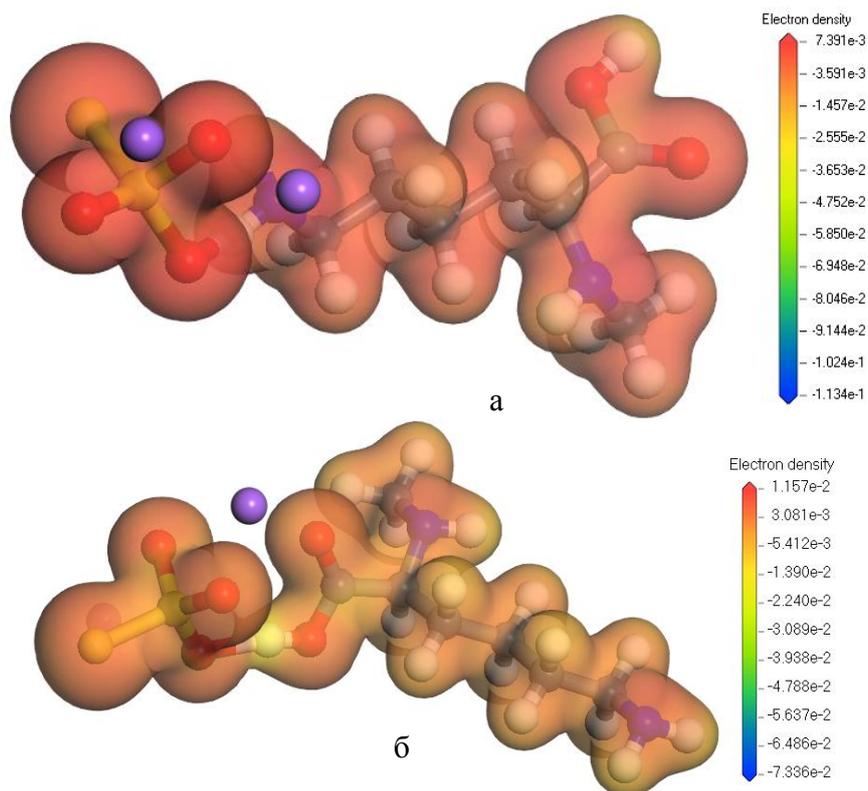


Рисунок 2. Относительная электронная плотность (а - Вариант 1, б – Вариант 2) для двух различных вариантов комплексообразования тиосульфата натрия  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  с метиллизинном

На рисунке. 3 представлены два варианта наиболее сильного взаимодействия нитрата серебра  $\text{AgNO}_3$  с метиллизинном. Рассчитанные параметры водородных связей представлены в таблице 2.

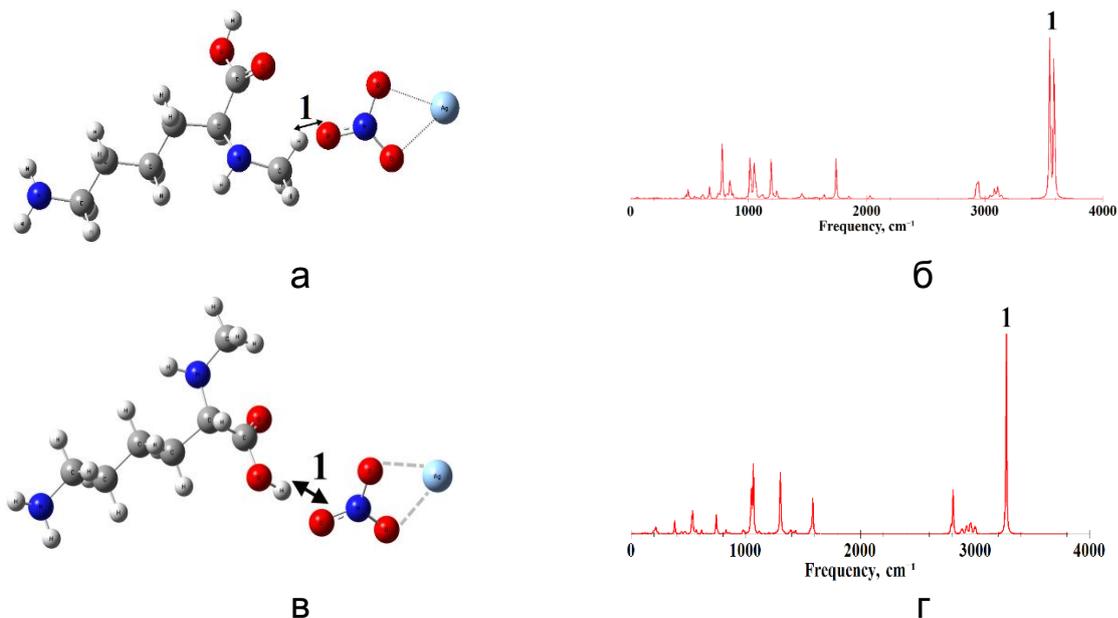


Рис. 3. Рассчитанные структуры (а,в,) и ИК спектры (б,г) для двух вариантов комплексообразования (1-а.б), (2-в,г), нитрата серебра  $\text{AgNO}_3$  с метиллизинном с обозначенными О-Н связями

Как и в случае молекулярного комплекса тиосульфат натрия – метиллизин, был произведен расчёт относительной электронной плотности (Рис. 4) комплекса нитрат серебра - метиллизин, однако, после добавления нитрата серебра изменение электронной плотности метиллизина практически не происходит, но если обратить внимание на электронную плотность О-Н связи, то можно проследить зависимость силы связи от величины относительной электронной плотности.

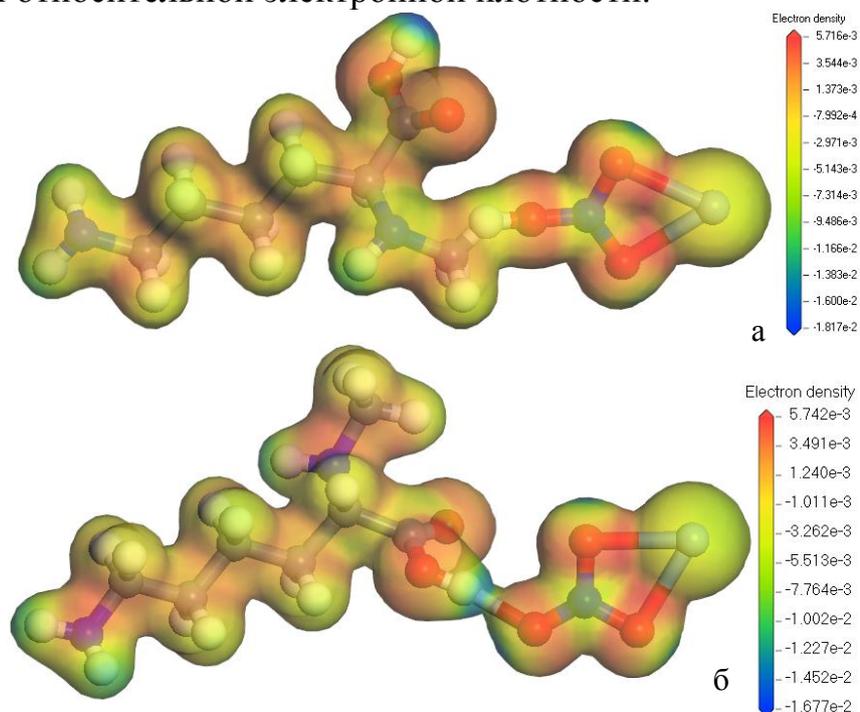


Рисунок 4. Относительная электронная плотность (а - Вариант 1, б – Вариант 2) для двух различных вариантов комплексообразования нитрата серебра  $AgNO_3$  с метиллизином

Также произведено моделирование взаимодействия двух молекул солей,  $AgNO_3$  и  $Na_2S_2O_3$  с метиллизином (Рис 5). Было установлено, что образуются две связи, близкие к связям средней силы, с частотными сдвигами  $316\text{ см}^{-1}$  и  $228\text{ см}^{-1}$  и энергиями в 4.98 ккал/моль, 4.11 ккал/моль соответственно.

Таблица 2. Рассчитанные параметры водородных связей для двух вариантов молекулярного комплекса  $AgNO_3$  –метиллизин

Номер варианта	Длина водородного мостика $R_{OH...O}$ , Å	Частота, $\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Частотный сдвиг $\Delta\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Энергия Связи $-\Delta H$ , ккал/моль	Интенсивность $I_{IR}$ , км/моль
1	2,2	3552	440	6,01	1375
2	2,59	3231	282	4,67	725

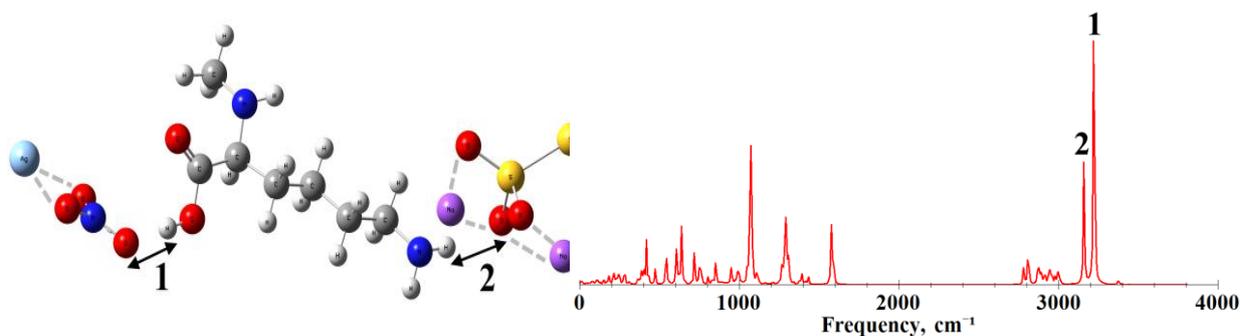


Рисунок 5. Рассчитанная структура и ИК спектр молекулярного комплекса  $\text{AgNO}_3$ -метиллизин- $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$

На основе результатов молекулярного моделирования различных вариантов комплексообразования метиллизина с солями нитрата серебра  $\text{AgNO}_3$  и тиосульфата натрия  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ , и последующего анализа параметров образующихся водородных связей, а также распределения заряда была установлена возможность и оценена степень комплексообразования. Было выяснено, что в молекулярных комплексах  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -метиллизин после добавления тиосульфата натрия происходит изменение относительной электронной плотности метиллизина, что может говорить об увеличении сил водородных связей в образованных комплексах. Кроме того, необходимо отметить особое влияние процесса метилизации лизина, благодаря которому степень его взаимодействия в составе флагеллина существенно повышается, что способствует образованию более прочной органической оболочки синтезируемых наночастиц.

Таким образом, можно сказать, что метиллизин образует достаточно устойчивые молекулярные комплексы с тиосульфатом натрия и нитратом серебра на основе водородных связей средней силы и близким к сильным, что даёт возможность говорить о его существенном вкладе в процесс образования наночастиц сульфида серебра методом биосинтеза с помощью грамположительных бактерий *Bacillus subtilis* 168.

#### Библиографический список

1. Воейкова Т.А., Шебанова А.С., Иванов Ю.Д. и др. Роль белков внешней мембраны бактерий *Shewanella oneidensis* MR-1 в образовании и стабилизации наночастицы сульфида серебра // Биотехнология. 2015, №5. С. 41-48.
2. Т.А. Воейкова, О.А. Журавлева, Н.В. Булушова, В.П. Вейко, Т.Т. Исмагулова, Т.Н. Лупанова, К.В. Шайтан, В.Г. Дебабов Белковая корона наночастиц сульфида серебра, полученных в присутствии грамотрицательных и грамположительных бактерий // Молекулярная генетика, микробиология, вирусология. 2017, т. 35. № 4. С. 151–156.
3. M.J. Frisch, G.W. Trucks, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, M. Caricato, H.P. Hratchian, X. Li, V. Barone, J. Bloino, G. Zheng et al. Gaussian 09, Revision A.02. Wallingford CT: Gaussian Inc., 2009. P. 3-5.

## МЕТОДЫ СИНТЕЗА КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕГЕНЕРАТИВНОЙ МЕДИЦИНЫ

*Н.В. Короневский, Е.А. Рябов, Р.А. Щитцов, К.А. Зыков, В.А. Кильдишева,  
И.В. Хайрушев, А.А. Андреев, И.С. Великанов, Б.В. Сергеева*

Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского  
E-mail: Kaskad\_94@mail.ru

В статье представлены методы синтеза композитных материалов, состоящих из микрочастиц карбоната кальция, выращенных на органических волокнах и модифицированных наночастицами магнетита. Полученный композитный материал может быть использован в качестве тканеинженерного каркаса для регенерационной медицины. Внедрение наночастиц магнетита делает материал чувствительным к магнитному полю.

**Ключевые слова:** тканеинженерный каркас, нановолокна, микрочастицы карбоната кальция

Одна из задач современного материаловедения – синтез композитных материалов из разнородных компонентов, способных менять свою структуру и свойства в соответствии с областью применения и условиями эксплуатации. Наибольший интерес вызывают сложносоставные материалы, состоящие из двух и более веществ. Особенность данного класса материалов в том, что один из материалов создает стабильную матрицу, ячейки которой заполняют остальные вещества.

Микрочастицы карбоната кальция активно используются в медицине в качестве микроконтейнеров для адресной доставки лекарственных препаратов [1]. Возможность встраивания наночастиц магнетита в объем сферических ядер карбоната кальция ( $\text{CaCO}_3$ ) [2] позволяет управлять полученными структурами с помощью внешнего магнитного поля [3].

Магнитные наночастицы, в частности наночастицы оксидов железа, широко используются в биомедицинских целях *in vivo*, например, для усиления контрастирования и повышения диагностической чувствительности в магнитной резонансной томографии [4], гипертермии с помощью переменного магнитного поля [5], тканевой инженерии [6].

Один из главных вопросов костной регенерационной медицины – поиск альтернативных решений восстановления скелетных увечий [7]. На данный момент известно, что культивирование клеток лучше проводить на подложках, имитирующих натуральный внеклеточный матрикс кости [8]. При этом существует проблема создания матриц с поверхностью, структурированной на микро- и наноуровнях, подобно естественному внеклеточному матриксу.

Существует множество направлений модификации матриксов, таких как: физическая и/или химическая обработка волокон (например,

термическая обработка); введение функциональных добавок в раствор полимера (биологически активные вещества, лекарственные препараты, нано- и микрочастицы и др.) [9]. В работе [10] описан процесс покрытия микрочастицами  $\text{CaCO}_3$  волокон поликапролактона (ПКЛ).

Главной целью данного исследования является разработка композитного материала для применения в регенеративной костной медицине. Синтезируемый материал состоит из волокон поликапролактона (основной матричный материал), микрочастиц  $\text{CaCO}_3$ , используемых в качестве контейнеров [11-14], а так же наночастиц магнетита ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) в качестве чувствительного к переменному магнитному полю материала, применяемого как для стимуляции процесса заживления [15], так и иммунной системы [16].

За основной метод синтеза был выбран алгоритм формирования микрочастиц карбоната кальция на поверхности органических волокон поликапролактона, предложенный в работах [10, 17, 18]. В пробирку, содержащую нановолокна ПКЛ, добавляются растворы солей хлорида кальция ( $\text{CaCl}_2$ ) и карбоната натрия ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) в эквимольных пропорциях. Полученную систему подвергают обработке ультразвуком частотой 35 кГц в течение 1 минуты. После завершения химических реакций образец изымается, промывается деионизованной водой и помещается в сушильный шкаф на 10 – 15 минут при температуре 46 °С.

В исследовании использовались волокна поликапролактона, полученные методом электроспиннинга, диаметром  $100 \pm 50$  нм.

Для анализа синтезированных образцов использовалась растровая электронная микроскопия (аналитический комплекс на базе растрового электронного микроскопа высокого разрешения Mira II LMU фирмы «TESCAN»), широко применяемая для визуализации объектов микро- и наномасштаба. Морфология полученных образцов проводилась в режиме детектирования вторичных электронов, наиболее чувствительных к рельефу поверхности. Ускоряющее напряжение составляло 30 кВ, диаметр пучка – 3,2 нм. В работе использовался раствор наночастиц магнетита, полученных методом химического соосаждения, концентрацией 0,4 мг/мл и размерами  $16 \pm 4$  нм.

Были разработаны три основных алгоритма синтеза микрочастиц карбоната кальция, содержащих наночастицы магнетита, на органических волокнах поликапролактона.

**Метод коприципитации солей с магнетитом** заключается в использовании смесей растворов солей хлорида кальция и карбоната натрия с раствором наночастиц магнетита. Результаты синтеза представлены на рисунке 1.

**Метод ультразвуковой обработки** заключается в выдерживании нановолокон поликапролактона в растворе магнетита в течение 1 минуты перед добавлением растворов солей хлорида кальция и карбоната натрия. Результаты синтеза представлены на рисунке 2.

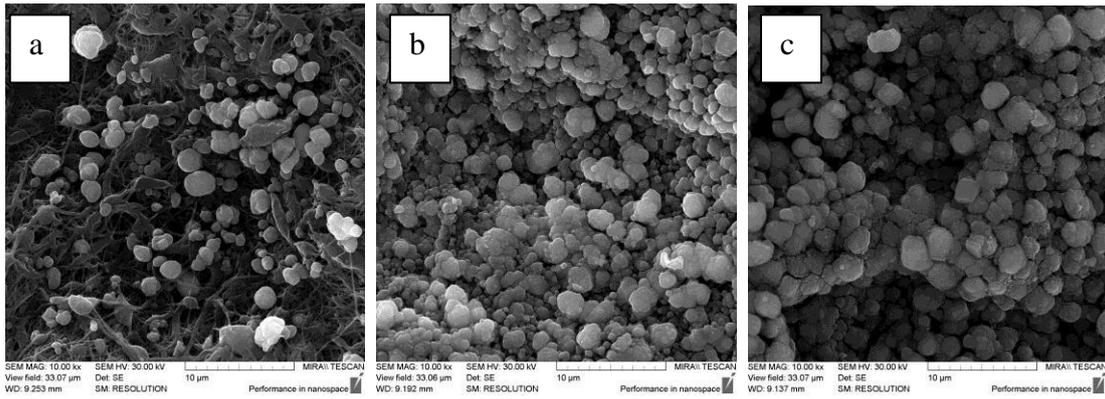


Рисунок 1. СЭМ изображения образцов, полученных методом копреципитации солей и магнетита после проведения: а – 1-ого ТЦ, б – 2-ого ТЦ, с – 3-ого ТЦ

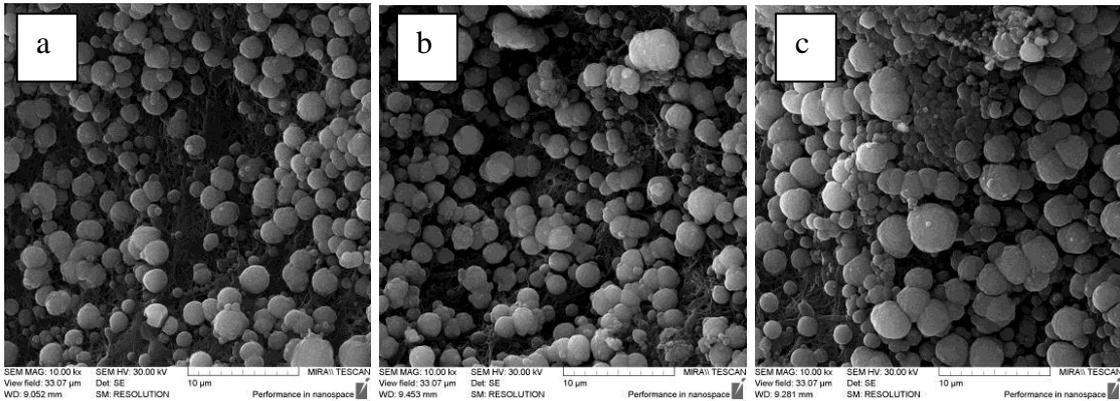


Рисунок 2. СЭМ изображения образцов, полученных методом ультразвуковой обработки после проведения: а – 1-ого ТЦ, б – 2-ого ТЦ, с – 3-ого ТЦ

**Метод адсорбции, индуцированной кристаллизацией**, основан на методе, представленном в [19]. Наночастицы магнетита вдавливаются в микрочастицы  $\text{CaCO}_3$  выращенные на органических волокнах фронтом кристаллизации в процессе замораживания полученной системы. На рисунке 3 показаны результаты проведенного эксперимента.

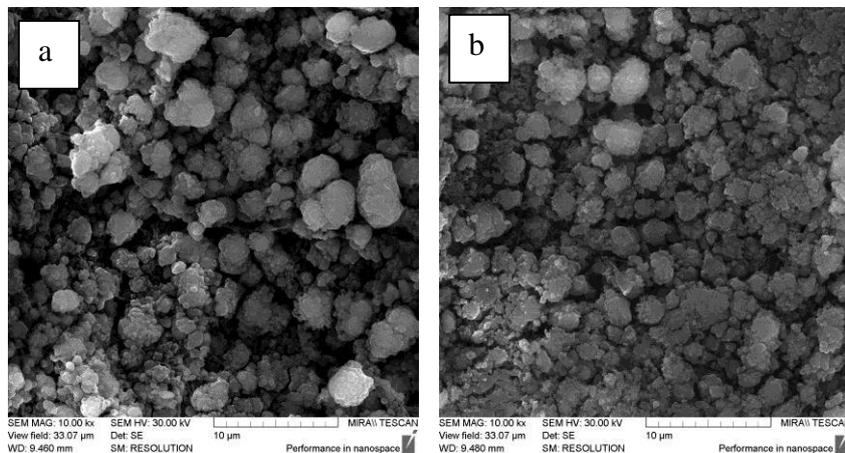


Рис. 3. СЭМ изображения микрочастиц карбоната кальция, выращенных на органических волокнах, а – до и б – после использования метода адсорбции, индуцированной кристаллизацией

Были определены средние размеры синтезированных микрочастиц  $\text{CaCO}_3$  на поверхности органических волокон ПКЛ. Для метода коприципитации солей после 3-ого технологического цикла (ТЦ) средний размер микрочастиц карбоната кальция составляет  $1,4 \pm 0,3$  мкм, для метода ультразвуковой обработки после 3-ого ТЦ средний размер частиц равен  $1,2 \pm 0,4$  мкм, для метода адсорбции, индуцированной кристаллизацией –  $1,1 \pm 0,4$  мкм.

Главным результатом проведенного исследования является разработка технологий синтеза нового композитного материала. Образцы, полученные предложенными методами, проявляют восприимчивость к внешним магнитным полям, демонстрируют стабильную структуру из микрочастиц карбоната кальция модификации ватерит, размеры которых находятся в диапазоне от 500 нм до 2 мкм. Технология получения данных частиц используется на практических и лабораторных занятиях по физической химии [20, 21] и твердотельной электронике [22–24].

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 11-07-00233).*

#### Библиографический список

1. *Larson D.R., Zipfel W.R., Williams E.M.* Water-soluble quantum dots for multiphoton fluorescence imaging in vivo // *Science*. 2003. V. 300, № 5624. P. 1434–1436.
2. *Fakhrullin R.F., Minullina R.T.* Hybrid cellular–inorganic core–shell microparticles: Encapsulation of individual living cells in calcium carbonate microshells // *Langmuir*. 2009. V. 25, № 12. P. 6617–6621.
3. *Wang C., He C, Tong Z, Liu X.* Combination of adsorption by porous  $\text{CaCO}_3$  microparticles and encapsulation by polyelectrolyte multilayer films for sustained drug delivery // *International journal of pharmaceutics*. 2006. V. 308, № 1. P. 160–167.
4. *Jun Y., Lee J.-H., Cheon J.* Chemical Design of Nanoparticle Probes for High-Performance Magnetic Resonance Imaging // *Angewandte Chemie International Edition* 2008. V. 47. P. 22–51.
5. *Васильченко И.Л., Осинцев А.М., Тупицын А.В., Васильченко Н.В.* Интраоперационная гипертермия за счет нагрева персонального аппликатора в переменном магнитном поле субмегагерцового диапазона при лечении злокачественных опухолей // *Research'n Practical Medicine Journal*. 2018. Т. 5. №. Спецвыпуск 2. С. 172–180.
6. *Levy M., Lagarde F., Maraloiu V-A., Blanchin M-G.* Degradability of superparamagnetic nanoparticles in a model of intracellular environment: follow-up of magnetic, structural and chemical properties // *Nanotechnology*. 2010. V. 21. P. 10–39.
7. Кирилова И.А., Подорожная В.Т., Легостаева Е.В. Костно-пластические биоматериалы и их физико-механические свойства // *Хирургия позвоночника*. 2010. № 1. С. 81–87.
8. *Faghihi F, Baghaban Eslaminejad M.* The effect of nano-scale topography on osteogenic differentiation of mesenchymal stem cells. *Biomed Pap Med Fac Univ Palacky Olomouc Czech Repub*. 2014. V. 158. P. 5–16.
9. *Agarwal S, Wendorff A., Greiner J.* Use of electrospinning technique for biomedical applications // *Polymer*. 2008. V. 49, № 26. P. 5603–5621.

10. *Savelyeva M.S., Abalymov A.A., Lyubun G.P.* Vaterite coatings on electrospun polymeric fibers for biomedical applications // *Journal of Biomedical Materials Research Part A*. 2017. V. 105, № 1. P. 94–103.
11. *Сергеев Р.С., Сергеева А.С., Ленгерт Е.В., Сергеев С.А.* Формирование и исследование сферических пористых микрочастиц карбоната кальция, обладающих магнитными свойствами // *Наноматериалы и нанотехнологии: проблемы и перспективы: сб. мат. конф.* – М.: Прондо. 2014. С. 275–283.
12. *Сергеев Р.С., Сергеева А.С., Ленгерт Е.В., Сергеев С.А.* Формирование и исследование сферических пористых микрочастиц карбоната кальция, функционализированных магнитными наночастицами // *Новые материалы и технологии: состояние вопроса и перспективы развития: сб. мат. конф.* – Саратов: ИЦ Наука, 2014. С. 244–249.
13. *Сергеева А.С., Сергеев Р.С., Сергеев С.А.* Синтез пористых микрочастиц, обладающих магнитными свойствами // *Фундаментальные и прикладные аспекты новых высокоэффективных материалов: Мат. конф.* – Казань: ИП Синяев Д.Н., 2013. С. 139–141.
14. *Сергеева А.С., Сергеев Р.С., Сергеев С.А.* Исследование процесса перекристаллизации магнитных микрочастиц // *Фундаментальные и прикладные аспекты новых высокоэффективных материалов: Мат. конф.* – Казань: ИП Синяев Д.Н., 2013. С. 142–144.
15. *Иванов Д.В., Субботина Т.И., Яшин А.А.* Электромагнитные поля и излучения в восстановительной медицине (обзор литературы) // *Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание*. 2018. Т. 12, № 5.4. С. 232–238.
16. *Улащик В.С.* Магнитотерапия: современные представления о механизмах действия магнитных полей на организм // *Здравоохранение*. 2015. № 11. С. 21.
17. *Сергеев С.А., Короневский Н.В., Аткин В.С., Сергеев Р.С.* Синтез и исследование свойств неорганических нановолокон с микрочастицами  $\text{CaCO}_3$  // *Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика: тез. докл. конф.* – Саратов: Техно-Декор, 2017. С. 249–251.
18. *Короневский Н.В., Сергеев Р.С., Савельева М.С., Сергеев С.А.* Синтез и исследование свойств микрочастиц  $\text{CaCO}_3$ , выращенных на неорганических волокнах и модифицированных наночастицами  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  // *Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2017: Мат. Всерос. школы-семинара / под ред. проф. Д.А. Усанова.* – Саратов: Саратовский источник, 2017. С. 120–123.
19. *German S.V., Novoselova M.V., Bratashov D.N.* High-efficiency freezing-induced loading of inorganic nanoparticles and proteins into micron-and submicron-sized porous particles // *Scientific reports*. 2018. V. 8, № 1. P. 17763–17773.
20. *Портнов С.А., Сергеев С.А., Иноземцева О.А., Горбачёв И.А., Сергеева А.С., Горин Д.А.* Физика и химия границ раздела фаз: учеб. пособие. – Саратов: Саратовский источник, 2015. 132 с.
21. *Сергеев С.А., Иноземцева О.А., Браташов Д.Н., Герман С.В., Воронин Д.В., Ломова М.В., Горин Д.А.* Физика и химия коллоидных систем: учеб. пособие. – Саратов: Саратовский источник, 2016. 168 с.
22. *Михайлов А. И., Сергеев С. А.* Физические основы твердотельной электроники: Учеб. пособие. 2-е изд. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2020. 192 с.
23. *Михайлов А.И., Сергеев С.А.* Физические основы твердотельной электроники: Учеб. пособие. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2007. – 164 с.
24. *Михайлов А.И., Сергеев С.А., Глуховской Е.Г.* Физические основы твердотельной электроники и микроэлектроники: Планы семинарских занятий: Учеб. пособие. – Саратов: ООО «Редакция журнала «Промышленность Поволжья», 2008. 116 с.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЗАИМОДЕСТВИЯ ИОНОВ ЦИНКА И МОЛЕКУЛЫ ФЛАГЕЛЛИНА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л.

Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина

E-mail: [filinbox98@gmail.com](mailto:filinbox98@gmail.com)

Методами молекулярной динамики исследуются молекулярные механизмы взаимодействия ионов цинка и молекулы флагеллина возникающего в процессе бактериального синтеза наночастиц сульфида цинка. Особенностью получения данных наночастиц методом биосинтеза с помощью бактерий *Bacillus subtilis* 168 является то, что единственным белком, участвующим в процессе синтеза и адсорбирующимся на поверхности частиц, является белок флагеллин. Было обнаружено, что при температуре 300К в присутствии ионов цинка степень комплексообразования молекулы флагеллина существенно возрастает, что способствует образованию наночастиц металла.

**Ключевые слова:** ионы цинка, флагеллин, молекулярное моделирование, водородные связи, наноматериалы

Наночастицы сульфидов металлов являются одним из перспективных материалов в биофотонике и медицине, используемым для диагностики и мониторинга *in vivo* различных биопроцессов, а также для таргетной терапии онкологических заболеваний.

В представленной работе анализируются молекулярные механизмы образования наночастиц сульфидов металлов методом бактериального синтеза при помощи бактерий *Bacillus subtilis* 168 [1]. Как правило, наночастицы сульфидов металлов получают химическими методами, однако эти методы высокочемические и экологически опасны. Кроме того, химически синтезированные наночастицы менее биосовместимы, что существенно ограничивает их применение в биологических и медицинских системах. Особенностью бактериального синтеза наночастиц сульфидов металлов на основе именно этих бактерий является то, что единственным белком, участвующим в процессе синтеза и адсорбируемым на поверхности частиц, является флагеллин, присутствующий в жгутиках бактерий и обладающий уникальными характеристиками, обуславливающими его высокую подвижность, благодаря которой флагеллин может организовываться в полые цилиндрические структуры.

Методами молекулярной динамики было изучено поведение флагеллина в водных растворах солей, используемых в процессе синтеза наночастиц сульфида цинка. В качестве исследуемых объектов была рассмотрена молекула флагеллина и ионы цинка и хлора поскольку основной солью рабочего раствора, используемого в ходе бактериального синтеза, является хлорид цинка [1]. Ранее нами было проведен анализ водородных связей аминокислот флагеллина и ионов серебра при

образовании наночастиц сульфидов серебра. Была выявлена существенная роль нестандартной аминокислоты метилизина в процессе водородного связывания и комплексообразования наночастиц сульфида серебра [2]. В случае сульфида цинка мы ожидаем, что влияние так же будет существенно.

Молекулярное моделирование проводилось при помощи программного комплекса GROMACS [3] с использованием силовых полей AMBER99SB-ILDN [4] и трехточечного сольвата TIP3P. Аминокислотная последовательность флагеллина 6GOW (рисунок 2а) взята из международной базы данных белков RCSB PDB [5]. На основе анализа среднего радиуса инерции и графика возникновения водородных связей между протеином и ионами цинка была изучена динамика молекул флагеллина.

В результате наших исследований была получена сольватированная электронейтральная система, состоящая из белка и ионов. Существует величина среднеквадратичного отклонения, которая характеризуется суммой расстояний между атомами из стандартного строения белковой структуры и новым рассчитанным состоянием. В случае молекулы флагеллина структура белка является устойчивой, так как среднеквадратичное отклонение находится в промежутке 1-1.5 Å на всем этапе моделирования (Рисунок 1).

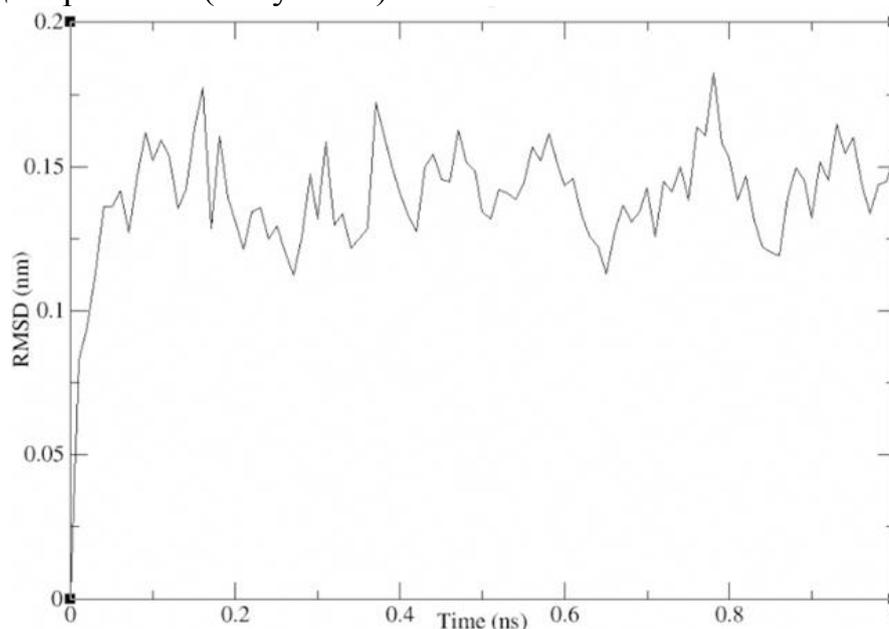
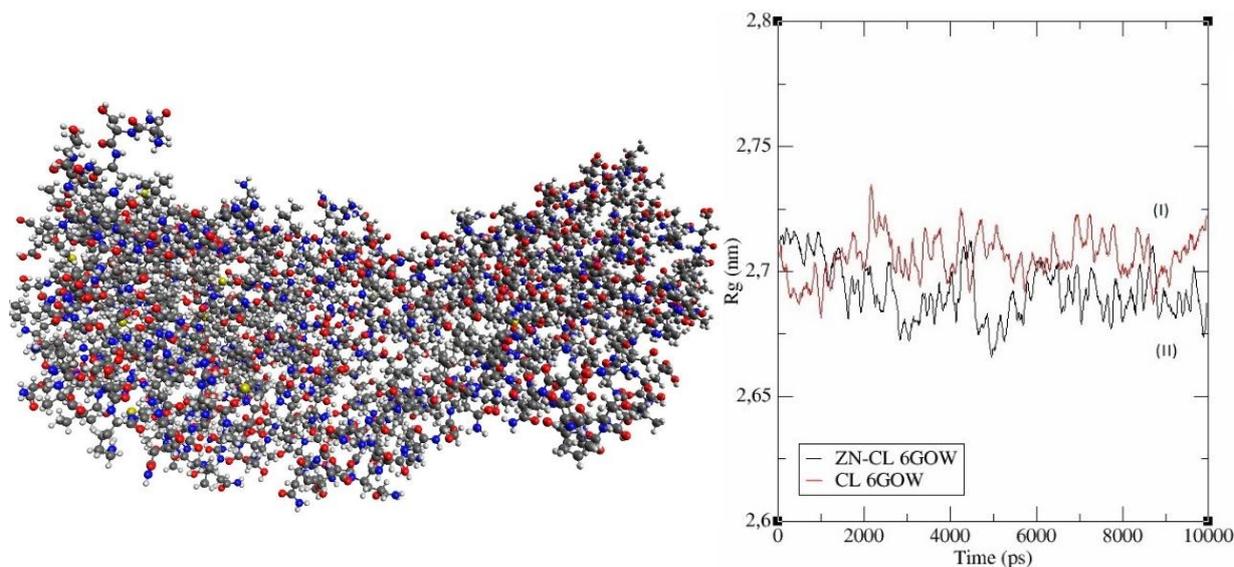


Рисунок 1. Среднеквадратичное отклонение атомов флагеллина в зависимости от времени

Второй характеристикой, определяющей поведение белковой структуры является радиус инерции, характеризующий меру компактности, посредством определения удалённости масс атомов от общего центра масс. В ходе расчётов было обнаружено, что в растворе, содержащем ионы хлора и цинка, средний радиус инерции постепенно

уменьшался (на графике, рисунок 2б, радиус инерции белка в присутствии ионов цинка обозначен чёрным цветом, без ионов цинка - красным).



(а) (б)  
Рисунок 2. Рассчитанная молекулярная структура флагеллина (а) и радиус инерции флагеллина (б) в присутствии ионов хлора (б, (I)) и ионов хлора и цинка (б, (II)).

Также была выявлена зависимость радиуса инерции белка в растворе ионов цинка (Zn) и хлора (Cl) от температуры (рисунок 3). Флагеллин стремится занять более компактную структуру при  $T = 300\text{K}$ . При температуре  $305\text{K}$  и выше тепловое движение молекул препятствует образованию устойчивых связей с ионами. Таким же образом при температуре  $295\text{K}$  и ниже биологическая активность белка падает. Это все выражается тем, что графики данных функций лежат выше и имеют тенденцию к увеличению значений.

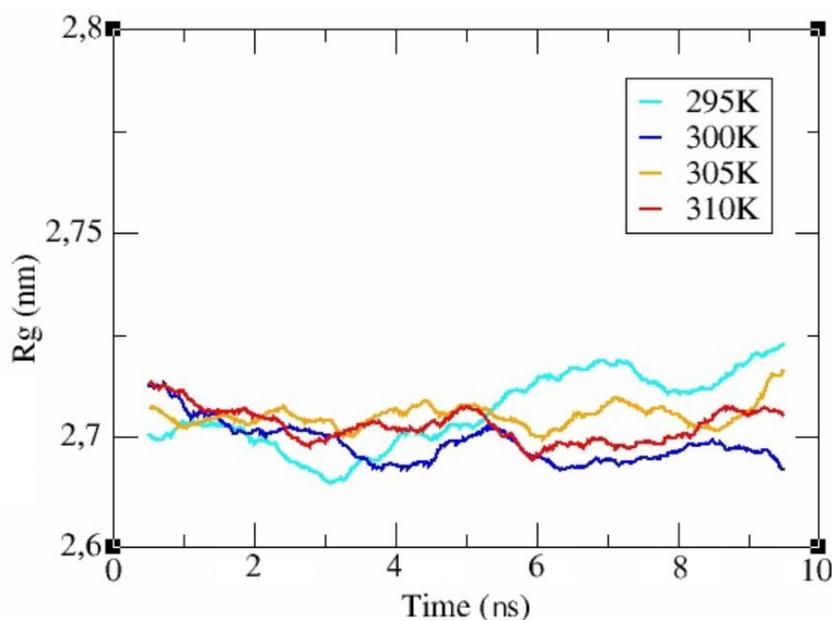


Рисунок 3. Зависимость радиуса инерции от температуры

Кроме того, было отслежено количество возникающих в системе водородных связей, что показано на рисунке 4. Из рисунка видно, что с увеличением времени количество водородных связей растёт, что говорит о том, что происходит электростатическое взаимодействие между ионами цинка и аминокислотами флагеллина. Это показывает электростатическую природу механизма образования наночастиц сульфида цинка.



Рисунок 4. Зависимость числа водородных связей от времени

Таким образом, по результатам молекулярного моделирования можно сделать вывод, что в присутствии ионов цинка степень комплексообразования молекулы флагеллина существенно возрастает, что способствует образованию наночастиц металла, причём наиболее эффективно этот процесс происходит при 300К (26,8 °С) — температуре, близкой к комнатной, когда все биологические процессы наиболее активны. Увеличение количества водородных связей при уменьшении радиуса инерции подтверждает электростатические механизмы комплексообразования в случае аминокислот флагеллина и ионов цинка.

#### Библиографический список

1. Журавлева О.А., Воейкова Т.А., Хаддаж М.Х. и др. Бактериальный синтез наночастиц сульфидов кадмия и цинка. Характеристика и перспектива их применения // Молекулярная генетика, микробиология, вирусология. 2018. № 36 (4). С. 191–198.
2. Пластун И.Л., Захаров А.А., Наумов А.А., Жулидин П.А., Филин П.Д. Спектральные проявления молекулярных механизмов образования наночастиц сульфида серебра методом бактериального синтеза // Оптика и спектроскопия. 2021. том 129, вып. 6. С. 717- 726
3. Интернет-ресурс: [https://www.gromacs.org/About\\_Gromacs](https://www.gromacs.org/About_Gromacs)

4. K. Lindorff-Larsen, S. Piana, K. Palmo, P. Maragakis, J. L. Klepeis, R. O. Dror, D. E. Shaw Improved side-chain torsion potentials for the Amber ff99SB protein force field // Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics. 2010 Volume 78, Issue 8, P.1950-1958
5. Интернет-ресурс: <https://www.rcsb.org/3d-view/6GOW> doi 10.2210/pdb6GOW/pdb

## **АНАЛИЗ ИЗМЕНЕНИЯ СВЕТОПРОНИЦАЕМОСТИ ТВЕРДЫХ ТКАНЕЙ ЗУБА НА ЭТАПЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОТБЕЛИВАНИЯ**

*Н.В. Булкина, О.Ю. Гусева, В.М. Моргунова, Е.Н. Полосухина*

Саратовский государственный медицинский университет им. В.И. Разумовского

E-mail: o-guseva@bk.ru

Отбеливание зубов является востребованной процедурой. Пациента всегда интересует вопрос, насколько белее станут его зубы. В настоящее время еще не разработаны методики, позволяющие точно предсказать конечный результат отбеливания зубов, вопрос о предсказуемости полученного результата остается открытым. Использование комплекса современных механизмов нашего экспериментального исследования, могло бы обеспечить количественный анализ процессов изменения светопроницаемости твердых тканей зуба на этапе экспериментального отбеливания зубов, что создало теоретические предпосылки к проведению «управляемого» клинического отбеливания зубов.

**Ключевые слова:** отбеливание зубов, светопроницаемость зубов, цвет зубов, прогноз результатов отбеливания.

Белоснежная улыбка всегда вызывает симпатию, свидетельствует о хорошем уровне здоровья, и несомненно, является одной из составляющих образа современного благополучного человека. Существенное изменение естественного цветового фона зубов значительно нарушает внешний вид зубов пациента [3, 5, 6]. Несомненно, придя на процедуру отбеливания, пациент подсознательно ожидает эффекта так называемой голливудской улыбки. Однако не всегда результат отбеливания удовлетворяет ожидания пациента [1]. К сожалению, прогнозировать результат отбеливания по тем параметрам, которые ожидает пациент, врач не может. Именно поэтому, методы обследования пациента, позволяющие прогнозировать результат отбеливания еще до проведения процедуры, нуждаются в усовершенствовании. Возрастающая популярность высокоточных методик диагностики, в том числе и оптических, диктует необходимость создания высокоточного прибора для определения светопроницаемости твердых тканей зубов.

Проводимый нами эксперимент, в ходе которого мы определили интенсивность прохождения лазерного света в зубах до и после отбеливания, позволил сделать выводы, что интенсивность свечения зуба после процедуры отбеливания изменяется в сторону увеличения;

интенсивность света, проходящего через твердые ткани зуба после процедуры отбеливания, увеличивается в области экватора зуба, но уменьшается в области режущего края [2]. Полученные данные мы оценивали, используя визуальный и графический анализы.

Для проведения эксперимента был использован полупроводниковый лазер, излучающий свет с длиной волны 532 нм, мощность – 4 мВт (Photonic Solutionis), фотокамера (Nikon d5100). Объектом изучения стали 6 образцов интактных, удаленных по ортодонтическим показаниям. Для оценки светопроницаемости была выстроена система, состоящая из: лазера, камеры и исследуемых зубов. Лазерное излучение наводилось на исследуемый образец перпендикулярно. На линии, образованной зубом и лазером, располагалась камера, регистрирующая свет, излучаемый зубом. Для исключения световых помех, данная система была изолирована от светового излучения извне. Исследуемый зуб фотографировался на фиксированном расстоянии. После каждый образец подвергался отбеливанию в 6% растворе перекиси водорода с экспозицией на 12 часов. Затем образцы фотографировались снова, по методике, представленной ранее. Для анализа и интерпретации данных было использовано программное обеспечение для математических и инженерных вычислений «Mathcad», в результате чего мы получали средние значение интенсивности света и таблицу интенсивности.

Визуальный анализ полученных изображений показал, что интенсивность просвечивания отбеленных зубов выше, чем у неотбеленных. Чтобы подтвердить это количественно, были построены графики распределения интенсивности.

На рис. 1 представлен пример фотографии центрального резца, полученной в ходе исследования, а также график распределения интенсивности свечения до и после процедуры отбеливания.

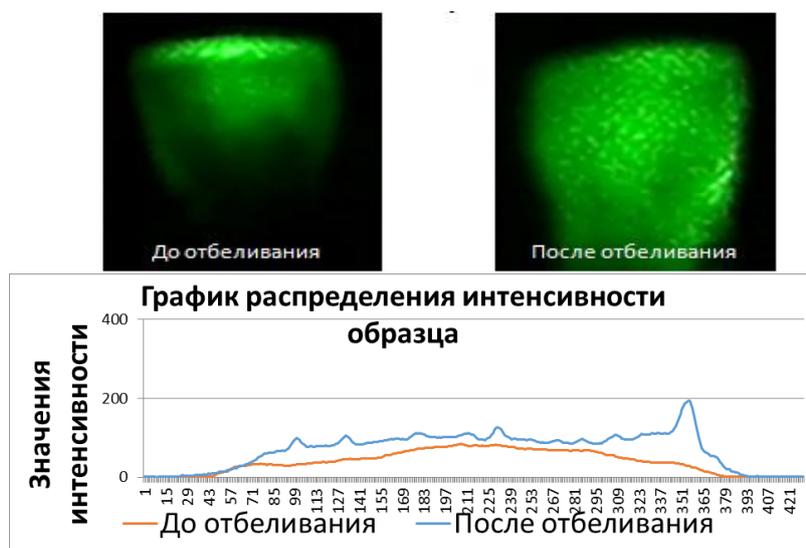


Рисунок 1. Фотография центрального резца и график распределения интенсивности свечения до и после процедуры отбеливания

Интенсивность просвечивания зубов после отбеливания возросли у центрального резца в 2,7 раза, у бокового резца в 2,5 раза, у клыков в 1,7 и 2,2 раза, у премоляров в 6,9 и 7, 4 соответственно.

Прослеживая интенсивность проходящего света в различных зонах исследуемых зубов, обнаружено снижение интенсивности в области режущего края. После проведенной нами работы были сформулированы следующие выводы: интенсивность свечения зуба после процедуры отбеливания изменяется в сторону увеличения, интенсивность света, проходящего через твердые ткани зуба после процедуры отбеливания, увеличивается в области экватора зуба, но уменьшается в области режущего края.

Во второй части исследования мы изучили проходимость света сквозь шлиф зуба до отбеливания и после проведения процедуры. Задачей нашего эксперимента было определить интенсивность проходящего света сквозь дентин зуба до и после отбеливания [4].

Для решения поставленных задач мы изучили плоскопараллельные шлифы удаленного по ортодонтическим показаниям интактного зуба. Предварительная подготовка зуба заключалась в шлифовке до необходимой плоскости (с дистальной поверхности зуба) до отбеливания, получен образец 1. После чего зуб подвергся отбеливанию в 6% растворе перекиси водорода с экспозицией на 12 часов. Затем производилась шлифовка зуба с медиальной поверхности до необходимой плоскости, по ране проводимой методике шлифовки, таким образом был получен образец 2.

Для исследования шлифов зуба, один из которых использовали установку, состоящую из оптического микроскопа БИОЛАМ с прикрепленной цифровой камерой Logitech, разрешением фотографий 3 Мрх. Со значением интенсивности 0-255. В процессе съемки образцов использовали 300-кратное увеличение микроскопа. В ходе исследования анализировались аналогичные области участков дентина зуба (область, прилежащая к эмали; средняя область дентина зуба; область дентина, прилежащая к пульпе).

Фотокамера фиксировала изображения прошедшего излучения через образец. Была получена серия фотографий образца 1 и образца 2. Анализ полученных изображений, произвели с помощью стандартных средств Microsoft Office. Для оценки количества прошедшего сигнала построили пространственное распределение интенсивности света через шлиф зуба.

На рис. 2 представлен пример фотографии образца шлифа зуба и цветового графического распределения интенсивностей.

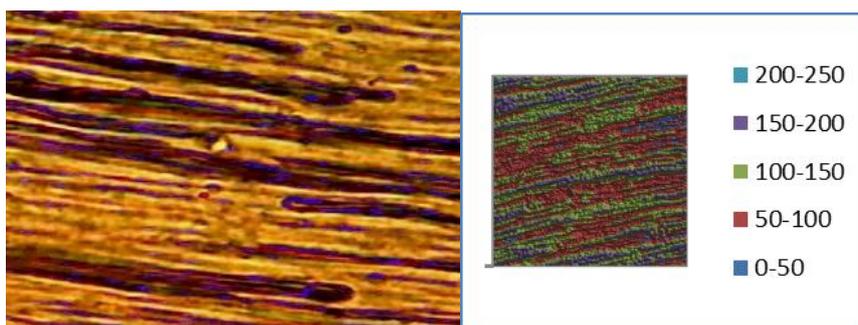


Рисунок 2. Образец шлифа зуба и цветовое графическое распределение интенсивностей.

По полученным пространственным распределениям интенсивности мы увидели некоторые расхождения в этих распределениях. Для образца не подверженному отбеливанию наблюдается большее количество сигнала, имеющее интенсивность менее 100-150, а для образца после отбеливания большее количество со значением 100 и более.

По полученным данным были построены графики распределений значений относительных частот интенсивностей. Среднее значение интенсивности проходящего света зуба, не подверженного отбеливанию наблюдалось меньше, чем аналогичное среднее значение образца после отбеливания.

На рис. 3 представлены графики распределения значений интенсивности образца 1 и образца 2. Различными цветами обозначены графики различных областей зуба.

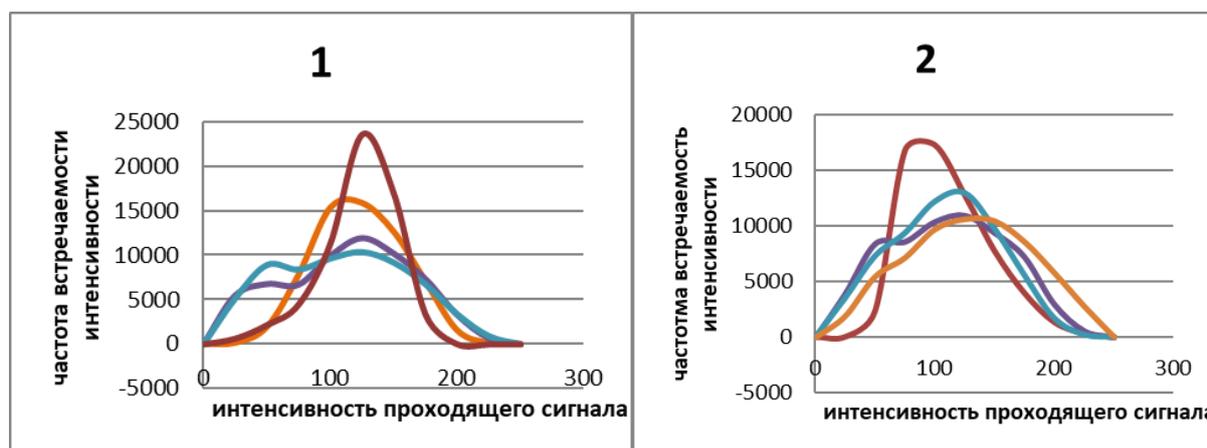


Рисунок 3. Распределение значений интенсивности образца 1 и образца 2. Различными цветами обозначены графики различных областей зуба

Эксперимент показал, что при исследовании распределение интенсивностей зависит от области, которую исследуем. Для образца без отбеливания среднее значение остается в диапазоне 100-150, а для образца с отбеливанием среднее значение интенсивности при переходе от области, прилегающей к эмали к области, прилегающей к пульпе смещается с 50 до

170 ед. и, следует заметить, что возрастает количество точек, в которых интенсивность близка к максимальной (250).

Таким образом светопроницаемость твердых тканей зуба – это параметр, изменяющийся в результате отбеливания, и определение его исходных показателей может иметь важное значение для прогнозирования результатов отбеливания.

Интенсивность прошедшего сигнала зависит от светопроницаемости и рассеяния света в твердых тканях зуба.

Эксперимент показал возможность выявления количественного показателя изменения светопроницаемости твердых тканей зубов до и после процедуры отбеливания, что теоретически, в будущем может дать возможность точно прогнозировать результат изменения светопроницаемости зуба что в свою очередь позволит достичь успехов в прогнозировании результатов процедуры.

#### **Библиографический список**

1. *Бакуменко М.Ю., Иванова И.П., Сергеева И.В., Красавцев П.В.* Отбеливание зубов: ожидание и реальность // *Здравоохранение Дальнего востока.* 2020. №1(83). С. 39-40
2. *Булкина Н.А., Гусева О.Ю., Султанов Р., Ганилова Ю.А.* Светопроницаемость зубов до и после отбеливания // *Эстетическая стоматология.* 2016. №3-4. С. 145-147.
3. *Горюнова М.В.* Клинико-лабораторное обоснование использования малоинвазивных технологий в коррекции стойких дисколоритов зубов: автореферат диссертации кандидата медицинских наук. Уральская государственная медицинская академия, г. Екатеринбург, 2006.
4. *Гусева О.Ю., Ганилова Ю.А., Кропотина А.Ю., Артемова Н.С., Аристова И.С.* Изменение светопроницаемости твердых тканей зуба при отбеливании. // *Вестник медицинского института «Реавиз»: реабилитация, врач и здоровье.* 2018. № 1(31). С. 26-31.
5. *Дунязина Т.М.* Отбеливание зубов в эстетической стоматологии / Т.М. Дунязина // *Институт стоматологии.* 2000. № 2. С. 20-22.
6. *Исаева Т.М.* Еще раз о проблеме цвета в эстетической стоматологии (Текст) / Т.М. Исаева // *Клиническая стоматология.* 2003. №4. С. 22-23.

## ИЗМЕНЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРОВИ У БОЛЬНЫХ С БЫСТРОПРОГРЕССИРУЮЩИМ ПАРОДОНТИТОМ НА ФОНЕ ЛЕЧЕНИЯ ЭМИ ТГЦ-СПЕКТРА НА ЧАСТОТАХ МСИП NO В СОСТАВЕ КОМПЛЕКСНОЙ ТЕРАПИИ

*Н.В. Булкина, А.В. Зеленова, В.М. Моргунова, О.Ю. Гусева*  
ФГБОУ ВО Саратовский ГМУ им. В.И. Разумовского Минздрава РФ  
E-mail: [victoriamorg@yandex.ru](mailto:victoriamorg@yandex.ru)

Быстропрогрессирующий пародонтит (БПП) представляет собой важную проблему современной стоматологии ввиду многофакторной этиологии, сложности патогенеза, кратковременности ремиссии и малой эффективности результатов большинства лечебных мероприятий. В работе приведено обоснование возможности успешного использования электромагнитного излучения крайне высокочастотного и терагерцевого диапазонов на частотах оксида азота в комплексной терапии у лиц с быстропрогрессирующим пародонтитом.

**Ключевые слова:** быстропрогрессирующий пародонтит, терагерцевая терапия, микроциркуляция.

На сегодняшний день из всех воспалительных заболеваний пародонта особое место отводится быстропрогрессирующему пародонтиту (БПП), который представляет серьезную медицинскую, социальную проблему [6,7]. Быстропрогрессирующий пародонтит (БПП) - форма пародонтита, характерная для лиц, вышедших из пубертатного периода, и младше 35 лет [8,9,10]. Характеризуется выраженной потерей альвеолярной кости, в генерализованной форме – вокруг большинства зубов [11]. В данном случае потеря кости может происходить как по вертикальному, так и по горизонтальному типу, а также в их комплексе [12]. Для данного заболевания также характерно несоответствие количества налета и степени деструктивных изменений кости [13].

Электромагнитные волны крайне высокой частоты (КВЧ-волны) уже достаточно давно и успешно применяются в лечении ряда заболеваний [1,2]. КВЧ-терапия, в частности, доказала свою эффективность в комплексном лечении болезней сердечно-сосудистой системы [3]. К числу преимуществ данного способа следует отнести высокую результативность, неинвазивность, небольшое количество побочных реакций и противопоказаний к применению, невысокую стоимость лечения, возможность сочетания с другими методами терапии, отсутствие побочных эффектов и отдалённых неблагоприятных результатов, высокую эффективность в виде монотерапии, хорошую сочетаемость с другими методами лечения [4,5, 15,16]. Эффективность применения КВЧ-терапии в качестве компонента комплексного лечения различных заболеваний обусловлена, прежде всего, ее нормализующим воздействием на систему гемостаза. Так, обнаружен антиангинальный, гипокоагуляционный и гипохолестеринемический эффект данного вида воздействия [3,4,5].

Проведенные ранее исследования показали, что применение КВЧ - терапии на частоте МСИП NO приводит к нормализации показателей микроциркуляции в сосудах слизистой оболочки десны, увеличению интерлейкина и IgA в содержимом пародонтальных карманов пациентов с хроническим генерализованным пародонтитом, а также уменьшение продолжительности болевого синдрома, сроков эпителизации послеоперационной раны и улучшение физико-химических свойств эритроцитов [17,18].

Цель исследования стало повышение эффективности терапии больных быстро прогрессирующим пародонтитом с использованием электромагнитного облучения терагерцевого диапазона на частотах молекулярного спектра излучения и поглощения оксида азота 150,176 – 150,664 ГГц.

В настоящей работе представлены результаты исследования течения БПП у 50 больных обоего пола, которые, были разделены на 2 группы. В первую группу вошли больные, получающие традиционное лечение (ГС). Во вторую составили больные БПП (ГИ), у которых в состав комплексного лечения входила КВЧ терапия терагерцевого диапазона на частотах молекулярного спектра излучения и поглощения оксида азота (150,176 – 150,664 ГГц). Группу контроля составили 40 здоровых добровольцев с интактным пародонтом, не имеющих хронической сомато-висцеральной, психической патологии и заболеваний челюстно-лицевой области. Суммарно, в исследование вошло 90 чел. обоего пола, средний возраст всех обследованных составил 29,5 (26,0; 33,0) лет. Критериями постановки диагноза БПП взрослых у всех обследованных больных служили: возраст пациентов (от 18 до 35 лет), продолжительность заболевания, составляющая от 1 года до 3 лет, генерализованный и прогрессирующий характер деструкции костной ткани, а также данные объективного исследования. Для верификации БПП во всех группах было проведено комплексное клинико-стоматологическое обследование состояния тканей пародонта с использованием общепринятых основных и дополнительных методов исследования стоматологического статуса. Одновременно для определения состояния тканей пародонта и гигиены полости рта применяли индексную оценку состояния тканей пародонта, применение которой в объективизации эффективности проводимых лечебных мероприятий считается доказанной.

Изучение вязкости крови при всех скоростях сдвига у больных БПП после применения в составе комплексного лечения КВЧ-терапии в виде ЭМИ ТГц-спектра на частотах МСИП NO в течение 15 минут амплитудной модуляции (ГИ-1, n=12) и 30 минут при непрерывном режиме генерации импульса (ГИ-2, n=13), при плотности потока ЭМИ мощностью 0,02-0,03 мВт/см<sup>2</sup>, в сравнении с больными БПП до лечения.

Полученные результаты показали, что у больных БПП после воздействия ТГц-излучения на частотах МСИП NO, наблюдается

существенное снижение вязкости крови при скоростях сдвига от 5 до 100 с<sup>-1</sup> до значений здоровых лиц КГ ( $p \leq 0,05$ ), а при скоростях от 150 до 300 с<sup>-1</sup> тенденция к снижению, также до значений здоровых лиц КГ. Причем, следует заметить, что наибольшее снижение вязкости крови у больных БПП после КВЧ-терапии наблюдается в сосудах микроциркуляторного русла, а также сосудах среднего и крупного калибра.

При сравнении вязкости крови у больных БПП после КВЧ-терапии ТГЦ-спектра на частотах МСИП NO в течение 15 минут амплитудной модуляции (ГИ-1, n=12) и 30 минут непрерывного облучения (ГИ-2, n=13), выявлено достоверное снижение вязкости крови при скоростях сдвига от 5 до 100 с<sup>-1</sup>, в сравнении со значениями больных БПП до лечения ( $p \leq 0,05$ ).

Причем, при 15 минутной КВЧ-терапии вязкость крови снижается несколько ниже значений здоровых лиц КГ. Каких-либо достоверных различий снижения вязкости крови, в зависимости от времени КВЧ-терапии (15 или 30 минут), не выявлено, поэтому 15 минутный режим может считаться оптимальным для восстановления вязкости крови в сосудах микроциркуляторного русла.

При изучении функциональных свойств эритроцитов у больных БПП после КВЧ-терапии ТГЦ-спектра на частотах МСИП NO в течение 15 минут амплитудной модуляции (ГИ-1, n=12) и 30 минут непрерывного облучения (ГИ-2, n=13) выявлено, что после КВЧ-терапии увеличивается способность эритроцитов к деформации (ИДЭ) и снижается способность эритроцитов к агрегации (ИАЭ,  $p \leq 0,04$ ) до показателей здоровых лиц КГ (таблица 1).

*Таблица 1. Сравнительная характеристика показателей функциональных свойств эритроцитов у больных БПП группы исследования после 15 и 30 минутной КВЧ терапии ТГЦ спектра на частотах МСИП NO, в сравнении с показателями больных БПП до лечения и здоровыми лицами контрольной группы*

Индекс	Здоровые лица КГ (n=40)	Больные БПП до лечения ГИ (n=25)	Больные БПП после КВЧ-терапии	
			ГИ-1 (n=12) КВЧ-15 мин	ГИ-2 (n=13) КВЧ-30 мин
ИДЭ (усл. ед)	1,08 (1,06; 1,09)	1,05 (1,03; 1,06) p = 0,065 при сравнении с КГ	1,07 (1,05; 1,08) p = 0,08 при сравнении с ГИ до лечения	1,07 (1,06; 1,08) p = 0,09 при сравнении с ГИ до лечения
ИАЭ (усл. ед)	1,42 (1,40; 1,44)	1,52 (1,49; 1,54) p=0,02 при сравнении с КГ	1,44 (1,42; 1,45) p = 0,04 при сравнении с ГИ до лечения	1,43 (1,41; 1,44) p = 0,035 при сравнении с ГИ до лечения

*Примечания: ИДЭ – индекс деформируемости эритроцитов (усл. ед)*

*ИАЭ – индекс агрегации эритроцитов (усл. ед)*

В то же время данные изменения функциональных свойств эритроцитов наблюдаются уже при 15 минутной амплитудной модуляции. Причем при 30 минутной КВЧ-терапии существенных улучшений ИДЭ и ИАЭ, в сравнении с 15 минутной модуляцией, не наблюдается (таблица 1).

Таким образом, принимая во внимание наличие снижения содержания оксида азота в тканях пародонта при развитии воспаления, нарушение иммунного гомеостаза и микроциркуляции в полости рта, представляется актуальной возможность коррекции этих нарушений ЭМИ на частоте молекулярного спектра поглощения и излучения оксида азота – МСИП NO, для восстановления функциональных свойств эритроцитов у больных БПП, достаточно КВЧ-терапии ТГЦ-спектра на частотах МСИП NO в течение 15 минут амплитудной модуляции.

### Библиографический список

1. *Киричук, В.Ф.* Влияние электромагнитных волн терагерцевого диапазона на частоте оксида азота на изменения гемореологии при остром стрессе / В.Ф. Киричук, Я.А. Томина, О.Н. Антипова. - Проблемы физической биомедицины: материалы межрегиональной научной конференции с международным участием. –Саратов: Изд-во СарГМУ, 2011. – С. 289–296.
2. *Funk, R.H.W.* Electromagnetic effects – From cell biology to medicine / R.H.W. Funk, T. Monsees, N. Özkucur // Progress in Histochemistry and Cytochemistry. – 2009. – V. 43. – № 4. – P. 177 – 264.
3. *Паршина, С.С.* Первые результаты клинического применения электромагнитного излучения терагерцевого диапазона на частотах молекулярного спектра оксида азота в кардиологии / С.С. Паршина, В.Ф. Киричук, Т.В. Головачёва. – Современные аспекты диагностики, лечения и профилактики в кардиологии: сбор. науч. трудов. Саратов, 2005. – С. 109–111.
4. *Паршина, С.С.* Адаптационные механизмы системы гемостаза и реологии крови у больных с различными формами стенокардии: автореф. дис.... докт. мед. наук / С.С. Паршина. – Саратов, 2006. – 48с.
5. *Киричук, В.Ф.* КВЧ-терапия / В.Ф. Киричук, Т.В. Головачева, А.Г. Чиж // Саратов: Изд-во СГМУ, 1999. – 360 с.
6. Булкина Н.В. Современные представления об этиологии и патогенезе быстро прогрессирующего пародонтита / Н.В. Булкина, Е.В. Понукалин, И.Н. Карпенко // Архив патологии. – 2009. - №1. – С. 57-60.
7. Грудянов А.И. Методы диагностики воспалительных заболеваний пародонта: рук. для врачей / А.И. Грудянов, А.О. Зорина. – М.: Мед. информ. агенство, 2009. – 110 с.
8. Данилевский, Н.Ф. Заболевания пародонта / Н.Ф. Данилевский, А.В. Борисенко. – К.: Здоров'я, 2000. – 461 с.
9. Дмитриева, Л.А. Современные аспекты клинической пародонтологии / Л.А. Дмитриева. М.: МЕДпресс, 2001. – 128 с.
10. Машенко, И.С. Заболевания пародонта / И.С. Машенко – Днепрпетровск, 2003. – 271 с.
11. Барер, Г.М. Болезни пародонта / под ред. засл. деятеля науки РФ, проф. Г.М. Барера. – М. : ГЭОТАР-Медиа», 2008. – 4.1. – 454 с.
12. Безрукова, И.В. Быстро прогрессирующий пародонтит. Этиология. Клиника. Лечение: автореф. дис. докт. мед. наук / И.В. Безрукова. М., 2001. – 32. с.
13. Булкина, Н.В. Пародонтология: Методические рекомендации к практическим занятиям со студентами / Сост.: Н.В. Булкина, В.В. Масумова, Л.Б. Белугина. Саратов. Издательство Саратовского медицинского университета, 2003. – 40 с.
14. Булкина, Н.В. Нарушение антитромбогенных свойств сосудистой стенки как фактор патогенеза быстро прогрессирующего пародонтита / Н.В. Булкина, Е.В. Понукалина, И.Н. Карпенко // Пародонтология. – 2007. – №1. – С. 7–9.

15. Девятков, Н.Д. Миллиметровые волны и их роль в процессах жизнедеятельности / Н.Д. Девятков, Н.Б. Голант, О.В. Бецкий. – М.: Радио и связь. – 1991. – 168 с.
16. Бецкий, О.В. История становления КВЧ-терапии и десятилетние итоги работы Медицинской ассоциации КВЧ / О.В. Бецкий, Н.Н. Лебедева // Миллиметровые волны в биологии и медицине. – 2002. – №4. – С. 10-17.
17. Костин, А.Ю. Реология крови и физико-химические свойства эритроцитов у практически здоровых лиц и больных хроническим генерализованным пародонтитом до и после КВЧ-терапии: автореф. дис. ... канд. мед. наук / А.Ю. Костин. – Саратов, 2005. – 126 с.
18. Фиохина, О.А. Применение КВЧ-излучения на частоте молекулярного спектра поглощения оксида азота в комплексном лечении пародонтита: автореф. дис ... канд. мед. наук: 14.00.21 / О.А. Фиохина. – Волгоград, 2006. – 23 с.

## **ФОТОМОДИФИКАЦИЯ ЗОЛОТЫХ И КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НАНОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРА ПРИ ДВИЖЕНИИ В КАПИЛЛЯРЕ**

*В.А. Ханадеев<sup>1,2</sup>, А.В. Симоненко<sup>1,3</sup>, О.В. Гришин<sup>3</sup>, Н.Г. Хлебцов<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов Российской академии наук,  
Саратов, Россия;

<sup>2</sup>Саратовский государственный аграрный университет имени Н. И. Вавилова, Саратов,  
Россия;

<sup>3</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
имени Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия  
E-mail: khanadeev\_v@ibppm.ru

Распространение биомедицинских приложений золотых наночастиц с использованием лазерного излучения приводит к необходимости тщательного изучения их взаимодействия. В данной работе применяя метод спектроскопии экстинкции и электронной микроскопии было проведено исследование фотомодификации под действием наносекундного импульсного лазера при движении в капилляре коллоидов четырёх видов золотых наночастиц, и трёх видов композитных наночастиц на основе золотых наностержней с различной толщиной оболочки из диоксида кремния.

**Ключевые слова:** фотомодификация, наностержни, нанозвёзды, нанооболочки, диоксид кремния, импульсный лазер

Золотые наночастицы нашли широкое применение в биомедицине благодаря своим уникальным оптическим свойствам, основным из которых является наличие локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ПР) [1, 2]. Изменяя форму, размер и структуру наночастиц, можно настраивать спектральное положение и амплитуду ПР. При воздействии лазерного излучения на золотую наночастицу может произойти фотомодификация – изменение формы и размера наночастицы, следовательно, изменение её оптических свойств, что сделает дальнейшее применение наночастиц неэффективным. Fales с соавторами в своей работе [3] исследовали фотомодификацию золотых наностержней и её влияние на фотоакустическую визуализацию. Они продемонстрировали, что даже при безопасных для биологических тканей параметрах лазерного облучения возможна

фотомодификация наночастиц, приводящая к кардинальным изменениям их свойств.

Целью нашей работы было исследовать фотомодификацию четырех видов золотых наночастиц – наностержней, нанозвезд, нанозвезд с тонкими шипами и наноболочек на ядрах из диоксида кремния. Для сравнения порогов фотомодификации мы использовали наностержни и нанозвезды с тонкими шипами с ПР, настроенным на длину волны лазера 900 нм, а также нанозвезды и наноболочки с высокой интенсивностью ПР на длине волны 900 нм. Для имитации движения наночастиц в кровотоке использовалась установка, собранная на основе перестраиваемого импульсного лазера Ekspla NT 200, позволяющая облучать коллоид наночастиц при движении по капилляру. Были выбраны следующие параметры лазерного излучения: длина волны 900 нм, совпадающая с максимумом ПР золотых наночастиц, частота импульсов 1 кГц, длительность импульса - 2.5 нс.

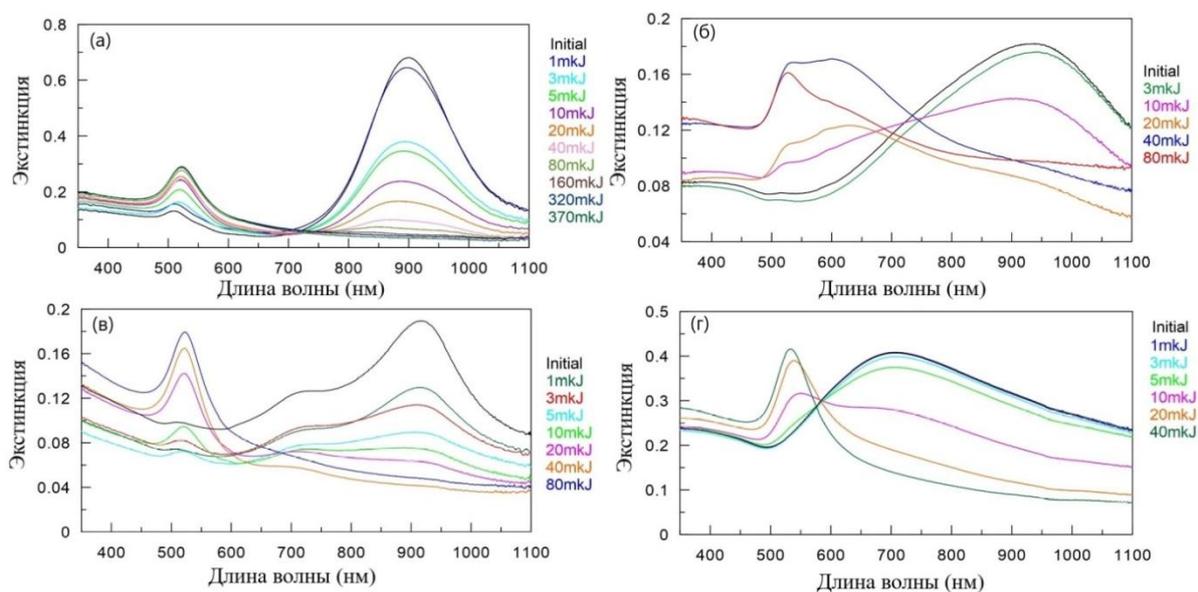


Рисунок 1. Спектры экстинкции золотых наночастиц: наностержней (а), нанозвезд (б), нанозвезд с тонкими шипами (в) и наноболочек (г) до (черные кривые) и после воздействия импульсного лазерного излучения при движении в капилляре.

На рис. 1 представлены спектры наностержней, нанозвезд, нанозвезд с тонкими шипами и наноболочек на ядрах из диоксида кремния до и после облучения импульсным лазером с длиной волны 900 нм. Для наностержней заметная фотомодификация начинается при энергии импульса 3 мкДж, основные изменения происходят в диапазоне 3-80 мкДж и все стержни фотомодифицируются при энергии 160 мкДж (рис. 1а). При этом пик продольного плазмонного резонанса на 900 нм постепенно снижается и становится шире, а пик ПР около 530 нм постепенно растёт (данный плазмонный резонанс характерен для наносфер). Для золотых нанозвезд пороговым значением фотомодификации является 10 мкДж, когда интенсивность основного пика заметно снижается. В диапазоне 10-80 мкДж наблюдается не только снижение основного пика, но и рост плеча на 630 нм

(рис. 1б). Это можно интерпретировать как увеличение числа крупных золотых частиц с небольшими выступами на поверхности. При энергии 80 мкДж все звёзды превращаются в золотые сферы. В случае нанозвёзд с тонкими шипами заметные изменения спектра начинаются при энергии 3 мкДж (рис.1в). В диапазоне от 3 до 40 мкДж происходит снижение высоты основного пика ПР и рост пика на 530 нм. Полная трансформация в наносферы наблюдается при энергии 80 мкДж. Для золотых оболочек на ядрах из диоксида кремния старт фотомодификации начинается при энергии 5 мкДж (рис. 1г). При этом происходит синхронное снижение основного широкого пика ПР и рост пика около 540 нм. Изменения формы частиц происходят в диапазоне 5-20 мкДж, а уже при энергии импульса 40 мкДж наблюдается полное исчезновение исходного ПР и остаётся только пик вблизи 530 нм, характерный для сфер.

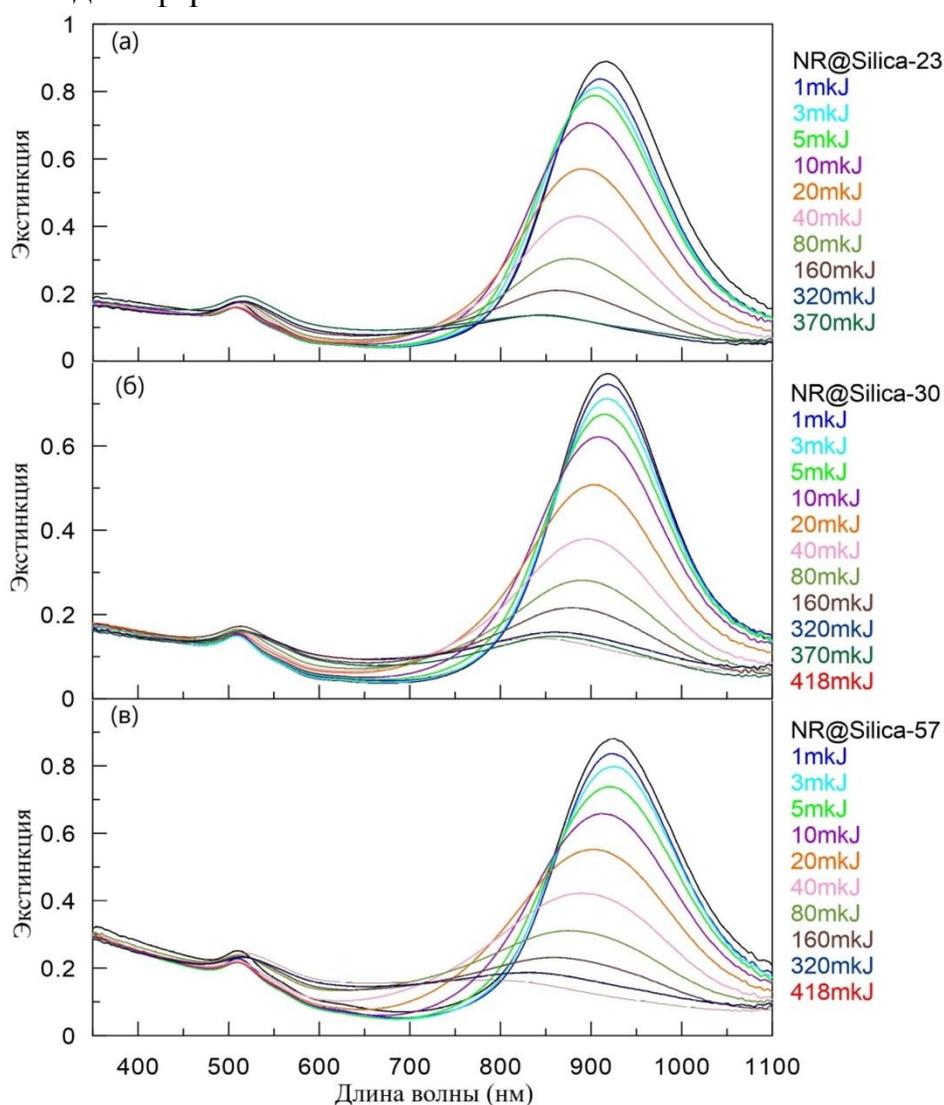


Рисунок 2. Спектры экстинкции золотых наностержней с оболочкой из диоксида кремния толщиной  $23.8 \pm 2.92$  (а),  $30.48 \pm 3.03$  (б) и  $57.26 \pm 6.4$  (в) до (черные кривые) и после фотомодификации под действием импульсного лазера с энергией импульса от 1 до 418 мкДж при движении по капилляру.

Нанесение на поверхность золотых наночастиц оболочки из диоксида кремния обычно выполняется, во-первых, для сохранения плазмонных свойств наночастиц и предотвращения агрегации. Во-вторых, такие нанокомпозиты используются в качестве контейнера для доставки лекарств. Мы исследовали влияние толщины оболочки из диоксида кремния на фотостабильность золотых наностержней. На рис. 2 представлены спектры экстинкции золотых наностержней, покрытых оболочкой из диоксида кремния со средней толщиной  $23.8 \pm 2.92$ ,  $30.48 \pm 3.03$  и  $57.26 \pm 6.4$  нм до и после фотомодификации под действием импульсного лазера при движении в капилляре.

Анализируя полученные спектры, можно заметить, что для всех трёх толщин оболочек от 23.8 до 57 нм начало фотомодификации наблюдается при энергии 10 мкДж. При этом основной пик снижается и немного смещается в сторону более коротких длин волн. Вероятно, часть стержней сокращает свою длину или лишается оболочки, либо оба этих процесса происходят одновременно. При увеличении энергии от 20 до 320 мкДж продолжается постепенное снижение и смещение пика до 850 нм для оболочек 23.8 и 30 нм. При толщине оболочки 57 нм наблюдается смещение пика до 800 нм и увеличение ширины основного пика ПР.

По сравнению с исходными золотыми наностержнями без оболочки наблюдается важное различие. Для стержней с оболочкой даже при высоких значениях энергии, когда фотомодифицируются все частицы, интенсивность ПР вблизи 520 нм не повышается. Этот факт можно объяснить тем, что оболочка плотно покрывает золотой стержень и препятствует его плавной трансформации в крупную золотую сферу. В итоге оболочка разрушается только в тот момент, когда стержень резко трансформируется в золотые частицы малого размера, которые не вносят большого вклада в ПР на 520 нм. С увеличением толщины оболочки наблюдаются различия только в пороге полной фотомодификации, который растёт с 320 до 418 мкДж.

Подводя итоги, при повышении энергии импульса высота основного пика исходных золотых наночастиц снижается до полного исчезновения, а высота пика в области 530 нм, соответствующего золотым наносферам, постепенно растёт. Наиболее чувствительными к фотомодификация являются золотые наностержни и нанозвёзды с тонкими шипами, у которых начало фотомодификации наблюдается уже при энергии импульса 3 мкДж, тогда как у нанооболочек и нанозвёзд оно наблюдается при 5 и 10 мкДж, соответственно. Оболочка из диоксида кремния увеличивает фотостабильность золотых наностержней, так как увеличивается порог начала фотомодификации с 3 до 10 мкДж, основные изменения происходят теперь в диапазоне 10-320 мкДж (для исходных стержней 3-80 мкДж), и порог полной фотомодификации частиц поднимается с 160 до 320 мкДж. При этом толщина оболочки не влияет на начальные изменения, а лишь

изменяет порог полной фотомодификации частиц, который растёт с 320 до 418 мкДж при увеличении толщины оболочки из диоксида кремния.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-00120. Разработка установки (Гришин О.В.) была поддержана правительством Российской Федерации (проект № 14.Z50.31.0044).*

#### Библиографический список

1. Du B., Gu X., Zhao W., Liu Z., Li D., Wang E., Wang J. Hybrid of gold nanostar and indocyanine green for targeted imaging-guided diagnosis and phototherapy using low-density laser irradiation // J. Mater. Chem. B. – 2016. – V. 4. – P. 5842–5849.
2. Wang S., Huang P., Nie L., Xing R., Liu D., Wang Z., Lin J., Chen S., Niu G., Lu G., Chen X.S. Ingle continuous wave laser induced photodynamic/ plasmonic photothermal therapy using photosensitizer- functionalized gold nanostars // Adv. Mater. – 2013. – V. 25. – P. 3055–3061.
3. Fales A. M., Vogt W.C., Wear K.A., Ilev I.K., Pfefer T.J. Pulsed laser damage of gold nanorods in turbid media and its impact on multi-spectral photoacoustic imaging // // Biomed.Opt. Express. – 2019. – V. 10, N. 4. – P. 1919–1934.

## ИК СПЕКТРЫ И СТРУКТУРА ХРОМЕНОПИРИДИНКАРБОНИТРИЛЬНЫХ СИСТЕМ

*И.В.Ивлиева (Перетоккина), А.А. Мещерякова, Л.М. Бабков, В.В.Сорокин*  
Саратовский государственный университет  
им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: Irine09@yandex.ru

Методом функционала плотности B3LYP/6-31G(d) построена структурно-динамические модели соединений 5-амино-2,4-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,4,10b-тетрагидро-1H-хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрила и 4-амино-2,5-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,5,10b-тетрагидро-1хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрила.

Минимизирована энергия, рассчитаны структуры, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и распределение интенсивности в ИК спектре молекулы. Проведена интерпретация ИК смеси amino-имино таутомеров, измеренного в диапазоне 400—3700 см<sup>-1</sup> при комнатной температуре.

**Ключевые слова:** 5-амино-2,4-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,4,10b-тетрагидро-1H-хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрил, 4-амино-2,5-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,5,10b-тетрагидро-1хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрил, хроменопиридинкарбонитрильные системы, геометрическая структура, ИК спектр

В настоящем кратком сообщении представлены результаты исследований строения и колебательных ИК спектры ранее неизвестных хроменопиридинкарбонитрильных систем: 5-амино-2,4-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,4,10b-тетрагидро-1H-хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрила (I) и 4-амино-2,5-диимино-3-(пиридин-2-ил)-2,3,5,10b-

тетрагидро-1-хромено[3,4-с]пиридин-1-карбонитрила (II). Эти системы реализуются в виде смеси amino-имино таутомеров, что ранее было доказано с помощью одномерной (ЯМР  $^1\text{H}$ ) и двумерной (HSQC  $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  и HMBC  $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ ) спектроскопии [1, 2].

Хромено [3,4-с] пиридинкарбонитрильные системы в последнее время активно изучаются, что связано с тем, что хроменопиридиновый фрагмент обуславливает противомикробную, противоопухолевую, антибактериальную, противовоспалительную и другие виды биологической активности [1–5].

В работах [6–8] авторы описывают многостадийный синтез ряда производных хромено [3,4-с] пиридина. Нами предложен двухстадийный синтез подобных систем отличающейся простотой и экологичностью [3, 7]. При этом полученные продукты реализовывались в виде смеси таутомеров в соотношении 49,56 : 50,44%. Для становления их структуры чаще всего используются такие методы, как ЯМР спектроскопия, РСТА и др. Однако установить строение подобных поли(гетеро)ароматических систем весьма затруднительно. В данной ситуации эту проблему можно разрешить на основе методов квантовой химии и спектроскопии. Высокий уровень развития современных методов построения структурно-динамических моделей позволяет установить строение молекулы и рассчитать ее колебательный спектр.

Целью нашей работы было построение структурно-динамических моделей соединений (I) и (II): установление структуры и получение ИК спектров - и интерпретация на этой основе ИК спектра смеси таутомеров.

Было проведено моделирование геометрической структуры и ИК спектров соединений. В моделировании использован метод B3LYP/6-31g(d) [9,10], реализованный в программном пакете GAUSSIAN'03 [11]. ИК спектры рассчитаны в гармоническом приближении.

На рис. 1 приведено строение соединений (I) и (II). Таутомеры (I) и

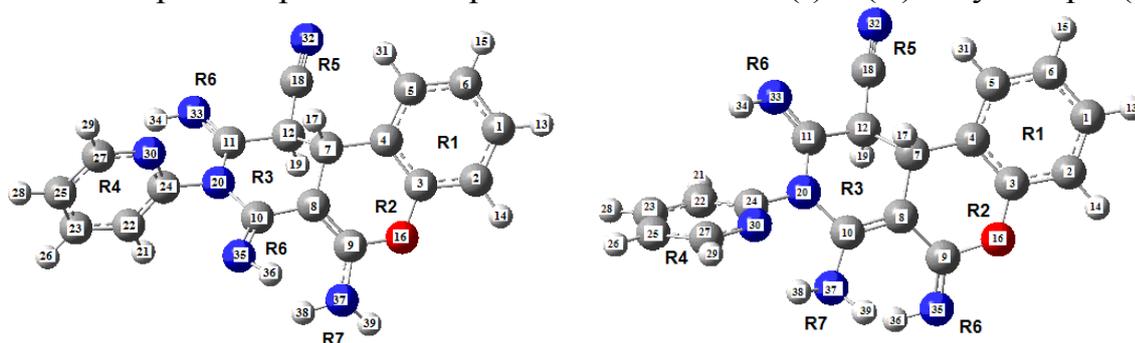


Рисунок 1. Строение соединений (I) и (II)

(II) отличаются друг от друга расположением групп  $=\text{NH}$  и  $-\text{NH}_2$ . В таблице 1 приведены вычисленные геометрические параметры соединений (I) и (II). На основе их анализе установлено, что таутомерный переход оказывает значительное влияние на геометрию всего соединения.

Меняется угол поворота кольца R4 относительно остальной части молекулы, меняются длины некоторых связей.

Таблица 1. Геометрические параметры соединений (I) и (II)

СВЯЗЬ	Длина связи, А	
	(I)	(II)
C <sub>12</sub> -C <sub>7</sub>	1,568	1,570
C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	1,536	1,530
C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub>	1,515	1,513
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	1,510	1,519
C <sub>12</sub> -C <sub>18</sub>	1,468	1,465
<b>C<sub>8</sub>-C<sub>10</sub></b>	<b>1,463</b>	<b>1,371</b>
C <sub>20</sub> -N <sub>24</sub>	1,445	1,434
C <sub>10</sub> -N <sub>20</sub>	1,416	1,415
<b>C<sub>11</sub>-N<sub>20</sub></b>	<b>1,407</b>	<b>1,424</b>
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1,402	1,403
C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	1,397	1,398
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1,396	1,398
C <sub>24</sub> -C <sub>22</sub>	1,396	1,402
C <sub>23</sub> -C <sub>25</sub>	1,395	1,396
C <sub>25</sub> -C <sub>27</sub>	1,395	1,393
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1,393	1,398
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	1,393	1,392
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1,392	1,389
C <sub>22</sub> -C <sub>23</sub>	1,392	1,392
C <sub>3</sub> -O <sub>16</sub>	1,388	1,372
<b>C<sub>9</sub>-N<sub>37</sub></b>	<b>1,377</b>	-
<b>C<sub>10</sub>-N<sub>37</sub></b>	-	<b>1,387</b>
<b>C<sub>8</sub>-C<sub>9</sub></b>	<b>1,362</b>	<b>1,467</b>
<b>C<sub>9</sub>-O<sub>16</sub></b>	<b>1,359</b>	<b>1,377</b>
C <sub>27</sub> -N <sub>30</sub>	1,339	1,341
C <sub>24</sub> -N <sub>30</sub>	1,331	1,336
<b>C<sub>10</sub>=N<sub>35</sub></b>	<b>1,290</b>	-
<b>C<sub>10</sub>=N<sub>35</sub></b>	-	<b>1,281</b>
C <sub>11</sub> =N <sub>33</sub>	1,274	1,271
C <sub>18</sub> ≡N <sub>32</sub>	1,160	1,160
N <sub>33</sub> -H <sub>34</sub>	1,022	1,021
N <sub>35</sub> -H <sub>36</sub>	1,021	1,018
N <sub>37</sub> -H <sub>38</sub>	1,014	1,013
N <sub>37</sub> -H <sub>39</sub>	1,013	1,016
C <sub>7</sub> -H <sub>17</sub>	1,099	1,101
C <sub>12</sub> -H <sub>19</sub>	1,099	1,099
C <sub>27</sub> -H <sub>29</sub>	1,088	1,088
C <sub>1</sub> -H <sub>13</sub>	1,086	1,087
C <sub>6</sub> -H <sub>15</sub>	1,086	1,086
C <sub>23</sub> -H <sub>26</sub>	1,086	1,086
C <sub>25</sub> -H <sub>27</sub>	1,086	1,085
C <sub>2</sub> -H <sub>14</sub>	1,085	1,085

C <sub>5</sub> -H <sub>31</sub>	1,085	1,084
C <sub>22</sub> -H <sub>21</sub>	1,084	1,085
Угол		
C <sub>12</sub> -C <sub>18</sub> ≡C <sub>32</sub>	175	176
C <sub>8</sub> -C <sub>10</sub> =N <sub>35</sub>	128	-
C <sub>10</sub> -N <sub>20</sub> -C <sub>11</sub>	126	121
C <sub>25</sub> -C <sub>27</sub> -N <sub>30</sub>	124	124
C <sub>8</sub> -C <sub>10</sub> -N <sub>37</sub>	-	124
N <sub>30</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>22</sub>	124	123
<b>O<sub>16</sub>-C<sub>9</sub>-C<sub>8</sub></b>	<b>124</b>	<b>117</b>
C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub> -O <sub>16</sub>	122	124
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	122	121
C <sub>9</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	121	122
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	121	121
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub>	120	120
C <sub>7</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>3</sub>	120	120
C <sub>6</sub> -C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	120	120
N <sub>20</sub> -C <sub>24</sub> -C <sub>22</sub>	120	120
C <sub>22</sub> -C <sub>23</sub> -C <sub>25</sub>	119	119
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	119	120
C <sub>3</sub> -O <sub>16</sub> -C <sub>9</sub>	119	122
C <sub>12</sub> -C <sub>11</sub> =N <sub>33</sub>	118	119
C <sub>23</sub> -C <sub>25</sub> -C <sub>27</sub>	118	118
C <sub>24</sub> -C <sub>22</sub> -C <sub>23</sub>	118	118
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	117	118
C <sub>27</sub> -N <sub>30</sub> -C <sub>24</sub>	117	118
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>10</sub>	117	117
C <sub>7</sub> -C <sub>12</sub> -C <sub>18</sub>	117	117
C <sub>10</sub> -N <sub>20</sub> -C <sub>24</sub>	117	120
N <sub>20</sub> -C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub>	116	114
C <sub>8</sub> -C <sub>10</sub> -N <sub>20</sub>	115	120
C <sub>9</sub> -N <sub>37</sub> -H <sub>38</sub>	115	-
H <sub>38</sub> -N <sub>37</sub> -H <sub>39</sub>	115	110
C <sub>9</sub> -N <sub>37</sub> -H <sub>39</sub>	114	-
C <sub>10</sub> -N <sub>37</sub> -H <sub>38</sub>	-	114
O <sub>16</sub> -C <sub>9</sub> =N <sub>35</sub>	-	113
C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>4</sub>	112	113
C <sub>11</sub> =N <sub>33</sub> -H <sub>34</sub>	112	113
C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	112	122
C <sub>10</sub> -N <sub>37</sub> -H <sub>39</sub>	-	112
C <sub>9</sub> =N <sub>35</sub> -H <sub>36</sub>	-	111
<b>C<sub>11</sub>-C<sub>12</sub>-C<sub>7</sub></b>	<b>110</b>	<b>106</b>
C <sub>10</sub> =N <sub>35</sub> -H <sub>36</sub>	110	-
O <sub>16</sub> -C <sub>9</sub> -N <sub>37</sub>	109	-
C <sub>12</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	106	104

К сожалению из-за громоздкости результатов расчета ИК спектров соединений (I) и (II) и ограничений объема статьи, мы остановимся на

описании лишь наиболее существенных моментов, касающихся ИК спектров и их интерпретации. Колебания в соединениях (I) и (II) сильно делокализованы. Спектрально-структурные признаки этих соединений, как оказалось, выделить трудно из-за их сложности. Тем не менее, в ходе анализа ИК спектров были идентифицированы полосы, наиболее характерные для того или иного таутомера. Такие полосы есть во всех областях спектра. В частности, интенсивные колебания в области 2295-2210 см<sup>-1</sup> и 1580-1640 см<sup>-1</sup>, относящиеся к колебаниям групп -C≡N, =NH, -NH<sub>2</sub>, являются спектральными признаками таутомеров.

Наличие колебаний с частотами 3439 см<sup>-1</sup> и 3483 см<sup>-1</sup> в измеренном ИК спектре обусловлены таутомерным переходом. Колебание с частотой 3483 см<sup>-1</sup> соответствует валентному колебанию q(NH) группы NH<sub>2</sub> с частотой 3466 см<sup>-1</sup> соединения (I), а колебание с частотой 3439 см<sup>-1</sup> соответствует колебанию q(NH) группы NH<sub>2</sub> с частотой 3439 см<sup>-1</sup> соединения (II).

Колебание с частотой 1346 см<sup>-1</sup> измеренного спектра соответствует колебанию с частотой 1353 см<sup>-1</sup> соединения (II) - это неплоское деформационное колебание фрагмента, непосредственно прилегающего к группам =NH и -NH<sub>2</sub>.

Колебание с частотой 1234 см<sup>-1</sup> измеренного спектра соответствует колебанию с частотой 1253 см<sup>-1</sup> соединения (I) - это неплоское колебание кольца R<sub>4</sub>, угол поворота которого изменяется при таутомерном переходе.

Колебание 1037 см<sup>-1</sup> измеренного спектра соответствует колебанию с частотой 1054 см<sup>-1</sup> соединения (I) - это неплоское деформационное колебание связи C-O.

Основной полученный результат проведенных исследований таков: установлено строение таутомеров (I) и (II), подтверждено наличие этих соединений в смеси таутомеров и дана интерпретация измеренного ИК спектра. На примере поли(гетеро)ароматических систем с хроменопиридинкарбонитрильным фрагментом показано, что использование теоретических методов определения структуры и моделирование колебательных спектров вполне оправдано при недостаточных экспериментальных данных или их полном отсутствии.

#### Библиографический список

1. *Núñez-Vergara L.J., Squella J.A., Navarrete-Encina P.A., Vicente-García E., Preciado S., Lavilla R.*, Chromenopyridines: promising scaffolds for medicinal and biological chemistry, *Curr. Med. Chem.* 2011, V.18. P. 4761–4785.
2. *Fouad S. A. et al.* Synthesis of Chromen-2-one, Pyrano [3, 4-c] chromene and Pyridino [3, 4-c] chromene Derivatives as Potent Antimicrobial Agents // *Croatica Chemica Acta.* 2018, V. 91, №. 1. P. 99-108.
3. *Oliveira-Pinto S.* Unravelling the anticancer potential of functionalized chromeno[2, 3-b] pyridines for breast cancer treatment // *Bioorganic Chemistry.* 2020, V. 100. P.103942
4. *Mohareb R. M., Megally Abdo N. Y., Gamaan M. S.* Uses of cyclohexan- 1, 3- dione for the synthesis of tetrahydrochromeno [3, 4- c] chromen derivatives with anti- tumor

- activities//Journal of Heterocyclic Chemistry. 2020, V. 57, №. 6. P. 2512-2527.
5. *Chen, H., Huang, M., Li, X., Liu, L., Chen, B., Wang, J., Lin, Y.* Phochrodines A–D, first naturally occurring new chromenopyridines from mangrove entophytic fungus *Phomopsis* sp. 33// *Fitoterapia*, 2018, V.124. P.103–107.
  6. *Helal M. H. et al.* One-step synthesis of chromene-3-carboxamide, bischromene,
  7. chromeno [3, 4-c] pyridine and bischromeno [3, 4-c] pyridine derivatives for antimicrobial evaluation // *Journal of Chemical Research*. 2010, V. 34, №. 8. P. 465-469.
  8. *Ammar Y. A., El-Gaby M. S. A., Salem M. A.* Cyanoacetanilides intermediates in heterocyclic synthesis. Part 6: Preparation of some hitherto unknown 2-oxopyridine, bipyridine, isoquinoline and chromeno [3, 4-c] pyridine containing sulfonamide moiety // *Arabian Journal of Chemistry*. 2014, V. 7, №. 5. P. 615-622.
  9. *Elagamey A. G.* An efficient synthesis and antibacterial activity of pyrido [2, 3-d]pyrimidine, chromeno [3, 4- c] pyridine, pyridine, pyrimido [2, 3- c] pyridazine, enediamines, and pyridazine derivatives // *Journal of Heterocyclic Chemistry*. 2016, V. 53, №. 6. P. 1801-1806.
  10. *Кон В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности// *УФН*. 2002, Т.172, №3. С. 336–348.
  11. *Попл Дж. А.* Квантово – химические модели// *УФН*. 2002, Т.172, №3. С. 349–356.
  12. *Frisch J., Trucks G.W., Schlegel H.B.* Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.

## РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЬБУМИНА НА ВЫДЕЛЕННЫХ ДЛИНАХ ВОЛН ПРИ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Е.Н. Лазарева<sup>1,2</sup>, И.Ю. Янина<sup>1,2</sup>, Ю.В. Кистенев<sup>2,3</sup>, В.В. Тучин<sup>1,2,4</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

<sup>3</sup>Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия

<sup>4</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов, Россия

В данной работе был измерен показатель преломления растворов альбумина для отдельных длин волн видимого и ближнего инфракрасного диапазона при комнатной температуре (+24°C), физиологической температуре (+37°C) и при высокой температуре (+50°C), близкой к температуре свертываемости белка. По полученным данным был проведен анализ зависимости показателя преломления от длины волны, концентрации и температуры, вычислены значения удельного и температурного инкрементов показателя, а также коэффициенты для представления дисперсионной зависимости по формуле Зельмейера.

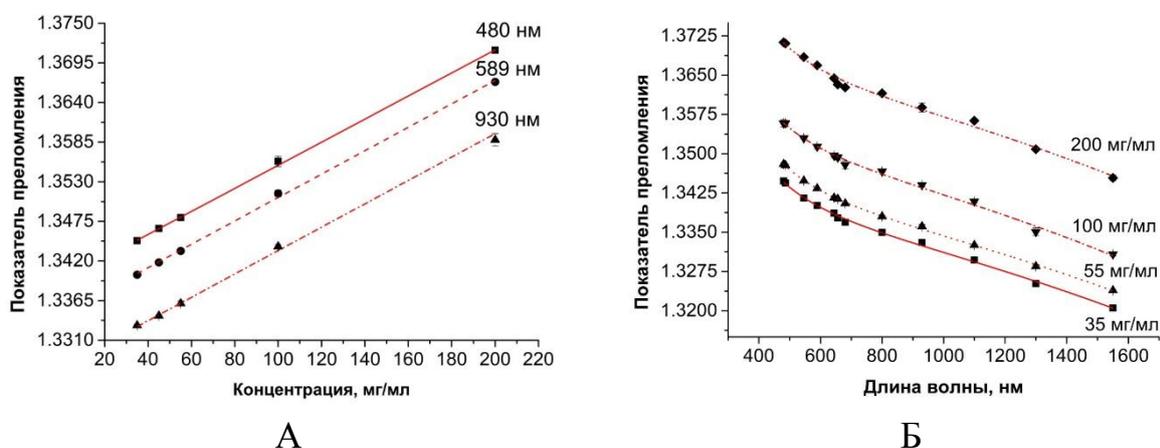
**Ключевые слова:** показатель преломления, альбумин, дисперсия, температурный инкремент, удельный инкремент

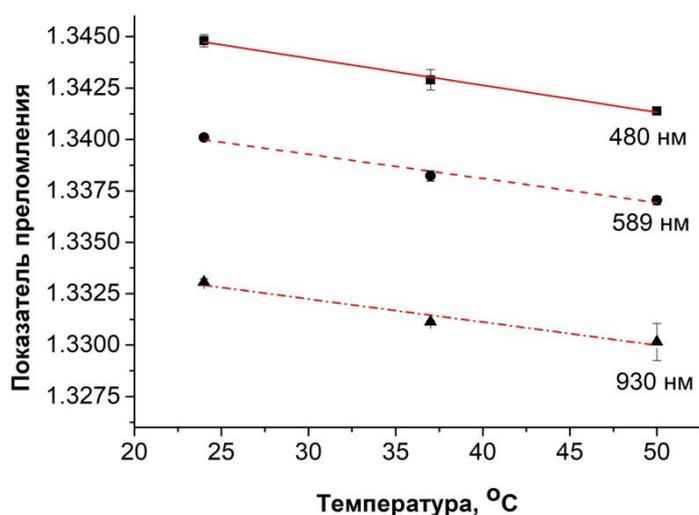
В настоящее время разработка оптических неинвазивных методов диагностики вирусных инфекций является актуальной проблемой биофотоники [1,2]. К физико-химическим, в частности оптическим, свойствам белков вирусов, проявляется особый интерес, так как именно белковая

часть отвечает за взаимодействие молекул вирусов с различными поверхностями. В строении коронавируса выделяют 4 основных структурных белка, обладающих антигенными свойствами, такие как нуклеокапсидный белок N, связанный с основной РНК, поверхностный рецепторный белок S, связывающийся с рецепторами на мембранах атакуемых клеток, мембранные белки М и Е, находящиеся под липидной оболочкой и покрывающие нуклеокапсид вируса [2]. Хорошо известно, что структура молекул альбумина схожа со структурой S-белка, поэтому он может рассматриваться в качестве эталонного «модельного» белка. Показатель преломления является одной из важнейших оптических характеристик, которые используются в разнообразных диагностических методах и оптических биосенсорах [3]. Следует отметить, что в литературе можно найти много информации по значениям показателя преломления прозрачных сред технического происхождения при различных внешних условиях и для различных длин волн, однако абсолютно недостаточно данных для биологических сред, тканей и жидкостей.

В данной работе показатель преломления растворов альбумина с концентрациями 35, 45, 55, 100 и 200 мг/мл был измерен для длин волн 480, 486, 546, 589, 644, 656, 680, 800, 930, 1100, 1300 и 1550 нм при комнатной температуре (+24°C), физиологической температуре (+37°C) и при высокой температуре (+50°C), близкой к температуре свертываемости белка. Измерения выполнялись на многоволновом рефрактометре Аббе DR-M2/1550 (Atago, Япония) с набором интерференционных фильтров. Постоянная температура образца во время измерений поддерживалась циркуляционным термостатом. Для измерений лиофилизированный порошок человеческого альбумина (Sigma Aldrich, США) разводился физиологическим раствором до нужной концентрации.

На рис.1 представлена зависимость показателя преломления растворов альбумина от концентрации (рис.1А), длины волны (рис.1Б) и температуры (рис.1В).





В

Рисунок 1. Зависимости показателя преломления растворов альбумина:

А - Зависимость показателя преломления растворов альбумина от концентрации при температуре 24 °С. ( $R^2 \geq 0,98$ ; средняя ошибка измерений  $\pm 0,0003$ );

Б - Дисперсионная зависимость показателя преломления растворов альбумина 35, 55, 100 и 200 мг/мл при температуре 24 °С. ( $R^2 \geq 0,995$ ; средняя ошибка измерений  $\pm 0,0003$ )

В - Температурная зависимость показателя преломления растворов альбумина 35 мг/мл для длин волн 480 нм, 589 нм и 930 нм. ( $R^2 \geq 0,987$ ; средняя ошибка измерений  $\pm 0,0003$ )

Для аппроксимации зависимости показателя преломления от концентрации альбумина была использована формула линейной зависимости:

$$n(C) = n_0(C = 0) + \frac{dn}{dC}, (1).$$

Коэффициенты, найденные в результате аппроксимации по формуле (1), приведены в таблице 1.

Таблица 1. Коэффициенты для восстановления зависимости показателя преломления раствора альбумина от концентрации при температуре 24 °С

Длина волны, нм	$n_0(C=0)$	Стандартное отклонение	$dn/dC, 10^{-4}$ мг/мл	Стандартное отклонение, $10^{-4}$	$R^2$
480	1.3393	0.0002	1.606	0.002	0.999
486	1.3389	0.0004	1.623	0.004	0.998
546	1.3359	0.0003	1.638	0.003	0.999
589	1.3346	0.0003	1.625	0.003	0.999
644	1.3332	0.0004	1.572	0.003	0.998
656	1.3329	0.0006	1.535	0.005	0.995
680	1.3320	0.0003	1.542	0.003	0.998
800	1.3294	0.0005	1.623	0.005	0.997
930	1.3276	0.0004	1.574	0.003	0.998
1100	1.3241	0.0004	1.622	0.003	0.998
1300	1.3196	0.0002	1.560	0.002	0.999
1550	1.3156	0.0002	1.495	0.002	0.999

Для аппроксимации дисперсионной зависимости показателя преломления растворов альбумина была использована формула Зельмейера:

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{A1 \cdot \lambda^2}{B1 - \lambda^2} + \frac{A2 \cdot \lambda^2}{B2 - \lambda^2}, \quad (2).$$

В таблице 2 приведены коэффициенты A1, A2, B1, B2, позволяющие восстановить дисперсионную зависимость для растворов альбумина различной концентрации.

Таблица 2. Коэффициенты для восстановления дисперсионной зависимости показателя преломления раствора альбумина при температуре 24 °С

Концентрация альбумина, мг/мл	A1	A2	B1, 1/нм <sup>2</sup>	B2, *10 <sup>10</sup> (1/нм <sup>2</sup> )	R <sup>2</sup>
35	0.78284	745.80866	8264.06289	4.27991	0.997
45	0.78725	745.16755	8261.21264	4.27633	0.997
55	0.79061	737.19422	8546.1684	4.32003	0.999
100	0.81448	790.22595	7753.49632	4.04895	0.993
200	0.85357	778.61143	8038.85745	4.11446	0.989

Для аппроксимации зависимости показателя преломления растворов альбумина от температуры была использована формула линейной зависимости:

$$n(T) = n_0(T = 0) + \frac{dn}{dT}, \quad (3).$$

Коэффициенты, найденные в результате аппроксимации по формуле (3), приведены в таблице 3.

Таблица 3. Коэффициенты для восстановления температурной зависимости показателя преломления раствора альбумина для концентрации 35, 45 и 55 мг/мл.

Длина волны, нм	Раствор альбумина 35 мг/мл			Раствор альбумина 45 мг/мл			Раствор альбумина 55 мг/мл		
	n <sub>0</sub> (T=0)	dn/dT, 10 <sup>-4</sup> °С	R <sup>2</sup>	n <sub>0</sub> (T=0)	dn/dT, 10 <sup>-4</sup> °С	R <sup>2</sup>	n <sub>0</sub> (T=0)	dn/dT, 10 <sup>-4</sup> °С	R <sup>2</sup>
480	1.3479 ±0.0003	-1.313 ±0.086	0.991	1.3494 ±0.0002	-1.462 ±0.044	0.998	1.3500 ±0.0008	-0.962 ±0.200	0.917
486	1.3475 ±0.0002	-1.299 ±0.050	0.997	1.3468 ±0.0006	-1.500 ±0.155	0.979	1.3472 ±0.0005	-0.988 ±0.127	0.968
546	1.3447 ±0.0001	-1.346 ±0.022	0.999	1.3455 ±0.0002	-1.538 ±0.044	0.998	1.3461 ±0.0003	-1.154 ±0.089	0.988
589	1.3428 ±0.0006	-1.176 ±0.150	0.968	1.3438 ±0.0003	-1.538 ±0.089	0.993	1.3432 ±0.0014	-0.769 ±0.355	0.648
644	1.3418 ±0.0003	-1.359 ±0.089	0.991	1.3438 ±0.0005	-1.615 ±0.133	0.986	1.3437 ±0.0005	-0.988 ±0.127	0.968
656	1.3402 ±0.0001	-1.038 ±0.022	0.999	1.3432 ±0.0007	-1.615 ±0.178	0.976	1.3427 ±0.0013	-1.038 ±0.333	0.813
680	1.3396 ±0.0001	-1.115 ±0.037	0.998	1.3402 ±0.0008	-1.500 ±0.200	0.965	1.3396 ±0.0002	-0.692 ±0.044	0.992
800	1.3384	-1.397	0.984	1.3378	-1.385	0.982	1.3378	-0.731	0.984

	±0.0005	±0.126		±0.0005	±0.133		±0.0003	±0.067	
930	1.3356 ±0.0008	-1.121 ±0.212	0.931	1.3354 ±0.0009	-1.615 ±0.222	0.963	1.3340 ±0.0005	-0.665 ±0.118	0.939
1100	1.3332 ±0.0003	-1.410 ±0.089	0.992	1.3300 ±0.0005	-1.462 ±0.133	0.984	1.3306 ±0.0005	-0.846 ±0.133	0.952
1300	1.3287 ±0.0003	-1.474 ±0.067	0.996	1.3259 ±0.0001	-1.423 ±0.022	1.000	1.3259 ±0.0004	-0.885 ±0.111	0.969
1550	1.3252 ±0.0003	-1.987 ±0.081	0.997	1.3500 ±0.0008	-0.896 ±0.207	0.899	1.3598 ±0.0022	-1.462 ±0.564	0.741

Таблица 4. Коэффициенты для восстановления температурной зависимости показателя преломления раствора альбумина для концентрации 100 и 200 мг/мл

Длина волны, нм	Раствор альбумина 100 мг/мл			Раствор альбумина 200 мг/мл		
	$n_0(T=0)$	$dn/dT, 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}$	$R^2$	$n_0(T=0)$	$dn/dT, 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}$	$R^2$
480	1.3594 ±0.0001	-1.477 ±0.022	1.000	1.3733 ±0.0002	-0.923 ±0.058	0.992
486	1.3564 ±0.0002	-1.412 ±0.042	0.998	1.3716 ±0.0006	-1.362 ±0.147	0.977
546	1.3547 ±0.0000	-1.385 ±0.000	1.000	1.3704 ±0.0005	-1.500 ±0.129	0.985
589	1.3528 ±0.0010	-1.408 ±0.266	0.931	1.3670 ±0.0005	-1.127 ±0.118	0.978
644	1.3527 ±0.0007	-1.488 ±0.175	0.973	1.3655 ±0.0001	-0.923 ±0.031	0.998
656	1.3517 ±0.0003	-1.615 ±0.075	0.996	1.3659 ±0.0001	-1.323 ±0.036	0.999
680	1.3501± ±0.0008	-1.512 ±0.220	0.959	1.3649 ±0.0006	-1.462 ±0.160	0.976
800	1.3474 ±0.0010	-1.512 ±0.269	0.939	1.3617 0.0007	-1.242 ±0.184	0.957
930	1.3445 ±0.0008	-1.577 ±0.213	0.964	1.3599 ±0.0008	-1.550 ±0.202	0.967
1100	1.3388 ±0.0008	-1.500 ±0.200	0.965	1.3532 ±0.0010	-1.027 ±0.251	0.887
1300	1.3336 ±0.0007	-1.104 ±0.193	0.941	1.3481 ±0.0009	-1.038 ±0.231	0.906
1550	1.3735 ±0.0007	-0.962 ±0.173	0.937	1.3733 ±0.0002	-0.923 ±0.058	0.992

Полученные в ходе исследования результаты хорошо согласуются с известными литературными данными и могут служить основой для дальнейшего изучения дисперсионной и температурной зависимостей биологических сред, в частности крови и её компонентов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-04-60505 и 20-32-90058.*

### Библиографический список

1. *Rehman S., Shafique L., Ihsan A., Liu Q.* Evolutionary Trajectory for the Emergence of Novel Coronavirus SARS-CoV-2 // *Pathogens*. 2020. V.9. P. 240.
2. *Jaimes J. A., André N. M., Chappie J. S., Mille J. K., Whittaker G.R.* Phylogenetic Analysis and Structural Modeling of SARS-CoV-2 Spike Protein Reveals an Evolutionary Distinct and Proteolytically Sensitive Activation Loop // *J. Mol. Biol* <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2020.04.009>.
3. *Ermatov T., Noskov R.E., Machnev A.A. et al.* Multispectral sensing of biological liquids with hollow-core microstructured optical fibres // *Light Sci Appl*. 2020. V.9. P.173.
4. *Lazareva E.N., and Tuchin V.V.* Blood refractive index modelling in the visible and near-infrared spectral regions // *J of Biomedical Photonics & Eng*. 2018V. 4 (1)P. 010503(7)/

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТЕПЕНИ ДЕГИДРАТАЦИИ КОЖИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЖИВОТНЫХ ПУТЕМ АНАЛИЗА СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОТРАЖЕНИЯ КОЖИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ РАСТВОРА ГЛИЦЕРИНА

*П.А.Дьяченко<sup>1,2</sup>, Е.Н. Лазарева<sup>1,2</sup>, А.Б.Бучарская<sup>1,3</sup>, В.В. Тучин<sup>1,2,4</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет

<sup>3</sup>Саратовский государственный медицинский университет

<sup>4</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН

E-mail: timoshina2906@mail.ru

В данной работе проведено исследование степени дегидратации кожи экспериментальных животных путем анализа спектральных характеристик отражения кожи с привитой опухолью при воздействии просветляющего агента (99.3% раствор глицерина).

**Ключевые слова:** просветление, опухоль, дегидратация, спектры отражения.

В настоящее время для диагностики и терапии некоторых заболеваний широко используются различные оптические методы. Повышение контрастности изображения, вызванное обезвоживанием тканей и оптическим просветлением в области патологии, чрезвычайно важно для мониторинга предраковых состояний, ранних стадий рака и других заболеваний [1].

Регистрация спектров отражения была проведена в спектральном диапазоне 900-2000 нм с использованием спектрометра USB4000-Vis-NIR (Ocean Optics, США) с помощью волоконного датчика QR400-7-Vis/NIR (Ocean Optics, США), датчик представлял из себя совокупность оптических волокон расположенных следующим образом: шесть волокон доставляющих свет к исследуемой области расположены вокруг детектирующего волокна.

Исследования были проведены на лабораторных крысах линии Vistar в количестве 6 штук, половозрелые самцы весом 300-400г. Лабораторные крысы были разделены на две группы: патологическую группу № 1 с

привитой опухолью спустя 14 дней после прививки опухоли и патологическую группу №2 с привитой опухолью спустя 28 дней после прививки опухоли, где измерения проводились с участка кожи непосредственно над опухолевым образованием и рядом на контрольном участке без новообразования. Лабораторным крысам была привита опухоль, путем подкожной инъекции в область лопаток по 0.5 мл 25% опухолевой взвеси в растворе Хэнкса штамма альвеолярного рака печени РС1. В качестве просветляющих агентов был взят 99.3% глицерин. Перед началом эксперимента крысе внутримышечно вводился препарат для анестезии Золетил 100. С исследуемого участка кожи всех групп лабораторных животных были удалены волосы, далее записывался спектр отражения трех участков кожи до нанесения агента, далее наносился просветляющий агент на 30 минут, по истечении этого времени агент с исследуемых участков удалялся, чтобы не исказить сигнал при регистрации спектров отражения, после чего производилась запись спектров.

Полученные спектры отражения кожи патологической группы № 1 лабораторных животных при использовании раствора глицерина представлены на рисунке 1.

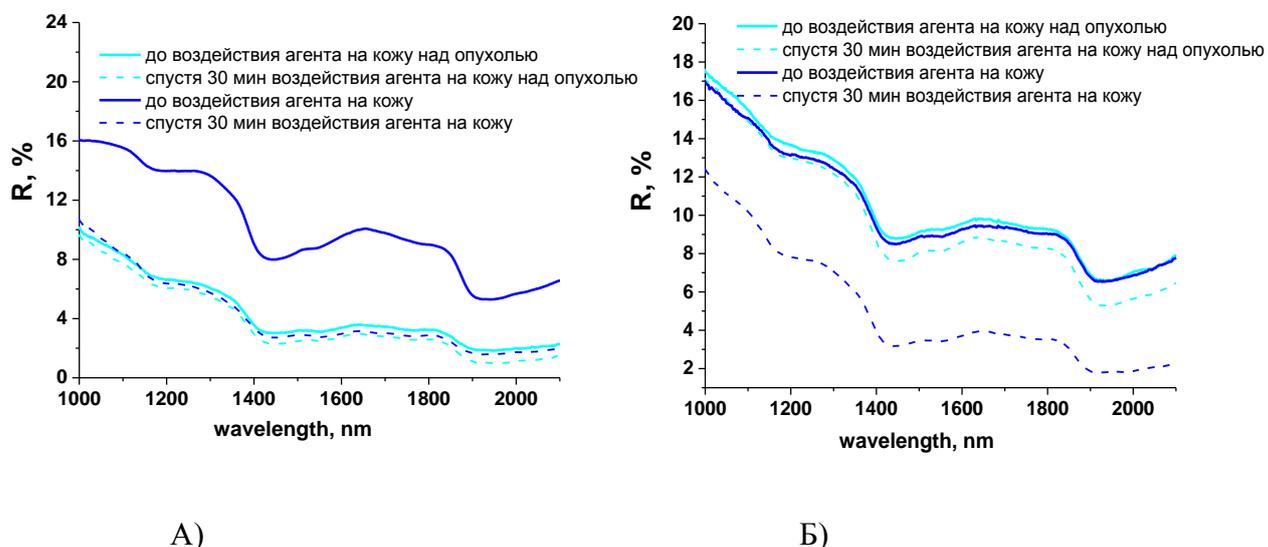
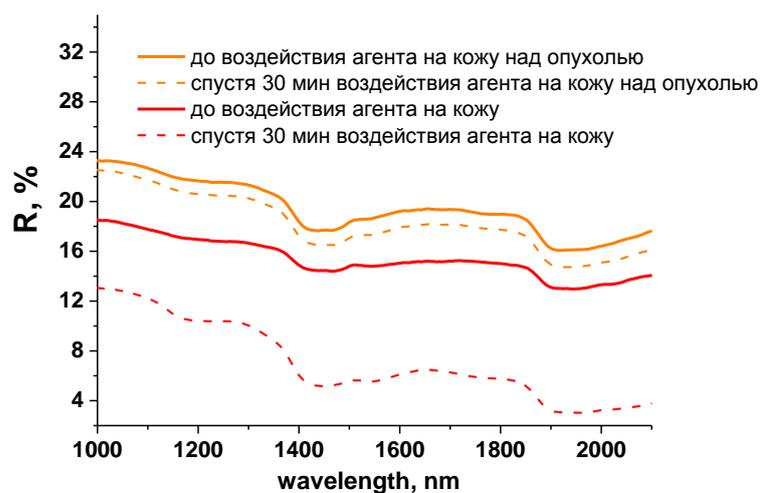
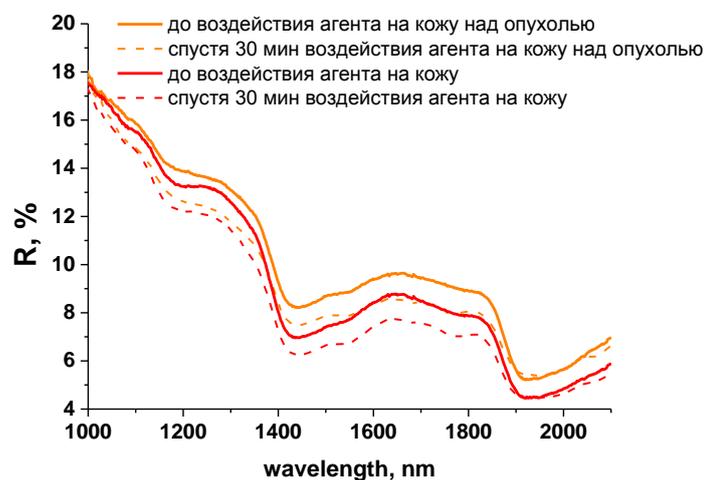


Рисунок 1. Спектры отражения кожи патологической группы № 1 лабораторных животных при использовании раствора глицерина: А) лабораторная крыса №1, Б) лабораторная крыса №2

Полученные спектры отражения кожи патологической группы № 2 лабораторных животных при использовании раствора глицерина представлены на рисунке 2.



А)



Б)

Рисунок 2. Спектры отражения кожи патологической группы № 2 лабораторных животных при использовании раствора глицерина: А) лабораторная крыса №1, Б) лабораторная крыса №2

Используя формулу для анализа содержания воды в коже [2]:

$$C = k(A_{1450} - A_{1100}) = k \lg(R_{1100}/R_{1450}),$$

где  $C$  - концентрация воды,  $k$  - константа,  $A_{1450, 1100}$  и  $R_{1450, 1100}$  - оптическая плотность и отражение на длинах волн 1100 и 1450 соответственно. В связи с тем, что нас интересует изменение содержания воды в течение 30 минут использования агента, нормирующей константой мы можем пренебречь.

Результаты изменения содержания воды в коже для обеих групп представлены на рисунке 3.

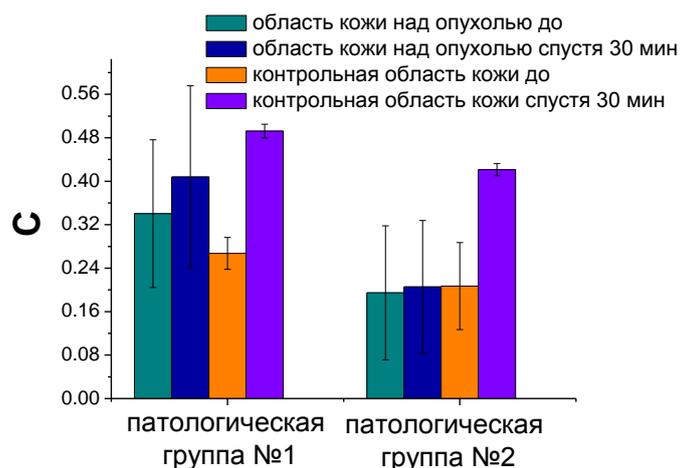


Рисунок 3. Кинетика изменения содержания воды в коже лабораторных животных патологической группы №1 и патологической группы №2

В результате подсчетов было выявлено изменение содержания воды в коже. При исследовании спектров кожи над онкологическим новообразованием патологической группы №1 (спустя 14 дней после прививки опухоли) при использовании раствора глицерина в течение 30 минут, спустя 30 минут воздействия просветляющего агента на участок кожи над опухолевым новообразованием в среднем содержание воды увеличилось на 18% (в 1.18 раза), при этом при воздействии на участок кожи находящийся рядом без новообразования в среднем по двум крысам содержание воды в коже увеличилось на 80% (в 1.8 раза). При исследовании спектров кожи животных из патологической группы № 2 (спустя 28 дней после прививки опухоли) спустя 30 минут воздействия просветляющего агента на участок кожи над опухолевым новообразованием в среднем содержание воды увеличилось на 6% (в 1.06 раза), при этом при воздействии на участок кожи находящийся рядом без новообразования в среднем по двум крысам содержание воды увеличилось в 2,2 раза.

Увеличение содержания воды в коже обеих групп животных возможно вызвано тем, что глицерин притягивает к себе молекулы воды из кожи и близлежащих тканей. Полученные результаты демонстрируют различия в воздействии просветляющего агента на содержание воды в коже лабораторных крыс с привитой опухолью контрольных участков и над опухолью. Что свидетельствует об изменении оптических свойств кожи в условиях развития патологии. Развитие онкологического новообразования вызвало замедленную диффузию агента в кожу, что подтверждается малым воздействием агента на содержание воды над опухолевым новообразованием, в отличие от участка кожи над здоровой тканью крысы.

Исследования степени дегидратации кожи при воздействии гиперосмотических просветляющих агентов являются актуальными и значимыми для Тгц спектроскопии, в силу того, что мы можем

контролировать концентрацию воды подбирая различные концентрации просветляющих агентов, при этом зная воздействия привитой опухоли на свойства кожи.

#### Библиографический список

1. *V.V. Tuchin*, Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnostics, 3rd ed., SPIE Press, Bellingham, Washington, p. 988, 2015
2. *Tingting Yu, Xiang Wen, Valery V. Tuchin, Qingming Luo, Dan Zhu* Quantitative analysis of dehydration in porcine skin for assessing mechanism of optical clearing / Journal of Biomedical Optics 16(9), 095002, 2011

## АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ГИПЕРОСМОТИЧЕСКОГО АГЕНТА НА МИКРОЦИРКУЛЯЦИЮ КРОВИ В КОЖЕ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТИЯ ПАТОЛОГИИ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ СПЕКЛ-КОНТРАСТНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ

*П.А.Дьяченко<sup>1,2</sup>, А.Б.Бучарская<sup>1,3</sup>, В.В. Тучин<sup>1,2,4</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет

<sup>3</sup>Саратовский государственный медицинский университет

<sup>4</sup> Институт проблем точной механики и управления РАН

E-mail: [timoshina2906@mail.ru](mailto:timoshina2906@mail.ru)

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования изменений микроциркуляции подкожного кровотока в условиях развития злокачественной опухоли с использованием лазерной спекл-контрастной визуализации (LSCI) при применении оптического просветляющего агента (70% раствор глицерина).

**Ключевые слова:** просветление, опухоль, спеклы, скорость кровотока.

Оптическое просветление (ОП) является одной из инновационных технологий биомедицинской оптики [1-3], которая помогает решить проблему рассеяния света в биологических тканях. Рассеяние ограничивает применение оптических методов в биомедицинской диагностике и терапии из-за малой глубины проникновения световых пучков и размытия оптического изображения при сильном рассеянии. Помимо того, что оптическое просветление уменьшает рассеяние света в тканях, проникновение (диффузия) ОП агентов в ткань может влиять на микроциркуляцию крови в ткани. Также многие заболевания, такие как заболевания сердечно-сосудистой системы, атеросклероз, сахарный диабет, хроническая венозная недостаточность, онкология и другие, вызывают функциональные и морфологические изменения в микроциркуляторном русле. В связи с этим были проведен анализ влияния просветляющего агента 70% раствор глицерина на микроциркуляцию крови в коже в условиях развития патологии методом лазерной спекл-контрастной визуализации.

Метод спекл-контрастной визуализации подразумевает оценку контраста усредняемых по времени динамических спеклов в зависимости от времени усреднения спекл-модулированных изображений. Расчет пространственного контраста  $K$  производился по регистрируемому изображению спекл-поля по области, размер которой обычно составляет  $5 \times 5$  или  $7 \times 7$  пикселей [4]:

$$K_k = \sigma_{I_k} / \bar{I}_k, \quad (1)$$

где  $k$  число кадров в последовательности спекл-модулированных изображений,  $\bar{I}_k$  и  $\sigma_{I_k}$  усредненная по интенсивности рассеянного света анализируемого кадра и среднеквадратичное значение флуктуационной составляющей яркости пикселя, соответственно:

$$\bar{I}_k = (1/MN) \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N I_k(m, n), \quad (2)$$

$$\sigma_{I_k} = \sqrt{(1/MN) \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \{I_k(m, n) - \bar{I}_k\}^2}, \quad (3)$$

где  $M$  и  $N$  - количество пикселей в строках и столбцах анализируемой области кадра соответственно.

Для мониторинга микрогемодинамики был использован лабораторный образец устройства реализующего метод спекл-визуализации, схема которого представлена на рисунке 1. Спекл-модулированные изображения поверхности анализируемого участка регистрировались монохромной КМОП-камерой (Basler a602f, число пикселей в матрице  $656 \times 491$ , размер пикселя  $9.9 \times 9.9$  мкм; 8 бит/пиксель), оснащенной микро-объективом ЛОМО с кратностью увеличения  $10 \times$ . В качестве источника излучения был использован He-Ne лазер ГН-5П с длиной волны 633 нм [5]. Время экспозиции составило 10 мс. Запись спекл изображений проводилась в течение 1 мин со средней частотой кадров 40 кадров в секунду. Проведенная нами калибровка [6] позволяет ввести понятие приведенной скорости, и проводить количественный анализ изменений микроциркуляции крови.

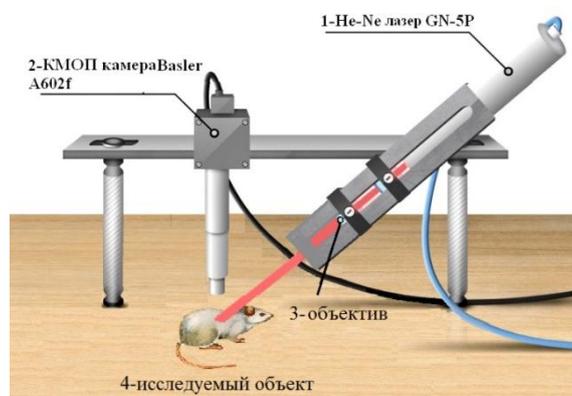


Рисунок 1. Схема экспериментальной установки. 1 - He-Ne лазер ГН-5П, длина волны — 633 нм; 2 – детектор (КМОП камера Basler A602f) с закрепленным тубусом микроскопа с микрообъективом (Ломо,  $10 \times$ ), 3- расширитель лазерного пучка объектив  $10 \times$ ; 4- исследуемый объект

Лабораторные животные были разделены на две группы, первая включала в себя здоровых животных (3 штуки), вторая - животных с привитой опухолью спустя 14 дней после инъекции (3 штуки) и третья - животных с привитой опухолью спустя 28 дней после инъекции (3 штуки). Лабораторным крысам была привита опухоль, путем подкожной инъекции в область лопаток по 0.5 мл 25% опухолевой взвеси в растворе Хэнкса штамма альвеолярного рака печени PC1. В качестве просветляющих агентов был взят водный 70% раствор глицерина. Под общим обезболиванием (внутримышечное введение анестетика) выполнялся надрез кожи, после чего производился анализ изменения кровотока в подкожных сосудах при воздействии 70% раствора глицерина методом спекл-контрастной визуализации. Значение диаметра исследуемых сосудов составляло  $150 \pm 50$  мкм.

Результат измерений влияния 70% раствора глицерина на микроциркуляцию крови подкожных сосудов у крыс *in vivo* с помощью лазерной спекл-контрастной визуализации показан на рис. 2. Результаты были представлены как среднее  $\pm$  стандартное отклонение.

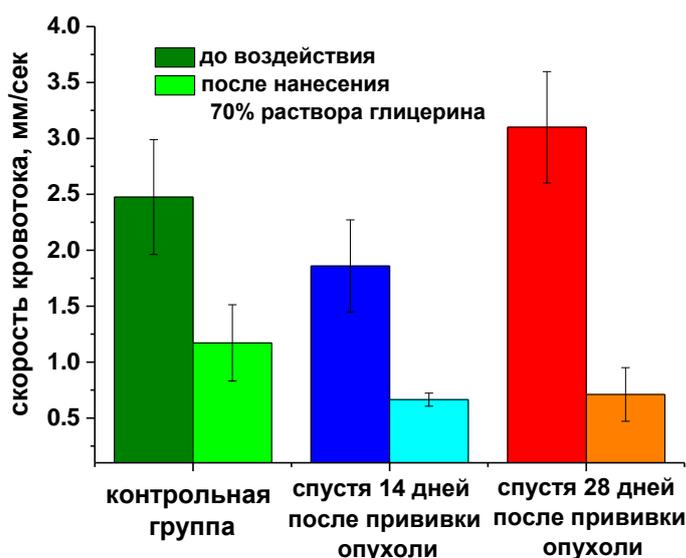


Рисунок 2. Изменение скорости кровотока при влиянии 70% раствора глицерина на подкожные сосуды.

Усредненные значения и стандартные отклонения приведенной скорости крови до воздействия 70% раствора глицерина у контрольной группы составили  $2,47 \pm 0,51$  мм/сек, у патологической группы №1  $1.85 \pm 0.41$  мм/сек, у патологической группы №2  $3.1 \pm 0.49$  мм/сек. Отсюда видно, что скорость кровотока у патологической группы №1 снижена на 25% относительно контрольных измерений, у патологической группы №2 увеличена на 20% относительно контрольных измерений. При этом результаты воздействия просветляющего агента на кровотоки показали, что применение 70% раствора глицерина вызывает снижение скорости

кровотока у контрольной группы, примерно в 2 раза. При этом у патологических групп воздействие раствора на кровоток более выражено, у группы, измерения на которой, проводились спустя 14 дней после прививки опухоли, скорость кровотока снизилась в 2.8 раз, спустя 28 дней – в 4 раза. Разница на характер воздействия 70% глицерина на скорость крови в подножных сосудах, свидетельствует о нарушении микрогемодинамики в условиях развития злокачественной опухоли.

#### Библиографический список

1. *V.V. Tuchin*, Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnostics, 3rd ed., SPIE Press, Bellingham, Washington, p. 988, 2015
2. *L. Oliveira, V. V. Tuchin*, The Optical Clearing Method: A New Tool for Clinical Practice and Biomedical Engineering, Basel: Springer Nature Switzerland AG, 2019 – 177 p. <https://www.springer.com/gp/book/9783030330545>
3. *A.N. Bashkatov, K. V. Berezin, K. N. Dvoretzkiy, M. L. Chernavina, E. A. Genina, V. D. Genin, V. I. Kochubey, E. N. Lazareva, A. B. Pravdin, M. E. Shvachkina, P. A. Timoshina, D. K. Tuchina, D. D. Yakovlev, D. A. Yakovlev, I. Yu. Yanina, O. S. Zhernovaya, V. V. Tuchin*, "Measurement of tissue optical properties in the context of tissue optical clearing," J. Biomed. Opt. 23(9), 091416 (2018).
4. *J. D. Briers* Laser Doppler, speckle and related techniques for blood perfusion mapping and imaging, Physiol. Meas., V.22, 35–66, 2001;
5. *K. Basak*, "Review of laser speckle-based analysis in medical imaging," Med. Biol. Eng. Comput. 50(6), P.547-558, 2012
6. *Postnikov E.B., Tsoy M.O., Timoshina P.A., Postnov D.E.*, Gaussian sliding window for robust processing laser speckle contrast images, International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering. Т. 35. № 4. С. e3186. (2019)
7. *Polina A. Timoshina, Alla B. Bucharaskaya, Denis A. Alexandrov, Valery V. Tuchin*, Study of blood microcirculation of pancreas in rats with alloxan diabetes by Laser Speckle Contrast Imaging, J. of Biomedical Photonics & Eng 3(2), 2017

### ОКТ-МОНИТОРИНГ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ КОЖИ ПРИ ОПТИЧЕСКОМ ПРОСВЕТЛЕНИИ *EX VIVO*

*Ю.И. Сурков<sup>1,2</sup>, И.А. Серебрякова<sup>1,2</sup>, А.Н. Башкатов<sup>1,2</sup>, Э.А. Генина<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет

E-mail: surkov9898@gmail.com

В настоящей работе реализован простой метод мониторинга среднего группового показателя преломления и геометрических характеристик кожи крысы в процессе её оптического просветления (ОП) ПЭГ-300 при помощи оптической когерентной томографии (ОКТ). Основным преимуществом данного метода ОКТ-мониторинга является то, что он позволяет одновременно и непрерывно отслеживать как средний по толщине групповой показатель преломления, так и геометрическую толщину без прерывания естественного хода процесса ОП и без изменения начального

положения образца, что позитивно сказывается на точности измерений. Показано, что метод может быть также использован для оценки содержания оптического просветляющего агента (ОПА) и воды в коже.

**Ключевые слова:** ОКТ, оптическое просветление, показатель преломления.

Увеличение прозрачности биологических тканей с помощью ОП широко используется для изучения структуры тканей, оптической диагностики и фототерапии [1-4]. Ключевыми механизмами ОП являются осмотическая дегидратация под действием ОПА и диффузия агента в биоткань. Так как эти процессы имеют противоположную направленность: в то время как дегидратация приводит к уменьшению объема образца, диффузия ОПА в ткань к ее увеличению, и при этом механизмы ОП дают аналогичный оптический эффект: уменьшение рассеяния света в биоткани и увеличение среднего показателя преломления, поэтому сложно достаточно точно оценить вклад дегидратации и диффузии ОПА при ОП. Количественная информация о скорости и степени выраженности этих процессов в конкретных условиях может быть получена при одновременном мониторинге оптических свойств, в частности средней групповой показатель преломления, и геометрических параметров ткани.

Фотометрические и спектрофотометрические методы широко используются для характеристики воздействия ОПА на биоткани, однако одновременный мониторинг оптических и геометрических характеристик образцов затруднителен, так как требует прерывания естественного процесса ОП и изменения начального положения образца ткани, что существенно влияет на точность измерений [4]. Для некоторых типов биологических тканей, например кожи, такой мониторинг может быть проведен при помощи ОКТ [5].

Известно, что средний показатель преломления биоткани зависит от её компонентного состава, поэтому по измеренным значениям показателя преломления и количественным данным изменения объема ткани можно оценить содержание воды и ОПА в коже.

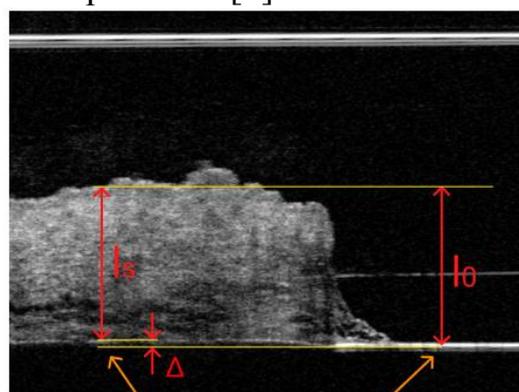
Известно, что расстояние между изображениями двух точек ( $R_{OCT}$ ), расположенных на одном А-скане, пропорционально оптической длине пути между этими точками ( $l$ ).  $R_{OCT} \sim l = n_{гр}d$  (1), где  $n_{гр}$  – средний групповой показатель преломления между точками, расположенными на одной линии вертикального ОКТ-зондирования,  $d$  – геометрическое расстояние между этими точками [5]. В рассматриваемой геометрии это может быть использовано для оценки среднего группового показателя преломления ткани, принцип измерения проиллюстрирован на рисунке 1. Оптическая толщина образца определяется как  $l_s = n_{гр}d_s$ , где  $d_s$  – геометрическая толщина образца,  $n_{гр}$  – средний групповой показатель преломления для данного А-скана. При отсутствии образца для той же геометрической длине пути  $d_s$  соответствовала бы оптическая длина пути

$l_0 = n_{\text{ОПА}} d_s$ , где  $n_{\text{ОПА}}$  – групповой показатель преломления ОПА. Смещение точки изображения верхней границы предметного стекла при наличии образца относительно ее положения в отсутствии образца ( $\Delta$ ) на В-скане можно определить как  $\Delta = l_s - n_{\text{ОПА}} l_s / n_{\text{ГР}}$  (2). Определив по ОКТ-изображению  $l_s$  и  $\Delta$ , можно рассчитать искомый показатель преломления  $n_{\text{ГР}} = \frac{n_{\text{ОПА}} l_s}{l_s - \Delta}$  (3). По нашим оценкам при толщине образца 300 мкм представленный метод позволяет определить  $n_{\text{ГР}}$  с точностью порядка 0,0089. Способы оценки показателя преломления, использующие этот принцип измерения, широко применяются на практике. [6]

В качестве объекта исследования были использованы 3 образца кожи *ex vivo* с брюшной части беспородных крыс-альбиносов. Размер образцов приблизительно составлял 2×3 см с предварительно удалённым слоем жировой ткани. Образец фиксировался на предметном стекле и помещался в ОКТ систему так, чтобы одновременно наблюдать и биоткань, и участок, где образец отсутствует. На поверхность кожи и область рядом с ней наносилось большое количество ОПА, исходя из того, что объем ОПА во много раз превышает объем выделившейся в него воды, показатель преломления окружающей среды можно считать приблизительно равным начальному значению. В качестве ОПА использовался ПЭГ-300 с групповым показателем преломления равным 1,4612 [5].

Одним из отслеживаемых параметров является коэффициент изменения объема образца, определяемый как  $k_V = V/V_0$ , где  $V$  – текущее значение объема,  $V_0$  – объем образца в исходном состоянии. Наши эксперименты показали, что объем кожи, зафиксированной на предметном стекле, изменяется при воздействии ОПА в основном за счет изменения толщины. Поэтому при данной геометрии эксперимента для количественной оценки изменения объема биоткани достаточно следить за изменением толщины образца  $k_V = d_s/d_{s0}$ . Метод, который мы использовали для оценки содержания воды и ОПА в коже по данным  $k_V$  и  $n_{\text{ГР}}$ , требует отдельного рассмотрения, он будет представлен в другой работе.

С целью мониторинга состояния кожи проводилось сканирование исследуемого участка с помощью спектрального ОКТ OCM0930SR (Thorlabs, США), работающего на центральной длине волны 930 нм с



Верхняя граница предметного стекла

Рисунок 1. Схема и используемые параметры для вычисления среднего группового показателя преломления по данным ОКТ

аксиальным и латеральным разрешением 2,67 и 7,32 мкм соответственно. ОКТ-мониторинг длился до завершения процесса ОП (не менее 2 часов). Для уменьшения спекл-шума регистрировались 10 А-сканов и усреднялись в один (усреднение по времени).

На рисунке 2 проиллюстрированы типичные ОКТ-сканы кожи в процессе её ОП. На рисунке 3 представлена кинетика изменения  $n_{гр}$  и  $k_V$  на разном расстоянии от края образца. Средний по всему зондируемому объему кожи групповой показатель преломления в начальный момент времени составил  $1,416 \pm 0,013$ , что с достаточной точностью соответствует известным данным  $1,41 \pm 0,03$  [1]. Спустя 210 минут после нанесения ПЭГ  $n_{гр}$  в удалённых от края участках (более чем на 3 мм) составил в среднем  $1,484 \pm 0,02$ . Границы изменения объема  $k_V$  сопоставимы с результатами других авторов полученные с использованием другого метода [4].

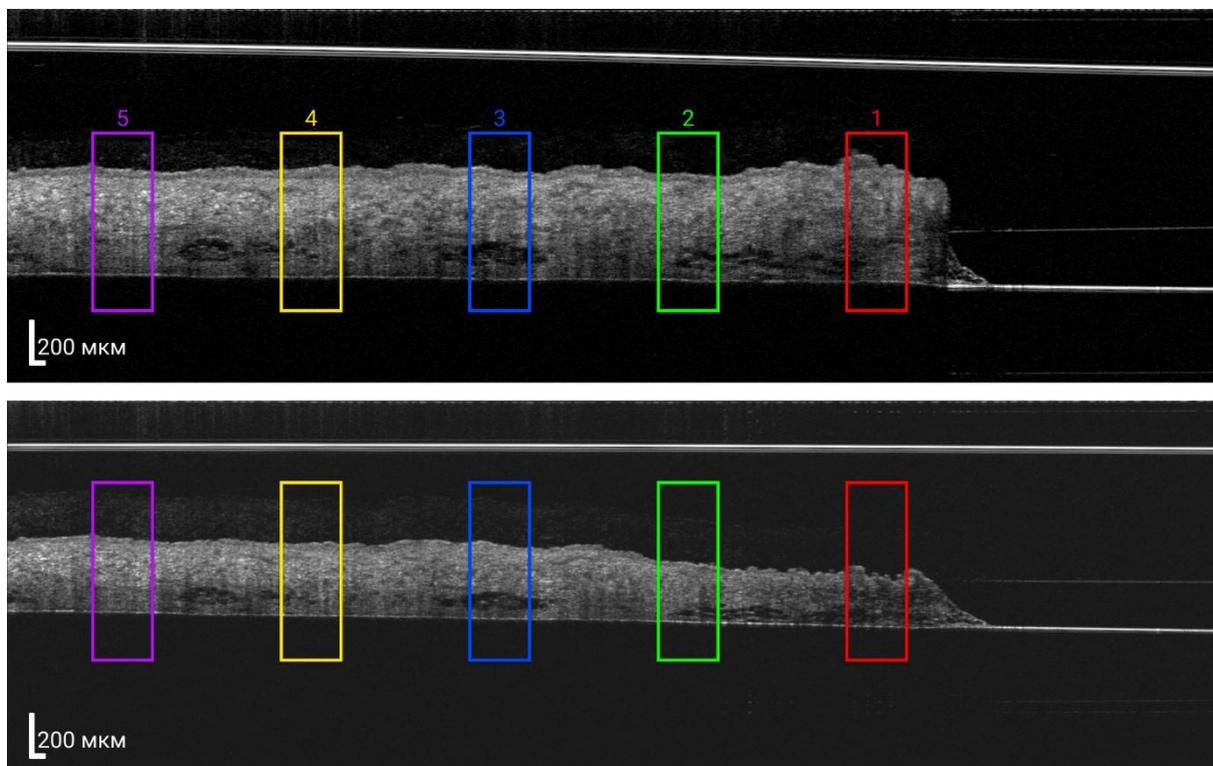


Рисунок 2. Типичные ОКТ сканы кожи крысы в процессе её ОП спустя 2 минуты после нанесения ПЭГ-300 – сверху, спустя 150 минут после аппликации ОПА – снизу. Цветными прямоугольниками отмечены области интереса на расстоянии от края образца: 1) 0,77 мм; 2) 3 мм; 3) 5,1 мм; 4) 7,3 мм; 5) 9,5 мм

ПЭГ имеет очень длинные молекулы, что не позволяет ему быстро диффундировать в ткань, поэтому при относительно коротком контакте с тканью, например, в течение часа, действие ПЭГ на биоткань состоит лишь в её дегидратации. На рисунке 4 приведена полученная зависимость объемной доли воды и ПЭГ-300 в коже в процессе ОП, видно, что у края образца дегидратация более выражена и объемная доля ОПА в коже выше, чем на участках удалённых от края, что может объясняться наличием

боковой диффузии со стороны, где эпидермис и роговой слой отсутствует и ОПА взаимодействует непосредственно с дермой. На расстоянии более 3 мм от края образца вклад боковой диффузии не наблюдался.

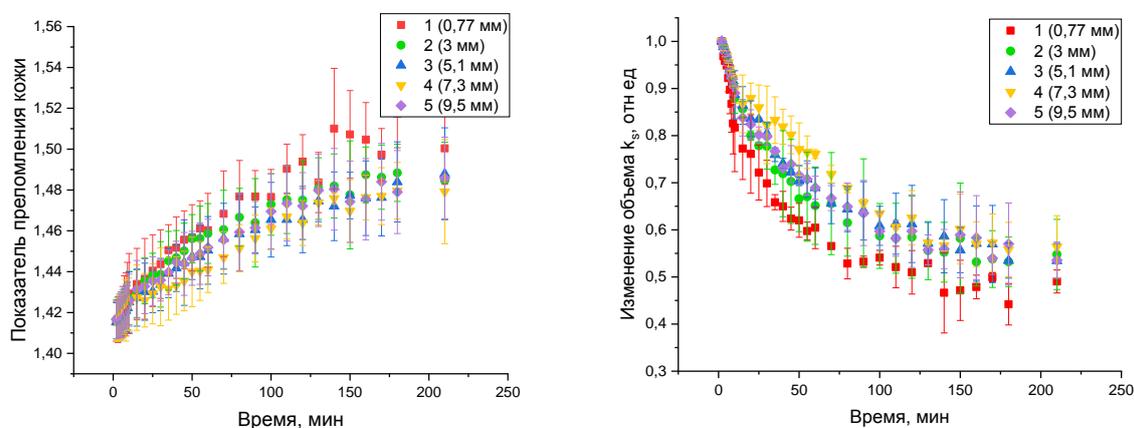


Рисунок 3. Кинетика среднего группового показателя преломления и изменения объема кожи в процессе ОП

Начальная объемная доля воды в образцах составила  $70,6 \pm 1,1\%$ , после 210 минут наблюдения  $34,9 \pm 4,3\%$  у края образца и  $42,2 \pm 2,1\%$  на удаленных от края участках. Точность измерения  $n_{гр}$  при уменьшении толщины образца значительно снижается и при толщине 100 мкм составляет всего 0,026.

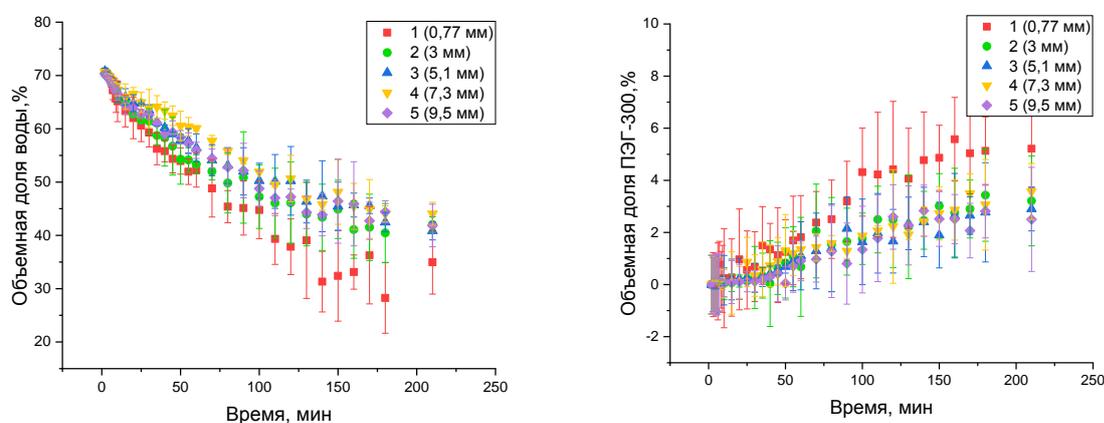


Рисунок 4. Зависимость от времени объемной доли воды и ПЭГ-300 в коже при её ОП

Приведены экспериментальные примеры относительно простого метода ОКТ-мониторинга среднего группового показателя преломления кожи и её геометрической толщины при оптическом просветлении. Данный метод может использоваться для изучения взаимодействия ОПА с кожей, для оценки скорости и степени дегидратации, а также скорости диффузии и вклада боковой диффузии ОПА в кожу. Кроме того, данный метод ОКТ-мониторинга может применяться для оценки содержания воды и ОПА в биоткани.

*Работа поддержана грантом РФФИ № 20-52-56005.*

### Библиографический список

1. *Tuchin V. V.* et al. Tissue optics. // Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE), 2015. -812 P.
2. *Costantini I.*, et al. In-vivo and ex vivo optical clearing methods for biological tissues: review // Biomed. Opt. Express. 2019. vol. 10. no. 10. P. 5251-5267.
3. *Genina E.A.*, et al. Optical Clearing of Tissues: Benefits for Biology, Medical Diagnostics and Phototherapy // Chapter 10 in: Handbook on Optical Biomedical Diagnostics, Vol. 2: Methods, 2nd ed., Valery V. Tuchin, Bellingham, Washington: SPIE Press. 2016. P. 565-937.
4. *Tuchina D. K.* et al. Optical clearing of skin tissue ex vivo with polyethylene glycol // Optics and spectroscopy. – 2016. – Т. 120. – №. 1. – С. 28-37.
5. *Shvachkina M. E.* et al. Monitoring of the process of immersion optical clearing of collagen bundles using optical coherence tomography // Optics and Spectroscopy. – 2019. – Т. 127. – №. 2. – С. 359-367.
6. *Wang X. J.* et al. Group refractive index measurement of dry and hydrated type I collagen films using optical low-coherence reflectometry // Journal of biomedical optics. — 1996. — Vol. 1, no. 2. — Pp. 212–217.

## ВЛИЯНИЕ КОНТРАСТНЫХ ВЕЩЕСТВ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ МРТ И КТ, НА ОПТИЧЕСКИЕ И ВЕСОВЫЕ ПАРАМЕТРЫ КОЖИ *IN VITRO*

Н.С.Чикалкин<sup>1</sup>, Д.К.Тучина<sup>1</sup>, Н.А. Шушунова<sup>1</sup>, А.П. Савицкий,<sup>2</sup>  
А.А. Богданов мл.,<sup>2,3</sup> В. В. Тучин<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени  
Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

<sup>2</sup>Институт биохимии им. А.Н. Баха ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Россия

<sup>3</sup>Медицинская школа Массачусетского университета, Вустер, Массачусетс, США

<sup>4</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов, Россия

E-mail: neat13@mail.ru

В работе проводилось исследование влияния контрастных агентов, применяемых в МРТ, на оптическое пропускание и вес образцов кожи лабораторных мышей. В исследованиях использовались такие МРТ агенты как: «Gadovist», «Magnevist», «Dotarem» и КТ агент «Visipaque». Исследования проводились с помощью спектрометра USB4000 в спектральном диапазоне 500-900 нм во время иммерсии образцов *ex vivo* в агентах. Также были проведены измерения веса образцов кожи, иммерсированных в КТ и МРТ агентах. В результате проведенных исследований получена эффективность оптического просветления кожи и степень набухания кожи при применении каждого из агентов.

**Ключевые слова:** кожа мыши, КТ и МРТ агенты, оптическое просветление, иммерсия, набухание/сжатие ткани.

Значительные перспективы, с точки зрения безопасности, простоты и надежности устройств, а также получения надежной информации о физиологических процессах, имеют различные оптические методы диагностики и терапии, например, оптическая диффузионная и оптическая когерентная томография, спектроскопия, лазерная терапия и хирургия [1].

Например, существует ряд направлений лазерной терапии и диагностики онкологических новообразований и эндокринных заболеваний [2]. С использованием света можно идентифицировать и характеризовать патологические изменения в биологических тканях на клеточном и субклеточном уровнях, а также получать структурную и функциональную информацию о ткани [3].

Однако кожа является естественным препятствием для проникновения света в тело человека или животного, поскольку является оптически неоднородной рассеивающей и поглощающей средой. Проникновение света на большие глубины ткани дает возможность получать больше информации о структуре, состоянии и происходящих в ней изменениях в результате внешних воздействий [3].

Рассеяние света в биотканях может быть существенно уменьшено при помощи действия гиперосмотических иммерсионных жидкостей (просветляющих агентов). Введение в биоткань иммерсионной жидкости, имеющей показатель преломления больший, чем у внутритканевой жидкости, вызывает частичное замещение внутритканевой жидкости иммерсионным раствором, выравнивание показателей преломления рассеивателей ткани и окружающей их среды, и, как следствие, значительное снижение рассеяния. Также, благодаря осмотическим свойствам, иммерсионные жидкости могут вызывать локальную дегидратацию, что также приводит к выравниванию показателей преломления различных компонент биотканей и их уплотнению (упорядочению внутренних структур) [2].

В данной работе проводилось исследование влияния контрастных агентов, применяемых для магнитно-резонансной томографии (МРТ) и компьютерной томографии (КТ) на оптические и весовые параметры кожи мыши *in vitro*.

Исследования проводились с использованием следующих МРТ агентов: «Gadovist» (Гадобутрол) (1 ммоль/мл, «Bayer HealthCare Pharmaceuticals», Германия), «Magnevist» (Смесь гадопентетовой кислоты с гадолинием и димеглюмином) (0.5 ммоль/мл, «Bayer HealthCare Pharmaceuticals», Германия), «Dotarem» (Комплекс гадолиния и гадотеровой кислоты) (0.5 ммоль/мл, «Guerbet», Франция); и КТ агента «Visipaque» (активное вещество - Йодиксанол) (1550.2 г/моль, «GH Healthcare», США), которые показали свою способность к оптическому просветлению кожи [5, 6]. Физиологический раствор выступал в качестве контрольного агента ("БиолоТ", Россия).

Каждый образец кожи помещался в кювету с агентом, и с помощью спектрометра USB4000-Vis-NIR (Ocean Optics, США) производилось измерение коэффициента пропускания кожи в спектральном диапазоне 500-900 нм во время иммерсии.

На основе экспериментальных данных определялась степень оптического просветления кожи с использованием формулы:  $P_T(\lambda) = \frac{T_c(\lambda)_{max} - T_c(\lambda)_{t=0}}{T_c(\lambda)_{t=0}}$ , где  $t$  – время (с),  $\lambda$  – длина волны (нм),  $P_T(\lambda)$  – степень оптического просветления образца,  $T_c(\lambda)_{max}$  – наибольший коэффициент пропускания кожи,  $T_c(\lambda)_{t=0}$  – коэффициент пропускания кожи в начальный момент времени [4].

Для получения временной зависимости веса образцов кожи от времени воздействия агентов на эти образцы, вес измерялся каждые 5 минут в течении часа иммерсии образцов в растворах на весах (Scientech, SA210, США) с точностью  $\pm 1$  мг.

Степень набухания образца рассчитывалась по формуле:  $H(t) = \frac{M(t) - M_{t=0}}{M_{t=0}}$ , где  $M(t)$  – вес (г),  $M_{t=0}$  – вес в начальный момент времени (г),  $t$  – время (сек) [4].

Толщина образцов до и после экспериментов измерялась с помощью электронного микрометра (Fujisan, Китай) с точностью 1 мкм.

На рисунках 1-4 представлены зависимости коэффициента коллимированного пропускания кожи на разных длинах волн от времени иммерсии образцов в растворах. На каждом графике видно увеличение коэффициента пропускания биоткани с течением времени. Это происходит за счёт увеличения оптической однородности, которая достигается за счёт дегидратации и проникновения в биоткань агента, который обладает более высоким показателем преломления, чем внутритканевая жидкость. Эти результаты коррелируют с результатами, полученными в работах [5, 6].

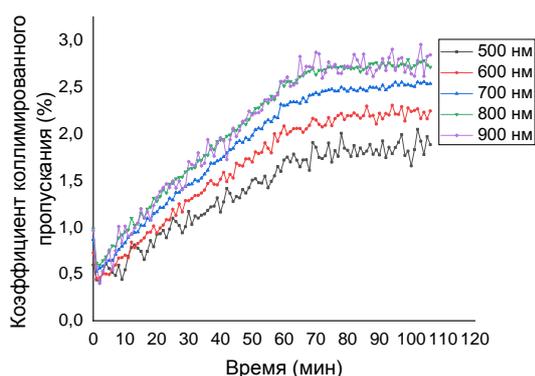


Рисунок 1. Зависимость коэффициента коллимированного пропускания образца кожи толщиной 0.250 мм от времени иммерсии в агенте «Gadovist»

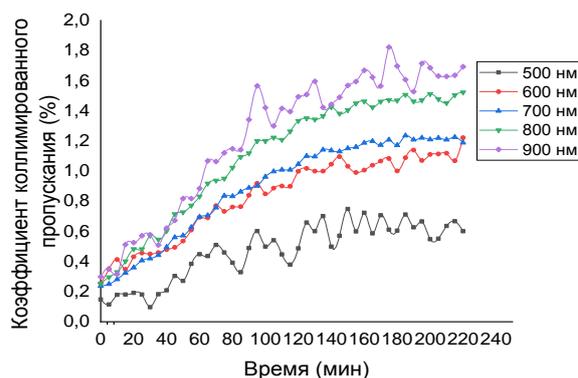


Рисунок 2. Зависимость коэффициента коллимированного пропускания образца кожи толщиной 0.315 мм от времени иммерсии в агенте «Magnevist»

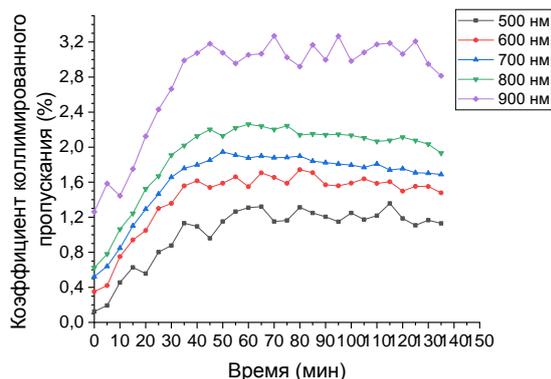


Рисунок 3. Зависимость коэффициента коллимированного пропускания образца кожи толщиной 0.228 мм от времени иммерсии в агенте «Dotarem»

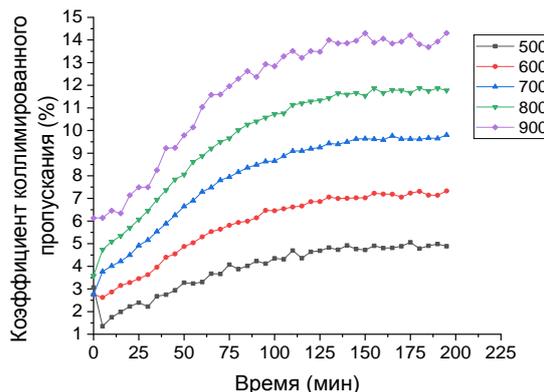


Рисунок 4. Зависимость коэффициента коллимированного пропускания образца кожи толщиной 0.110 мм от времени иммерсии в агенте «Visipaque»

На рисунке 5 представлена зависимость степени оптического просветления образцов кожи от длины волны. Видно, что «Gadovist» и «Magnevist» показали наибольшую степень оптического просветления кожи на всех длинах волн исследуемого диапазона.

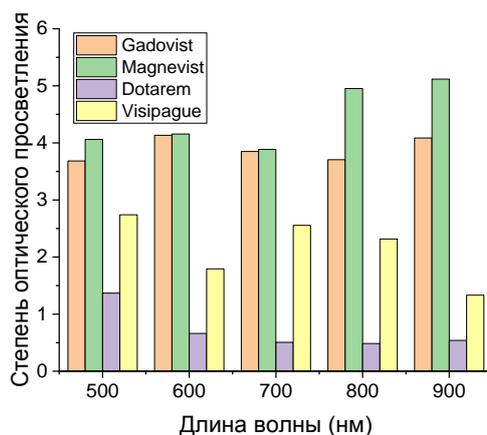


Рисунок 5. Зависимость степени оптического просветления образцов кожи от длины волны

В таблице 1 представлены значения веса и толщины образцов до и после измерения коллимированного пропускания. Из таблицы видно, что толщина и вес образцов немного изменяются, поэтому далее были проведены более тщательные измерения веса образцов кожи при их иммерсии в данных агентах.

Таблица 1. Вес и толщина образцов до и после иммерсии в агенте

Агент		«Gadovist»	«Magnevist»	«Dotarem»	«Visipaque»
До иммерсии	Вес (г)	0.0879	0.1570	0.1082	0.1160
	Толщина (мм)	0.250	0.315	0.228	0.110
После иммерсии	Вес(г)	0.0889	0.1550	0.1263	0.1020
	Толщина (мм)	0.260	0.420	0.138	0.100

На рисунках 6 и 7 видно, как влияют агенты на вес образцов кожи мыши с течением времени. Наблюдается увеличение веса образцов кожи, помещенных в «Magnevist», «Dotarem», физиологический раствор, в то время как за 30 минут действия агентов «Gadovist» и «Visipaque» не сильно повлияли на вес образцов. Наименьшее изменение веса образцов кожи получено при применении «Gadovist», что говорит о наименьшем нарушении водного баланса кожи.

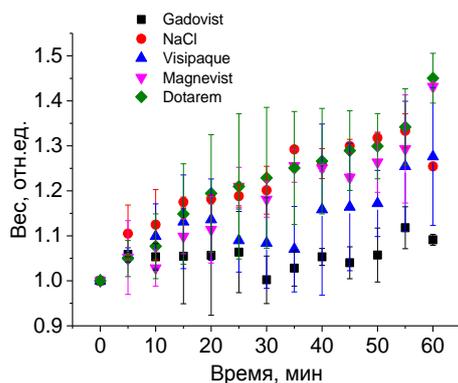


Рисунок 6. Зависимость веса образцов кожи от времени их иммерсии в исследуемых растворах

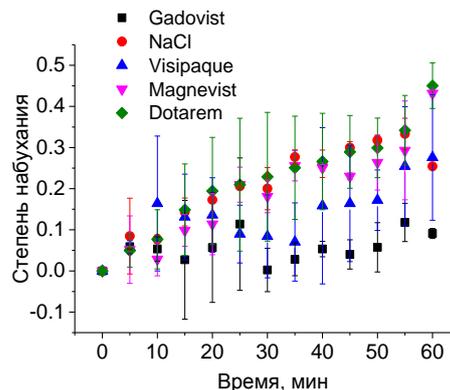


Рисунок 7. Степень набухания образцов кожи от времени их иммерсии в исследуемых растворах

Исходя из полученных результатов следует, что «Gadovist» и «Visipaque» вызывает наименьшее нарушение водного баланса в коже *in vitro*, при этом, как было показано ранее и подтверждено в текущей работе, оба агента показывают эффективное оптическое просветление кожи *ex vivo*. Действие «Gadovist» увеличило коэффициент пропускания биоткани в 4 раз за 70 минут, а «Magnevist» в 5 раз за 180 минут. Полученные результаты показывают, что МРТ и КТ агенты способны также увеличивать проницаемость ткани для света, что способствует развитию методов мультимодальной диагностики и терапии различных заболеваний.

*Работа выполнена при государственной финансовой поддержке научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях, подведомственных Федеральному агентству научных организаций, и государственных научных центрах Российской Федерации №14.W03.31.0023.*

#### Библиографический список

1. Тучин В.В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. – М: ФИЗМАТЛИТ. 2010. 488 с.

2. *Башкатов А.Н., Генина Э.А., Тучин В.В.* Исследование оптических и диффузионных явлений в биотканях при воздействии осмотически активных иммерсионных жидкостей // Саратов: Саратовский гос. ун-т. 2005.
3. *Хожиев Ш. Т., Хожиев Ш. Т.* Оптические просветления кожи и крови: перспективы и применения в медицине // Молодой ученый 2016. № 11 (115). С. 119-122.
4. *Башкатов А.Н., Генина Э.А., Долотов Л.Е., Правдин А. Б., Тучин В.В.* Учебно-методическое пособие физического факультета “Общий биофизический практикум. Биофотоника.” 2011. 144 с.
5. *Tuchina, D. K., Meerovich, I. G., Sindeeva, O. A., Zherdeva, V. V., Savitsky, A. P., Bogdanov Jr, A. A., Tuchin, V. V.* Magnetic resonance contrast agents in optical clearing: Prospects for multimodal tissue imaging // J. Biophotonics 2020. 13(11). e201960249.
6. *Тучина Д.К., Меерович И.Г., Синдеева О.А., Жердева В.В., Казачкина Н.И., Соловьев И.Д., Савицкий А.П., Богданов А.А., Тучин В.В.* Перспективы мультимодальной визуализации биологических тканей с использованием флуоресцентного имиджинга // Квант. электроника 2021. № 51(2). С. 104–117.

## ЗАВИСИМОСТЬ ДЛИНЫ ТРАЕКТОРИИ БРИЗЕРА ОТ ЕГО ЭНЕРГИИ В ГЕТЕРОГЕННОЙ ДНК

*Е.И. Гераськин<sup>1</sup>, А.П. Четвериков<sup>1,2</sup>, А.С. Шигаев<sup>2</sup>, В.Д. Лахно<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup> Институт математических проблем биологии – филиал Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

E-mail: chetverikovap@info.sgu.ru

В рамках модели Пейярда-Бишопа-Доксуа рассмотрены способы повышения длины траектории мобильных бризеров в гетерогенной молекуле ДНК с закрепленными концами. Установлено, что с увеличением энергии возбуждения влияние распределенной периодической неоднородности молекулярной цепочки на распространение бризеров вдоль цепочки слабеет. Определены параметры для реализации транспорта заряда в гетерогенной молекуле.

**Ключевые слова:** мобильный бризер, гетерогенная ДНК, модель Пейярда-Бишопа-Доксуа, АТ и ГЦ фрагменты.

Изучение сложных волновых процессов в ДНК все больше привлекает внимание исследователей в области биофизики и нанобиоэлектроники. Повышенный интерес к макромолекулярным ДНК обусловлен возможностью создания нано-проводников на основе органических молекул [1–4]. Одной из привлекательных особенностей ДНК является возможность транспорта заряда вдоль молекулы на большое расстояние.

Учитывая, что молекула ДНК часто включает последовательности нуклеотидов, содержащих в себе азотистые основания, такие как цитозин, тимин, аденин и гуанин, особое внимание в последнее время привлекает гетерогенная молекула [5,6]. Отдельной проблемой является вопрос о

возможности транспорта заряда в гетерогенной ДНК, подобного тому, который реализуется в гомогенной молекуле, как это показано в рамках квантово-классической модели Пейярда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ) [7-9].

Известно [10], что в гетерогенной ДНК, так же как и в гомогенной, можно сформировать мобильный бризер, возмущая часть нуклеотидных пар либо в центре либо у закрепленного конца молекулы. Однако бризер в неоднородной нуклеотидной цепочке распространяется хуже, чем в гомогенной с теми же параметрами и энергией возбуждения. Обусловлено это частичным рассеянием энергии бризера при прохождении его через границы АТ-ГЦ и ГЦ-АТ фрагментов молекулы.

Для преодоления неоднородностей бризеру необходимо иметь больше энергии, чем бризеру в гомогенной молекуле. Достичь этого можно, увеличивая количество возбуждаемых в начальный момент нуклеотидных пар с повышенным уровнем энергии возбуждения каждой пары, достигаемым за счет повышения степени сжатия каждой пары.

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования формирования и распространения бризеров при варьировании в широком диапазоне уровня энергии начального возмущения и распределении ее в кластере возбуждаемых нуклеотидных пар гетерогенной цепочки в рамках модели Пейярда-Бишопа-Доксуа (ПБД) [11].

В основе приближенной модели ПБД лежит гамильтониан

$$H_{lat} = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} M (\dot{w}_n^2 + \dot{v}_n^2) + V_n(w_n, v_n) + W_n(w_{n,n-1}, v_{n,n-1}) \right\}, \quad (1)$$

где  $M$  – масса нуклеотида,  $w_n$  и  $v_n$  – смещения двух нуклеотидов в  $n$ -ой нуклеотидной паре от положений равновесия. Нелинейный on-site потенциал Морзе  $V_n$  определяет связь частиц в  $n$ -ой нуклеотидной паре. Потенциал межпарного взаимодействия  $W_n$  описывает взаимодействие смежных нуклеотидных пар с номерами  $n$  и  $n-1$ .

Безразмерные уравнения движения частиц в каждой нуклеотидной паре можно записать следующим образом [9]:

$$\ddot{q}_n + \Gamma \dot{q}_n = D_r^n \sigma_r^n (e^{-\sigma_r^n q_n} - 1) e^{-\sigma_r^n q_n} - \omega_b^2 \{ (q_n - q_{n-1}) [1 + \rho e^{-\alpha(q_n - q_{n-1})}] + (q_n - q_{n-1})^2 [-\alpha \rho e^{-\alpha(q_n - q_{n-1})}] - (q_{n+1} - q_n) [1 + \rho e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)}] + (q_{n+1} - q_n)^2 [-\alpha \rho e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)}] \} , \quad (2)$$

Здесь учтено, что движения нуклеотидов в каждой паре симметричны относительно продольной оси молекулы,  $q_n = \sigma y_n$  – безразмерное смещение  $n$ -го нуклеотида от положения равновесия  $y_{n0} = 0$ . Точка обозначает производную по безразмерному времени  $\tau = \omega_M t$ ,  $\omega_M = (2\sigma^2 D \cdot M^{-1})^{1/2}$  – частота линейных колебаний нуклеотидов около положения равновесия, а  $\omega_{bond} = (k \cdot M^{-1})^{1/2} / \omega_M$  – безразмерная частота линейных

колебаний нуклеотидов вдоль комплементарных водородных связей. Параметры  $D_r = D_{GC}/D_{AT}$ ,  $\sigma_r = \sigma_{GC}/\sigma_{AT}$  характеризуют степень неоднородности цепочки, причем  $D_r^n = \sigma_r^n = 1$  в АТ фрагментах и  $D_r^n = D_r$ ,  $\sigma_r^n = \sigma_r$  в ГС фрагментах (в гомогенной цепочке  $D_r^n = \sigma_r^n = 1$  для всех  $n$ ),  $D$  и  $\sigma$  – глубина потенциальной ямы и коэффициент жесткости потенциала Морзе, коэффициент  $\alpha$  характеризует нелинейность потенциала связи,  $\Gamma \ll 1$  – коэффициент трения, характеризующий разного рода малые потери энергии в цепочке.

Решение нелинейных уравнений движения (2) проводилось численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка с шагом интегрирования 0.001-0.0001.

Характерные значения параметров модели ПБД для одной из природной ДНК традиционно оцениваются следующим образом [12,13]:  $D_{AT} = 0.05$  эВ,  $\sigma_{AT} = 4.2 \text{ \AA}^{-1}$  для АТ-пар и  $D_{GC} = 0.075$  эВ,  $\sigma_{GC} = 6.9 \text{ \AA}^{-1}$  для ГЦ-пар. Отсюда следует, что неоднородность такой молекулы очень сильная, поскольку значения параметров неоднородности  $D_r = 1.5$  и  $\sigma_r \approx 1.64$  существенно отличаются от 1. Тем не менее, в компьютерных экспериментах, в которых изучалась динамика молекул с регулярно чередующимися фрагментами с одинаковыми парами оснований АТ- или ГЦ-пар, выбираемые значения параметров основывались на приведенных выше данных.

Сначала исследовалась молекула, представляющая собой последовательность 47 нуклеотидных пар, фрагментированная по пять пар с центральным фрагментом из 5 АТ-пар (рис. 1), а потом аналогичная молекула с центральным ГЦ фрагментом.

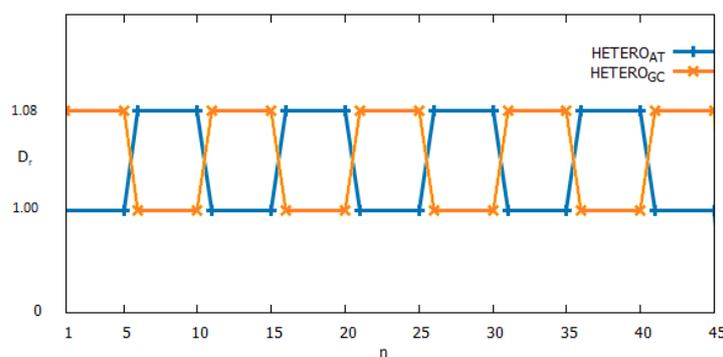


Рисунок 1. Распределение параметров  $D_r^n = \sigma_r^n$  пар оснований вдоль оси образцов гетерогенных молекул: цепочка с центральным АТ – (синим) и ГЦ – (желтым) фрагментами пар

Значения параметров  $D_r$  и  $\sigma_r$  взяты из расчета слабой неоднородности  $D_r = \sigma_r = 1.08$ , и в частном случае, для неоднородности, соответствующей природной молекуле  $D_r = 1.5$  и  $\sigma_r \approx 1.64$ .

Бризер возбуждался начальным локальным «сжатием» трех смежных нуклеотидных пар у закрепленного конца молекулы (отметим, что в

гомогенной молекуле оказывается достаточным возмущать только одну или две нуклеотидные пары [9].

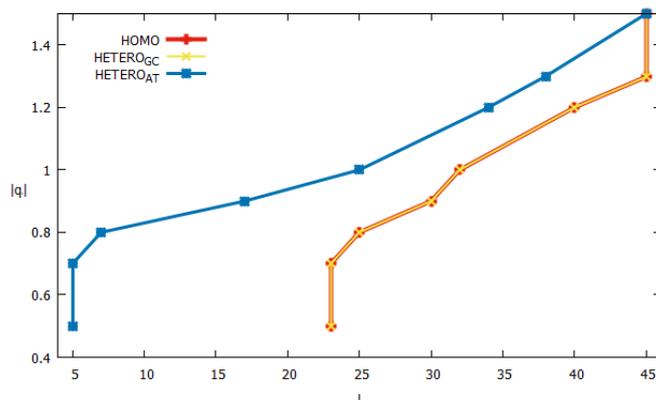
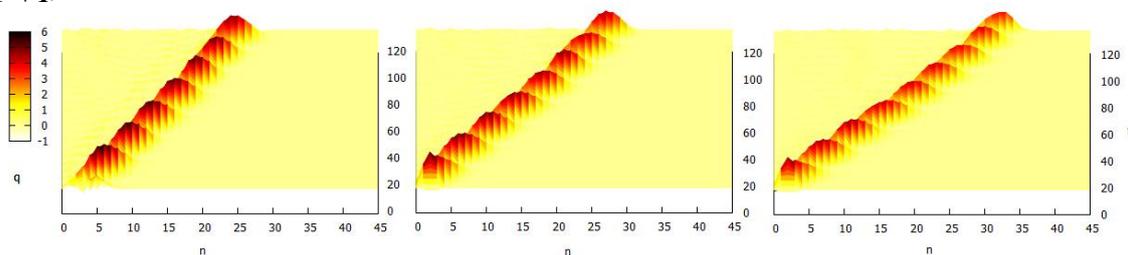


Рисунок 2. Зависимость длины траектории бризера до его разрушения от величины начального отклонения  $|q|$  трех нуклеотидов вблизи закрепленного конца в гомогенной (красным) и гетерогенной с начальными АТ- (синим) и GC- (желтым) фрагментами в цепочках с  $q_{0n \neq 1,2,3} = 0$ ,  $v_{0n} = 0$ .  $D_r = \sigma_r = 1.08$ ,  $\omega_{bond} = 0.5$ ,  $\rho = 0.5$ ,  $\alpha = 0.08$ ,  $\Gamma = 0.001$ ,  $N = 47$ ,  $t = 120$ .

На основании данных численного моделирования получена (рис.2) зависимость длины траектории мобильного бризера  $l$  от величины начального смещения по модулю  $|q|$ . Нетрудно прийти к заключению, что при увеличении энергии начального возмущения длина траектории мобильных бризеров растет почти линейно. Видно также, что длины траекторий гетерогенной цепочки с начальным ГЦ-фрагментом и гомогенной совпадают на всем рассматриваемом диапазоне  $|q|$ .

В гетерогенной цепочке с начальным АТ-фрагментом также происходит увеличение траектории в аналогичных условиях, однако длина траекторий на всем диапазоне меньше чем в гомогенной. Для успешного прохождения всей длины цепочки  $l=45$  мобильным бризером за время  $t=120$  в гомогенной и гетерогенной цепочках (со слабой неоднородностью) необходима энергия, запасаемая при начальном смещении (сжатии) трех пар  $|q|=1.5$ .



а)

б)

в)

Рисунок 3. Мобильные бризеры в ДНК с закрепленными концами при  $q_{01} = q_{02} = q_{03} = -1.0$ ,  $q_{0n \neq 1,2,3} = 0$ ,  $v_{0n} = 0$ . Эволюция распределений смещений  $q_n(t)$  в гетерогенных цепочках с начальным ГЦ-фрагментом при параметрах связи: а)  $\omega_{bond} = 0.40$ , б)  $\omega_{bond} = 0.45$ , в)  $\omega_{bond} = 0.50$

Длина траектории бризера оказывается разной в цепочке с разной жесткостью между парами оснований. На рис.3 представлена эволюция смещений частиц в гетерогенной ДНК при разной жесткости цепочки. Видно, что в цепочках, в которых параметр  $\omega_{\text{bond}}$  изменяется в пределах  $\sim 10\%$  происходит изменение длины пробега бризера в пределах 5 межпарных расстояний, при этом частота бризера изменяется в пределах 10%.

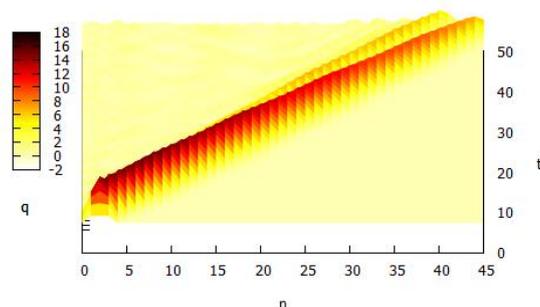


Рисунок 4. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при  $q_{01} = q_{02} = q_{03} = -1.3$ ,  $q_{0n \neq 1,2,3} = 0$ ,  $v_{0n} = 0$ . Эволюция распределений смещений  $q_n(t)$  в гетерогенной цепочке с начальным ГЦ-фрагментом и коэффициентом неоднородности  $D_f = 1.5$ .  $\sigma_f = 1.64$ ,  $\rho = 0.5$ ,  $\alpha = 0.08$ ,  $\Gamma = 0.001$ ,  $N = 47$ ,  $\omega_{\text{bond}} = 0.9$

В частном случае, при значениях параметров АТ- и ГЦ-фрагментов, близким к реальным, в гетерогенной ДНК можно сформировать мобильный бризер (рис.4).

Таким образом, за счет повышения энергии начального возмущения в гетерогенной молекуле, по аналогии с гомогенной цепочкой, можно сформировать мобильные бризеры, способные переносить заряд на большие расстояния.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-07-00406).*

#### Библиографический список

1. *Lakhno V.D.* DNA Nanobioelectronics. International Journal of Quantum Chemistry. 2008. V. 108. P. 1970–1981.
2. *Triberis G.P., Dimakogianni M.* DNA in the material world: electrical properties and nano-applications. Recent Patents on Nanotechnology. 2009. V. 3. P. 135–153
3. *Offenhauser A., Rinaldi R.* Nanobioelectronics-for Electronics, Biology, and Medicine. – Springer Science & Business Media, 2009.
4. *Лахно В. Д., Винников А. В.* Молекулярные устройства на основе ДНК. Нанобиоэлектроника //Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. – 2018. – №. 0. – С. 137-26.

5. *Hillebrand M.* Distribution of Base Pair Alternations in a Periodic DNA Chain: Application of Pólya Counting to a Physical System //Regular and Chaotic Dynamics. – 2018. – Т. 23. – №. 2. – С. 135-151.
6. *Hillebrand M.* Heterogeneity and chaos in the Peyrard-Bishop-Dauxois DNA model //Physical Review E. – 2019. – Т. 99. – №. 2. – С. 022213.
7. *Коршунова А. Н., Лахно В. Д.* Особенности моделирования движения заряда в PolyG/PolyC цепочке ДНК в постоянном электрическом поле на основе модели Пейрарда-Бишопа-Холстейна //Математическая биология и биоинформатика. – 2020. – С. 20-24.
8. *Четвериков А.П., Сергеев К.С., Лахно В.Д.* Захват и транспорт зарядов в ДНК мобильными дискретными бризерами. Мат. биол. и биоинф. 2018. Т. 13. С. 1-12.
9. *Гераськин Е. И.* Мобильные бризеры в гетерогенной молекуле ДНК //Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро-и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами: Сборник статей. – 2020. – С. 121.
10. *Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R.* Entropy-driven DNA denaturation. Physical Review E. 1993. V. 47. P. R44–R47.
11. *Шигаев А.С., Пономарёв О.А., Лахно В.Д.* Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК. Мат. биол. и биоинф. 2013. Т. 8. С. 553–664.
12. *Campa A., Giansanti A.* Experimental tests of the Peyrard-Bishop model applied to the melting of very short DNA chains. Physical Review E. 1998. V. 58. P. 3585–3588.

## ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНА МЕЖДУ СТАЦИОНАРНОЙ И ДВИЖУЩЕЙСЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ ЯМАМИ В МОЛЕКУЛЕ ДНК

*А.П. Четвериков<sup>1,2</sup>, Е.И. Казакова<sup>1</sup>, В.Д. Лахно<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup> Институт математических проблем биологии – филиал Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

E-mail: chetverikovap@info.sgu.ru

В рамках квантово-классической модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна исследован процесс туннелирования электрона между неподвижной (стационарной) ямой-ловушкой неоднородного энергетического профиля энергии и движущейся потенциальной ямой мобильного дискретного бризера в модели гомогенной молекулы ДНК. Показано, что в процессе сближения потенциальных ям максимум волновой функции электрона может попеременно локализоваться в той и другой ямах, пока не произойдет окончательный захват электрона мобильным бризером.

**Ключевые слова:** волновая функция электрона, туннелирование, мобильный дискретный бризер, ДНК, модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа-Холстейна,

Молекулярные проволоки, сформированные длинными органическими молекулами, рассматриваются как важный компонент нанобиоэлектроники [1-4]. В частности, хорошо известная молекула ДНК исследуется как один из потенциальных проводников электрических зарядов, которые будут использоваться для соединения различных функциональных компонентов. Одним из привлекательных механизмов перемещения электрона вдоль молекулы является транспорт электрона в потенциальной ловушке нелинейного дискретного бризера, возбуждаемого в цепочке нуклеотидных пар ДНК, реализующийся без влияния тянущего электрического поля [5,6].

Уже было показано, что электрон и мобильный бризер, возбуждаемый в молекуле за счет сжатия молекулы около ее закрепленного конца, могут образовывать заряженную квазичастицу, перемещающуюся вдоль оси молекулы за счет начального импульса бризера. При этом электрон может быть либо с самого начала дислоцирован в потенциальной яме бризера, либо он сначала может быть локализован в потенциальной яме-ловушке неоднородного статического профиля распределения энергии электрона [7]. В последнем случае при возбуждении бризера электрон может туннелировать в потенциальную яму бризера, если расстояние между ямами не слишком большое.

В настоящей работе исследуются характеристики процесса туннелирования электрона между статической ямой энергетического профиля и движущейся потенциальной ямой бризера, в частности, зависимость времени туннелирования от расстояния между ямами, от глубины и ширины ямы энергетического профиля.

Численное моделирование выполнено в рамках квантово-классической модели Пейярда-Бишопа-Доксуа-Холстейна (ПБДХ) [8,9], в которой динамика нуклеотидов гомогенной молекулы описывается как движение точечных частиц классическими уравнениями Ньютона, а дискретная волновая функция электрона эволюционирует в соответствии с дискретным уравнением Шредингера

$$\ddot{q}_n + \Gamma \dot{q}_n = D_r \sigma_r (e^{-\sigma_r q_n} - 1) e^{-\sigma_r q_n} - \omega_b^2 \{ (q_n - q_{n-1}) [1 + \rho e^{-\alpha(q_n - q_{n-1})}] + (q_n - q_{n-1})^2 [-\alpha \rho e^{-\alpha(q_n - q_{n-1})}] - (q_{n+1} - q_n) [1 + \rho e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)}] + (q_{n+1} - q_n)^2 [-\alpha \rho e^{-\alpha(q_{n+1} - q_n)}] \} \quad (1)$$

$$\mathcal{E}_n = i [(\varepsilon_n^0 + \chi_{el} q_n) c_n + \tau_e (c_{n+1} + c_{n-1})] \quad (2)$$

где относительная безразмерная координата  $q_n = \sigma y_n$  описывает отклонение  $n$ -го нуклеотида от положения равновесия  $y_{n0} = 0$ , точка обозначает производную по безразмерному времени  $\tau = \omega_M t$ ,  $\omega_M = (2\sigma^2 D \cdot M^{-1})^{1/2}$  –

частота малых колебаний точечных масс около положения равновесия, а  $\omega_{bond} = (kM^{-1})^{1/2}/\omega_M$  – относительная частота линейных колебаний точечных масс вдоль водородных связей, поперечных оси цепочки масс, а в потенциальном профиле энергии электрона  $\varepsilon_n^0$  имеется яма гауссовой формы с центром на  $n_a$ -ом нуклеotide глубины  $E_d$  и шириной  $\sigma_d$  (условно «донора»).

Полагается, что в начальный момент электрон локализован в потенциальной яме, а вблизи закрепленного конца молекулы возбуждается мобильный бризер за счет сжатия двух-трех нуклеотидных пар, причем степень сжатия определяет энергию мобильного бризера и его скорость, т.е. в конечном счете, предельную длину траектории бризера до его разрушения и проводимость молекулярного проводника.

В процессе численных экспериментов, параметры которых выбирались на основе известных экспериментальных данных [10] выяснилось, что после формирования бризера возникает процесс туннелирования между потенциальными ямами донора и бризера – волновая функция электрона «перетекает» в потенциальную яму бризера, возникающую за счет сгущения нуклеотидов и эффекта поляризации, и электрон локализуется в яме бризера. Удивительным оказалось то, что этот процесс происходит очень быстро, причем возможна и обратная перекачка волновой функции в яму акцептора, откуда потом волновая функция опять перекачивается в яму бризера, и электрон окончательно захватывается бризером и перемещается вместе с ним.

Эволюция волновой функции исследована в деталях, чтобы выяснить влияние на эффективность захвата параметров бризера и характеристик потенциальной ямы акцептора, в первую очередь ширины и глубины потенциальной ямы, а также ее расположения. Для оценки характеристик процесса туннелирования был проведен компьютерный эксперимент, моделирующий «перекачку» волновой функции между двумя стационарными потенциальными ямами «донора» и «акцептора» (рис. 1, а,б). Показано, что время туннелирования из одной ямы в другую растет по экспоненте от расстояния между ямами (рис.1, б).

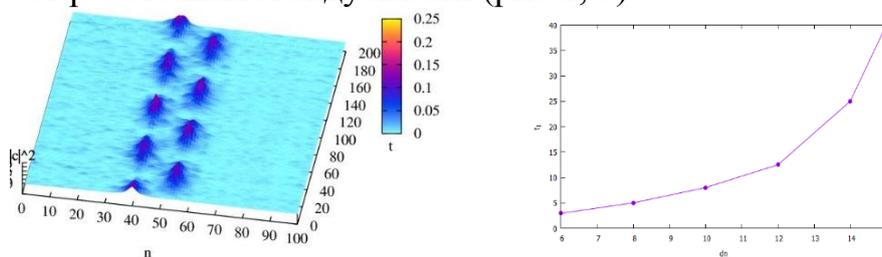


Рисунок 1. Туннелирование электрона между потенциальными ямами донора и акцептора. а) эволюция распределений вероятностей  $|c_n(t)|^2$  при расстоянии между ямами  $dn=14$ , б) зависимость времени туннелирования электрона из одной ямы в другую от расстояния между ямами. Волновая функция вначале локализована в яме донора с центром на 40-ом сайте.  $N=100$ ,  $\omega_{bond} = 0.4$ ,  $\rho = 0.5$ ,  $\alpha = 0.08$ ,  $\Gamma = 0.001$ ,  $E_d=5$ ,  $\sigma_d = 5$ .

Туннелирование волновой функции между сближающимися стационарной ямой донора и движущейся деформирующейся ямой бризера происходит более сложным образом, но характеристики процесса соответствуют оценкам, полученным в модельном эксперименте (рис. 2). В частности, время захвата электрона бризером составляет примерно 35.

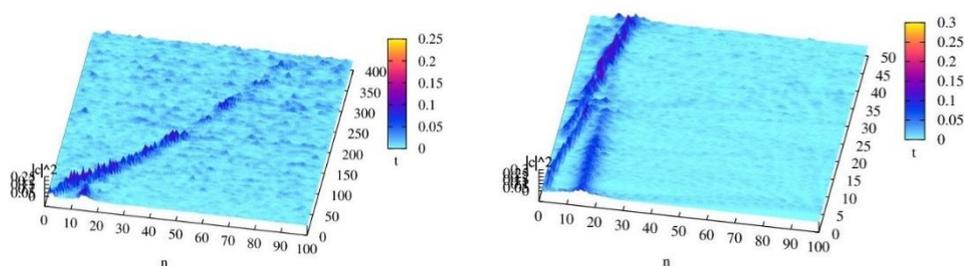


Рисунок 2. Эволюция распределения вероятностей  $|c_n(t)|^2$  в течение длительного времени  $t=400$  (а) и в течение короткого времени  $t=50$  (б). Волновая функция вначале локализована в яме донора с центром на 15-ом сайте.  $q_{0,1} = q_{0,2} = -1.5$ ,  $q_{0n \neq 1,2} = 0$ ,  $v_{0n} = 0$ .  $N=100$ ,  $\omega_{bond} = 0.4$ ,  $\rho = 0.5$ ,  $\alpha = 0.08$ ,  $\Gamma = 0.001$ ,  $E_d = 5$ ,  $\sigma_d = 5$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-07-00406).*

#### Библиографический список

1. *Lakhno V.D.* DNA Nanobioelectronics. International Journal of Quantum Chemistry. 2008. V. 108. P. 1970–1981.
2. *Triberis G.P., Dimakogianni M.* DNA in the material world: electrical properties and nano-applications. Recent Patents on Nanotechnology. 2009. V. 3. P. 135–153
3. *Offenhauser A., Rinaldi R. (ed.)*. Nanobioelectronics-for Electronics, Biology, and Medicine. – Springer Science & Business Media, 2009.
4. *Lakhno V.D., Sultanov V.B.* Baseline logical elements on the basis of DNA. International Journal of Quantum Chemistry. 2008. V. 108. P. 1913–1920.
5. *Четвериков А.П., Сергеев К.С., Лахно В.Д.* Захват и транспорт зарядов в ДНК мобильными дискретными бризерами. Мат. биол. и биоинф. 2018. Т. 13. С. 1-12.
6. *Chetverikov A.P., Ebeling W., Lakhno V.D., Velarde M.G.* Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires. Physical Review E. 2019. V. 100. P. 052203
7. *Четвериков А.П., Сергеев К.С., Казакова Е.И., Лахно В.Д.* Взаимодействие мобильного бризера с электроном, локализованным в энергетической ловушке с молекуле ДНК //Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и опти-ческого излучения с полупроводниковыми микро-и нанострук-турами, метаматериалами и биообъектами: Сборник статей. – 2020. – С. 128.
8. *Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R.* Entropy-driven DNA denaturation. Physical Review E. 1993. V. 47. P. R44–R47.
9. *Шигаев А.С., Пономарёв О.А., Лахно В.Д.* Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК. Мат. биол. и биоинф. 2013. Т. 8. С. 553–664.
10. *Campa A., Giansanti A.* Experimental tests of the Peyrard-Bishop model applied to the melting of very short DNA chains. Physical Review E. 1998. V. 58. P. 3585–3588.

# 4 ТВЕРДОТЕЛЬНАЯ СВЧ-ЭЛЕКТРОНИКА

## СПОСОБ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ИЗОТРОПНОМ ВОДНОМ РАСТВОРЕ ХЛОРОФИЛЛА

*Н. А. Бабкина, А.П. Рытик, А.М Палагута*  
Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: ra4csz@yandex.ru

В работе приведены результаты исследований по изменению однородности водного раствора хлорофилла, при воздействии сверхвысокочастотного электромагнитного излучения (СВЧ) в диапазоне 45-90 ГГц и плотности мощности 0,04 мВт/см<sup>2</sup>.

**Ключевые слова:** хлорофилл, визуализация СВЧ-излучения, изотропный раствор, электромагнитное излучение.

Визуализация магнитных и электромагнитных полей является важной задачей, в частности для понимания механизмов влияния СВЧ излучения на человека. Методы визуализации электромагнитного излучения (ЭМИ) используются не только в научных исследованиях, но и в промышленности, экологическом мониторинге, радиосвязи. В настоящее время успешно применяются методы визуализации в оптическом, УФ, ИК, рентген-диапазоне, для этого используются теоретические методы [1] и инструментальные, например, ближнеполевые сканеры (например, NOISEKEN EPS-02E Electromagnetic Field Visualization System) или люминофор-сцинтиллятор для визуализации рентгеновского излучения [2]. Следует отметить, что появляются новые методы и среды для визуализации электромагнитного излучения, например, на основе радиолюминесценции органических конденсированных сред [3] или железоаммониевые квасцы [4]. Главные характеристики в подборе новых сред для визуализации является диапазон частот и плотность мощности которые возможно детерминировать.

Целью настоящей работы явилось исследование изменения однородности водного раствора хлорофилла, при воздействии

неионизирующего излучения в полосе частот 45-90 ГГц и плотности мощности  $0,04 \text{ мВт/см}^2$ .

Для выполнения исследований была разработана экспериментальная установка на основе СВЧ-генератора сигналов Г4-142 и открытой оптопары, для оценки изменения оптической плотности раствора. В качестве исследуемой среды использовался гомогенизированный раствор эвкалипта на масляной основе и деионизованной воды. Облучение выполнялось в прозрачной полипропиленовой кювете. Генератор позволял перестраивать частоту и выходную мощность в ходе исследования.

В ходе эксперимента было установлено, что изотропность раствора хлорофилла не нарушается до момента включения генератора и подачи мощности более  $0,01 \text{ мВт/см}^2$ . При воздействии излучения, спустя 45 секунд начинает формироваться прозрачная область в области кюветы наиболее близко расположенного к волноводу. Важно заметить, что нарушение изотропности вызывали лишь частоты 45 и  $90 \pm 1$  ГГц. Дополнительно были проведены тепловизионные исследования и достоверно показано отсутствие нагрева среды или кюветы. Обнаружено, что при воздействии излучения 45 ГГц цветность раствора в области примыкания к волноводу изменялась относительно всего раствора (приобретался бледно зелено-коричневый окрас), а также проявилось расслоение раствора по оттенку и появлению на дне кюветы пузырей (рис.1). Продолжительность воздействия составляла 35 минут.

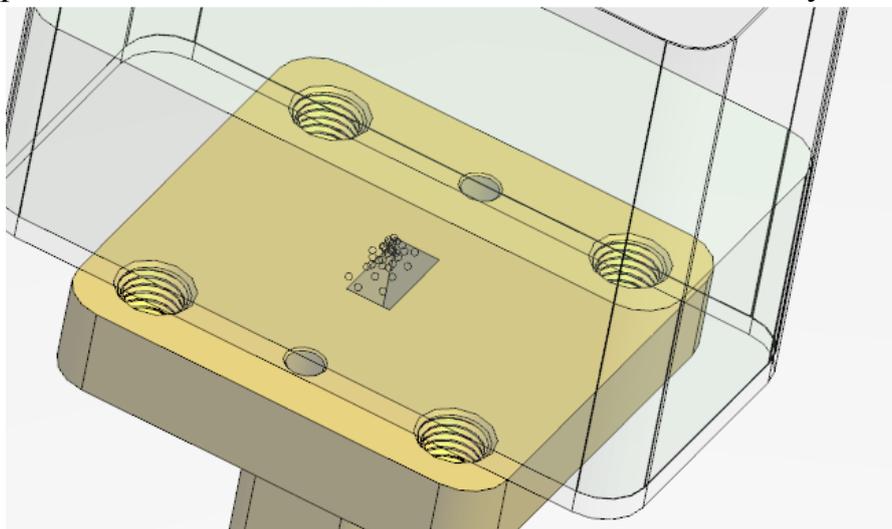


Рисунок 1. Визуализация 3D модели кюветы и волновода в SolidWorks .  
Кювета с раствором хлорофилла с пузырьками воздуха в области примыкания к волноводу

Поскольку был исключен локальный нагрев кюветы и среды, то образование пузырьков газа в кювете в области примыкания волновода к кювете связано с воздействием СВЧ излучения. В данном случае частота

воздействия была 45 ГГц, что совпадает с одной из линий поглощения кислорода [5]. Возможно, воздействие электромагнитного излучения на линии поглощения кислорода приводит к изменению конформации молекул и запасанию энергии излучения во вращательной степени свободы. Это, в свою очередь, приводит к увеличению коэффициента диффузии и образованию пузырьков воздуха растворенного кислорода. Однако расслоение по высоте объяснить воздействием излучения не удается.

Ещё одной характерной частотой была 95 ГГц, на которой возникал достоверно воспроизводимый эффект в среде – нарушение изотропности и появление осветленной области. Был измерен спектральный состав химической среды кюветы в областях с разной оптической плотностью и цветом. Спектр был получен на спектрофотометре SHIMADZU UV-1700 PharmaSpec UV-VIS. Рабочий спектральный диапазон составлял от 190-1100 нм. Результат спектрального анализа показан на рисунке 2. Спектр не отличается для двух областей в части спектрального состава, однако имеет различную интенсивность, что говорит о не изменном химическом составе и отличной концентрацией исходных компонент, в частности хлорофилла. Дополнительно были проведены спектральные измерения в области поглощения хлорофилла на УФ-спектрофотометре в полосе частот (рис.2) видно, что значительной разницы в спектре не наблюдалось, и что это может быть связано с тем, что воздействие электромагнитного излучения приводит к «очищению» раствора, то есть происходит ускорение расслоения раствора и определённые его части (в виде осадка, повторяющего геометрическую форму волновода) вытесняются за пределы фронта распространяющейся волны.

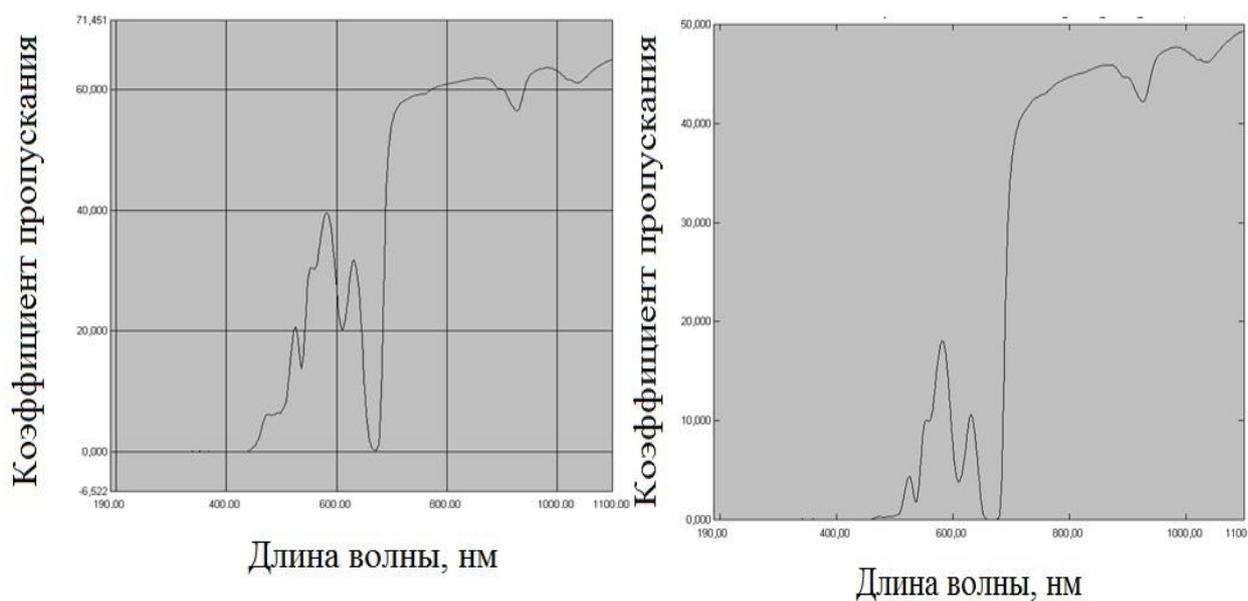
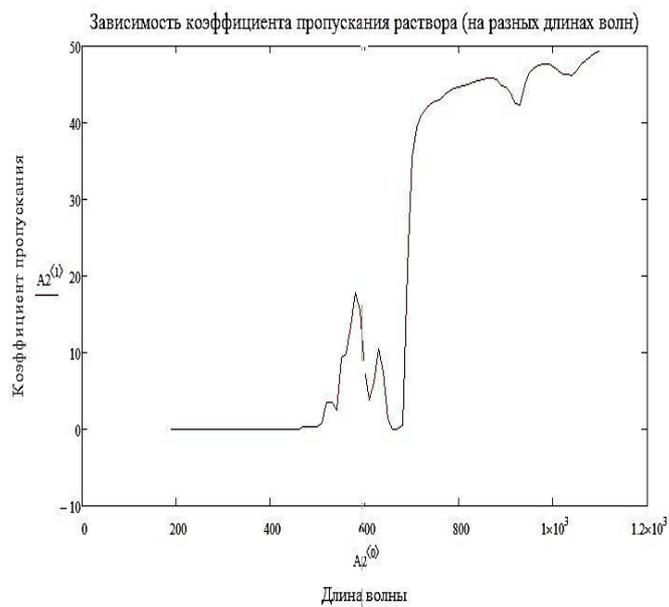


Рисунок 2. Графики с УФ-спектрофотометра

Слева график – спектр оптически более плотной среды (исходная среда изотропного раствора хлорофилла) и справа график – спектр осветленной области хлорофилла в области примыкания волновода.



Рисунок 3. Наблюдаемый фронт волны ЭМИ СВЧ в растворе (сверху- при размещении в растворе постоянного магнита, внизу- без)



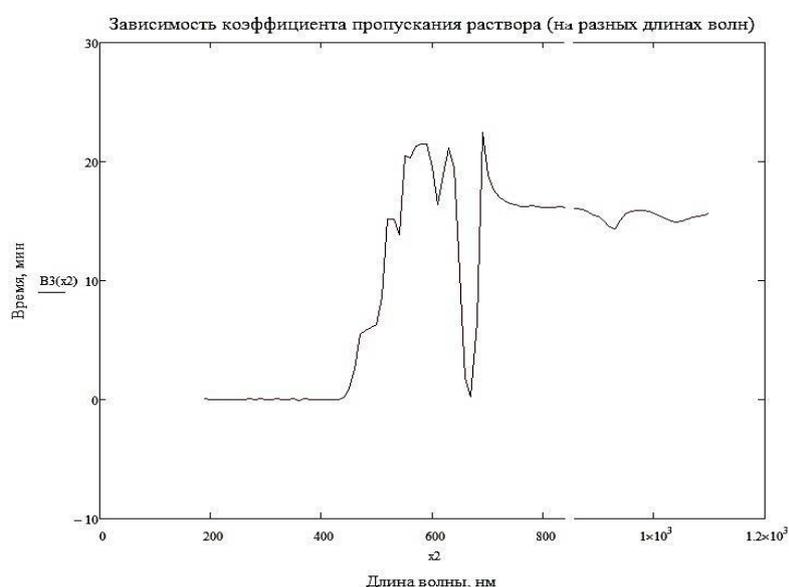
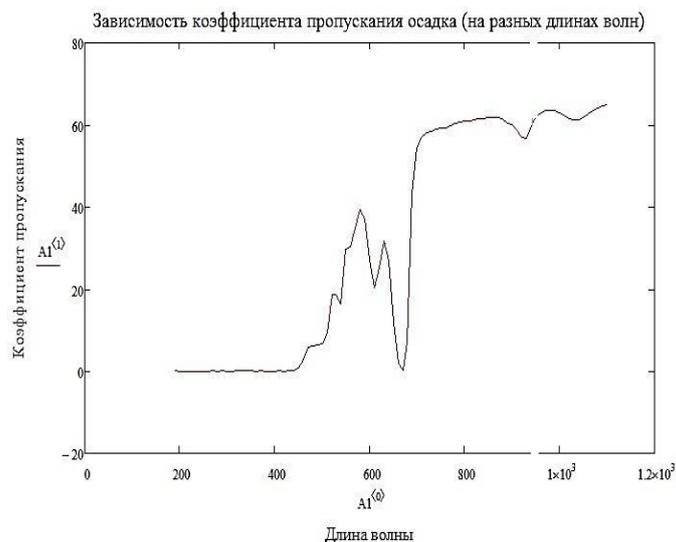


Рисунок 4. Слева график– спектр оптически более плотной среды (исходная среда изотропного раствора хлорофилла) и справа график– спектр освещенной области хлорофилла в области примыкания волновода. Внизу график – сравнение двух спектров.

Также были проведены исследования на ИК-Фурье спектрометре IRAFFINITY-1S в диапазоне длин волн  $7800\text{--}350\text{ см}^{-1}$  в полученных данных наблюдается корреляция с предыдущими графиками, а именно, наблюдается сходство на участках, как в освещенной области, так и в области оптически более плотной.

Приведенные результаты подтверждают выдвигаемую гипотезу об очищении раствора под воздействием ЭМИ (СВЧ).

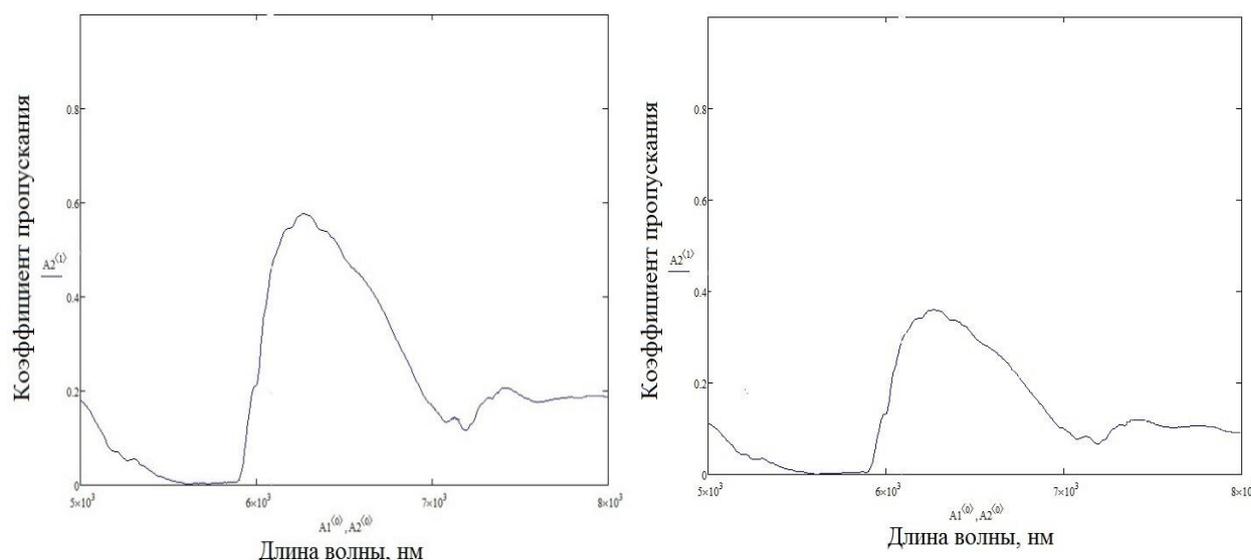


Рисунок 5. Слева – спектр оптически более плотной среды (затемненная исходная среда изотропного раствора хлорофилла) и справа – спектр осветленной области хлорофилла в области примыкания волновода.

Таким образом, воздействие СВЧ-излучения влияет на однородность раствора хлорофилла – появляется осветленная область и в растворе появляются структуры, по которым можно говорить о наличии электромагнитного излучения. Полученные результаты позволяют предположить, возможность использования изотропной среды для визуализации ЭМИ. Также результаты могут быть полезны для экологического аспекта очистки вод.

#### Библиографический список

1. Звездина М.Ю., Шокова Ю. А., Шоков А. В., Визуализация электромагнитного поля апертурной антенны подвижной связи в рамках социально ориентированного электромагнитного мониторинга // *Universum: технические науки*. 2015. №8-9 (20)
2. Rossi M., Casali F., Golovkin S.V., Govorun V.N. Digital radiography using an EBCCD-based imaging device // *Appl. Radiation and Isotopes* 2000. Vol.53. P.699-709
3. Galunov, Nikolai & Гринева, Б & Tarasenko, Oleg. (2005). Особенности сцинтилляционного процесса в органических сцинтилляторах. *Voprosy atomnoj nauki i tehniki = Pytannja atomnoj nauki i tehniki = Problems of atomic science and technology*. 176-181.
4. Березовчук, А. В. Электромагнитное излучение и химические реакции / А. В. Березовчук, А. В. Шантроха, М. А. Старшов. — Текст: непосредственный // *Молодой ученый*. — 2010. — № 11 (22). — Т. 1. — С. 109-112.
5. Бецкий О.В., Голант М.Б., Девятков Н.Д. СВЧ-волны в биологии. —М.: Знание, 1988. —64 с.
6. Маслов М.Ю., Сподобаев М.Ю., Сподобаев Ю.М. Электромагнитный мониторинг мегаполиса. *Труды научно-исследовательского института радио*. 2013. No 4.С.5–7.
7. Маслов М.Ю., Сподобаев М.Ю., Сподобаев Ю.М. Современные проблемы электромагнитной экологии. *Электросвязь*. —2014. —№ 10. —С. 39–42.
8. Трубецков Д. И., Храмов А. Е. Лекции по сверхвысокочастотной электронике для физиков. В 2-х томах. 2003-2004 г. С. 496-648.
9. Харвей А.Ф. Техника сверхвысоких частот. В 2-х томах.1965 г. С. 59-63.

10. *Гвоздовер С. Д.* Теория электронных приборов сверхвысоких частот. М., Гостехиздат, 1956. С 98-100.
11. *Усанов Д.А., Горбатов С.С., Орлов В.Е., Вениг С.Б.* Резонансы в полубесконечном волноводе с диафрагмой, связанные с возбуждением волн высших типов // *Письма в ЖТФ*, 2000, том 26, вып. 18. С47-53.
12. *Усанов Д.А., Рытик А.П., Бабкина Н.А.* Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2018 / Сборник статей всероссийской школы-семинара. под редакцией д.а. Усанова. 2018, «Изменение сопротивления раствора хлорофилла при воздействии различной плотности мощности ЭМИ на частоте 60 ГГц» С. 162—165.

## **ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПОЛОСКОВЫХ ИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР С КИРАЛЬНЫМИ ПОДЛОЖКАМИ**

*Д.С. Клюев, А.М. Неццет, Ю.В. Соколова*  
Поволжский государственный университет  
телекоммуникаций и информатики, г. Самара  
E-mail: neshceret\_a@list.ru

Работа посвящена вопросам определения характеристик излучения полосковых излучающих структур с подложками из киральных метаматериалов. Получены выражения для определения продольных и поперечных составляющих напряженностей электрического поля. Приведены результаты расчётов напряженностей электрического и магнитного полей в пространстве. Установлено, что такие структуры с достаточно узким излучателем могут излучать электромагнитные волны с круговой поляризацией. Приведены также диаграммы направленности данной излучающей структуры. Показано, что такие структуры при горизонтальном, относительно поверхности, расположении излучателя могут излучать и принимать волны с азимутальных направлений.

**Ключевые слова:** полосковая излучающая структура, киральный метаматериал, интегральное представление поля, характеристики излучения, поляризация.

На данный момент достаточно перспективным подходом к улучшению характеристик антенных систем может оказаться подход, связанный с применением в их конструкции киральных метаматериалов [1]. Киральный метаматериал представляет собой совокупность металлических элементов зеркально-асимметричной формы, которые равномерно уложены в диэлектрическом контейнере. Такими элементами являются, в частности, спирали, S-элементы, гаммадионы и т.п.

При этом актуальной задачей является разработка эффективных методов численного моделирования таких излучающих структур на основе киральных метаматериалов, корректных и адекватных математических моделей, позволяющих с высокой точностью рассчитывать их характеристики. Поскольку такие структуры являются достаточно сложными, с точки зрения вычислительной эффективности, необходимо также, чтобы разрабатываемые методы не требовали чрезмерно больших вычислительных ресурсов.

В работах [2,3] показан подход к численному моделированию данных излучающих структур на основе киральных метаматериалов, основанный на методе сингулярных интегральных представлений поля. Данный подход предполагает получения сингулярного интегрального уравнения Коши относительно неизвестной функции распределения плотности тока по излучателю структуры, численное решение которого является корректной математической задачей по Адамару. При этом данное уравнение было решено несколькими методами, в частности, методом частичного обращения оператора (МЧОО), методом моментов, а также методом коллокации [2]. Наиболее эффективным является МЧОО, поскольку численно вычисляется лишь часть решения, отвечающая за возбуждение структуры. Остальная часть решения определяется аналитически.

На рис. 1 приведена излучающая структура с металлизированной биизотропной киральной подложкой, макроскопические параметры которой равны  $\epsilon_1, \mu_1, \chi$ , где  $\chi$  - параметр киральности, определяющий степень взаимосвязи процессов электрической и магнитной поляризации в киральном метаматериале. На поверхности подложки находится достаточно узкий прямоугольный излучатель.

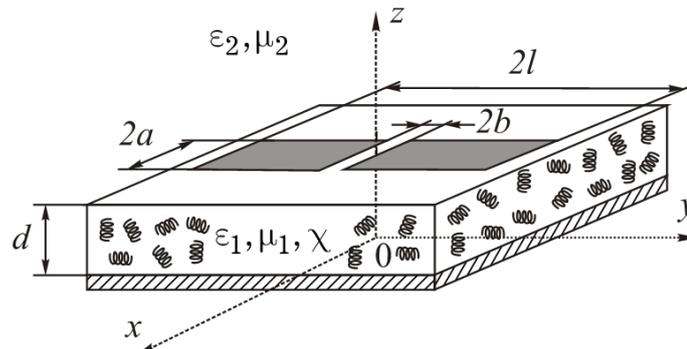


Рисунок 1. Геометрия излучающей структуры с киральной подложкой

Математическая модель излучающей структуры с киральной подложкой базируется на использовании феноменологической теории, которая предполагает применение специальных материальных уравнений [4]:

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \epsilon_0 \epsilon_1 \vec{E} \mp i\chi \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \vec{H} \\ \vec{B} &= \mu_0 \mu_1 \vec{H} \pm i\chi \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \vec{E} \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\epsilon_0, \mu_0$  - электрическая и магнитная постоянные.

Кроме того, в математической модели такой структуры используется также матрица поверхностных импедансов  $[Z]$  границы раздела диэлектрик - киральная среда, являющаяся связующим звеном между Фурье-образом напряженности электрического поля с Фурье-образом поверхностной плотности тока на поверхности излучателя [2,3].

После выполнения обратного преобразования Фурье, с учётом того, что распределение поперечной составляющей плотности тока описывается квазистатическим приближением:  $\eta_y(x', y') = f(y')/\sqrt{1-(x'/a)^2}$  где  $f(y')$  – неизвестная функция, описывающая продольное распределения поверхностной плотности тока, было получены сингулярное интегральное уравнение с особенностью Коши относительно функции  $f'(y') = df(y')/dy'$  :

$$\frac{1}{\pi} \int_{-l}^l \frac{af'(y')}{y'-y} dy' = \sigma v(y) + \int_{-l}^l af'(y')K(y, y') dy', \quad (2)$$

После определения функции распределения плотности тока по излучателю структуры с киральной подложкой были получены выражения для определения поперечной и продольной составляющих напряженностей электрического и магнитного полей в диэлектрическом полупространстве:

Вид выражений для напряженностей электрического поля:

$$E_y^{(2)}(x, y, z) = \int_{-a-l}^a \int_{-l}^l \eta_y(x', y') Z_{yy}^{(2)}(x', y', x, y, z) dx' dy', \quad (3)$$

$$E_x^{(2)}(x, y, z) = \int_{-a-l}^a \int_{-l}^l \eta_y(x', y') Z_{yx}^{(2)}(x', y', x, y, z) dx' dy',$$

где  $Z_{yy}^{(2)}(x', y', x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-h_{\max}}^{h_{\max}} \int_{-\beta_{\max}}^{\beta_{\max}} Z_{11}(\beta, h) e^{-i\gamma_2(z-d)} e^{-i\beta(x-x')} e^{-ih(y-y')} d\beta dh,$

$$Z_{yx}^{(2)}(x', y', x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-h_{\max}}^{h_{\max}} \int_{-\beta_{\max}}^{\beta_{\max}} \hat{Z}_{yx}^{(2)}(\beta, h, z) e^{-i\beta(x-x')} e^{-ih(y-y')} d\beta dh,$$

$$\hat{Z}_{yx}^{(2)}(\beta, h, z) = \left[ -\frac{2Y_{21}^{(2)}(\beta, h)}{Y_{22}^{(2)}(\beta, h)} Z_{11}(\beta, h) - Z_{21}(\beta, h) \right] e^{-i\gamma_2(z-d)},$$

Вид выражений для напряженностей магнитного поля:

$$H_y^{(2)}(x, y, z) = \int_{-a-l}^a \int_{-l}^l \eta_y(x', y') K_{yy}^{(2)}(x', y', x, y, z) dx' dy', \quad (4)$$

$$H_x^{(2)}(x, y, z) = \int_{-a-l}^a \int_{-l}^l \eta_y(x', y') K_{yx}^{(2)}(x', y', x, y, z) dx' dy',$$

где  $K_{yy}^{(2)}(x', y', x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-h_{\max}}^{h_{\max}} \int_{-\beta_{\max}}^{\beta_{\max}} K_{11}^{(2)}(\beta, h) e^{-i\gamma_2(z-d)} e^{-i\beta(x-x')} e^{-ih(y-y')} d\beta dh,$

$$K_{yx}^{(2)}(x', y', x, y, z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-h_{\max}}^{h_{\max}} \int_{-\beta_{\max}}^{\beta_{\max}} \hat{K}_{yx}^{(2)}(\beta, h, z) e^{-i\beta(x-x')} e^{-ih(y-y')} d\beta dh,$$

$$\hat{K}_{yx}^{(2)}(\beta, h, z) = \left( \frac{\varepsilon_2}{\mu_2} \frac{Z_{11}(\beta, h)}{Y_{22}^{(2)}(\beta, h)} - \frac{(Y_{21}^{(2)}(\beta, h))^2}{Y_{22}^{(2)}(\beta, h)} Z_{11}(\beta, h) - Y_{21}^{(2)}(\beta, h) Z_{21}(\beta, h) \right) e^{-i\eta_2(z-d)}.$$

$$K_{11}^{(2)}(\beta, h) = Y_{21}^{(2)}(\beta, h) Z_{11}(\beta, h) + Y_{22}^{(2)}(\beta, h) Z_{21}(\beta, h),$$

В вышеприведенных выражениях присутствуют элементы матрицы поверхностных импедансов  $[Z]$  и матрицы входных адмитансов диэлектрического полупространства  $[Y^{(2)}]$ , которые были определены в [2].

На рис. 2 приведены зависимости модулей  $x$  и  $y$ -составляющих напряженностей магнитного поля от координат  $x$ ,  $y$  и  $z$ , соответствующих направлению главного излучения, при следующих параметрах:  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ,  $a/\lambda = 0.025$ ,  $l/\lambda = 0.25$ ,  $b/\lambda = 0.01$ ,  $d/\lambda = 0.1$  и  $\chi = 0$  (а),  $\chi = 0.3$  (б).

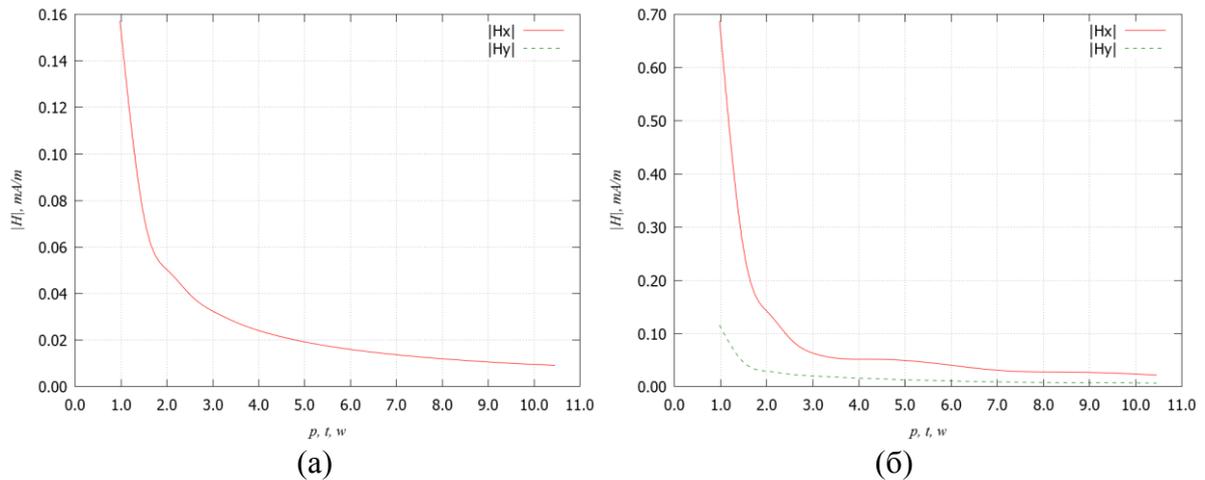


Рисунок 2. Зависимости модуля  $x$  и  $y$ -составляющих напряженностей магнитного поля от координат при  $\chi = 0$  (а) и  $\chi = 0.3$  (б)

Из графиков видно, что в случае излучающей структуры с диэлектрической подложкой (рис. 2а) продольная составляющая напряженности магнитного поля  $H_y^{(2)}$  имеет значение, близкое к нулю. Это объясняется тем, что в случае линейной поляризации вектор  $\vec{H}^{(2)}$  является ортогональным по отношению к вектору  $\vec{E}^{(2)}$ . В случае, если у излучающей структуры появляется киральная подложка, то  $H_y^{(2)}$  становится отличной от нуля, что говорит о вращении векторов  $\vec{E}^{(2)}$  и  $\vec{H}^{(2)}$  относительно излучателя.

На рис. 3 приведены зависимости модулей  $x$  и  $y$ -составляющих напряженностей электрического поля от координат  $x$ ,  $y$  и  $z$ , при  $\chi = 0$  (а) и  $\chi = 0.3$  (б), и других аналогичных параметрах излучающей структуры.

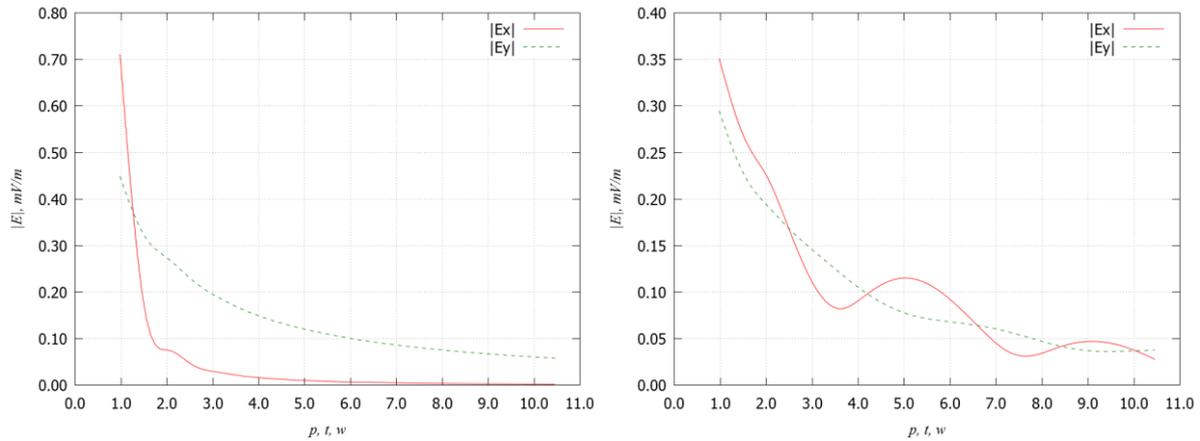


Рисунок 3. Зависимости модуля x и y-составляющих напряженностей электрического поля от координат при  $\chi = 0$  (а) и  $\chi = 0.3$  (б)

С увеличением параметра киральности происходит уменьшение отношения  $|E_y|/|E_x|$ , а при  $\chi = 0.3$ , средние значения этих составляющих напряженностей электрического поля становятся сопоставимыми, что свидетельствует о том, что излучаемые такой структурой электромагнитные волны обладают круговой поляризацией.

На рис. 4 показаны нормированные диаграммы направленности (ДН) излучающей структуры с подложкой из лево- и правосторонних киральных метаматериалов. Параметр киральности излучающей структуры равен  $\chi = 0$  (а) и  $\chi = 0.3$  (б), а параметры, а другие - аналогичны предыдущим.

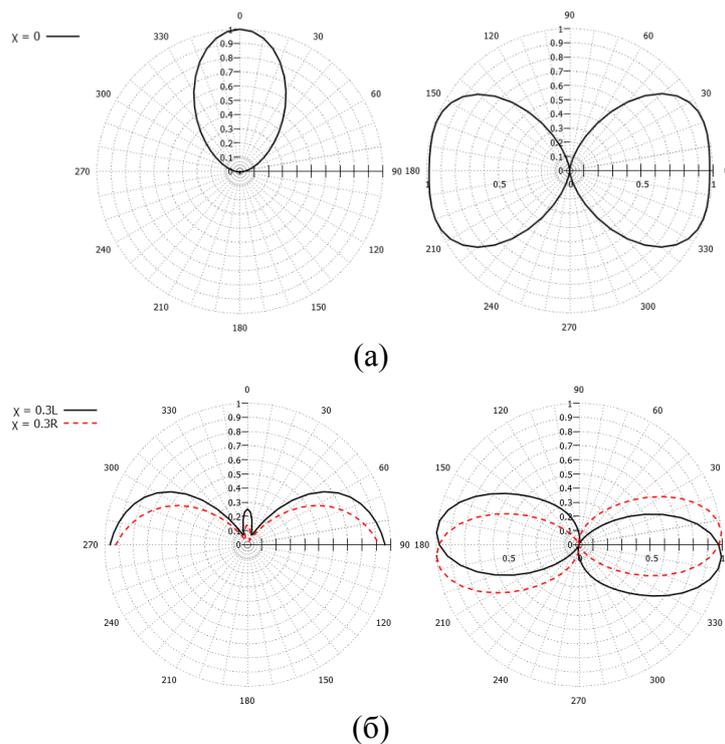


Рисунок 4. Нормированные ДН в вертикальной (слева) и азимутальной (справа) плоскостях излучающей структуры с киральной подложкой

Как видно из представленных графиков, при  $\chi = 0.3$  данная структура с киральной подложкой начинает излучать электромагнитные волны в азимутальных направлениях.

#### Библиографический список

1. Бузов А.Л., Ключев Д.С., Нещерет А.М., Неганов В.А. Перспективы использования метаматериалов в антеннах нового поколения // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2017. Т. 20. № 3. С. 15-20.
2. Нещерет А.М. Анализ микрополосковых антенн с подложками из киральных метаматериалов методом сингулярных интегральных уравнений // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2018. – № 4. – т. 21. – С. 6 - 16.
3. Ключев Д.С., Нещерет А.М., Осипов О.В., Почепцов А.О. Анализ микрополосковой антенны на киральной подложке с учетом пространственной дисперсии // Успехи современной радиоэлектроники. 2015. №11. С. 67 – 72.
4. Ключев Д.С., Нещерет А.М. Применение методов моментов и коллокаций для расчета характеристик антенн на основе киральных метаматериалов // Сборник статей седьмой Всероссийской научной школы-семинара «Взаимодействие СВЧ, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами» / под ред. проф. Ал.В. Скрипаля – Саратов: Изд-во «Саратовский источник», 2020. — С. 75-79.
5. Неганов В.А., Осипов О.В. Отражающие, волноведущие и излучающие структуры с киральными элементами. – М.: Радио и связь. 2006. 280 с.

## НАНОУГЛЕРОДНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ПОДАВЛЕНИЯ ЭМИССИИ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ КАТОДНО-СЕТОЧНЫХ УЗЛОВ МОЩНЫХ ЭВП СВЧ И СУБТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНОВ

*Яфаров Р.К.<sup>1,2</sup>, Шабунин Н.О.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский филиал Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

[pirpc@yandex.ru](mailto:pirpc@yandex.ru)

Предложена технология получения и модификации поверхности тонкопленочных углеродных покрытий с целью увеличения работы выхода электронов и уменьшения энергии связи диполь-дипольного взаимодействия Ван-дер-Ваальса при адсорбции распыляемых атомов активных веществ металлопористых термокатодов. Показано, что плазменное фторирование углеродных покрытий увеличивает работу выхода электронов не менее, чем на 0,6 эВ и уменьшает вторичную электронную эмиссию более, чем в два раза. Это позволит минимизировать влияние вторичных электронов на функционирование катодно-сеточных узлов мощных ЭВП и увеличить их долговечность.

**Ключевые слова:** вторичная электронная эмиссия, алмазографитовые структуры, дипольный момент, плазменное фторирование, работа выхода.

Электроравакуумные приборы СВЧ и субтерагерцового диапазонов имеют широкое применение, как в наземных, так и в воздушно-космических радиотехнических устройствах. С развитием средств космической связи усилился интерес к источникам электронов на основе металлопористых катодов (МПК) с потенциальной долговечностью и надежностью в десятки и сотни тысяч часов. Это обусловлено тем, что на их основе изготовлены практически все производимые в мире усилители на базе ЛБВ или ЛОВ, используемые для радиолокации, наземной и космической связи, телевидения, сотовой связи и пр.

Одним из основных требований, предъявляемых к МПК, является повышение плотности отбираемого тока, которое достигается увеличением рабочей температуры и, как следствие, сопровождается высокой скоростью испарения его активного вещества, предназначенного для уменьшения температурного коэффициента работы выхода электронов. Низковольтный отбор тока большой плотности достигается при малых межэлектродных расстояниях (300-500 мкм), а это сопряжено с интенсивным перемещением активного вещества на управляющую сетку. Вследствие его напыления, а также радиационного нагрева и токоперехвата, сетка сама становится эмитирующим элементом. Паразитная термоэмиссия сетки, усиливается ее вторичной эмиссией под действием пучка первичных электронов, снижает качество запирающего электронного потока в промежутке между импульсами. Результатом этого является ухудшение характеристик и снижение долговечности МПК и прибора в целом. Это является одним из основных факторов, который снижает долговечность ЭВП.

В настоящее время предложены различные способы подавления эмиссии материала сетки. Наиболее перспективные среди них связаны с применением различного рода покрытий, обладающих, с одной стороны, относительно высокой работой выхода электронов, а с другой, низкой энергией связи продуктов испарения МПК с поверхностью антиэмиссионного материала [1,2]. Перспективными покрытиями, обладающими такими свойствами, являются углеродные пленки [3,4].

Целью работы является получение наноуглеродных пленочных покрытий с повышенной работой выхода электронов для использования в качестве антиэмиссионных сеточных покрытий мощных ЭВП СВЧ и субтерагерцового диапазонов.

Плазмохимическое осаждение углеродных покрытий проводилось в вакуумной установке с использованием СВЧ ионно-плазменного источника на частоте 2,45 GHz [5]. Мощность СВЧ-излучения и индукция магнитного поля составляли 250 W и 875 Gs. Величина магнитного поля обеспечивала выполнение условий электронного циклотронного резонанса, при котором степень ионизации плазмы составляла около 5%. Осаждение осуществлялось на стеклянные подложки с никелевыми

контактными площадками. В качестве плазмообразующего вещества использовались пары этанола при давлении 0,02 Па. Напряжение смещения на подложкодержателе при осаждении составляло – 300В. Подложки в экспериментах нагревались до температуры  $300 \pm 10^\circ\text{C}$ . Для уменьшения коэффициента вторичной электронной эмиссии (КВЭЭ) и снижения скорости осаждения активного вещества МПК полученную углеродную пленку обрабатывали в микроволновой плазме, где в качестве плазмообразующего использовался фторсодержащий газ  $\text{CF}_4$ . Обработка производилась при давлении  $\text{CF}_4$  0,1 Па и различных смещениях на подложкодержателе в течение 5 минут.

Исследования поверхности углеродных структур осуществлялись с использованием атомно-силовой микроскопии (АСМ). Исследования автоэмиссионных свойств проводились при давлении  $10^{-5}$  Па на диодной структуре, способной изменять расстояние между электродами с точностью до 1  $\mu\text{m}$ . Расстояние между катодной структурой и анодом составляло 40 мкм. Диаметр рабочей поверхности анода, изготовленного из углеродного материала МПГ-6, составлял 3 мм.

На рис. 1, 2 приведены АСМ изображения морфологий и распределений поверхностных плотностей высот выступов-острий углеродной пленочной структуры с удельным поверхностным сопротивлением 110 кОм/ $\square$  до и после обработки в плазме  $\text{CF}_4$ . Видно, что до обработки в плазме  $\text{CF}_4$  наибольшую поверхностную плотность имеют острия высотой около 18 нм с радиусом закругления вершин 1-2 нм. После плазменной обработки в  $\text{CF}_4$  за счет травления углеродной пленки высота острий с максимальной поверхностной плотностью увеличилась до 23 нм. Поверхностная плотность и радиус закругления вершин острий при этом уменьшились, соответственно, до  $4 \cdot 10^{10}$   $\text{cm}^{-2}$  и 0,5 – 1,0 нм. Как известно, наибольшая плотность полевого тока реализуется в случаях, если полевая эмиссия осуществляется одновременно с наибольшего количества острий. В данном случае это острия высотой 18 нм и 23 нм. Коэффициенты усиления поля  $K$  при таких микрогеометриях поверхностей, в первом приближении представляющими собой отношение высот острий к радиусу закругления их вершин, имеют значения, соответственно, около 10-20 до обработки в плазме  $\text{CF}_4$  и 25-50 после обработки. Эти значения коэффициентов усиления поля  $K$  использованы для определения работы выхода электронов из автоэмиссионных ВАХ построенных в координатах Фаулера и Нордгейма (рис. 3).

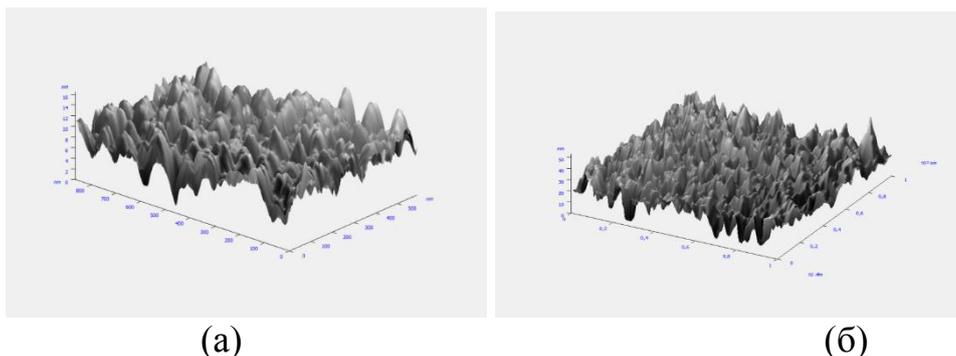


Рисунок 1 – АСМ изображения углеродной пленочной структуры до (а) и после обработки в плазме  $\text{CF}_4$  (б)

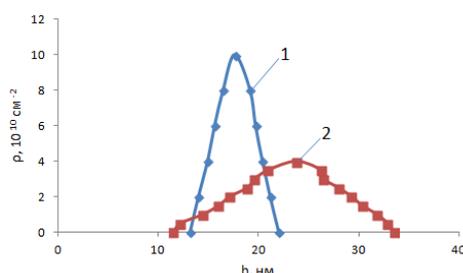


Рисунок 2 – Распределения поверхностных плотностей высот выступов углеродной пленки до (1) и после (2) обработки в плазме  $\text{CF}_4$

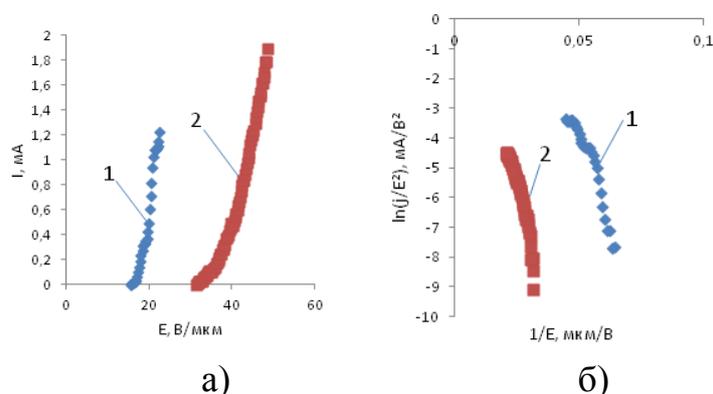


Рисунок 3 – ВАХ алмазграфитовой пленочной структуры в линейных (а) и Фаулера-Нордгейма (б) координатах: 1 – до обработки в плазме  $\text{CF}_4$ ; 2 – после обработки в плазме  $\text{CF}_4$

Расчеты работы выхода электронов углеродной структуры с коэффициентами усиления поля до обработки в плазме  $\text{CF}_4$  ( $K_1 = 15$ ) и после нее ( $K_2 = 30$ ) по методике, изложенной в работе [6], показали ее увеличение от исходных 4,6 эВ до 5,2 эВ после обработки в плазме  $\text{CF}_4$ .

С использованием ранее разработанной численной методики определения вторично-эмиссионных свойств пленочных алмазграфитовых наноконкомпозитов по яркости изображений в сканирующем электронном микроскопе [7], проведены исследования влияния энергии ионов фторсодержащего плазмообразующего вещества на вторичную электронную эмиссию (ВЭЭ) наноуглеродных пленочных

структур, как до обработки в плазме  $CF_4$ , так и после нее. Кроме того, в связи с высокими температурными условиями эксплуатации антиэмиссионных сеточных покрытий исследования проведены также для обработанных в плазме  $CF_4$  углеродных структур после их вакуумного высокотемпературного отжига, который проводился при  $P=10^{-3}$  Па и температуре  $300\text{ }^\circ\text{C}$  в течение 30 минут. Соответствующие зависимости приведены на рис. 4 (точке с координатой 0,0 соответствует значение ВЭЭ углеродной пленки до ее обработки в плазме  $CF_4$ ). Из рис. 4 можно видеть: 1- обработка в плазме  $CF_4$  позволяет уменьшить ВЭЭ углеродных пленок более, чем в два раза: с 900 усл. ед. до 400 усл. ед.; 2 – наблюдается зависимость ВЭЭ от энергии фторсодержащих ионов бомбардирующих углеродную пленочную структуру: с увеличением смещения на подложкодержателе от -100 В до -300 В ВЭЭ уменьшается с 500 усл. ед. до 400 усл. ед.; 3 – высокотемпературный вакуумный отжиг обработанных в плазме  $CF_4$  углеродных структур несколько улучшает ВЭЭ: при смещении – 300 В ВЭЭ увеличилась от 400 до 500 усл. ед., что практически в два раза меньше, чем в отсутствие обработки.

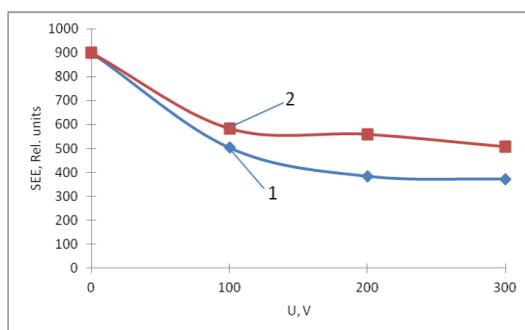


Рисунок 4 – Зависимости ВЭЭ (усл. ед.) от напряжения смещения на подложкодержателе при обработке в плазме  $CF_4$  наноструктур до (1) и после (2) вакуумного отжига

При низкоэнергетичной ионно-плазменной обработке углеродных покрытий в высокоионизованной фторсодержащей среде ( $CF_4$ ) химически активными частицами являются ионы  $CF_n^+$ , где  $n = 0...4$ , а также радикалы  $CF_n$  и нейтральные атомы фтора. При хемосорбции они образуют адкомплексы  $C = CF_m$ , где  $m = 1...3$  [5]. Наиболее сильной связью обладают комплексы C-F (5,6 эВ), она более чем в два раза превышает энергию разрыва химической связи C-C (2,74 эВ). При плазменной обработке эти комплексы пассивируют оборванные в результате ионной бомбардировки химические связи поверхностных атомов углеродного покрытия. Ввиду высокой электроотрицательности фтора результатом пассивации является увеличение суммарного дипольного момента поверхности углеродного покрытия. Дипольный момент, вызванный адсорбатом, направлен от поверхности покрытия в вакуум и приводит к увеличению работы выхода электронов. Установлено, что увеличение

может составить не менее 0,6 эВ. Следствием этого является уменьшение КВЭЭ более чем в два раза. Кроме того, использование фторированных наноуглеродных пленочных структур, одновременно с увеличением работы выхода электронов, может уменьшить вероятность прилипания испаряемых с МПК ЭВП активных примесей. Последнее обусловлено низкой поляризуемостью комплексов  $CF_m$  и, как следствие, низкой энергией связи диполь-дипольного взаимодействия Ван-дер-Ваальса при адсорбции распыляемых атомов примеси МПК, что затрудняет их переход в конденсированное состояние с последующим влиянием на термоэмиссию сетки. Суммарное влияние этих факторов позволит минимизировать влияние вторичных электронов на функционирование КСУ и увеличить долговечность ЭВП.

### Библиографический список

1. Дюбуа Б.Ч., Ермолаев Л.А. Антиэмиссионные и антидинаatronные материалы // Вопросы радиоэлектроники. Серия 1 «Электроника». 1964. Вып. 12. С. 170.
2. Бабанов Ж.Н., Козлов Б.И., Андреев А.А. К вопросу о подавлении термоэлектронной эмиссии с сеток электровакуумных приборов. // Электронная техника. Серия 6 «Материалы». 1980. Вып. 8(320). С. 14-17.
3. Анпилов А.М., Бархударов Э.М., Косый И.А., Мисакян М.А. Патент RU № 2565199 от 20.10.2015 г., МПК: C01B 31/02, B82B 3/00, B82Y 40/00. / Способ получения наноструктурированного углеродного покрытия.
4. Jin Chenggang, Huang Tianyuan, Yang Yan, Yang Dongjin, Hu Yibo, Zhuge lanjian, Wu Xiemei Патент CN № 104241061 (A) от 24.12. 2014 г., МПК: H01J 1/14. / Material for suppressing secondary electron emission.
5. Яфаров Р.К. Физика СВЧ вакуумно-плазменных нанотехнологий. – М.: Физматлит, 2009. – 216 с.
6. Усанов Д. А., Яфаров Р. К. Методы получения и исследование самоорганизующихся наноструктур на основе кремния и углерода: учеб.-метод. пособие для студентов фак. Нано- и биомед. Технологий / Д. А. Усанов, Р. К. Яфаров. – Саратов: Изд-во Сарат. Унта, 2011. – 124 с.
7. Yafarov R. K., Shabunin N.O., Shanygin V. Ya., Zakharevich A.V. Nanocarbon Composites for Non-Incandescent Microwave Magnetrons and Subterahertz Ranges. Izv. Saratov Univ. (N.S.), Ser. Physics, vol. 20, iss. 2, pp. 134-143 (in Russian).

# РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ЭКРАНИРОВАНИЯ ШИРОКОПОЛОСНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ СИГНАЛОВ МАГНИТОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ОДНОСЛОЙНЫМ ПЛОСКИМ ЭКРАНОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АТОМАРНЫХ ФУНКЦИЙ

*В.Т.Ерофеенко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Учреждение Белорусского государственного университета «НИИ прикладных проблем математики и информатики»  
E-mail: bsu\_erofeenko@tut.by

Сформулирована краевая задача экранирования, описывающая проникновение широкополосных временных сигналов через плоский однослойный магнитодиэлектрический экран. Аналитическое решение задачи представлено в виде интегралов Фурье через монохроматические спектральные электромагнитные поля. Спектральные поля выражены через базисные плоские монохроматические поля с использованием атомарных функций. Поле, проникшее через экран, аналитически представлено в интегральном виде. Приведена формула для вычисления коэффициентов эффективности экранирования широкополосных временных сигналов при прохождении через экран.

**Ключевые слова:** плоский магнитодиэлектрический экран, широкополосные временные сигналы, монохроматические волны, атомарные функции, эффективность экранирования.

В теории электромагнитного поля значительное внимание уделяется методам аналитического моделирования временных сигналов, передаваемых импульсными электромагнитными полями в вакууме и в композитных материалах [1]. Для исследования частотных структур электромагнитных сигналов применяется интегральное преобразование Фурье, преобразующее сигналы в монохроматические спектральные электромагнитные поля, которые выражаются через базисные монохроматические поля [2]. В электродинамике одним из важнейших классов задач является класс краевых задач экранирования импульсных электромагнитных полей композитными экранами, выполненными из различных материалов.

В работе рассмотрен плоский однослойный магнитодиэлектрический экран. Сформулирована краевая задача экранирования с классическими граничными условиями непрерывности тангенциальных составляющих электромагнитных полей на плоскостях экрана для определения широкополосных электромагнитных сигналов, прошедших через экран. Для аналитического решения задачи применен метод двухсторонних(нелокальных) граничных условий на магнитодиэлектрическом экране связывающих электромагнитные поля по обе стороны экрана. Задача решена аналитически и решение представлено через атомарные функции [3].

**Постановка краевой задачи экранирования широкополосных электромагнитных сигналов магнитодиэлектрическим экраном**

В пространстве  $R^3$  из вакуума с декартовой системой координат  $Oxyz$  размещен плоский магнитодиэлектрический экран  $D(0 < z < \Delta)$ , характеризуемый материальными параметрами  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r, \mu = \mu_0 \mu_r$  ( $\varepsilon > 0, \mu > 0$ );  $\varepsilon_0, \mu_0$  – электрическая и магнитная постоянные,  $c$  – скорость света в вакууме. Экран ограничен плоскостями  $\Gamma_1(z=0), \Gamma_2(z=\Delta)$ . На экран воздействует первичное электромагнитное поле  $\vec{E}_0(\vec{r}, t), \vec{H}_0(\vec{r}, t)$ . В рассматриваемой структуре возбуждаются электромагнитные поля:  $\vec{E}'_1(\vec{r}, t), \vec{H}'_1(\vec{r}, t)$  – отражённое поле в полупространстве  $D_1(z < 0)$ ;  $\vec{E}_1(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}, t) + \vec{E}'_1(\vec{r}, t), \vec{H}_1(\vec{r}, t) = \vec{H}_0(\vec{r}, t) + \vec{H}'_1(\vec{r}, t)$ ;  $\vec{E}(\vec{r}, t), \vec{H}(\vec{r}, t)$  – поле в слое  $D$ ;  $\vec{E}_2(\vec{r}, t), \vec{H}_2(\vec{r}, t)$  – поле в полупространстве  $D_2(z > \Delta)$ .

Сформулируем краевую задачу экранирования. [2].

Краевая задача 1. Для заданного первичного поля  $\vec{E}_0, \vec{H}_0$  требуется определить поля  $\vec{E}'_1, \vec{H}'_1; \vec{E}_2, \vec{H}_2; \vec{E}, \vec{H}$ , которые удовлетворяют уравнениям

$$\text{rot } \vec{E}_j = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}_j}{\partial t}, \text{rot } \vec{H}_j = \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}_j}{\partial t} \quad \text{в } D_j, \quad (1)$$

$$\text{rot } \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \text{rot } \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad \text{в } D; \quad (2)$$

граничным условиям непрерывности тангенциальных составляющих полей на плоскостях  $\Gamma_1, \Gamma_2$

$$(\vec{E}_{1\tau} - \vec{E}_\tau)|_{z=0} = 0, (\vec{H}_{1\tau} - \vec{H}_\tau)|_{z=0} = 0, (\vec{E}_{2\tau} - \vec{E}_\tau)|_{z=\Delta} = 0, (\vec{H}_{2\tau} - \vec{H}_\tau)|_{z=\Delta} = 0; \quad (3)$$

и условиям излучения на бесконечности.

В качестве первичного поля выберем широкополосный электромагнитный сигнал, распространяющийся под углом  $\theta_0$  к экрану  $D$  в направлении вектора  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ .

$$\vec{E}_0(\vec{r}, t) = \frac{E_0 \Omega_{\text{сиг}}}{4\pi} (-\vec{v}_1 A_0 \sin(\alpha_+(t)) + \vec{v}_2^{(-)} B_0 \cos(\alpha_+(t))) \text{Up}(\alpha_+(t)), \quad (4)$$

$$\vec{H}_0(\vec{r}, t) = \frac{E_0 \Omega_{\text{сиг}}}{4\pi Z_0} (\vec{v}_2^{(-)} A_0 \sin(\alpha_+(t)) + \vec{v}_1 B_0 \cos(\alpha_+(t))) \text{Up}(\alpha_+(t)), \quad (5)$$

где

$$\alpha_+(t) = \frac{\Omega_{\text{сиг}}}{2} (p_+ - t), \text{Up}(y) = \prod_{n=1}^{\infty} \text{sinc}\left(\frac{y}{2^n}\right), \text{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x};$$

$$\vec{v}_1 = \sin \varphi_0 \vec{e}_x - \cos \varphi_0 \vec{e}_y, \vec{v}_2^{(\mp)} = \mp \cos \theta_0 (\cos \varphi_0 \vec{e}_x + \sin \varphi_0 \vec{e}_y) + \sin \theta_0 \vec{e}_z; \quad (6)$$

$$p_{\pm} = \frac{1}{c} (p_1 x + p_2 y \pm p_3 z), p_1 = \sin \theta_0 \cos \varphi_0, p_2 = \sin \theta_0 \sin \varphi_0, p_3 = \cos \theta_0,$$

Частотный диапазон плоского сигнала (4), (5) сосредоточен на отрезке  $-\Omega_{\text{сиг}} < \omega < \Omega_{\text{сиг}}$ ;  $A_0, B_0$  – физически безразмерные постоянные,  $Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ ,  $E_0$  – постоянная величина,  $[E_0] = \frac{B}{M}$ ;  $0 < \varphi_0 < 2\pi, 0 < \theta_0 < \frac{\pi}{2}$ . В дальнейшем рассмотрен случай  $TE$  – поляризованных широкополосных электромагнитных сигналов ( $A_0 \neq 0, B_0 = 0$ ; вектор  $\vec{E}_0$  параллелен экрану  $D$ ).

### 1. Краевая задача экранирования спектральных монохроматических электромагнитных полей для широкополосных временных сигналов.

Решение краевой задачи для  $TE$  – поляризованных полей представим в интегральном виде через монохроматические электромагнитные поля.

$$\vec{E}_0(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}_0(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad \vec{H}_0(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{H}_0(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (7)$$

$$\vec{E}'_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}'_1(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad \vec{H}'_1(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{H}'_1(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

$$\vec{E}_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}_2(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad \vec{H}_2(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{H}_2(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (8)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{H}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

где в областях возбуждаются монохроматические электромагнитные поля: первичное поле  $\vec{E}_0(\vec{r}, \omega), \vec{H}_0(\vec{r}, \omega)$  в области  $D_1$ , колеблющееся с круговой частотой  $\omega = 2\pi f$ ;  $\vec{E}'_1(\vec{r}, \omega), \vec{H}'_1(\vec{r}, \omega)$  – отраженное поле в области  $D_1$ ;  $\vec{E}_2(\vec{r}, \omega) = \vec{E}_0(\vec{r}, \omega) + \vec{E}'_1(\vec{r}, \omega), \vec{H}_2(\vec{r}, \omega) = \vec{H}_0(\vec{r}, \omega) + \vec{H}'_1(\vec{r}, \omega)$  – суммарное поле в области  $D_1$ .

Краевая задача 2. Для заданного первичного монохроматического поля  $\vec{E}_0, \vec{H}_0$  требуется определить поля  $\vec{E}'_1, \vec{H}'_1$ ;  $\vec{E}_2, \vec{H}_2$ ;  $\vec{E}, \vec{H}$ ; для которых выполнены уравнения

$$\text{rot } \vec{E}_j = i\omega\mu_0 \vec{H}_j, \quad \text{rot } \vec{H}_j = -i\omega\epsilon_0 \vec{E}_j, \quad \text{в } D_j, \quad (9)$$

$$\text{rot } \vec{E} = i\omega\mu \vec{H}, \quad \text{rot } \vec{H} = -i\omega\epsilon \vec{E}, \quad \text{в } D, \quad (10)$$

граничные условия непрерывности тангенциальных составляющих полей на плоскостях  $\Gamma_1, \Gamma_2$ ,

$$\left(\vec{E}_{1\tau} - \vec{E}_{\tau}\right)\Big|_{z=0} = 0, \quad \left(\vec{H}_{1\tau} - \vec{H}_{\tau}\right)\Big|_{z=0} = 0, \quad \left(\vec{E}_{2\tau} - \vec{E}_{\tau}\right)\Big|_{z=\Delta} = 0, \quad \left(\vec{H}_{2\tau} - \vec{H}_{\tau}\right)\Big|_{z=\Delta} = 0, \quad (11)$$

и условия излучения на бесконечности.

Задачу (8) -(10) разрешим, используя двухсторонние (нелокальные) граничные условия [4]. Для первичного спектрального  $TE$  – поляризованного поля

$$\vec{E}_0 = A\vec{W}_0^{(-1)}(\vec{r}, k_0), \vec{H}_0 = h_0 A\vec{W}_0^{(-2)}(\vec{r}, k_0), \quad (12)$$

соответствующего нестационарному полю (4) -(5), вычислим поля

$$\vec{E}_2 = x_2\vec{W}_0^{(-1)}(\vec{r}, k_0), \vec{H}_2 = h_0 x_2 \vec{W}_0^{(-2)}(\vec{r}, k_0), \quad z > \Delta; \quad (13)$$

$$\vec{E}'_1 = x_1 \vec{W}_0^{(+1)}(\vec{r}, k_0), \quad \vec{H}'_1 = h_0 x_1 \vec{W}_0^{(+2)}(\vec{r}, k_0), \quad z < 0;$$

где базисные плоские поля [2]

$$\vec{W}_0^{(\mp 1)}(\vec{r}; \theta_0, \varphi_0; k_0) = \frac{i}{\sin\theta_0} \vec{V}_1 \Phi(x, y) F^{(\pm)}(z),$$

$$\vec{W}_0^{(\mp 2)}(\vec{r}; \theta_0, \varphi_0; k_0) = \left( \mp \frac{\cos\theta_0}{\sin\theta_0} \vec{V}_2 + \sin\theta_0 \vec{e}_z \right) \Phi(x, y) F^{(\pm)}(z),$$

$$\Phi = \Phi(x, y) = \exp(ik_0(p_1 x + p_2 y)), \quad F^{(\pm)} = F^{(\pm)}(z) = \exp(\pm ik_0 z \cos\theta_0), \quad k_0 = \frac{\omega}{c},$$

$$h_0 = \frac{1}{iZ_0}, \quad Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}, \quad \vec{V}_1 = p_2 \vec{e}_x - p_1 \vec{e}_y, \quad \vec{V}_2 = p_1 \vec{e}_x + p_2 \vec{e}_y.$$

## 2. Вычисление электромагнитного поля для широкополосного временного сигнала прошедшего через экран.

Амплитуда  $x_2$  монохроматического поля (11) определяется формулами:

$$x_2(\omega) = \frac{A}{FD}, \quad A = \frac{1}{2} E_0 A_0 \text{up}_{\text{ш}}^{(-)}(\omega), \quad \text{up}_{\text{ш}}^{(\pm)}(\omega) = \text{up}\left(\frac{2\omega}{\Omega_{\text{сиг}}} - 1\right) \pm \text{up}\left(\frac{2\omega}{\Omega_{\text{сиг}}} + 1\right),$$

$$D = \cos(k_0 \bar{v} \Delta) - iB \sin(k_0 \bar{v} \Delta), \quad B = \frac{1}{2} \left( \frac{\mu_r \cos\theta_0}{\bar{v}} + \frac{\bar{v}}{\mu_r \cos\theta_0} \right),$$

$$F = \exp(ik_0 \Delta \cos\theta_0),$$

$$\bar{v} = \sqrt{\bar{k}^2 - \sin^2\theta_0}, \quad \bar{k} = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}; \quad \text{up}(x) - \text{атомарная функция [3].}$$

Подставляя электрические поля (12), (13) в интегралы (7), (8), вычислим широкополосные электромагнитные сигналы в точке  $M_0 \in \Gamma_2$ .

$$\vec{E}_0(\vec{r}, t)|_{M_0} = \frac{\bar{A}_0 \Omega_{\text{сиг}}}{2\pi \sin\theta_0} \vec{V}_1 e_0(\bar{t}), \quad \vec{E}_2(\vec{r}, t)|_{M_0} = \frac{\bar{A}_0 \Omega_{\text{сиг}}}{\pi \sin\theta_0} \vec{V}_2 e_2(\bar{t}),$$

$$\text{где } e_0(\bar{t}) = \sin\left(\alpha_0 - \frac{\bar{t}}{2}\right) \text{Up}\left(\alpha_0 - \frac{\bar{t}}{2}\right), \quad \alpha_0 = \frac{\Omega_{\text{сиг}} \Delta}{2c} \cos\theta_0;$$

$$e_2(\bar{t}) = \int_0^1 \frac{1}{|D|^2} \text{up}(2x-1) (\cos(\alpha_2 x) \sin(x\bar{t}) - B \sin(\alpha_2 x) \cos(x\bar{t})) dx,$$

$\alpha_2 = \frac{\Omega_{\text{сиг}} \bar{v}}{2c} \Delta$ ,  $|D|^2 = (\cos^2(2\alpha_2 x) + B^2 \sin^2(2\alpha_2 x))$ ,  $\bar{t} = \Omega_{\text{сиг}} t$  – безразмерное время.

Коэффициент эффективности экранирования определим соотношением

$$\mathcal{E} = \frac{\max_{0 \leq \bar{t} < \infty} |\vec{E}_0|}{\max_{0 \leq \bar{t} < \infty} |\vec{E}_2|} = \frac{\max_{0 \leq \bar{t} < \infty} |e_0(\bar{t})|}{\max_{0 \leq \bar{t} < \infty} |e_2(\bar{t})|}.$$

**Выводы.** Рассмотрен магнитоэлектрический экран с положительными диэлектрической и магнитной проницаемостями. Исследовано проникновение через экран  $TE$  – поляризованного импульсного широкополосного электромагнитного сигнала (вектор  $\vec{E}_0$  параллелен экрану), распространяющегося под углом  $\theta_0$  к экрану. Электромагнитный сигнал, прошедший через экран, аналитически представлен в виде интеграла с физически безразмерными параметрами. Коэффициент эффективности экранирования определяет во сколько раз ослабевает первичное поле при прохождении через экран.

#### Библиографический список

1. *Виноградов А. П.* Электродинамика композитных материалов / М.: Эдиториал УРСС, 2001. 206 с.
2. *Ерофеев В. Т., Козловская И. С.* Аналитическое моделирование в электродинамике / М.: Либроком, 2014. 304 с.
3. *Кравченко В. Ф.* Лекции по теории атомарных функций и некоторым их приложениям. Монография / М.: Радиотехника, 2003. 512 с.
4. *Бондаренко В. Ф., Ерофеев В. Т.* Экранирование импульсных электромагнитных полей многослойными плоскопараллельными экранами с чередующимися магнитными и немагнитными слоями // Физические основы приборостроения. 2017. Т.6, № 2(24). С.53-66.

# СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СУЛЬФИДА КАДМИЯ В МАТРИЦЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ

*С.Ю. Молчанов<sup>1</sup>, Н.М. Ушаков<sup>2,3</sup>, И.Д. Кособудский<sup>2,4</sup>*

<sup>1</sup>Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН,  
Саратовский филиал

<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет им. Н.Г. Чернышевского,  
Институт физики

<sup>4</sup>Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.  
E-mail: nmu@bk.ru

Введение в матрицу полиэтилена низкой плотности КТ CdS с концентрацией от 5 до 20 мас.% увеличивает диэлектрическую проницаемость более чем в два раза. Размер наночастиц CdS составлял от 2 до 7 нм. Экспериментальные образцы в виде толстых пленок толщиной от 80 до 100 мкм были приготовлены методом термокомпрессии. Комплексную диэлектрическую проницаемость измеряли в диапазоне от 2 до 8 ГГц. Для образцов с 20 мас.% CdS NPs обнаружен размерный эффект.

**Ключевые слова:** полимерный композит, СВЧ диэлектрические свойства, сульфид кадмия, квантовая точка, полиэтилен низкой плотности.

Разработка диэлектрических материалов и покрытий на основе композиционных наноматериалов в широком диапазоне СВЧ-частот особенно актуальна в последнее время в связи с появлением технологических возможностей создания материалов и покрытий с контролируемыми диэлектрическими свойствами [1, 2]. Среди таких материалов особое место, на наш взгляд, могут занять нанокompозитные материалы на основе полимеров, которые обладают регулируемыми в широком диапазоне диэлектрическими, тепловыми и оптическими свойствами, а также имеют низкую стоимость производства, особенно при массовом производстве [3]. В зависимости от решаемой задачи в СВЧ-диапазоне полимерная матрица заполняется наночастицами с разной проводимостью. Металлические, полупроводниковые наночастицы и углеродные наноструктуры в пространстве полимерной матрицы могут быть использованы для создания радиопоглощающей среды, диэлектриков с низкой диэлектрической проницаемостью и т. д. [4, 5]. В настоящей работе полупроводниковые наночастицы CdS были выбраны в качестве наполнителя в полимерной матрице на основе LDPE. В некоторых из наших предыдущих работ (например, см. [6]) было показано, что композиционные наноматериалы на основе наночастиц CdS обладают интересными оптическими свойствами. Однако эти материалы очень плохо изучены в СВЧ диапазоне частот.

В данной статье представлены результаты СВЧ измерений

комплексной диэлектрической проницаемости, тангенса угла диэлектрических потерь и вносимых потерь для толсто пленочных образцов на основе полиэтиленовой матрицы низкой плотности (высокого давления) с наночастицами CdS различной концентрации и размера.

Для количественной оценки коэффициента диэлектрических потерь и вносимых потерь в композитном материале линия передачи с образцом в виде толстой нанокompозитной пленки на полимерной основе представлена в качестве полосового фильтра. Известно, что коэффициент пропускания полосового фильтра  $|\tau|^2$  в переходной зоне между частотными областями непрозрачности и прозрачности можно оценить как [7]

$$|\tau|^2 = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \left( \frac{2\sqrt{SWRV}}{1+SWRV} \right)^2 \quad (1)$$

где  $P_{in} = P_0(1-|\Gamma|^2)$  - СВЧ мощность, прошедшая в полосовой фильтр в области прозрачности;  $P_0$  - падающая СВЧ от генератора;  $|\Gamma|$  - коэффициент отражения СВЧ в области прозрачности;  $SWRV$  - коэффициент стоячей волны.

Поглощенная СВЧ мощность в фильтре в области прозрачности вычисляется, как

$$P_{out} = P_{in} \cdot \exp(-\alpha l) \quad (2)$$

отсюда,

$$|\tau|^2 = \exp(-\alpha l) \quad (3)$$

На основании соотношений (1-3) вносимые потери можно оценить, как

$$\alpha = -\left(\frac{2}{l}\right) \ln\left(\frac{2\sqrt{SWRV}}{1+SWRV}\right) \text{ Неп/м} \quad (4)$$

$$\alpha = -\left(\frac{17,372}{l}\right) \lg\left(\frac{2\sqrt{SWRV}}{1+SWRV}\right) \text{ дБ/м} \quad (5)$$

где  $\alpha$  коэффициент СВЧ ослабления в фильтре (Неп или дБ),  $l$  - длина образца (м).

Реальная и мнимая часть диэлектрической проницаемости легко найти на основании (4) в виде

$$\text{Re } \varepsilon^* = \left( \frac{\beta^2 - \alpha^2}{\beta_0^2} \right) \quad \text{Im } \varepsilon^* = \left( \frac{2\alpha\beta}{\beta_0^2} \right) \quad (6)$$

Тогда тангенс угла диэлектрических потерь можно определить, как

$$\operatorname{tg} \delta = \left( \frac{2\alpha\beta}{\beta^2 - \alpha^2} \right) \quad (7)$$

где  $\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\varepsilon}$  постоянная распространения СВЧ волны в линии передачи с образцом;

где  $\beta_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$  постоянная распространения СВЧ волны в линии передачи без образца

$\lambda_0$  длина волны в свободном пространстве.

В данной работе синтез наночастиц CdS был проведен методом термодеструкции координационных комплексов тиомочевинны и соответствующих солей металлов. Выбор термодеструкции координационных комплексов тиомочевинны в качестве метода синтеза наночастиц CdS объясняется тем, что при использовании тиомочевинны в качестве сульфонирующего агента ее молекула образует комплексные соединения с переходными металлами, которые под термическим воздействием разлагаются до соответствующих сульфидов металлов. Взаимодействие соли металла с сульфидирующим агентом начинается уже в растворе, благодаря чему достигается координация Cd-S в комплексном соединении. Это делает возможным внедрение атома серы в ближайшее окружение атомов кадмия, что в свою очередь приводит к образованию сульфидов. Преимущество этого метода заключается в том, что частицы вставляются в матрицу на основе полимера сразу же в момент их образования, следовательно, сульфид кадмия образуется в условиях, исключая фазу образования оксида кадмия. Анализ состава и конструкции комплексного соединения, являющегося основным материалом для фазы сульфидообразования, показывает, что фрагменты сульфидной структуры уже начинают формироваться во внутренней сфере.

Исследование полученных композитов проводилось с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Изображение металлических частиц получено на микроскопе *JEM-1011* компании *JEOL* при 100 кВ. Исследуемый материал подвергался ультразвуковому диспергированию в этиловом спирте, после чего диспергированный порошок наносился на углеродную основу. На основании полученных микрофотографий проведен гранулометрический анализ по программе, разработанной в субмикронной электронной лаборатории Саратовского филиала ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН. Программа позволяет рассчитать все статистические свойства нормального и логнормального распределения наночастиц в зависимости от их размера. Средний размер частиц CdS для 5 мас.% составляет  $2 \pm 1$  нм, 10 мас.% -  $5 \pm 1$  нм и для 20 мас.% -  $(4-7) \pm 1$  нм. На основе полученного нанопорошка методом

термокомпрессии формировали толсто пленочные образцы толщиной 80-100 мкм, использованные в дальнейшем при измерениях.

При лабораторных исследованиях комплексной диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  диэлектрических материалов в СВЧ диапазоне используются разные методы. Среди них известен метод, использующий стандартную панорамную аппаратуру для автоматизированного измерения стоячей волны напряжения в волноводно-коаксиальных и полосовых трассах. Это значительно облегчает измерения по сравнению с методами, основанными на измерительных линиях. В данной статье измерения вносимых потерь проводились на анализаторе цепей серии *E5080A Series Network Analyzer*.

Измерение вносимых потерь в образцах проводилось с помощью асимметричной полосковой линии, центральный проводник которой имел емкостной зазор. Образец в прижатом состоянии располагался над зазором линии передачи центрального проводника.

На рис. 1 представлены частотные зависимости эффективной диэлектрической проницаемости (кривая 1) и тангенса угла диэлектрических потерь (кривая 2) в образце CdS-PE (10 мас.%). Значения диэлектрической проницаемости и потерь уменьшаются с ростом частоты, что можно объяснить уменьшением микроволновой проводимости образца.

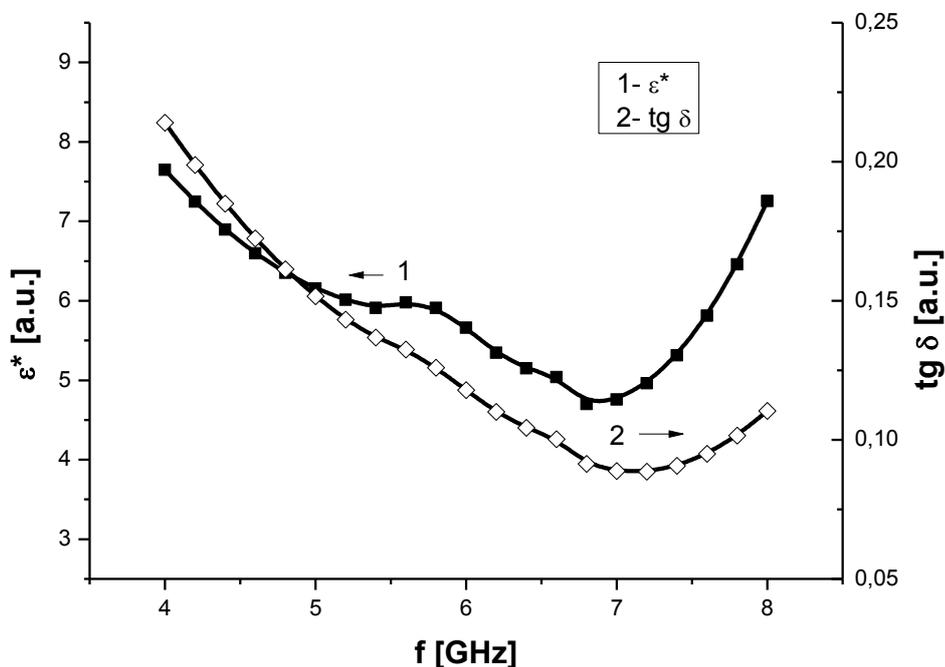


Рисунок 1. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости (кривая 1) и тангенса угла диэлектрических потерь (кривая 2) в образце *CdS+LDPE* (10 мас.%) от частоты

На рис. 2 представлена частотная зависимость вносимых потерь в

образцах на основе наночастиц *CdS* 10 мас.%, Стабилизированных в полиэтилене высокого давления (кривая 1). Для сравнения на этом же рисунке показана частотная зависимость линии передачи, нагруженной на толстую пленку из чистого полиэтилена высокого давления (кривая 2). Введение полупроводниковых частиц в полиэтилен высокого давления приводит к увеличению вносимых потерь. Следует отметить, что частотная зависимость диэлектрической проницаемости композитного образца носит более немонотонный характер, чем для чистой матрицы. На наш взгляд, это связано с возможным влиянием экситонного спектра частиц *CdS*. Однако для подтверждения или опровержения этого факта необходимо провести дополнительные исследования.

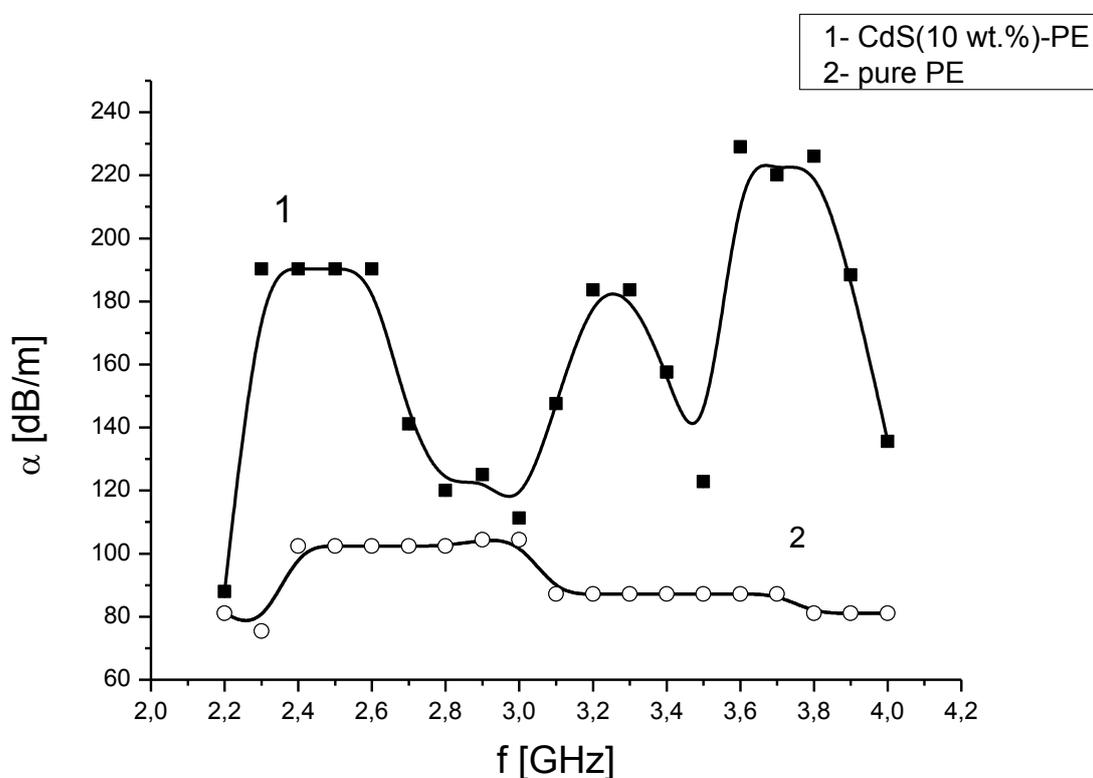


Рисунок 2. Частотная зависимость вносимых потерь на основе наночастиц *CdS* 10 мас.%, Стабилизированных в матрице полиэтилена высокого давления (кривая 1) и чистом полиэтилене высокого давления (кривая 2)

Влияние наночастиц *CdS* на изменение диэлектрических свойств образца полимерного композиционного материала показано на рис. 3.

Для управления свойствами полимерного нанокомпозитного материала в настоящей работе исследовались два основных параметра, такие как концентрация наночастиц в матрице и их размер при заданной концентрации. Для исследования первого вышеуказанного параметра были измерены наночастицы *CdS* с концентрацией 5 масс.%, 10 масс.% и 20

масс.%. Однако этот параметр не оказал существенного влияния на диэлектрические свойства материала. Например, диэлектрические потери для всех значений массовой концентрации наночастиц были равны 162 дБ/м и различались лишь в пределах 1% погрешности измерений. Это связано с тем, что существенное влияние на контроль композиционных материалов на основе полимеров оказал второй параметр - размер наночастиц при определенной концентрации в матрице.

Образцы с 20 масс. % *CdS* в матрице *LDPE* измеряли с размером наночастиц *CdS*:  $4, 6 \pm 0,5$  и  $7 \pm 0,5$  нм.

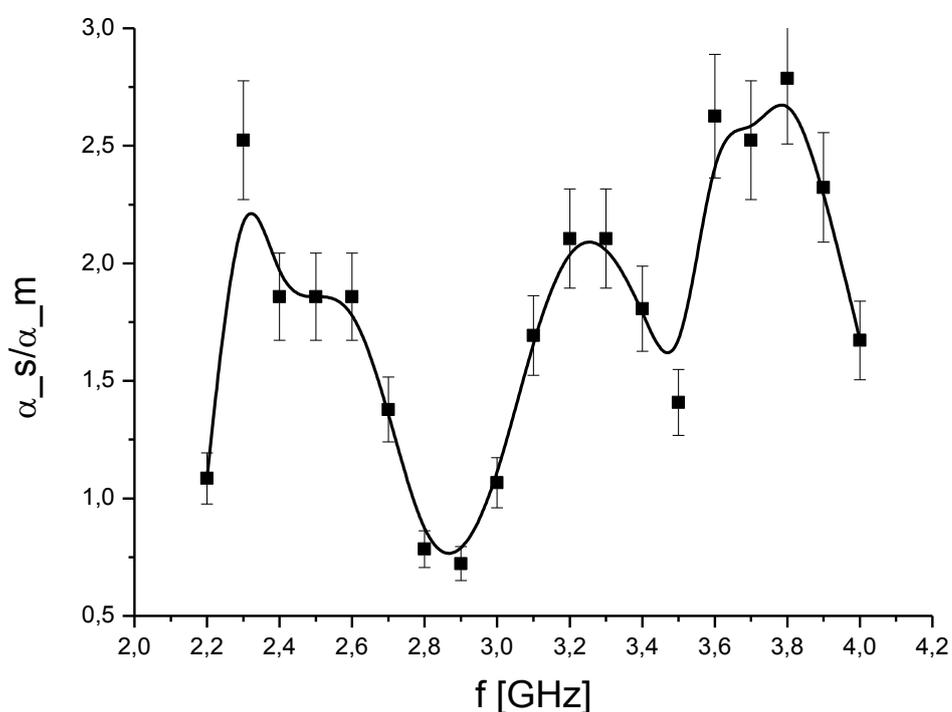


Рисунок 3. Частотная зависимость вносимых потерь образцов на основе наночастиц *CdS* 10 мас.%.  $\alpha_s$  относительно потерь в чистой матрице *LDPE*  $\alpha_m$

Значения диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь для этих образцов измерялись в диапазоне от 4 до 8 ГГц.

На рис.4 приведены измеренные значения диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь, усредненных в частотном диапазоне для каждого образца. Уменьшение размеров наночастиц приводит к увеличению диэлектрической проницаемости, а также к вносимым потерям микроволновой энергии в образец.

Имеющий место размерный эффект, связанный с ростом диэлектрической проницаемости и вносимых СВЧ потерь в диапазоне 4 – 8

ГГц с уменьшением размера полупроводниковых наночастиц сульфида кадмия в матрице полиэтилена низкой плотности, показывает возможность управления диэлектрическими свойствами таких полимерных композитных наноматериалов в различных полосовых устройствах на их основе.

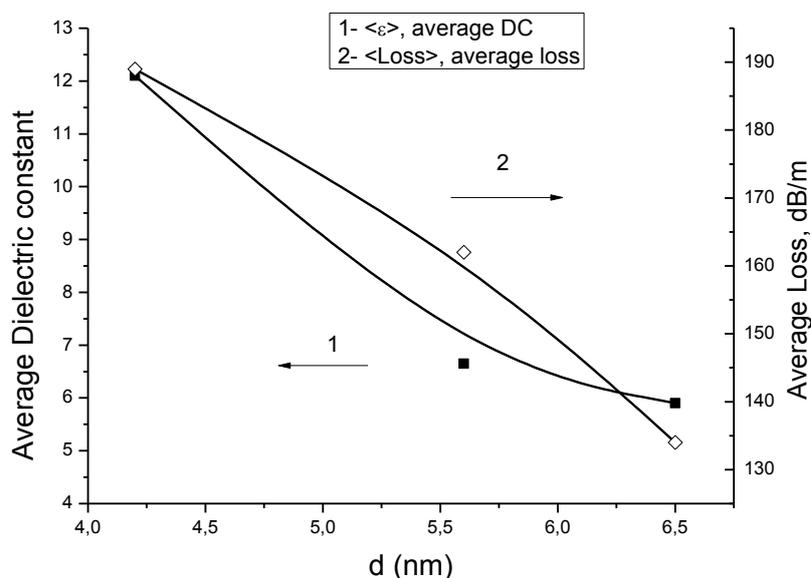


Рисунок 4. Средние значения диэлектрической проницаемости (кривая 1) и вносимых потерь (кривая 2) от размера наночастиц *CdS* в *LDPE* в диапазоне 4-8 ГГц

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 0030-2019-0016).*

#### Библиографический список

1. Biscaro R. S., Hoang N. N., Wojkiewicz J.-L et al Polymers for Advanced Technologies // Proc. of the 8th Polymers for Advanced Technologies International Symposium Budapest Hungary 13-16 September, 2005.
2. Tan Foo Khooon, Jumiah Hassan, Nurhidayat Mokhtar, Mansor Hashim et al // American Journal of Applied Sciences, 2010. V.7 (9), P.1226-1230.
3. Ushakov N.M., Yurkov G.Yu, Kosobudskii I.D. et al // Acta Materialia. 2008. V.56. P. 2336–2343.
4. Kolesov V.V., Petrova N.G., Feeonov A.S. // Proc. of 16th Int. Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology" (CriMiCo'2006). 11-15 September 2006. Sevastopol, Crimea, Ukraine. P.677-678.
5. Tanwar A, Gupta K. K, Singh P. J et al // Bull. Mater. Sci. 2006. V. 29, No. 2. P. 181–185.
6. Ushakov N.M., Yurkov G.Yu., Baranov D.A. et al // Optics and Spectroscopy. 2006. V. 101, No 2. P. 248-252.
6. Tischer F.J., Mikrowellen-Meßtechnik, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1958. DOI: 10.1007/978-3-642-87504-5

# «ЛЕВЫЕ» СРЕДЫ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

*А.В. Богомолова, С.В. Гришин*

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Россия, Саратов

На основе электродинамической модели, разработанной для полоскового волновода, полностью заполненного продольно намагниченной бигиротропной средой, исследована возможность создания «левой» среды для микроволнового диапазона частот. Установлено, что на частотах левой среды существует медленная обратная объемная электромагнитная волна, полосовыми свойствами которой можно управлять как за счет изменения концентрации свободных носителей заряда (электронов), так и напряженности внешнего постоянного магнитного поля.

**Ключевые слова:** левая среда, ферромагнитный полупроводник.

## Введение

На сегодняшний день одним из бурно развивающихся направлений в области материаловедения и нанотехнологий являются метаматериалы, представляющие собой композитные структуры со свойствами отличными от природных материалов [1-3]. Среди метаматериалов наиболее привлекательными объектами являются «левые» среды, диэлектрическая и магнитная проницаемости которых являются одновременно отрицательными величинами [4]. Интерес к левым средам связан с тем, что в них распространяется обратная волна, у которой фазовая и групповая скорости направлены в противоположные стороны. В первых экспериментальных работах для получения левых сред использовались периодические структуры, состоящие из субволновых элементов в виде металлических проволок и кольцевых разомкнутых резонаторов, период следования которых был намного меньше длины электромагнитной волны (ЭМВ) [5, 6]. Однако при таком подходе использование субволновых элементов неминуемо приводит к значительному увеличению уровня потерь на распространение волн в таких средах.

Целью настоящей работы является демонстрация возможности получения левой среды из бигиротропного материала с параметрами ферромагнитного (ФМ) полупроводника, что позволит отказаться от технологий создания субволновых элементов и снизить потери на распространение обратных ЭМВ.

## 1. Электродинамическая модель

Рассмотрим бигиротропный материал, схематическое изображение которого приведено на Рис.1. Он представляет собой продольно намагниченный ферромагнетик, в котором существуют свободные носители заряда в виде продольно намагниченной «холодной» и бесстолкновительной одно-

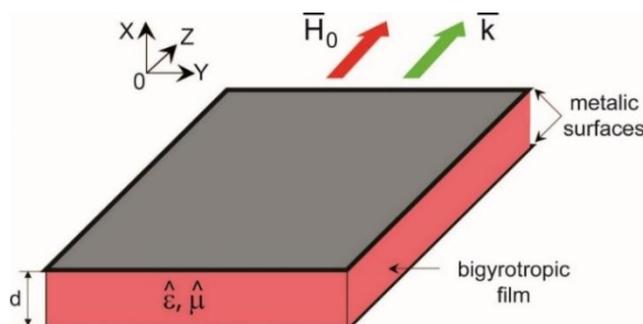


Рисунок 1 - Схематическое изображение полоскового волновода, полностью заполненного продольно намагниченной бигиротропной средой

компонентной (электронной) плазмы. Для указанного материала, безграничного в направлении оси  $OY$ , распространение ЭМВ происходит вдоль оси  $OZ$ , вдоль которой приложено внешнее постоянное магнитное поле  $\vec{H}_0$ . Диэлектрические свойства такого материала описываются тензором высокочастотной диэлектрической проницаемости, который имеет следующий вид [7, 8]:

$$\vec{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon & -jg & 0 \\ jg & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$\varepsilon = 1 + \omega_{pe}^2 / (\omega_{ce}^2 - \omega^2)$ ,  $g = -\omega_{pe}^2 \omega_{ce} / [(\omega_{ce}^2 - \omega^2)\omega]$ ,  $\eta = 1 - \omega_{pe}^2 / \omega^2$ ,  $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi N e^2 / m_e}$  – плазменная частота электронов,  $\omega_{ce} = |eB_0| / (m_e c)$  – циклотронная частота электронов,  $N$  – концентрация электронов в плазме,  $e/m_e$  – удельный заряд электрона,  $B_0$  – постоянная магнитная индукция. Магнитные свойства такого материала описываются тензором высокочастотной магнитной проницаемости, который имеет следующий вид:

$$\vec{\mu} = \begin{pmatrix} \mu & j\mu_a & 0 \\ -j\mu_a & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$\mu = [\omega_H(\omega_H + \omega_M) - \omega^2]/(\omega_H^2 - \omega^2)$ ,  $\mu_a = \omega_M \omega/(\omega_H^2 - \omega^2)$ ,  $\omega_H = \gamma H_0$  – частота ферромагнитного резонанса, которая в случае бигиротропной среды равна циклотронной частоте электронов ( $\omega_H = \omega_{ce}$  – гирочастота),  $\omega_M = 4\pi\gamma M_0$ ,  $4\pi M_0$  – намагниченность насыщения,  $\gamma$  – гиромагнитное отношение.

Для расчета дисперсионных характеристик (ДХ) ЭМВ, существующих в продольно намагниченной бигиротропной среде, воспользуемся дисперсионным уравнением (ДУ), которое имеет следующий вид:

$$\varepsilon\mu k_x^4 + \{(\varepsilon + \eta\mu)k_z^2 + [\mu(g^2 - \varepsilon^2) - \varepsilon\eta(\mu^2 - \mu_a^2)]k_0^2\}k_x^2 + \eta\{[k_z^2 - (\varepsilon\mu - g\mu_a)k_0^2]^2 - (g\mu - \varepsilon\mu_a)^2 k_0^4\} = 0, \quad (3)$$

где  $k_0 = \omega/c$  – волновое число ЭМВ в вакууме,  $k_z$  – продольное волновое число и  $k_x$  – поперечное волновое число. При  $g = 0$  и  $\eta = \varepsilon$ , из (3) получаем хорошо известное ДУ для продольно намагниченного ферромагнетика [9], а при  $\mu_a = 0$  и  $\mu = 1$ , из (3) получаем ДУ для продольно замагниченной плазмы [10].

В квазистатическом приближении, когда  $k_z \gg k_0$ , ДУ (3) переписывается к следующему виду:

$$(\varepsilon k_x^2 + \eta k_z^2)(\mu k_x^2 + k_z^2) = 0. \quad (4)$$

Выражение (4) содержит произведение двух скобок, одна из которых (левая скобка) является ДУ для продольно замагниченной плазмы [8], а другая (правая скобка) является ДУ для продольно намагниченного ферромагнетика [11]. Отметим, что в данном приближении рассчитываются только медленные электростатические волны (в случае плазмы) и медленные магнитостатические волны (в случае ферромагнетика), фазовая скорость которых  $v_{ph}$  намного меньше скорости света в свободном пространстве ( $v_{ph} \ll c$ ).

Вид функции поперечного волнового числа  $k_x$  находится из граничных условий в виде идеально проводящих металлических экранов, граничащих с обеих сторон с бигиротропным слоем. Она задается в виде

$$k_x = n\pi/d, \quad (5)$$

где  $d$  – толщина бигиротропного слоя,  $n$  – номер моды объемной ЭМВ.

## 2. Спектр ЭМВ в полосковом волноводе, полностью заполненном продольно намагниченным ФМ полупроводником

На Рис. 2 приведены результаты расчета ДХ одной из двух низкочастотных медленных ЭМВ, полученные на основе решения (3) с учетом (1), (2) и (5) для двух значений концентрации электронов. Из представленных результатов расчета следует, что в бигиротропной среде на частотах, где  $\epsilon, \eta < 0$  и  $\mu_+ < 0$  ( $\mu_+$  – правополяризованная компонента тензора  $\vec{\mu}$ ), существует медленная обратная объемная ЭМВ, на полосовые свойства которой оказывает влияние концентрация свободных носителей заряда. Так, увеличение концентрации электронов (увеличивается плазменная частота) приводит как к сдвигу частоты отсечки данной волны в более высокочастотный диапазон, так и к увеличению замедления  $K = k/(k_0\sqrt{\epsilon})$  на фиксированной частоте. С увеличением концентрации электронов от  $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  до  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  полоса частот обратной ЭМВ расширяется в 2.2 раза (с  $\Delta f = 1.98 \text{ GHz}$  до  $\Delta f = 4.34 \text{ GHz}$ ), а замедление на частоте  $f_{\perp} = [\omega_H(\omega_H + \omega_M)]^{1/2}$  возрастает практически на порядок величины с  $K = 1.6 \times 10^3$  до  $K = 1.9 \times 10^4$ .

На Рис. 2 помимо результатов аналитической теории приведены результаты расчета ДХ обратной ЭМВ, полученные с использованием пакета программ COMSOL Multiphysics [12]. Видно, что результаты, полученные в ходе проведения численного эксперимента, полностью подтверждают результаты аналитической теории.

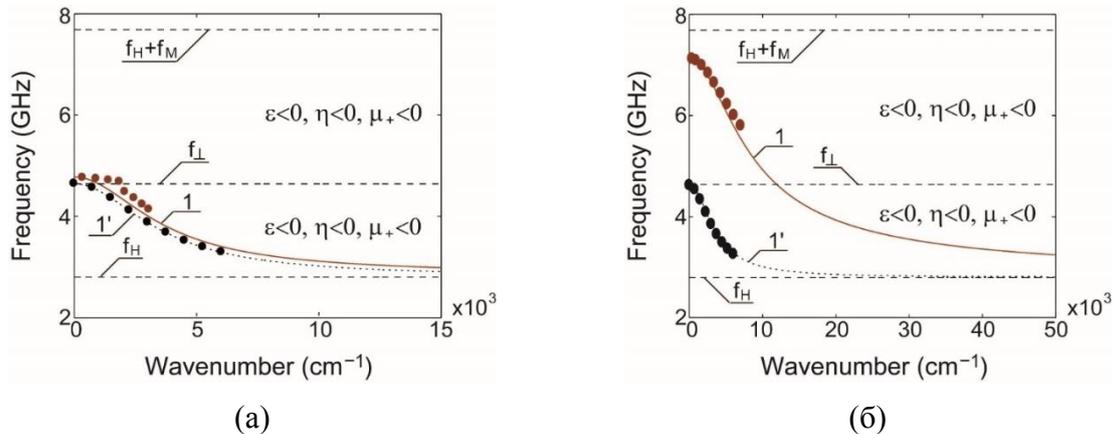


Рисунок 2 - Дисперсионные характеристики медленной обратной объемной ЭМВ (кривая 1 – строгое решение, кривая 1' – магнитостатическое приближение), рассчитанные для двух значений концентрации электронов  $N$ :  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  (а) и  $10^{19} \text{ см}^{-3}$  (б). На (а, б) кружками показаны результаты расчетов, полученные с использованием ComSol Multiphysics. Расчеты выполнены для  $d = 10 \text{ мкм}$ ,  $H_0 = 79.58 \text{ кА/м}$ ,  $4\pi M_0 = 0.175 \text{ Т}$  и  $n = 1$ .

На рисунке 3 представлены результаты, демонстрирующие управление ДХ обратной ЭМВ за счет изменения намагниченности насыщения ферромагнетика и напряженности внешнего постоянного

магнитного поля. При проведении численных расчетов значения намагниченности и концентрации электронов в плазме соответствовали ферромагнитному полупроводнику – монооксиду европия [13].

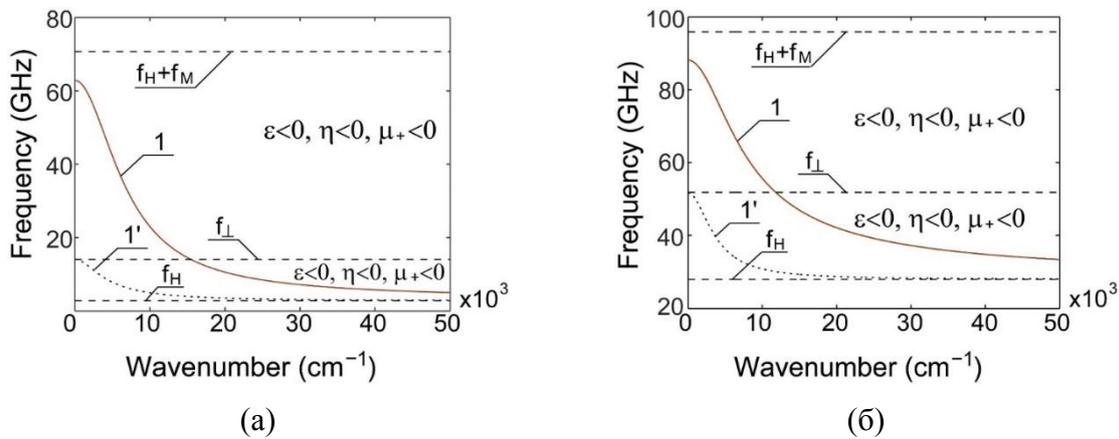


Рисунок 3 - Дисперсионные характеристики медленной обратной объемной ЭМВ, рассчитанные для намагниченности  $4\pi M_0 = 2.43$  Т и двух значений напряженности внешнего постоянного магнитного поля  $H_0$ : 79.58 кА/м (а) и 795.76 кА/м (б). Расчеты выполнены для  $d = 10 \mu\text{м}$ ,  $N = 10^{19} \text{см}^{-3}$  и  $n = 1$ .

Из представленных результатов следует, что увеличение намагниченности насыщения и напряженности магнитного поля приводят к смещению спектра обратной ЭМВ в миллиметровый диапазон длин волн и к увеличению ее замедления на частоте  $f_{\perp}$ . Кроме того, увеличение намагниченности насыщения обуславливает увеличение ширины полосы частот обратной ЭМВ, существующей в ФМ метаматериале, практически в 4 раза по сравнению со случаем обычного ферромагнетика. Рост напряженности магнитного поля, наоборот, приводит к сужению полосы частот обратной ЭМВ.

### Заключение

Проведенные расчеты дисперсионных характеристик обратных объемных ЭМВ указывают на возможность использования ферромагнитных полупроводников для создания на их основе левых сред, способных осуществлять функциональную обработку сигналов в микроволновом диапазоне.

*Работа выполнена за счет гранта Российского Научного Фонда (проект № 19-79-20121)*

### Библиографический список

1. Tong X.C. Functional metamaterials and metadevices. Springer Ser. in Materials Science. 2018. V. 262. 277 p.
2. Гуляев Ю.В., Лагарьков А.Н., Никитов С.А., *Метаматериалы: фундаментальные исследования и перспективы применения*// Вестник РАН. 2008. Т. 78. № 5. С. 438-449.
3. Вендик И.Б., Вендик О.Г. *Метаматериалы и их применение в технике сверхвысоких частот*// ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 1. С. 3-28.

4. *Веселаго В.Г.* Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями  $\epsilon$  и  $\mu$ // УФН. 1967. Т. 92. № 3. С. 517–526.
5. *Pendry J.B., Holden A.J., Stewart W.J., Youngs I.* Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures// Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 4773-4776.
6. *Smith D.R., Padilla W.J., Vier D.C., Nemat-Nasser S.C., Schultz S.* Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity// Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. No 18. P. 4184–4187.
7. *Гуревич А.Г.* Ферриты на сверхвысоких частотах. М.: Физматлит. 1960. 407 с.
8. Электродинамика плазмы / *А. И. Ахиезер.* — 2-е изд.— М.: Наука, 1974. 720 с.
9. *Микаэлян А.Л.* Теория и применение ферритов на сверхвысоких частотах. М. – Л.:Госэнергоиздат. 1963. 664 с.
10. *Еськин В.А.* Электромагнитные волны в замагниченных плазменных волноводах. Учебное пособие. Нижний Новгород: Нижегородский университет. 2012. 108 с.
11. *Ваишковский А.В., Стальмахов В.С., Шараевский Ю.П.* Магнитостатические волны в электронике сверхвысоких частот. Саратов: Изд-во СГУ. 1993. 311 с.
12. *Садовников А.В., Рожнев А.Г.*// Изв.ВУЗов – Прикладная нелинейная динамика. 2012. Т. 20. № 1. С. 143-159.
13. *Борухович А.С., Трошин А.В.* Полупроводник и ферромагнетик монооксид европия в спинтронике. СПб: Лань. 2017. 288 с.

## **ГЕНЕРАЦИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ПРИ ТРЕХВОЛНОВЫХ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ**

*А.С. Бир, Д.В. Романенко, С.В. Гришин*

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Россия, Саратов

E-mail: bir.evstegneeveva.1997@gmail.com

В работе представлены результаты, демонстрирующие возможность формирования ультракоротких импульсов (УКИ) в автоколебательных системах с трехволновым параметрическим взаимодействием. На основе модифицированной модели Вышкинд-Рабиновича с нелинейным усилением получены периодические последовательности «темных» и «светлых» УКИ субпикосекундной длительности. На лабораторном макете спин-волнового генератора, работающего в условиях трехволновых параметрических взаимодействий, получена генерация темных УКИ субнаносекундной длительности.

**Ключевые слова:** ультракороткие импульсы, спиновые волны, трехволновые параметрические процессы.

### **Введение**

На сегодняшний день одной из актуальных задач в области радиофизики и СВЧ электроники является создание источников ультракоротких импульсов (УКИ). УКИ представляют интерес для систем передачи информации, для исследования быстро протекающих процессов, а также для микрообработки различных материалов и биологических тканей [1]. Как известно, наиболее впечатляющие результаты по

разработке методов получения УКИ были достигнуты в лазерной физике, за которые французский исследователь Жерар Альбер Муру совместно со своей канадской коллегой Донной Стрикланд были удостоены Нобелевской Премии по физике в 2018 году. Наверное, одними из первых работ по генерации УКИ в микроволновом диапазоне являются работы Б.А. Калиникова, в которых он использовал оптический метод синхронизации мод на керровской нелинейности для получения УКИ в виде периодических последовательностей «светлых» и «темных» солитонов огибающей наносекундной длительности [2, 3]. В качестве среды с кубической (керровской) нелинейностью использовались ферромагнитные пленки, в которых распространялись магнитостатические спиновые волны (МСВ) с разными видами (нормальной или аномальной) волноводной дисперсии. В последние годы группой нижегородских исследователей, возглавляемой Н.С. Гинзбургом, было предложено использовать другой оптический метод (метод пассивной синхронизации мод) для получения мощных УКИ в вакуумных генераторах микроволнового диапазона. В своих теоретических работах они получили периодические последовательности мощных УКИ субнаносекундной длительности за счет использования ЛБВ-подавителя в качестве насыщающегося поглотителя [4, 5]. Экспериментальная реализация данного метода в микроволновом диапазоне была осуществлена в Саратовском университете сотрудниками кафедры электроники, колебаний и волн [6].

Целью настоящей работы является демонстрация нового метода формирования периодических последовательностей УКИ в диссипативных системах, в которых усиление не только компенсирует потери на частоте одной из трех параметрически взаимодействующих волн, но и ограничивает рост амплитуды усиливаемой волны.

### 1. Генераторная модель и результаты численного эксперимента

Генераторная модель разработана на основе параметрической волновой модели Вышкинд-Рабиновича [7] в случае нелинейного усиления. До настоящего времени параметрическое взаимодействие трех волн в диссипативных средах исследовалось только при наличии линейного усиления [8]. Параметрическая модель с нелинейным усилением описывается системой трех обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial m(t)}{\partial t} &= -c_0 b_1(t) b_2(t) \exp(-i\delta t) - \eta m(t) + \gamma \{1 - \tanh[\alpha |m(t)|]\} m(t), \\ \frac{\partial b_1(t)}{\partial t} &= c_1 m(t) b_2^*(t) \exp(i\delta t) - \nu b_1(t), \\ \frac{\partial b_2(t)}{\partial t} &= c_2 m(t) b_1^*(t) \exp(i\delta t) - \nu b_2(t), \end{aligned}$$

где  $m(t)$  – комплексная амплитуда огибающей усиливаемой волны,  $b_{1,2}(t)$  – комплексные амплитуды огибающих параметрически возбуждаемых волн,  $\delta$  – отстройка частоты параметрически возбуждаемых волн от половинного значения частоты усиливаемой волны,  $\eta$  – коэффициент затухания усиливаемой волны,  $\nu$  – коэффициент затухания параметрически возбуждаемых волн,  $\gamma$  – коэффициент линейного усиления и  $\alpha$  – параметр нелинейности усилителя.

На рис.1 приведены результаты расчета, полученные при разных значениях параметра нелинейного усиления. Видно, что в обоих случаях наличие нелинейного усиления приводит к ограничению роста амплитуды усиливаемой волны. В результате такого ограничения на ее амплитудном профиле образуется плато, содержащее периодически повторяющиеся провалы, внутри которых амплитуда волны спадает до нуля. Данные провалы имеют симметричный вид и напоминают по виду «темные» солитоны огибающей [3]. Что касается параметрически возбуждаемых волн, то они участвуют в формировании периодических последовательностей импульсов, похожих на «светлые» солитоны огибающей [2]. Последние находятся на временных интервалах, где формируются темные импульсы усиливаемой волны. Кроме того, из представленных результатов расчета следует, что уменьшение параметра нелинейности усилителя приводит как к увеличению амплитуд взаимодействующих волн, так и к уменьшению периода следования и длительности импульсов. Видно, что при относительно небольших значениях параметра нелинейности импульсы могут достигать субпикосекундной длительности.

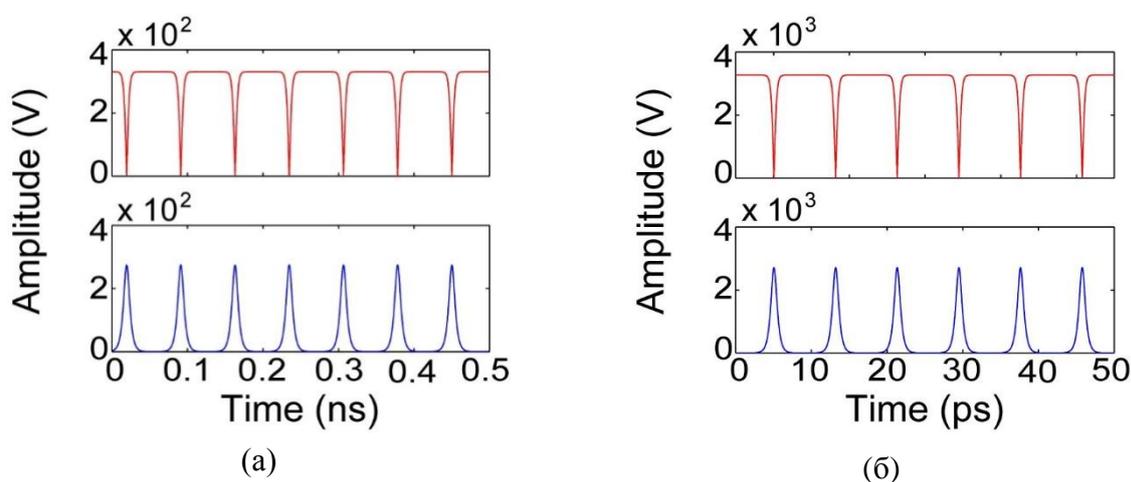


Рисунок 1. Амплитудные профили темных импульсов усиливаемой волны (верхняя панель) и светлых импульсов параметрически возбуждаемых волн (нижняя панель), рассчитанные для двух значений параметра нелинейности  $\alpha$ : (а) 0.005 и (б) 0.0005. Расчеты выполнены для  $c_0=1232$  мкс<sup>-1</sup>,  $c_1=c_2=846$  мкс<sup>-1</sup>,  $\gamma=30$  мкс<sup>-1</sup>,  $\nu=7$  мкс<sup>-1</sup>,  $\eta=1.4$  мкс<sup>-1</sup> и  $\delta=0.1$  мкс<sup>-1</sup>

## 2. Лабораторный макет параметрического генератора и результаты радиофизического эксперимента

В качестве генератора, в котором можно было осуществить описанные в теоретической модели механизмы, был выбран кольцевой твердотельный генератор, содержащий магنونный микроволновод и каскад из двух транзисторных усилителей [9]. Схематическое изображение генератора приведено на рис.2. Магنونный микроволновод изготовлен из пленки железо-иттриевого граната толщиной 10 мкм с намагниченностью насыщения 1750 Гс, выращенной на подложке из гадолиний галлиевого граната толщиной 500 мкм с использованием метода жидкофазной эпитаксии.

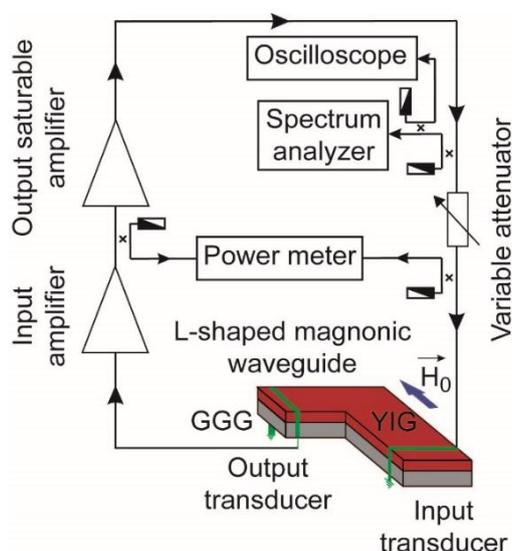


Рисунок 2. Схематическое изображение микроволнового генератора УКИ

Для возбуждения и приема МСВ, распространяющихся в данном волноводе, используются микрополосковые преобразователи. Оба преобразователя сформированы на поликоровой подложке толщиной 500 мкм, имеют ширину 30 мкм и длину 1 мм. Внешнее постоянное магнитное поле приложено касательно к поверхности волновода, а его напряженность выбирается такой, чтобы в одном из плеч волновода реализовывались трехволновые параметрические процессы распада МСВ на коротковолновые спиновые волны (СВ). Усилительный каскад служит для компенсации потерь МСВ. Кроме того, выходной усилитель каскада, работая в режиме насыщения выходной мощности, ограничивает рост амплитуды МСВ.

В ходе проведения эксперимента были получены сложные диссипативные структуры в виде чередующихся последовательностей многосолитонных комплексов. Пример отдельно взятого многосолитонного комплекса приведен на рис.3а. Многосолитонный

комплекс состоит из темных УКИ с длительностью 0.6-0.8 нс и периодом следования 15.4 нс, которые «вложены» в более длинные темные импульсы с длительностью 60 нс и периодом следования 2 мкс. Отметим, что полученные длительности у темных УКИ являются принципиально недостижимыми в случае синхронизации мод на керровской нелинейности, если в автоколебательной системе развиваются четырехволновые нелинейные спин-волновые взаимодействия [3]. На рис.3б для сравнения приведены результаты расчета темных импульсов на МСВ и светлых импульсов на СВ для значений параметров модели, близких к экспериментальным. Видно, что, хотя предложенная генераторная модель не позволяет описывать сложные диссипативные структуры в виде многосолитонных комплексов, однако она дает возможность получать темные УКИ на частоте усиливаемой волны приблизительно такой же длительности и периодом следования, как и в эксперименте. Кроме того, результаты численного моделирования указывают на возможность получения светлых УКИ на частотах СВ. Отметим, что визуализация данных импульсов возможна в эксперименте только с привлечением методов бриллюэновской спектроскопии [10].

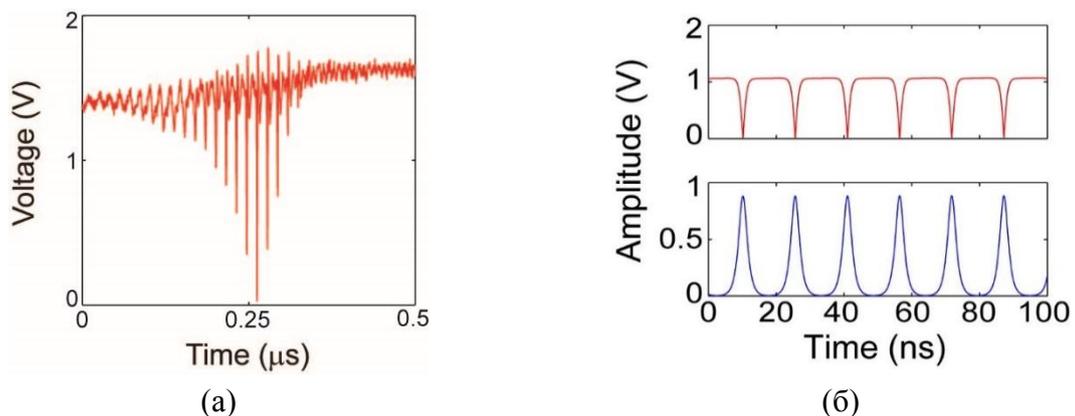


Рис. 3. На (а) показан профиль темного многосолитонного комплекса на МСВ, полученного на генераторной схеме с Г-образным магннным волноводом и транзисторным усилителем, работающим в режиме насыщения выходной мощности. На (б) показаны амплитудные профили темных солитоноподобных импульсов МСВ (верхняя панель) и светлых солитоноподобных импульсов СВ (нижняя панель), рассчитанные по параметрической генераторной модели. Расчеты выполнены для  $c_0=1232 \text{ мкс}^{-1}$ ,  $c_1=c_2=846 \text{ мкс}^{-1}$ ,  $\nu=7 \text{ мкс}^{-1}$ ,  $\eta=1.4 \text{ мкс}^{-1}$ ,  $\alpha=1.52$ ,  $\gamma=30 \text{ мкс}^{-1}$  и  $\delta=10^{-1} \text{ мкс}^{-1}$

### Заключение

В заключение отметим, что разработанная генераторная модель позволяет получать УКИ субнаносекундной длительности, которые формировались спин-волновым генератором, работающим в сантиметровом диапазоне. В тоже самое время модель указывает на возможность получения УКИ субпикосекундной длительности, которые

можно реализовать только в параметрических системах оптического диапазона.

*Работа выполнена за счет гранта Российского Фонда  
Фундаментальных исследований (проект № 19-02-00075)*

#### Библиографический список

1. *Крюков П.Г.* Фемтосекундные импульсы. Введение в новую область лазерной физики. М.: Физматлит. 2008. 208 с.
2. *Kalinikos B.A., Kovshikov N.G., Patton C.E.* Self-generation of microwave magnetic envelope soliton trains in yttrium iron garnet thin films // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. No 19. P. 4301-4304.
3. *Kalinikos B.A., Scott M.M., Patton C.E.* Self-generation of fundamental dark solitons in magnetic films // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84. No 20. P. 4697-4700.
4. *Ginzburg N.S., Denisov G.G., Vilkov M.N., Sergeev A.S., Zotova I.V., Samsonov S.V., and Mishakin S.V.* Generation of trains of ultrashort microwave pulses by two coupled helical gyro-TWTs operating in regimes of amplification and nonlinear absorption // *Phys. Plasmas.* 2017. Vol. 24. No 2. P. 023103.
5. *Гинзбург Н.С., Абубакиров Э.Б., Вилков М.Н., Зотова И.В., Сергеев А.С.* Генерация периодической последовательности мощных ультракоротких импульсов в цепочке связанных ламп бегущей волны, работающих в режимах усиления и нелинейного компфнеровского подавления // *ПЖТФ.* 2017. Т. 43. Вып. 18. С. 47-55.
6. *Grishin S.V., Dmitriev B.S., Moskalenko O.I., Skorokhodov V.N., Sharaevskii Yu.P.* Self-generation of chaotic dissipative multisoliton complexes supported by competing nonlinear spin-wave interactions // *Phys. Rev. E.* 2018. Vol. 98. No 2. P. 022209.
7. *Вышкинд С.Я., Рабинович М.И.* Механизм фазовой стохастизации и структура волновой турбулентности в диссипативных средах // *ЖЭТФ.* 1976. Т. 71. Вып. 2. С. 557-569.
8. *Демидов В.Е., Ковшиков Н.Г.* Механизм возникновения и стохастизации автомодуляции интенсивных спиновых волн // *ЖТФ.* 1999. Т. 69, № 8. С. 100-103.
9. *Bir A.S., Grishin S.V., Moskalenko O.I., Pavlov A.N., Zhuravlev M.O., Osuna Ruiz D.* Experimental observation of ultrashort hyperchaotic dark multisoliton complexes in a magnonic active ring resonator // *Phys. Rev. Lett.* 2020. V. 125. No 8. P. 083903.
10. *Romanenko D.V., Grishin S.V., Sadovnikov A.V., Sharaevskii Yu.P., Nikitov S.A.* Spatial and temporal dynamics of dissipative parametric solitons in a ferromagnetic film active ring resonator // *IEEE Trans. on Magnetics.* 2014. Vol. 50. No. 11. P. 4006304.

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕОДНОРОДНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ВЛАЖНОЙ ПОЧВЫ С УЧЕТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ

*И.В.Матвеев<sup>1</sup>, О.В.Осипов<sup>1</sup>, Д.Н. Панин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Поволжский государственный университет  
телекоммуникаций и информатики (г. Самара)  
E-mail: o.osipov@psuti.ru

В работе рассматривается представление влажной почвы в виде «метаматериала» естественного происхождения. Влажная почва представлена в виде совокупности контейнера из сухой почвы с произвольно распределенными в нем областями из влажной почвы. В рамках данного представления получено выражение для комплексной диэлектрической проницаемости слоя почвы с учетом неоднородности изменения влажности вдоль поперечной координаты. Для учета гетерогенности слоя была использована модель Бруггемана. При построении математической модели почвы были учтены ее дисперсионные свойства и проводимость.

**Ключевые слова:** почва, комплексная диэлектрическая проницаемость, гетерогенная система, метаматериал, влажность, дисперсия, электропроводность.

В настоящее время, в связи с активной цифровой трансформацией сельского хозяйства, всё более значимыми являются вопросы, связанные с дистанционным зондированием поверхности почвы и ее корнеобитаемого слоя. В частности, предполагается использовать дистанционное радиолокационное зондирование для определения распределения влажности почвы в корнеобитаемом слое. В этой связи, необходима разработка новых моделей комплексной диэлектрической проницаемости (КДП) почвы с учетом неоднородного профиля влажности вдоль поперечной к поверхности координаты. В ряде работ рассмотрены подходы к построению подобных моделей [1, 2].

В предлагаемой работе рассмотрен новый подход к построению модели неоднородной комплексной проницаемости корнеобитаемого слоя почвы. Слой почвы, подобно «метаматериалу», предлагается рассматривать как гетерогенную двухкомпонентную среду: контейнера из сухой почвы и внедренных в него компонент влажной почвы с объемной концентрацией  $\alpha$ . Общая геометрия задачи приведена на рис. 1.

В разрабатываемой модели будем учитывать гетерогенность двухкомпонентной системы по формуле Бруггемана, дисперсию диэлектрической проницаемости — по формуле Дебая [2], проводимость почвы — по формуле Боровинской [3]. Формула для комплексной диэлектрической проницаемости среды имеет следующий вид [4]:

$$\varepsilon(z, \omega) = \varepsilon'(z, \omega) - i \frac{\sigma(z)}{\omega \varepsilon_0}, \quad (1)$$

где  $\epsilon_0$  — диэлектрическая постоянная вакуума;  $\sigma(z)$  — профиль удельной проводимости.

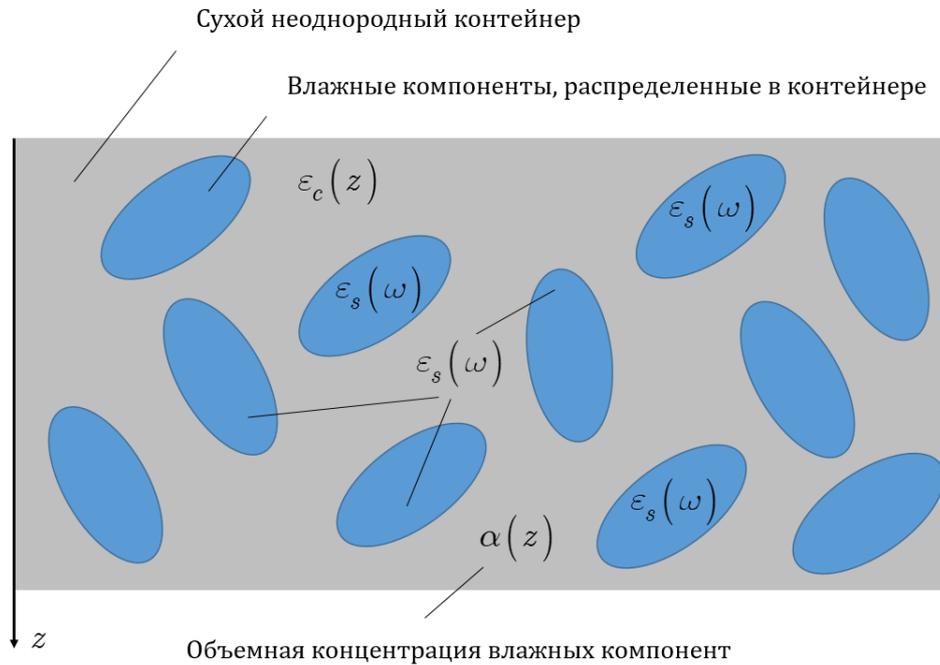


Рисунок 1. Слой влажной почвы как гетерогенная среда

Формула Бруггемана [5] применительно к вещественной части КДП имеет вид:

$$\begin{aligned} \epsilon'(z, \omega) &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_1^2(\omega, z) + \tilde{\epsilon}_2^2(\omega, z)} - \tilde{\epsilon}_1(\omega, z); \\ \tilde{\epsilon}_1(\omega, z) &= \frac{\epsilon_s(\omega)[1 - 3\alpha(W(z))] - \epsilon_c(z)[2 - 3\alpha(W(z))]}{4}; \\ \tilde{\epsilon}_2(\omega, z) &= \sqrt{\frac{\epsilon_c(z)\epsilon_s(\omega)}{2}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Функция  $\epsilon_s(\omega)$  определяется из дисперсионной модели Дебая:

$$\epsilon_s(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s(0) - \epsilon_\infty}{1 - i\omega\tau_s}, \quad (3)$$

где  $\epsilon_\infty$  — высокочастотный предел диэлектрической проницаемости (оптическая диэлектрическая проницаемость);  $\tau_s$  — время релаксации;  $\epsilon_s(0)$  — статическая диэлектрическая проницаемость, представляющая собой низкочастотный предел величины.

Мнимая часть КДП в общем случае определяется следующим образом:

$$\varepsilon''(z, \omega) = \frac{\sigma(z)}{\omega \varepsilon_0}. \quad (4)$$

При вычислении профиля удельной проводимости почвы в работе используется модель Боровинской. В этой модели формула для удельной проводимости почвы имеет вид:

$$\sigma(z) = \sigma(W(z)) = \frac{l}{R(z)S} = \frac{lW^b(z)}{aS}, \quad (5)$$

где  $a, b$  — коэффициенты, зависящие от типа почвы (наличия металлов).

Подставляя в формулу (4) соотношение (5), получаем выражение для мнимой части КДП почвы:

$$\varepsilon''(z, \omega) = \frac{\sigma(z)}{\omega \varepsilon_0} = \frac{lW^b(z)}{\omega \varepsilon_0 aS}. \quad (6)$$

Объединяя выражения (2), (3) и (6), получаем общее соотношение для комплексной диэлектрической проницаемости почвы, полученное при совместном использовании совокупности моделей Бруггемана-Дебая-Боровинской:

$$\varepsilon(z, \omega) = \left\{ \sqrt{\tilde{\varepsilon}_1^2(\omega, z) + \tilde{\varepsilon}_2^2(\omega, z)} - \tilde{\varepsilon}_1(\omega, z) \right\} - i \frac{lW^b(z)}{\omega \varepsilon_0 aS};$$

$$\tilde{\varepsilon}_1(\omega, z) = \frac{\left[ \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s(0) - \varepsilon_\infty}{1 - i\omega\tau_s} \right] [1 - 3\alpha(W(z))] - \varepsilon_c(z) [2 - 3\alpha(W(z))]}{4}; \quad (7)$$

$$\tilde{\varepsilon}_2(\omega, z) = \sqrt{\frac{\varepsilon_c(z) \left[ \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s(0) - \varepsilon_\infty}{1 - i\omega\tau_s} \right]}{2}}.$$

Функциональная зависимость концентрации компонент из влажной почвы  $\alpha(z)$  от влажности  $W(z)$  имеет вид:

$$\alpha(z) = \alpha(W(z)). \quad (8)$$

В дальнейшем будем считать, что при  $\alpha = 1$  влажность куба почвы с ребрами  $1\text{м} \times 1\text{м} \times 1\text{м}$  равна 100%; случай  $\alpha = 0$  соответствует «абсолютно сухому» кубу почвы.

Понятие влажности  $W$  почвы вводится следующим образом:

$$W[\%] = \frac{m_{\text{wet}} - m_{\text{dry}}}{m_{\text{dry}}} \cdot 100\%, \quad (9)$$

где  $m_{\text{wet}}$  — масса влажной почвы, грамм;  $m_{\text{dry}}$  — масса абсолютно сухой почвы, грамм (после сушки при температуре 105–110 °С до постоянной

массы). Разность  $m_{\text{water}} = m_{\text{wet}} - m_{\text{dry}}$  определяет массу воды во влажных компонентах двухкомпонентной системы.

Концентрация влажных компонент может быть определена как отношение всего объема влажных компонент  $V_{\text{wet}}$  к объему контейнера из сухой почвы  $V_{\text{dry}}$ :

$$\alpha(z) = \frac{V_{\text{wet}}}{V_{\text{dry}}} = \frac{\left( \frac{m_{\text{water}} + m_{\text{dry}}}{\rho_{\text{mix}}} \right)}{\left( \frac{m_{\text{dry}}}{\rho_{\text{dry}}} \right)} = \frac{\rho_{\text{dry}}}{\rho_{\text{mix}}} [1 + W(z)], \quad (10)$$

где  $m_{\text{water}}$  — масса воды во влажной компоненте почвы;  $m_{\text{dry}}$  — масса контейнера из сухой почвы;  $\rho_{\text{dry}}$  — плотность абсолютно сухой почвы;  $\rho_{\text{mix}}$  — плотность смеси из почвы в сухом контейнере и влажных компонент почвы внутри контейнера (максимально сильно намоченная почва в компонентах).

Введем нормированную плотность почвы, которая зависит от типа почвы:

$$P(z) = \frac{\rho_{\text{dry}}(z)}{\rho_{\text{mix}}}. \quad (11)$$

Подставляя соотношение (11) в формулу (10), получаем следующее выражение для профиля концентрации влажных компонент в контейнере из сухой почвы:

$$\alpha(z) = P(z) [1 + W(z)]. \quad (12)$$

Совокупность выражений (7) и (12) представляет собой выражение для комплексной диэлектрической проницаемости слоя почвы как гетерогенной среды с дисперсией при учете неоднородности изменения влажности вдоль поперечной координаты, а также электропроводности.

#### Библиографический список

1. Родионова О.В. Метод измерения комплексной диэлектрической проницаемости почвогрунтов в широкой полосе частот. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.03 / Родионова Ольга Васильевна. Омск, 2016. 136 с.
2. Садовский И.Н., Кузьмин А.В., Шарков Е.А. и др. Анализ моделей диэлектрической проницаемости водной среды, используемых в задачах дистанционного зондирования акваторий. М: Институт космических исследований РАН, 2013. 60 с.
3. Поздняков А.И., Позднякова А.Д. Электрофизика почв. Москва-Дмитров, 2004. 48 с.
4. Рекомендация МСЭ-R P.527-4 от 06/2017. Электрические характеристики земной поверхности. Серия Р. Распространение радиоволн.
5. Сушко М.Я., Криськив С.К. Метод компактных групп в теории диэлектрической проницаемости гетерогенных систем// Журнал технической физики, 2009. Т.79. Вып.3. С. 97-101.

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСНОГО КИРАЛЬНОГО МЕТАМАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ 2-Х СОРТОВ МНОГОЗАХОДНЫХ ГАММАДИОНОВ

*О.В.Осипов<sup>1</sup>, М.К.Троицкая<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Поволжский государственный университет  
телекоммуникаций и информатики (г. Самара)

<sup>2</sup>ИП «Троицкая Марина Константиновна» (г. Волгоград)  
E-mail: o.osipov@psuti.ru

В работе предложена математическая модель комплексного кирального метаматериала, состоящего из однородного диэлектрического контейнера, в котором распределены два вида многозаходных гаммадионов, отличающихся друг от друга числом заходов или размерами. Математическая модель базируется на использовании модели Лорентц-Лоренца для учета гетерогенности метаматериала. В работе решена задача об отражении плоской электромагнитной волны линейной поляризации от планарного слоя из рассматриваемого метаматериала. Анализ численных результатов показала, что структура обладает ярко выраженной частотной селективностью и позволяет на ряде дискретных частот концентрировать энергию падающего электромагнитного поля СВЧ в объеме слоя.

**Ключевые слова:** метаматериал, киральность, киральная среда, модель Лорентц-Лоренца, гаммадион, частотная селективность.

Интерес к исследованию метаматериалов вызван возможностью получения уникальных свойств взаимодействия между электромагнитным полем и искусственной средой [1-2]. Одним из видов таких композиционных сред являются киральные метаматериалы (КММ) [3-4]. «Классический» киральный метаматериал представляет собой двухкомпонентную структуру, состоящую из однородного диэлектрического контейнера, в котором размещены проводящие элементы зеркально асимметричной формы. В работах [5-6] доказана возможность использования КММ для частотно селективной концентрации падающей СВЧ энергии в объеме слоя метаматериала, в случае, когда в качестве зеркально асимметричных элементов использовались тонкопроволочные одно и многозаходные спиральные элементы. В работе [7] построена математическая модель кирального метаматериала с учетом свойств киральности, гетерогенности и дисперсии. Гетерогенность КММ описывалась известными формулами Максвелла Гарнетта и Бруггемана, позволяющими определить эффективную диэлектрическую проницаемость КММ через проницаемости контейнера, объемов, занятых зеркально асимметричными элементами и их концентрацию. Во всех перечисленных работах были использованы математические модели киральных метаматериалов в предположении, что в структуру КММ входит только одна разновидность зеркально асимметричных элементов, то есть все они тождественны по форме и геометрическим размерам.

В данной работе рассматривается комплексный киральный метаматериал, представляющий собой совокупность однородного диэлектрического контейнера и размещенных в нем в общем случае  $N$  наборов из тождественных дисперсных киральных микрочастиц. В качестве зеркально асимметричного элемента выбран многозаходный гаммадион (представляющий собой набор  $S$ -элементов с общим геометрическим центром). Внутри каждого набора все киральные элементы являются тождественными; микрочастицы из различных наборов могут отличаться друг от друга количеством заходов (числом  $S$ -элементов в структуре гаммадиона), геометрическими размерами (радиус, ширина полосы). Каждый набор гаммадионов имеет свою концентрацию в контейнере  $\alpha^{(i)}$  и относительную диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon_s^{(i)}$ . Общая геометрия задачи и структура многозаходного гаммадиона приведены на рис. 1.

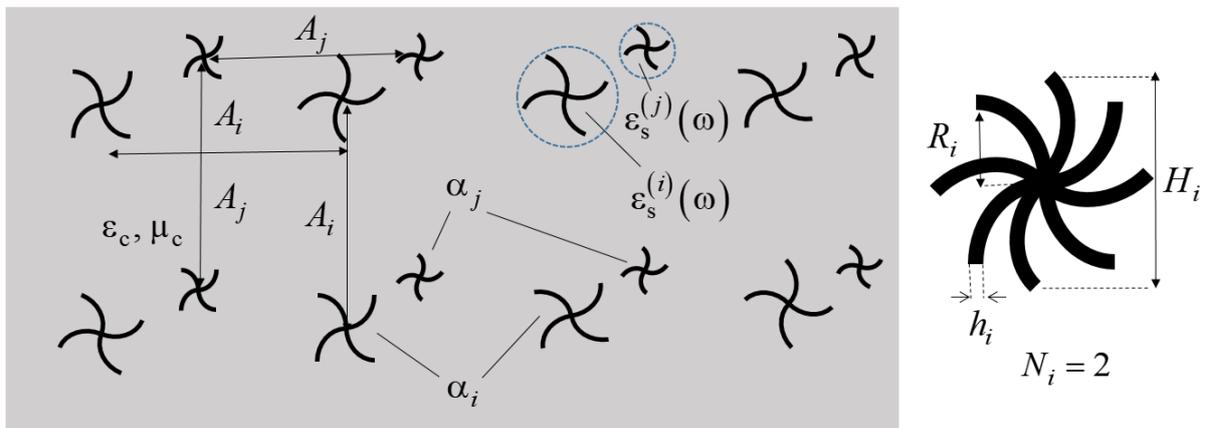


Рисунок 1. Комплексный киральный метаматериал на основе планарных многозаходных гаммадионов.

При построении математической модели комплексного КММ будем учитывать четыре основные его свойства.

1. Киральность. Для учета киральности в работе использовались общеизвестные материальные уравнения для киральной среды [3]:

$$\vec{\mathbf{D}}_m = \varepsilon(\omega)\vec{\mathbf{E}}_m \mp i\chi(\omega)\vec{\mathbf{H}}_m; \quad \vec{\mathbf{B}}_m = \mu\vec{\mathbf{H}}_m \pm i\chi(\omega)\vec{\mathbf{E}}_m, \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  — эффективная диэлектрическая проницаемость КММ;  $\mu$  — магнитная проницаемость;  $\chi$  — параметр киральности;  $i$  — мнимая единица. Соотношения (1) записаны в Гауссовой системе единиц.

2. Для описания гетерогенности многокомпонентного (комплексного метаматериала) используется модель Лорентц-Лоренца [8]:

$$\varepsilon_s(\omega) = \varepsilon_c \frac{1 + \frac{8\pi}{3} \sum_{i=1}^N \alpha^{(i)} \zeta^{(i)}(\omega)}{1 - \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^N \alpha^{(i)} \zeta^{(i)}(\omega)}; \quad \zeta^{(i)}(\omega) = \frac{3}{4\pi} \int_V d\mathbf{r} \frac{\varepsilon_s^{(i)}(\omega) - \varepsilon_c}{2\varepsilon_c + \varepsilon_s^{(i)}(\omega)}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_s(\omega)$  — эффективная (интегральная) диэлектрическая проницаемость всех объемов, в которых расположены киральные элементы всех сортов;  $\varepsilon_s^{(i)}(\omega)$  — диэлектрическая проницаемость объемов, в которых расположены киральные элементы  $i$ -го сорта;  $\varepsilon_c$  — диэлектрическая проницаемость контейнера;  $\zeta^{(i)}(\omega)$  — частотно зависимый форм-фактор области, занятой дисперсным включением  $i$ -го сорта;  $\alpha^{(i)}$  — концентрация дисперсных включений  $i$ -го сорта.

3. Для описания дисперсии диэлектрической проницаемости кирального метаматериала используется модель Друде:

$$\varepsilon_s^{(i)}(\omega) = \varepsilon_c + \frac{\alpha^{(i)2}}{\omega_{0i}^2 - \omega^2}, \quad (3)$$

где  $\omega_{0i}$  — резонансная частота поглощения микроэлемента  $i$ -го сорта.

4. Для описания дисперсии параметра киральности применяется модель Кондона [9]:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{A_i \alpha^{(i)2} \omega}{c(\omega_{0i}^2 - \omega^2)}, \quad (4)$$

где  $A_i$  — расстояние между соседними элементами  $i$ -го сорта;  $c$  — скорость света.

Выражения (1)-(4) в совокупности представляют собой модель комплексного кирального метаматериала, созданного на основе  $N$  наборов (сортов) киральных дисперсных микровключений.

Для расчета резонансных частот использовался метод эквивалентных схем в квазистационарном приближении. В дальнейшем определялись границы его применимости, в зависимости от соотношения длины волны падающего излучения, линейных размеров микрочастиц и расстояния между ними. Резонансные частоты  $\omega_{0i}$  различных сортов гаммадионов зависят от их геометрических размеров и толщины контейнера  $h$  :

$$\omega_{0i} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_c \mu_c}} \frac{\sqrt{2A_i h_i}}{N_i R_i \sqrt{\pi H (4A_i + h_i)}}, \quad (5)$$

где  $N_i$  — число заходов в гаммадионе  $i$ -го сорта;  $R_i$  — радиус S-элемента в гаммадионе  $i$ -го сорта;  $h_i$  — ширина полосы, образующей гаммадион  $i$ -го сорта;  $H_i$  — линейный размер объема, занятого гаммадионом  $i$ -го сорта.

Для тестирования разработанной математической модели была решена задача о падении плоской электромагнитной волны перпендикулярной поляризации на слой из комплексного кирального материала, описываемый математической моделью (1)-(5). Задача была решена методом частичных областей с учетом кросс поляризации электромагнитного поля при его взаимодействии с КММ.

В результате решение задачи было сведено к системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов отражения и прохождения основной и кросс-поляризованной компонент поля, а также локальных коэффициентов отражения и прохождения внутри слоя из комплексного кирального метаматериала:

$$\vec{\mathbf{A}} \vec{\mathbf{X}} = \vec{\mathbf{P}}; \quad (6)$$

$$\vec{\mathbf{X}} = \left\{ r_{ee}, r_{eh}, T_R^{(+)}, T_R^{(-)}, T_L^{(+)}, T_L^{(-)}, t_{ee}, t_{eh} \right\}^T,$$

где  $\vec{\mathbf{A}}$  — квадратная матрица размерностью  $8 \times 8$ ;  $\vec{\mathbf{P}}$  — столбец свободных членов (зависит от типа поляризации падающего СВЧ излучения);  $r_{ee}, r_{eh}$  — коэффициенты отражения основной и кросс-поляризованной компонент электромагнитного поля;  $T_{R,L}^{(\pm)}$  — локальные коэффициенты отражений и прохождений волн с право- и левокруговыми поляризациями в слое из комплексного КММ;  $t_{ee}, t_{eh}$  — коэффициенты прохождения основной и кросс-поляризованной компонент электромагнитного поля.

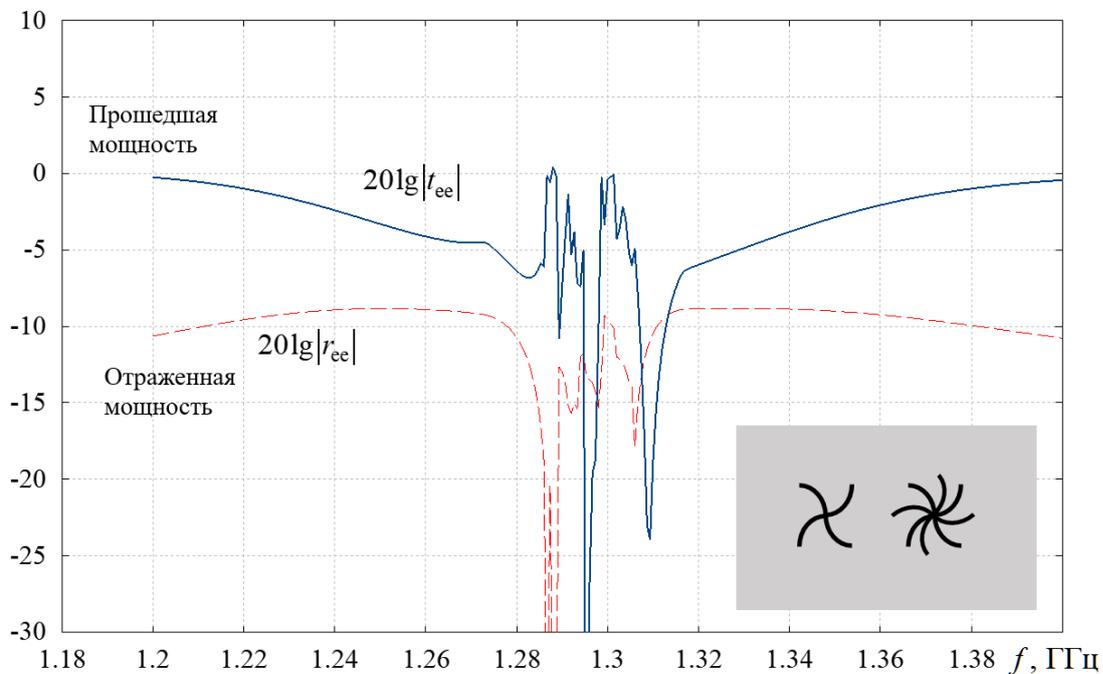


Рис. 2. Частотные зависимости отраженной и прошедшей мощностей основной и кросс-поляризованной компонент электромагнитного поля для случая КММ, состоящего из двух сортов многозаходных гаммадионов.

В работе были рассчитаны частотные зависимости отраженной и прошедшей мощностей основной и кросс-поляризованной компонент электромагнитного поля для случая КММ, состоящего из двух сортов многозаходных гаммадионов. Первый сорт представлял собой двухзаходные гаммадионы; второй — четырехзаходные. При этом значения геометрических размеров планарных гаммадионов обоих сортов были одинаковыми;  $N_1 \neq N_2$ ;  $h_1 = h_2$ ;  $R_1 = R_2$ .

На рис. 2 приведены указанные зависимости в диапазоне от 1 до 2.8 ГГц (в котором выполняется условие квазистационарности). Как видно из рис.2, структура проявляет ярко выраженные частотно селективные свойства: имеются резонансные частоты, на которых падающее электромагнитное поле в большей степени концентрируется внутри объема слоя из комплексного кирального метаматериала.

Таким образом, в работе доказано, что свойством частотно селективной концентрации СВЧ энергии обладают не только КММ на основе одного сорта дисперсных зеркально асимметричных включений, но и комплексные киральные метаматериалы, моделируемые двумя различными сортами многозаходных гаммадионов, размещенные в общем диэлектрическом контейнере.

#### Библиографический список

1. *Capolino F.* Theory and Phenomena of Metamaterials. – CRC Press/Taylor & Francis, 2009. 992 p.
2. *Tie J.C., Smith, D.R., Ruopeng Liu.* Metamaterials: Theory, Design and Application. – Springer, 2010. 376 p.
3. *Lindell I.V.* Electromagnetic waves in chiral and bi-isotropic media / I.V. Lindell, A.H. Sihvola, S.A. Tretyakov, A.J. Viitanen. – London: Artech House, 1994. 291 p.
4. *Lakhtakia A., Varadan V.K., Varadan V.V.* Time-harmonic electro-magnetic fields in chiral media. Lecture Notes in Physics. – Berlin: Heidelberg and Boston: Springer-Verlag, 1989. 121 p.
5. *Осипов О.В., Юрасов В.И., Почепцов А.О.* Киральный метаматериал для частотно селективной концентрации энергии сверхвысокочастотного излучения // Инфокоммуникационные технологии, 2014. Т.12. №4. С. 76-82.
6. *Осипов О.В., Плотников А.М., Салимова Н.Р.* Использование эффекта азимутального рассеяния электромагнитных волн метаструктурой на основе элементов Телледжена в прикладных задачах электродинамики // Инфокоммуникационные технологии, 2012. Т.10. №1. С. 8-15.
7. *Аралкин М.В., Дементьев А.Н., Осипов О.В.* Математические модели киральных метаматериалов на основе многозаходных проводящих элементов // Физика волновых процессов и радиотехнические системы, 2020. Т. 23. № 1. С. 8-19.
8. *Сушко М.Я., Криськив С.К.* Метод компактных групп в теории диэлектрической проницаемости гетерогенных систем// Журнал технической физики, 2009. Т.79. Вып.3. С. 97-101.
9. *Semchenko I.V., Tretyakov S.A., Serdyukov A.N.* Research on chiral and bianisotropic media in Byelorussia and Russia in the last ten years // Progress In Electromagnetics Research, 1996. V.12. P. 335-370.

# ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ЭМИССИОННОЙ СПОСОБНОСТИ СИЛЬНОТОЧНЫХ ПОЛЕВЫХ АЛМАЗОГРАФИТОВЫХ КАТОДОВ

*Р.К. Яфаров<sup>1,2</sup>, А.В. Сторублев<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Саратовский филиал ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Саратовский государственный научно-исследовательский университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>3</sup>АО «НПП «Алмаз»

E-mail: pirpc@yandex.ru

Обнаружены и получили интерпретацию факторы, ограничивающие долговечность сильноточных полевых источников электронов на основе нанокompозитных алмазографитовых пленочных структур. Установлено, что сильноточная эмиссия сопровождается распылением ионами остаточного газа вакуумной системы атомов материала автокатада и его переосаждением на анод. Показано, что осажденный материал на аноде изменением полярности напряжения в межэлектродном зазоре может быть переосажден на катодный электрод с восстановлением его исходной эмиссионной способности.

**Ключевые слова:** сильноточная полевая эмиссия электронов, наноуглеродный композит, катодное распыление, восстановление эмиссионной способности автокатада.

Создание электровакуумных приборов (ЭВП) СВЧ-диапазона длин волн с использованием в качестве источника электронов катода, работающего на основе явления автоэлектронной эмиссии, является целью исследователей всего мира уже достаточно давно. Первый СВЧ-прибор с автоэмиссионным катодом (АЭК) создан более чем через 60 лет после открытия явления автоэмиссии (фемитрон в 1958г.) [1]. Изобретение прибора с протяженным участком взаимодействия электронов с электромагнитной волной (ЛБВ) в 1943г. от создания первой опытной ЛБВ с автоэмиссионным катодом разделило около 50 лет. При этом на сегодняшний день ни одно предприятие не имеет технологии промышленного выпуска такого прибора. Полученные опытные образцы имели различного рода недостатки. К нерешённым вопросам приборов с АЭК относятся: получение высокоточной эмиссии, сравнимой с уровнем тока термоэмиссионного катода, получение устойчивого уровня тока в течение срока службы изделия при уровне вакуума  $1,3 \cdot (10^{-4} - 10^{-5})$  Па, понижение вытягивающего напряжения и т.д. [2, 3]. Работа автоэмиссионных катодов сопровождается ионной бомбардировкой их поверхностей, адсорбцией и десорбцией ионов и молекул остаточных газов, поверхностной миграцией атомов и др. Стабильность и долговечность работы чрезвычайно чувствительна к изменению геометрии эмиссионных центров и к состоянию их поверхности [4]. В зависимости от конкретной конструкции и режима эксплуатации АЭК, перечисленные процессы, порознь или в некоторой совокупности, приводят к ряду

эффектов, изменяющих режим его работы. К ним относятся: катодное распыление материала эмиттера, изменение количества и расположения эмиссионных микровыступов, изменение работы выхода электронов, разогрев катода и электромеханические напряжения [5]. Особенно важными эти изменения являются в случае сильноточных АЭК, которые, как правило, работают в условиях технического вакуума и высоких напряженностей электрических полей. С течением времени они способствуют уменьшению автоэмиссионных токов, снижают стабильность и долговечность сильноточной полевой эмиссии [2,3].

Целью работы являлось исследование долговременной эмиссионной способности сильноточных полевых алмазографитовых катодов.

В качестве автокатада использовались алмазографитовые плёнки толщиной около 100 нм, осажденные на поликоровые пластины в микроволновой плазме паров этанола по методике, изложенной в [6]. Эмитирующей частью катодов были торцы алмазографитовой плёнки, на расстоянии 7 мм от которых напылялся металлический контакт, к которому прикладывался катодный потенциал (рис. 1).



Рисунок 1. Образец для испытаний автоэмиссии

Катодная структура располагалась в держателе, вид которого показан на рис. 2. Конструктивно он представлял собой диодную структуру, одним из электродов которой являлся анод с поверхностью в форме квадрата со стороной 5,5 мм, другим электродом был держатель катодной структуры, представленной на рис. 1, с диэлектрической деталью из керамики, которая обеспечивала электрическую развязку между электродами. Расстояние катод-анод – 40 мкм. Крепление образца в держателе, а также электрический контакт с ним осуществлялся с помощью винтового прижима. Упор винтами выполнялся в металлический контакт, нанесённый на поверхность подложки.

Автоэмиссионные измерения проводились при давлении в вакуумной камере ниже  $4 \cdot 10^{-5}$  Па путем поэтапного подъёма напряжения между катодом и анодом. При достижении напряжённости поля 50 В/мкм и плотности полевого тока более  $800 \text{ А/см}^2$  была замерена ВАХ катода. После этого образец извлекался из держателя и проводился визуальный анализ поверхностей эмиттера и анода. Вид электродов показан на рис. 3.

Торцевая часть поверхности эмиттера, как видно на рисунке, видоизменилась. Она приобрела участок протяжённой формы, на котором отсутствовал алмазографит. Форма распылённого ионной бомбардировкой участка приобрела геометрические размеры близкие к размеру анода. Часть распыленного материала катодной структуры напылилась на анод. Его поверхность в области расположения торца катода была покрыта тёмной плёнкой.

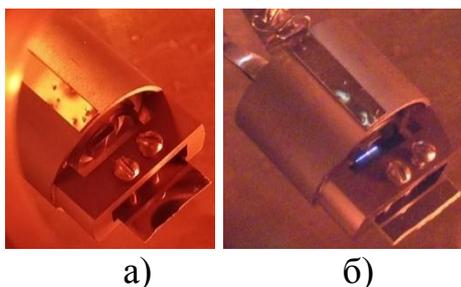


Рисунок 2. Испытательный макет с закреплённым образцом:  
а) до подачи напряжения; б)  $U=1,4$  кВ,  $I=6$  мА

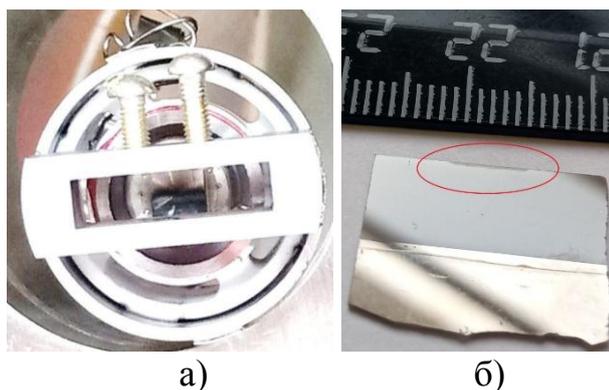


Рисунок 3. Поверхности электродов после испытаний с токоотбором:  
а) поверхность анода; б) поверхность катода

После визуального осмотра состояния поверхностей электродов, катод был вновь установлен в вакуумную камеру и откачан. После подъёма напряжения между электродами получена ВАХ, соизмеримая с первоначальной (рис.4).

Проведены исследования эмиссионной способности слоя, осажденного на анод в процессе сильноточной полевой эмиссии с катода. При подаче на анод отрицательного относительно катода напряжения в электрической цепи фиксировался ток. Значения эмиссионных токов с поверхности анода были соизмеримы с током эмиссии с торца катода. Однако ток анода имел повышенную нестабильность (рис.5). При напряженностях электрического поля свыше 40 В/мкм, происходили микропробой, результатом которых являлось снижение тока с поверхности анода. Т.к. до начала пробоев на ВАХ в координатах Фаулера-Нордгейма

(рис. 5б) присутствует линейный участок, то ток с анода также имеет автоэмиссионную природу.

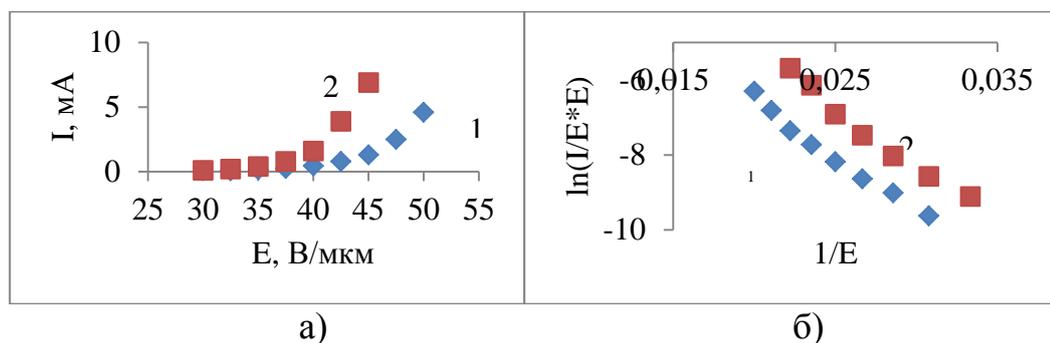


Рисунок 4. Изменение ВАХ автоэмиссионного катода до (1) и после (2) перепыления эмиссионного материала с поверхности анода на катод:  
 а) в линейных координатах; б) в координатах Фаулера-Нордгейма

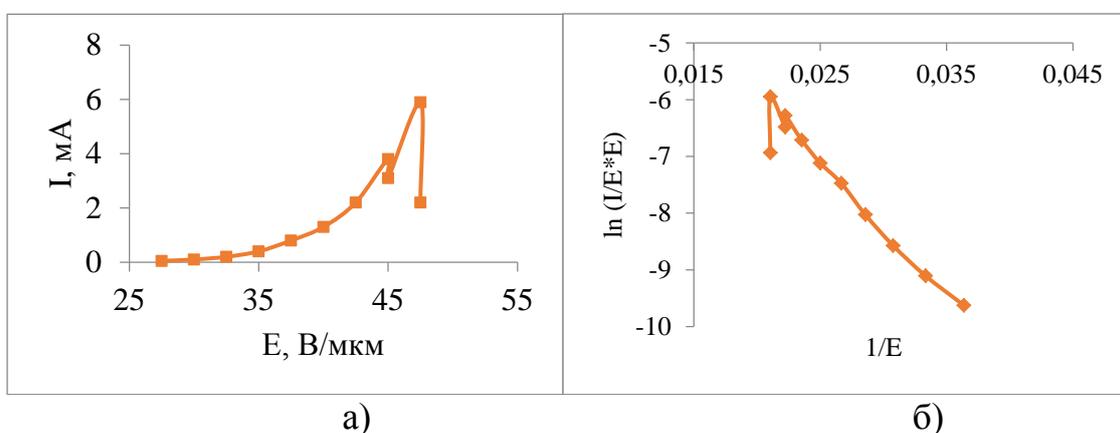


Рисунок 5. ВАХ полевой эмиссии с анода: а) в линейных координатах; б) в координатах Фаулера-Нордгейма

После пересаживания материала с анода на катод наблюдалось повышение эмиссионную способность последнего (рис.4). Положительный эффект проявляется в повышении крутизны ВАХ, что позволяет получать аналогичные токи при меньших напряжённостях электрического поля.

Качественные изменения углеродной структуры катода, следствием которых является повышение его эмиссионной способности, установлены впервые и требуют более детального изучения. Обнаруженный эффект может быть использован как для создания автоэмиссионного катода с улучшенными эмиссионными характеристиками, так и для восстановления его эмиссионной способности при долговременной работе в составе ЭВП в том числе в условиях нестабильного вакуума.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-19-10033) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-38-90216).*

### Библиографический список

1. *Chabonner, F. M. / F. M. Chabonner, J. P. Barbour, L. F. Garret, W. P. Dyke // Pros. IEEE. – 1963. – Vol. 51, No 7*
2. *Мелешкевич П.М.* О возможности применения автоэмиссионных катодов в мощных приборах // СВЧ Электронная техника, сер. 1, СВЧ-Техника, вып. 4(531), 2016 С. 6-14
3. *Яфаров Р.К., Сторублев А.В., Новиков П.Е.* Катодное распыление при сильноточной полевой эмиссии в алмазографитовых источниках электронов. // Сборник статей седьмой Всероссийской научной школы-семинара «Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами». Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского. Саратов, 2020. С. 133-137
4. *Ye Hua, Hong Wan, Xingyu Chen, Bin Chen, Ping Wu, Shuxin Bai.* Influence of Surface Microstructures on Explosive Electron Emission Properties for Graphite Cathodes IEEE Transactions on Plasma Science. 2017. Vol. 45. Iss.6. P. 959-968. DOI: 10.1109/TPS.2017.2703139
5. *Filip V., Filip L. D., Hei Wong.* Review on peculiar issues of field emission in vacuum nanoelectronic devices Solid-State Electronics. 2017. Vol. 138. P. 3–15. DOI: 10.1016/j.sse.2017.09.010
6. *Яфаров Р. К., Шаныгин В. Я., Нефедов Д. В.* Углеродный пленочный наноконтакт для сильноточных полевых источников электронов // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2019. Т. 19, вып. 1. С. 68–75. DOI: 10.18500/1817-3020-2019-19-1-68-75.

## ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН СВЧ-ДИАПАЗОНА С КОМПОЗИЦИОННЫМИ НАМАГНИЧИВАЮЩИМИСЯ СРЕДАМИ

*С.Д. Туркин, Ю.И. Диканский*

Северо-Кавказский Федеральный Университет, физико-технический факультет,  
Ставрополь, Россия

*E-mail: TurkinSD@gmail.com*

В работе проведено исследование особенностей распространения ЭМ волны через прямоугольный волновод, частично заполненный магнитными эмульсиями на основе однородных магнитных жидкостей при воздействии постоянного магнитного поля. Было показано, что воздействие электромагнитной волны на структурированный образец различно по отношению к расположениям образца в волноводе.

**Ключевые слова:** магнитная жидкость, СВЧ-диапазон, коэффициент прохождения, магнитные капли

Магнитные жидкости (МЖ) – высокодисперсные коллоиды ферри- и ферромагнетиков, способные эффективно взаимодействовать с магнитными полями при сохранении их текучести. Одним из интересных направлений исследования магнитных жидкостей является изучение их взаимодействия с электромагнитным излучением и возможности его

регулирования с помощью внешних магнитных полей. В области сверхвысоких (СВЧ) частот магнитная восприимчивость однородных магнитных коллоидов претерпевает существенные (резонансные) изменения только в области *сильных* полей напряженностью порядка  $10^5$  А/м. Однако на основе магнитных жидкостей созданы новые композиционные намагничивающиеся среды – магнитные эмульсии [1-4]. Структурой таких сред можно управлять воздействием даже относительно *слабых* магнитных полей, которое приводит к деформации магнитных капель в магнитных эмульсиях. Это должно в свою очередь привести к изменениям характера взаимодействия электромагнитных волн с такими средами. Подтверждением этого могут служить результаты проведенных нами ранее исследований эффекта Фарадея, наблюдающегося в магнитных коллоидах и созданных на их основе магнитных эмульсиях в СВЧ-диапазоне [5-6]. Влияние пространственной структуры, возникающей в композите, на поглощение ЭМ волны можно исследовать с помощью частичного заполнения прямоугольного волновода образцом в виде тонкой пластинки. Такая конфигурация за счет геометрии волновода позволяет выделять области с отдельным видом колебаний электрического и магнитного вектора. Это в свою очередь может привести к различным видам поглощения электромагнитной энергии.

В связи с вышеизложенными рассуждениями в настоящей работе проведено исследование особенностей распространения ЭМ волны через прямоугольный волновод, частично заполненный магнитными эмульсиями на основе однородных магнитных жидкостей. Исследования проводились при воздействии постоянного магнитного поля, напряженность которого достаточна для структурного изменения системы, но значительно меньше значения, при котором возможен ферромагнитный резонанс. Было показано, что воздействие электромагнитной волны на структурированный образец различно по отношению к расположениям образца в волноводе. Физическая разница этих расположений заключается в том, что в середине волновода имеется пучность электрического поля волны, а возле боковой стенки электрическое поле отсутствует. Соответственно вытягивание магнитных капель вдоль электрического вектора электромагнитной волны приводит дополнительному поглощению энергии. Таким образом, было установлено, что структурообразование в магнитных эмульсиях существенным образом влияет на параметр  $S_{21}$  матрицы рассеяния четырехполюсника, содержащего данную среду. Характер изменения коэффициента прохождения также зависит от взаимной ориентации внешнего магнитного поля и направления распространения волны. Отметим, что длина волны СВЧ-излучения, использованного в экспериментальных исследованиях, гораздо больше размера капель магнитной эмульсии. Это в свою очередь позволило при математическом

описании эксперимента использовать модель сплошной среды с эффективными параметрами.

#### Библиографический список

1. *Y.I. Dikansky, M.A. Bedzhanyan, V.V. Kiselev.* Magnetization properties of magnetic emulsions // *Magnetohydrodynamics*, Vol. 31, 1995, No. 1, P. 79-84.
2. *Zakinyan, Y. Dikansky.* Drops deformation and magnetic permeability of a ferrofluid emulsion // *Colloids and Surfaces, A*, 2011. Vol. 380. P. 314-318.
3. *M. Ivey, J. Liu, Y. Zhu, S. Cutillas.* Magnetic-field-induced structural transitions in a ferrofluid emulsion // *Phys. Rev. E*, 63, 011403, 2000. DOI: 10.1103/PhysRevE.63.011403
4. *Zakinyan, Y. Dikansky, M. Bedzhanyan.* Electrical properties of chain microstructure magnetic emulsions in magnetic field // *Journal of Dispersion Science and Technology*. – 2014. Vol. 35. P. 111-119.
5. *Ю.И. Диканский, С.Д. Туркин.* Об эффекте Фарадея в магнитных коллоидных наносистемах // *ЖТФ*, 87 (12), 1895.
6. *S.D. Turkin, Yu.I. Dikansky.* Nanoparticles concentration influence on magnetic gyrotropy in ferrocolloids // *Magnetohydrodynamics*, 54 (1–2), 2018.

## ВОЛНОВОДНО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В РАСШИРЕНИИ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ВОЛНОВОДА

*М.А.Прасолова<sup>1</sup>, В.И.Занин<sup>1</sup>, В.Б. Феклистов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Самарский университет

<sup>2</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: zvi@samsu.ru

Для повышения точности измерения малых отклонений комплексной диэлектрической проницаемости поверхности полупроводниковых пластин с нарушенным поверхностным слоем предложено использовать волноводно-диэлектрический резонанс, возникающий при размещении полупроводниковых образцов в расширении прямоугольного волновода.

**Ключевые слова:** прямоугольный волновод, волноводно-диэлектрический резонанс, резонанс на запертых модах.

Технология производства полупроводниковых преобразователей является определяющим фактором в достижении максимальной чувствительности таких приборов. В процессе изготовления полупроводниковых образцов их подвергают различным видам воздействий, среди которых можно отметить механическое, химическое и электрохимическое воздействия. Перечисленные способы оказывают основное влияние на состояние и свойства поверхности полупроводников, а с помощью последнего, путем травления, задают на поверхности пластин необходимый рельеф. Фигурам травления можно, например, придать вид пирамидальных структур. В результате, структурированные полупроводники получают неоднородными по толщине и обладают электрофизической особенностью, заключающейся в наличии

приповерхностных слоев, которые отличаются от объемного слоя электрофизическими параметрами. Контроль основных параметров приповерхностного слоя на завершающем этапе технологической операции желательно проводить бесконтактным и неразрушающим методом, что дает возможность целенаправленно подбирать режим технологического процесса производства полупроводниковых преобразователей.

С целью повышения чувствительности неразрушающих СВЧ-методов используются электродинамические системы (рис.1), в которых частотные характеристики для измеряемых слоистых структур резко изменяются при вариации параметров входящих в их состав полупроводниковых слоев [1,2].

На рис.2,3 приведены результаты численного моделирования резонансного рассеяния электромагнитной волны на неоднородно-слоистой полупроводниковой структуре в прямоугольном волноводе. Геометрия задачи показана на рис. 1.

Анализ частотных характеристик коэффициента прохождения волны в волноводе, содержащем полупроводниковую структуру с приповерхностным слоем, показал, что для СВЧ-диагностики электрофизических параметров слоя, таких как электропроводность и диэлектрическая проницаемость, можно использовать явление волноводно-диэлектрического резонанса [1,2]. Характерной чертой проявления этого эффекта является то, что получившаяся таким образом резонансная система обладает высокой чувствительностью к изменениям электрофизических параметров неоднородности в СВЧ диапазоне. Определение диэлектрической проницаемости и удельного сопротивления слоя сводится в этом случае к определению резонансной частоты и величины затухания волны на этой частоте. На рисунке 2 показано влияние проницаемости ( $\epsilon$ ) поверхностного слоя кремниевой пластины ( $\epsilon_r = 11.7$ ) на резонансную частоту в 8-миллиметровом диапазоне (волновод сечением  $7.2 \times 3.4 \text{ мм}^2$ ).

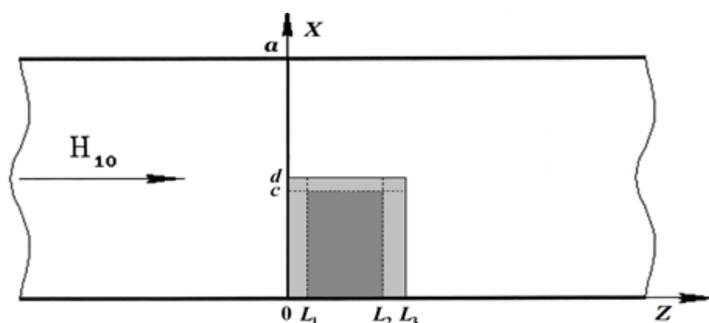
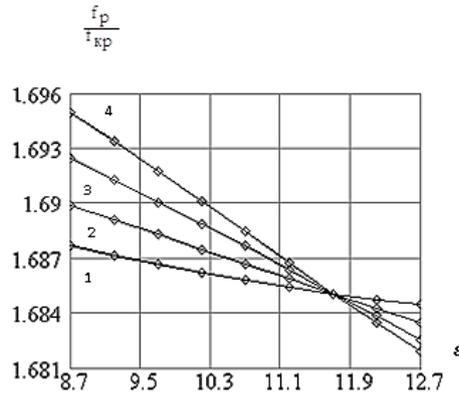


Рисунок 1. Прямоугольный волновод со слоистой структурой

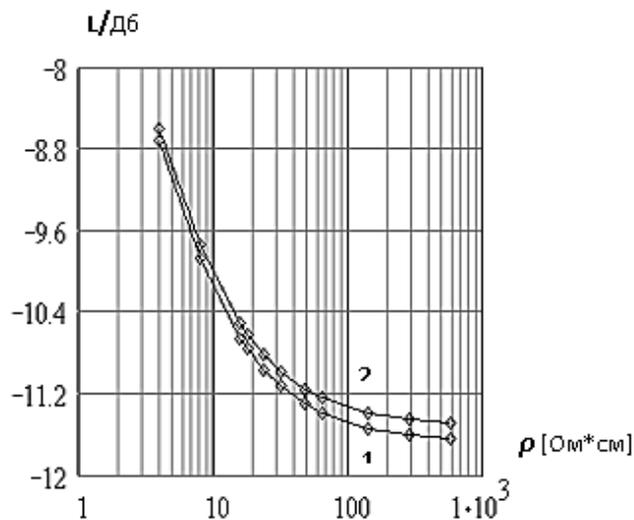


1 -  $L_1 = 3.6$  мкм; 2 -  $L_1 = 7.2$  мкм, 3 -  $L_1 = 10.8$  мкм; 4 -  $L_1 = 14.4$  мкм,  $L_3 = 302.4$  мкм,  
 $a = 7200$  мкм;  $d = 3240$  мкм.

Рисунок.2. Зависимости нормированной резонансной частоты от диэлектрической проницаемости приповерхностного слоя

При решении задачи дифракции предполагалось, что неоднородность полностью заполняет волновод по высоте и сторонняя волна  $H_{10}$ -типа возбуждает на участке с неоднородностью только  $H_{n0}$ -моды. Полупроводниковая пластина толщиной  $L_3$ , шириной  $d$  имела приповерхностный полупроводниковый слой одинаковой толщины  $\delta = d - c = L_1$ . Объемный и поверхностный слои пластины рассматривались как диэлектрики с потерями, обладающие каждый своей комплексной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_k = \epsilon_{real} - j\sigma/(\omega\epsilon_0)$ . Удельное сопротивление слоев было принято равным  $32 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ .

На рис.3 приведены зависимости ослабления волны от удельного сопротивления кремниевой пластины без слоя (1) и со слоем (2).



1 -  $\epsilon_r = 11.7$ ,  $\epsilon = 11.7$ ;  $d/a = 0.45$ ,  $L_1/a = 0.001$ ,  $L_2/a = 0.041$ ,  $L_3/a = 0.042$ ,  
2 -  $\epsilon_r = 11.7$ ,  $\epsilon = 9.7$ ,  $d/a = 0.45$ ,  $L_1/a = 0.001$ ,  $L_2/a = 0.041$ ,  $L_3/a = 0.042$ .

Рисунок 3. Затухание волны от удельного сопротивления пластины

Для того чтобы расширить диапазон значений измеряемых комплексных диэлектрических проницаемостей исследуемых образцов, была предложена конструкция (рис.4), в которой используется Н-плоскостное расширение прямоугольного волновода, заполненного вспомогательным диэлектриком заподлицо с узкой стенкой прямоугольного волновода. В такой волноведущей системе может наблюдаться полное отражение волны основного типа за счет резонанса на запертых модах пустого волновода даже без присутствия исследуемого образца [3,4].

Была поставлена и решена методом проекционного сшивания электродинамическая задача о рассеянии сторонней волны  $H_{10}$ -типа на Н-плоскостном расширении и содержащем диэлектрический образец. Геометрия задачи показана на рис.4.

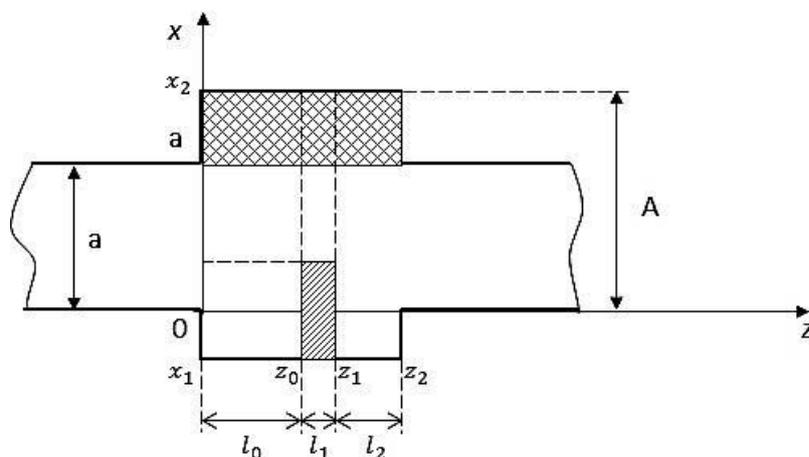


Рисунок 4. Н-плоскостное расширение волновода с исследуемым образцом

Результаты расчета резонансных характеристик затухания волны от диэлектрической проницаемости, задаваемой в пределах от 1 до 6, приведены на рис. 5 в виде зависимости нормированной частоты резонанса от диэлектрической проницаемости малопроницаемого материала

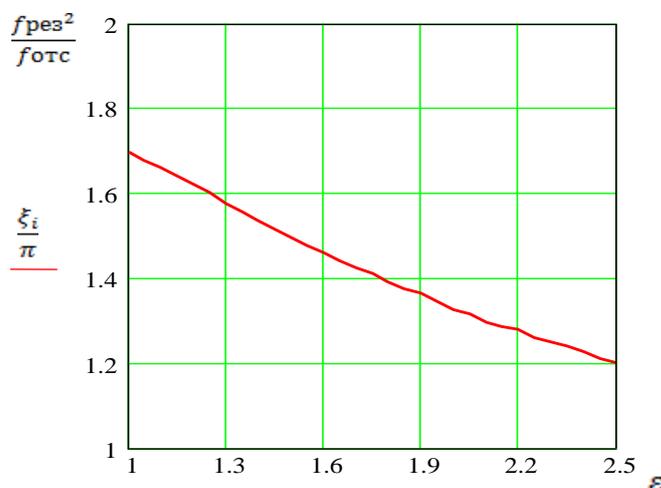


Рисунок.5 Зависимость нормированной частоты резонанса от диэлектрической проницаемости малопроницаемого материала

### Библиографический список

1. Занин В.И., Усанов Д.А., Феклистов В.Б. Определение электрофизических параметров полупроводника волноводным резонансным методом // Межвузовский сборник научных статей "Электродинамика слоисто-неоднородных структур СВЧ". – Самара: Изд-во Самарского университета, 1995. – С.88-99.
2. Занин В.И., Феклистов В.Б. Волноводно-диэлектрический резонанс диэлектрического образца в двумодовом прямоугольном волноводе // Тезисы докл. VI Международ.кон-фер."Электродинамика и техника СВЧ и КВЧ". Т.УП. Вып 2.-С.161-162. Самара 1999.
3. Шестопалов В.П., Кириленко Л.А., Рудь А.А. Резонансное рассеяние волн. Т.2. Волноводные неоднородности. -Киев: Наукова Думка.1986.-216с.
4. Минакова Л.Б., Рудь Л.А. Резонансное поглощение в волноводах // Радиопизика и электроника. Сб. научн. тр. ИРЭ НАН Украины.–2001.–Т.6.–№ 2.–С.206-216.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЙ ВОЛНЫ ОСНОВНОГО ТИПА ОТ ПОЛУПРОВОДЯЩЕЙ ВСТАВКИ С НЕОДНОРОДНЫМ НАРУШЕННЫМ СЛОЕМ

*Е.В.Баканов<sup>1</sup>, В.И.Занин<sup>1</sup>, В.Б. Феклистов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Самарский университет

<sup>2</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

E-mail: zvi@samsu.ru

Показано, что режим бегущей волны основного типа в волноводной линии передачи можно обеспечить путем размещения в волноводе полупроводящей вставки с переменным профилем и неоднородным нарушенным поверхностным слоем.

**Ключевые слова:** волноводная линия передачи, согласованная нагрузка, неоднородная структура с переменным профилем, неполный метод Галеркина, краевая задача.

Основное назначение согласованных нагрузок, находящихся в линии передачи, это обеспечение режима бегущей волны. В работе исследуется рассеяние волны основного типа на оконечной нагрузке в прямоугольном волноводе, которая представляет собой неоднородную структуру с переменным профилем. Неоднородность структуры также задает нарушенный слой, являющийся средой с градиентными электрическими параметрами проводимости и диэлектрической проницаемости. Исследуемая электродинамическая система представляет собой прямоугольный волновод, содержащий волноводную неоднородность, например, типа «скос» с нарушенным слоем, которая полностью заполняет волновод по высоте (рис.1).

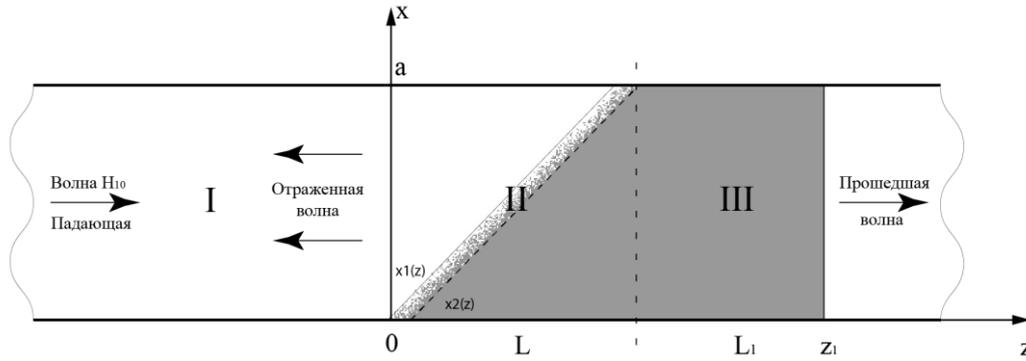


Рисунок 1 Конфигурация волноводной нагрузки типа «скос» с нарушенным слоем

Комплексная диэлектрическая проницаемость волноводной неоднородности  $\dot{\epsilon}_k(x, z)$  - задается кусочной функцией вида:

$$\dot{\epsilon}_k(x, z) = \begin{cases} 1, & \text{если } (x, z) \in I, \\ \dot{\epsilon}_{\text{слоя}}(x, z), & \text{если } (x, z) \in II, \\ \dot{\epsilon}_{\text{объема}} = \text{const}, & \text{если } (x, z) \in III. \end{cases}$$

Полагаем, что на неоднородность слева набегают волны  $H_{10}$ , напряженность электрического поля которой имеет только  $y$  – компоненту. При взаимодействии волны  $H_{10}$  с нагрузкой возбуждаются волны  $H_{m0}$ -типа, для которых также отличны от нуля только  $y$  – компоненты напряженности электрического поля.

Ставится задача по определению коэффициентов отражения и прохождения и установившегося распределения поля во всем объеме волновода, включая неоднородность.

Представление полей в различных областях волновода можно записать в виде:

1. Область  $z < 0$ ,  $E_y(x, z) = e^{-\gamma_1 z} \varphi_1(x) + \sum_{k=1} R_k e^{\gamma_k z} \varphi_k(x)$ ,

2. Область  $0 < z < L$ ,

$$\frac{\partial^2 E_y(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y(x, z)}{\partial z^2} + k_0^2 \epsilon_k(x, z) E_y(x, z) = 0,$$

3. Область  $L < z < z_1$ ,  $E_y(x, z) = \sum_{s=1} (A_s e^{-\Gamma_s(z-L)} + B_s e^{\Gamma_s(z-L)}) \varphi_s(x)$ ,

4. Область  $z > z_1$ ,  $E_y(x, z) = \sum_{k=1} T_k e^{-\gamma_k(z-z_1)} \varphi_k(x)$ ,

где  $\varphi_n(x) = \sin p_n x$ ,  $\gamma_n^2 = p_n^2 - k_0^2$ ,  $k_0^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0$ ,  $\Gamma_s^2 = p_s^2 - k_0^2 \dot{\epsilon}_{\text{объема}}$   
 $p_n = \pi n / a$ .

Во второй области будем искать решение в виде:  $E_y(x, z) = \sum Y_n(z) \varphi_n(x)$ .

В соответствии с процедурой неполного метода Галеркина [1,2] для амплитуд  $Y_n(z)$  волноводных мод можно получить краевую задачу

$$\frac{dY_n}{dz} = U_n(z),$$

$$\frac{dU_n}{dz} = \sum_{m=1}^N [p_n^2 \delta_{nm} - k_0^2 \alpha_{nm}(z)] Y_m(z).$$

с граничными условиями в начале и конце неоднородного участка для функций  $Y_n(z), U_n(z)$ :

$$\gamma_m Y_m(0) - U_m(0) = 2\gamma_m \delta_{1m},$$

$$\Gamma_m Y_m(L) \left[ \frac{\gamma_m - \Gamma_m}{2\Gamma_m} e^{-\Gamma_m L} + \frac{\gamma_m + \Gamma_m}{2\Gamma_m} e^{\Gamma_m L} \right] -$$

$$- U_m(L) \left[ \frac{\gamma_m - \Gamma_m}{2\Gamma_m} e^{-\Gamma_m L} - \frac{\gamma_m + \Gamma_m}{2\Gamma_m} e^{\Gamma_m L} \right] = 0.$$

где  $\alpha_{nm}(z) = (2/a) \int_0^a \dot{\epsilon}_k(x, z) \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx$ ,  $U_n(z) = \frac{dY_n}{dz}$ .

Амплитудные коэффициенты  $R_m$  отраженных  $H_{m0}$  - мод и связанный с ними коэффициент стоячей волны по напряжению находятся по формулам

$$R_m = \frac{1}{2\gamma_m} (\gamma_m Y_m(0) + U_m(0)), \quad KCBH = \frac{1 + R_1}{1 - R_1}.$$

В свою очередь, амплитудные коэффициенты  $T_m$  прошедших  $H_{m0}$  - мод можно найти следующим образом:

$$T_m = \frac{1}{2\gamma_m} \left\{ \frac{\gamma_m + \Gamma_m}{2\Gamma_m} [\Gamma_m Y_m(L) + U_m(L)] e^{-\Gamma_m L} + \right.$$

$$\left. + \frac{\gamma_m - \Gamma_m}{2\Gamma_m} [\Gamma_m Y_m(L) + U_m(L)] e^{\Gamma_m L} \right\} = 0.$$

Амплитудные коэффициенты  $A_s, B_s$  прямых и обратных волн третьей области волновода  $L < z < z_1$  определяются из соотношений:

$$A_s = \frac{1}{2\Gamma_s} [\Gamma_s Y_s(L) - U_s(L)].$$

$$B_s = \frac{1}{2\Gamma_s} [\Gamma_s Y_s(L) + U_s(L)].$$

Заметим, если в плоскости  $z = z_1$  разместить электрическую стенку,

т.е. превратить волноводную нагрузку (рис.1) проходящего типа в оконечную нагрузку, то граничные условия в начале и конце неоднородного участка запишутся другим образом:

$$\begin{aligned} \gamma_m Y_m(0) - U_m(0) &= 2\gamma_m \delta_{1m}, \\ \Gamma_m \cdot Y_m(L) - U_m(L) \cdot \operatorname{th} \Gamma_m(L - z_1) &= 0. \end{aligned}$$

Методом дифференциальной прогонки краевая задача была сведена к решению задачи Коши, численное решение прямого и обратного хода которой проведено неявным методом Адамса 5-порядка.

При численном моделировании рассеяния основной волны в прямоугольном волноводе на оконечной нагрузке были заданы следующие значения параметров: размер широкой стенки волновода  $a=1$ , длина неоднородного участка  $L=2.5a$ , а однородного -  $L_1=0.5a$ , действительная часть комплексной  $\dot{\epsilon}_k = \epsilon_r - j \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0}$  проницаемости  $\epsilon_r = 2.05$ , электропроводность  $\sigma = 0.012$ . комплексная проницаемость слоя  $1 \leq \dot{\epsilon}_{\text{слоя}} \leq \sqrt{\dot{\epsilon}_k}$ . Количество учтенных мод при расчетах было равно 2.

На рис.2,3,4 показаны частотные характеристики отражения волны вдали от волноводной нагрузки типа «скос» для разных толщин неоднородного слоя в диапазоне  $\pi \leq k_0 a \leq 2\pi$  изменения нормированного волнового числа.

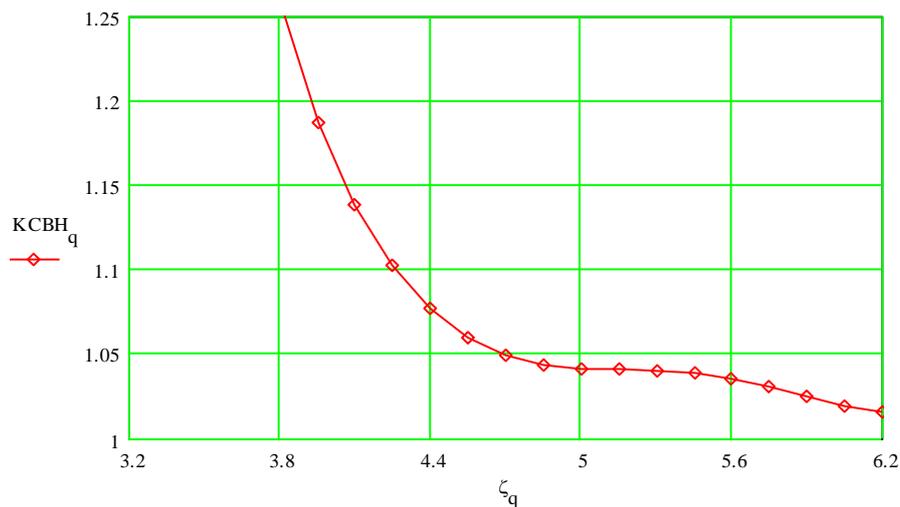


Рисунок 2. Отражение волноводной нагрузки типа «скос» без нарушенного слоя

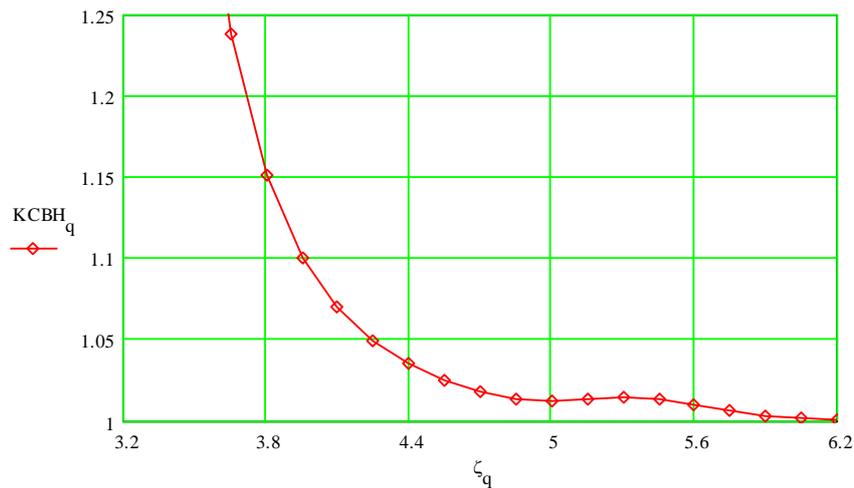


Рисунок 3. Отражение волноводной нагрузки типа «скос», толщина слоя (0.1)

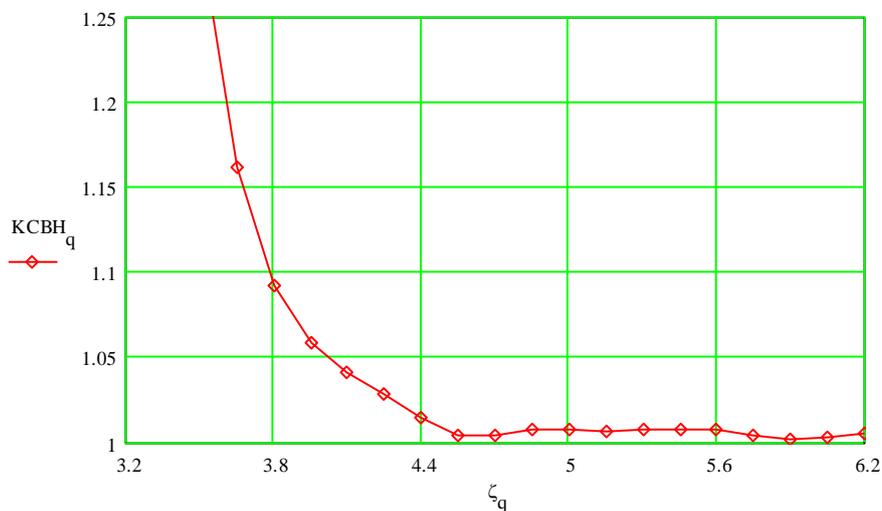


Рисунок 4. Отражение волноводной нагрузки типа «скос», толщина нарушенного слоя (0.2)

### Библиографический список

1. Моденов В.П., Свешников А.Г. Проекционный метод решения несамосопряженных краевых задач теории волноводов // Вестник МГУ. Сер.. – 1985. – Т.26. - №2. - С.3-6.
2. Берестнев Д.П., Зайцев В.В., Занин В.И. Численный анализ частотных характеристик цилиндрических неоднородностей в волноводах // Электродинамика и техника СВЧ и КВЧ. – 1993. – Вып.3. –С.5-9.

# ГЕНЕРАЦИЯ ЭДС ЗА СЧЕТ ВОЗБУЖДЕНИЯ СПИНОВЫХ ВОЛН В УСЛОВИЯХ СУЩЕСТВОВАНИЯ ДИПОЛЬНО-ОБМЕННЫХ И МАГНИТОУПРУГИХ РЕЗОНАНСОВ В СТРУКТУРЕ Pt/YIG

*М.Е. Селезнев<sup>1,2\*</sup>, Ю.В. Никулин<sup>1,2</sup>, В.К. Сахаров<sup>1</sup>, Ю.В. Хивинцев<sup>1,2</sup>, А.В.Кожевников<sup>1</sup>,  
С.Л. Высоцкий<sup>1,2</sup>, Ю.А. Филимонов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>СФирЭ им. В. А. Котельникова РАН, Саратов

<sup>2</sup>СНИГУ им. Н. Г. Чернышевского

E-mail: mixanich94@mail.ru

Исследована генерация ЭДС в тонкопленочной структуре Pt/YIG в условиях существования гибридизации поверхностных магнитостатических волн с обменными объемными модами пленки YIG и магнитоупругих резонансов. Показаны резонансные пики ЭДС на частотах дипольно-обменных резонансов. В тоже время, на частотах магнитоупругих резонансов значения ЭДС уменьшаются.

**Ключевые слова:** спинтроника, спиновые волны, эффект увлечения электронов, обратный спиновый эффект Холла, магнитоупругие резонансы, дипольные обменные резонансы.

## Введение

Исследование механизмов генерации ЭДС в структурах феррит-металл представляет интерес для развития энергоэффективной элементной базы на основе спинтроники и магноники [1,2]. Наиболее широко исследуются структуры на основе пленок железиттриевого граната (YIG) и платины (Pt) – металла с сильной спин-орбитальной связью. В таких структурах электроны проводимости чувствительны к состоянию намагниченности в пленке YIG, вследствие чего в таких структурах основными механизмами генерации ЭДС при распространении спиновых волн являются эффект увлечения электронов [3,4,5] и обратный спиновый эффект Холла [6,7]. При этом исследование влияния дипольно-обменных и магнитоупругих резонансов на генерируемую ЭДС при распространении спиновых волн в структурах Pt/YIG ранее не проводилось.

В данной работе исследовалась генерация ЭДС  $U$  в структуре Pt/YIG в условиях гибридизации бегущих поверхностных магнитостатических волн (ПМСВ) с обменными объемными акустическими модами.

## Методы изготовления и исследования структур

Для изготовления структуры (рис.1а) на поверхность пленки YIG толщиной  $d \sim 900$  nm и эффективной намагниченностью  $4\pi M^{ef} \sim 1800$  G, выращенная на подложке гадолиний-галлиевого граната (GGG) толщиной  $g \sim 459$   $\mu$ m, напылялась пленка Pt толщиной  $t \sim 9$  nm, из которой с использованием методов фотолитографии и ионного травления формировалась микрополоска длиной  $L \sim 220$   $\mu$ m, шириной  $W \sim 40$   $\mu$ m и удельным сопротивлением  $\rho \sim 0.324 \cdot 10^{-6}$   $\Omega \cdot m$ . Затем, на поверхность пленки YIG напылялась пленка меди Cu толщиной  $\sim 500$  nm, из которой с

помощью метода взрывной фотолитографии формировались индукционные антенны (1,2) для возбуждения и детектирования ПМСВ и контакты (3,4) для снятия частотных зависимостей генерируемой ЭДС. Апертура антенн составляла  $\sim 250 \mu\text{m}$ , ширина медной полоски, соединяющая медные контактные площадки составляла  $b \sim 4 \mu\text{m}$ .

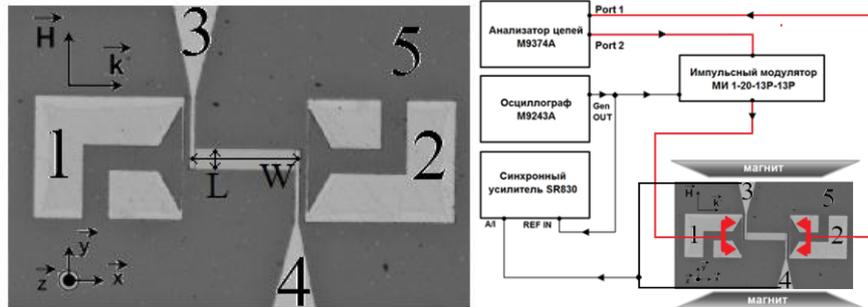


Рисунок 1 (а) Микроструктура Pt/YIG в виде Pt микрополоски длиной  $L \sim 220 \mu\text{m}$  и шириной  $W \sim 40 \mu\text{m}$ , цифрами 1, 2 обозначены медные возбуждающие и детектирующие антенны, 3, 4 – медные контакты для измерения генерируемой ЭДС, 5 – поверхность пленки YIG; (б) Схема измерений амплитудно- и фазочастотных характеристик и генерируемой ЭДС  $U(f)$

Для проведения исследования образец располагался между полюсами магнитного поля таким образом, что магнитное поле  $H=939 \text{ Oe}$  было направлено касательно к поверхности пленки YIG и перпендикулярно длине Pt микрополоски (рис.1b), что соответствовало геометрии возбуждения ПМСВ. Исследование частотных зависимостей модуля и фазы коэффициентов отражения  $S_{22}$  и прохождения  $S_{12}$  сигналов ПМСВ осуществлялось за счет векторного анализатора. Измерения частотных зависимостей генерируемой ЭДС  $U(f)$  проводилось за счет селективного вольтметра, который подключался к контактам 3 и 4 (рис.). При этом, на входную антенну подавался СВЧ сигнал с импульсной модуляцией (11.33 kHz) для обеспечения работы вольтметра и уменьшения влияния нагрева на генерацию ЭДС.

### Результаты и обсуждение

На рис.2а показаны частотные зависимости коэффициента прохождения  $S_{12}(f)$  для свободной пленки YIG (кривая 1) при мощности накачки  $P=-20 \text{ dBm}$  и для исследуемой структуры при мощностях накачки  $P=-20$  и  $0 \text{ dBm}$  (2 и 3 соответственно). Значения  $S_{12}$  для пленки YIG были больше, чем значения  $S_{12}$  исследуемой структуры практически на всем частотном диапазоне ПМСВ при одной и той же мощности накачки  $P$ . Это может быть связано как с потерями, вносимые Pt микрополоской, так и влиянием медных контактов на распространение ПМСВ. Уменьшение значений  $S_{12}$  для  $P=0 \text{ dBm}$  на всем частотном диапазоне ПМСВ можно связать с четырехмагنونными процессами параметрической неустойчивости.

Также отмечено наличие резонансных частот на всех кривых (рис.2а отмечены звездочками), на которых происходит резкое уменьшение значений  $S_{12}$ . Это может быть обусловлено дипольно-обменными резонансами – гибридизацией дипольной ПМСВ и обменных мод, распространяющихся по толщине пленки YIG.

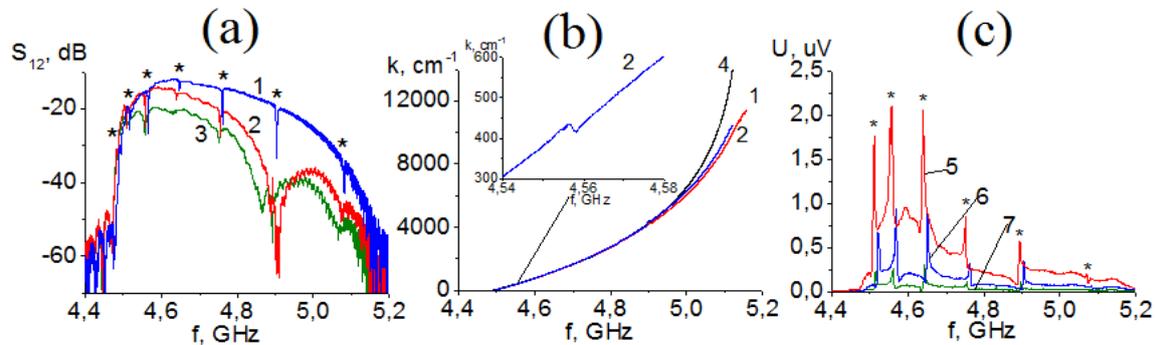


Рисунок 2 Частотные зависимости коэффициента прохождения  $S_{12}$  (а), волнового числа  $k$  ПМСВ (б) и генерируемой ЭДС  $U$  (с). Цифрами обозначены результаты: 1 – для пленки YIG при  $P = -20$  dBm; 2 и 3 – для исследуемой структуры при  $P = -20$  и  $0$  dBm, соответственно; 4 – теоретический расчет дисперсии ПМСВ для YIG; 5, 6 и 7 – для мощностей  $P = -5, -10$  и  $-15$  dBm

На рис.2б приведены рассчитанные [8] дисперсионные характеристики  $k(f)$  на основе полученных фазочастотных зависимостей  $\varphi(f)$ , где  $k$  – волновое число ПМСВ. Наибольшие значения  $k \sim 12000 \text{ cm}^{-1}$  наблюдались для пленки YIG (кривая 1), в то время как для исследуемой структуры наблюдались  $k \sim 11000 \text{ cm}^{-1}$ . При этом построенные кривые слабо отличались от теоретического расчета дисперсионной характеристики для ПМСВ Деймона-Эшбаха в пленке YIG (кривая 4) при  $k < 6000 \text{ cm}^{-1}$ . Расхождение дисперсионных характеристик при больших значениях  $k$  можно связать с влиянием обменного взаимодействия и неоднородностью пленки YIG по толщине. На вставке к рис.2б показано anomalous поведение дисперсии на частоте дипольно-обменного резонанса.

На рис.2с показаны измеренные частотные зависимости ЭДС  $U(f)$  для исследуемой структуры при входных мощностях накачки  $P = -5, -10$  и  $-15$  dBm (кривые 5, 6 и 7 соответственно). Зависимости показывают резкий рост значений  $U$  на частотах, соответствующих частотам дипольно-обменных резонансов. Это может быть связано с тем, что в структуре Pt/YIG основным механизмом генерации ЭДС  $U$  при распространении ПМСВ является обратный спиновый эффект Холла, при этом значения  $U$  будут зависеть от величины генерируемого из YIG в Pt спинового тока. А потому, на частотах дипольно-обменных резонансов резкое увеличение значений  $U$  связано с усилением спинового тока за счет обменных мод.

При этом, в работе [5] исследовались схожие осцилляции ЭДС  $U(f)$  на частотах дипольно-обменных резонансов для структуры n-InSb-YIG. Однако, в данной работе было показано уменьшение значений  $U$  на соответствующих частотах. На частотах  $f > 5$  GHz происходит уменьшение значений  $U$  для всех мощностей накачки. Это можно связать с уменьшением ПМСВ с  $k > \pi/b \sim 8000 \text{ cm}^{-1}$ .

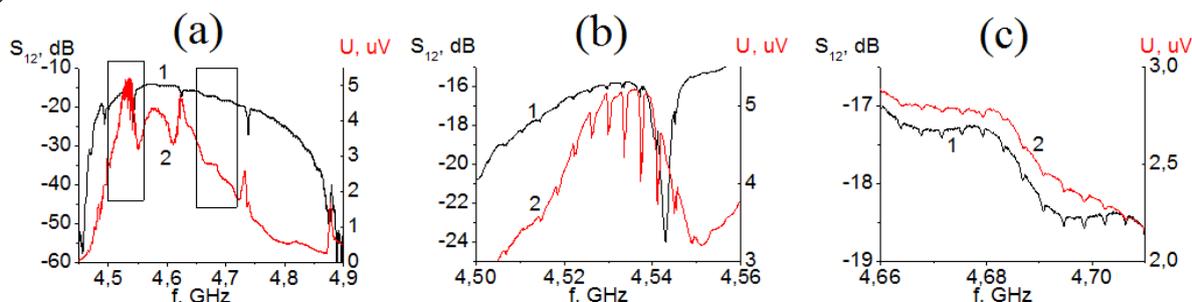


Рисунок 3 Частотные зависимости коэффициента прохождения  $S_{12}$  при  $P = -20$  dBm и генерируемой ЭДС  $U$  при  $P = 0$  dBm (a); прямоугольниками обозначены рассматриваемые в большем масштабе участки  $S_{12}(f)$  и  $U(f)$  с дипольно-обменным резонансом (b) и без (c)

На рис.3 (a) показаны зависимости  $S_{12}(f)$  при  $P = -20$  dBm и генерируемой ЭДС  $U(f)$  при  $P = 0$  dBm для исследуемой структуры. Отмечено наличие резонансных частот с интервалом  $f^* \sim 4$  MHz, на которых наблюдалось уменьшение значений  $S_{12}$  на 0.6 dB и  $U$  на 0.6  $\mu\text{V}$  на частотном диапазоне дипольно-обменного резонанса (рис.3b) и уменьшение значений  $S_{12}$  на 0.1 dB и  $U$  на 30 nV на частотном диапазоне вне дипольно-обменного резонанса (рис.3c). Такое поведение  $S_{12}(f)$  и генерируемой  $U(f)$  можно объяснить взаимодействием ПМСВ с упругими (акустическими) волнами, возникающие в структуре Pt/YIG/GGG за счет эффекта магнестрикции. При этом, теоретический расчет [9]  $f^* = V_T/2D \sim 3.9$  MHz хорошо согласуется с экспериментом, где  $V_T \sim 3.57 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$  – скорость акустических волн в GGG, а  $D = t+r+d \sim 460 \mu\text{m}$  – толщина всей структуры Pt/YIG/GGG. Такое поведение  $S_{12}(f)$  и генерируемой  $U(f)$  можно объяснить взаимодействием ПМСВ с упругими (акустическими) волнами, возникающие в структуре Pt/YIG/GGG за счет эффекта магнестрикции и приводит к тому, что часть энергии ПМСВ уходит из спиновой подсистемы в упругую, в результате чего генерируется меньший спиновый ток из YIG в Pt.

### Заключение

Исследована генерация ЭДС  $U(f)$  в структуре Pt (9 nm)-YIG (900 nm) за счет возбуждения и распространения ПМСВ в пленке YIG в условиях существования дипольно-обменных и магнитоупругих резонансов. Показано, что на частотах дипольно-обменных резонансов значения генерируемой ЭДС  $U(f)$  могут резко увеличиваться. При этом на частотах магнитоупругих резонансов значения  $U(f)$  существенно уменьшаются на

частотах дипольно-обменных резонансов и незначительно вне данных частот.

*Работа выполнена в рамках государственного задания при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-37-90099, 20-07-00968).*

#### **Библиографический список**

1. *Cornelissen L.J., Peters K.J., Bauer G.E., Duine R.A., Wees B.J.* Magnon spin transport driven by the magnon chemical potential in a magnetic insulator. // *Physical Review B*, 2016. Т.94(1). Р.014412.
2. *Demidov V.E., Urazhdin S., Anane A., Cros V., Demokritov S.O.* Spin-orbit-torque magnonics // *Journal of Applied Physics*. 2020. Т.127(17). Р.170901.
3. *Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е., Раевский А.О.* Теория эффекта увлечения электронов спиновой волной в слоистой среде // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1979. Т. 76. Р. 1593-1601.
4. *Высоцкий С.Л., Казаков Г.Т., Сухарев А.Г., Филимонов Ю.А.* Исследование эффекта генерации статической ЭДС бегущими поверхностными магнитостатическими волнами в тонкопленочной структуре железо-иттриевый гранат – n-InSb // *Радиотехника и электроника*. 1986. Т. XXXI. Р. 411-413.
5. *Казаков Г.Т., Сухарев А.Г., Филимонов Ю.А., Нурджанова С.К., Нам Б.П., Хе А.С.* Обменные осцилляции электродвижущей силы увлечения в тонкопленочной структуре железоиттриевый гранат-n-InSb // *Радиотехника и электроника*. 1988. Т. XXXIII. Р. 801-807.
6. *Chumak A.V., Serga A.A., Jungfleisch M.B., Neb R., Bozhko D.A., Tiberkevich V.S., Hillebrands B.* Direct detection of magnon spin transport by the inverse spin Hall effect // *Applied Physics Letters*. 2012. Т.100(8). Р. 082405.
7. *Marmion S.R., Ali M., McLaren M., Williams D.A., Hickey B.J.* Temperature dependence of spin Hall magnetoresistance in thin YIG/Pt films // *Physical Review B*. 2014. Т.89(22). Р. 220404.
8. *Khivintsev Y.V., Filimonov Y.A., Nikitov S.A.* Spin wave excitation in yttrium iron garnet films with micron-sized antennas // *Appl. Phys. Lett.* 2015. Т.106(5). Р. 052407.
9. *Тихонов В.В., Литвиненко А.Н., Садовников А.В., Никитов С.А.* Манделштам-бриллюэновская спектроскопия нелинейных магнитоакустических резонансов в пленочной структуре ЖИГ-ГТГ. *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2016. Т.80(10). Р. 1389-1394.

# 5 ТЕРАГЕРЦОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

## ГИРОМАГНИТНЫЕ МЕТАМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ГИГАГЕРЦОВОГО И ТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНОВ ЧАСТОТ

*М.Д. Амельченко, С.В. Гришин*

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Россия, Саратов

E-mail: amelchenko.mar@gmail.com

Приведены результаты теоретического исследования дисперсионных характеристик электромагнитных волн, существующих в поперечно намагниченных ферро- и антиферромагнитных метаматериалах. Показано, что в таких гиромагнитных метаматериалах существуют области частот, в которых материальные параметры среды являются дважды отрицательными. У ферромагнитных метаматериалов такая область частот одна и находится в микроволновом диапазоне. У антиферромагнитных метаматериалов таких областей частот две, и обе они находятся в терагерцовой области.

**Ключевые слова:** метаматериалы, левые среды, ферромагнетики, антиферромагнетики

### Введение

Известно, что метаматериалы представляют собой искусственно созданные среды со свойствами, не встречающимися у обычных природных сред [1]. Среди метаматериалов особый класс составляют дважды отрицательные среды (или «левые» среды), у которых диэлектрическая  $\epsilon$  и магнитная  $\mu$  проницаемости являются одновременно отрицательными величинами [2]. В левой среде вектора напряженности электрического и магнитного полей совместно с волновым вектором составляют левую тройку векторов. Это приводит к появлению у среды отрицательного показателя преломления и к распространению в ней обратной электромагнитной волны (ЭМВ), у которой вектора фазовой и групповой скоростей направлены в противоположные стороны. Первоначально для создания дважды отрицательных сред использовались периодические структуры из субволновых элементов, размещенных в вакууме [3]. Основным недостатком таких метаматериалов является отсутствие электрического управления их рабочей полосой частот. Дважды отрицательные среды можно создавать и на основе гиромагнитных материалов, которые, как известно, являются  $\mu$ -

отрицательными средами. Внедряя в гирромагнитную матрицу периодическую структуру в виде тонких проводящих проволочек, моделирующую  $\epsilon$ -отрицательную среду, можно получить управляемую магнитным полем левую среду [4].

В настоящей работе на основе электродинамической модели намагниченной безграничной магнитоупорядоченной среды, внутри которой находится периодическая структура из тонких проводящих проволочек, демонстрируется возможность создания дважды отрицательных сред, работающих как в микроволновом, так и в терагерцовом диапазонах. Для микроволнового диапазона в качестве гирромагнитной среды используется ферромагнетик (ФМ), а для терагерцового диапазона – антиферромагнетик (АФМ).

### 1. Электродинамическая модель

Анализируемая структура представляет собой безграничный магнетик, в котором находится двумерная (2D) периодическая структура из тонких проволок с периодом  $a$ . Предполагается, что период структуры является намного меньше длины ЭМВ  $\lambda$ , т.е.  $a \ll \lambda$ . Исследуется случай поперечного намагничивания, когда внешнее постоянное магнитное поле  $\vec{H}_0$  направлено вдоль проволок, а волновой вектор  $\vec{k}$  направлен перпендикулярно магнитному полю  $\vec{H}_0$  ( $\vec{k} \perp \vec{H}_0$ ). При таком виде намагничивания в магнетике существуют ЭМВ с линейной поляризацией. В этом случае электрическое поле ЭМВ направлено вдоль проволок, а магнитное поле ЭМВ является ортогональным электрическому полю и вектору  $\vec{k}$ . Схематическое изображение структуры приведено на рис. 1.

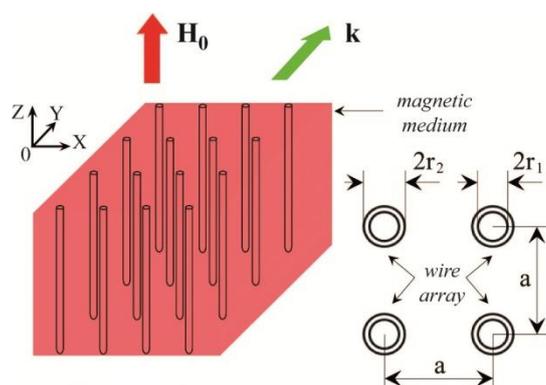


Рисунок 1. Схематическое изображение безграничного поперечно намагниченного магнитного метаматериала. На вставке справа показан вид сверху периодической структуры из проводящих проволок радиусом  $r_1$ , окруженных немагнитным изолятором радиусом  $r_2$ .

В [4] было показано, что для получения дважды отрицательной среды из ФМ материала необходимо окружить проводящие проволоки,

находящиеся внутри магнитной матрицы, немагнитным диэлектриком. Радиус проволоки  $r_1$  выбирался намного меньше, чем период структуры  $a$ , а внешний радиус изолирующей оболочки  $r_2$  выбирался из условий, что  $r_2 \cong (r_1 a)^{1/2}$  и  $r_1 \ll r_2 \ll a$  (см. вставку на рис.1).

Для расчета спектра ЭМВ, существующих в поперечно намагниченном магнитном метаматериале, используется следующее дисперсионное уравнение (ДУ):

$$k = k_0 \sqrt{\mu_{eff\perp} \varepsilon_{eff\perp}}, \quad (1)$$

где  $k$  – волновое число ЭМВ в среде,  $k_0 = \omega/c$  – волновое число ЭМВ в вакууме,  $\omega = 2\pi f$  – круговая частота,  $f$  – линейная частота,  $\varepsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость,  $\mu_{eff\perp}$  – эффективная магнитная проницаемость, которая определяется как

$$\mu_{eff\perp} = (\mu^2 - \mu_a^2)/\mu, \quad (2)$$

где  $\mu$  и  $\mu_a$  – диагональная и недиагональная компоненты тензора высокочастотной магнитной проницаемости. Для изотропного ФМ компоненты  $\mu$  и  $\mu_a$  рассчитываются на основе следующих выражений:

$$\begin{aligned} \mu &= [\omega_H(\omega_H + \omega_M) - \omega^2]/(\omega_H^2 - \omega^2), \\ \mu_a &= \omega_M \omega / (\omega_H^2 - \omega^2), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\omega_H = \gamma H_0$  – частота ферромагнитного резонанса,  $\omega_M = 4\pi\gamma M_0$ ,  $4\pi M_0$  – намагниченность насыщения,  $\gamma$  – гиромагнитное отношение. Для АФМ с «легкой» осью анизотропии, совпадающей с осью  $OZ$ , компоненты  $\mu$  и  $\mu_a$  запишутся в следующем виде [5]:

$$\begin{aligned} \mu &= 1 + 8\pi\gamma_s^2 M_s H_A (\omega_+ \omega_- - \omega^2) / [(\omega_+^2 - \omega^2)(\omega_-^2 - \omega^2)], \\ \mu_a &= 8\pi\gamma_s^2 M_s H_A \omega (\omega_- - \omega_+) / [(\omega_+^2 - \omega^2)(\omega_-^2 - \omega^2)], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\gamma_s$  – усредненный g-фактор,  $M_s$  – усредненная статическая намагниченность подрешеток,  $H_A$  – поле анизотропии,  $\omega_+ = \gamma_s(H_C + H_0)$ ,  $\omega_- = \gamma_s(H_C - H_0)$  – частоты АФМ резонанса,  $H_C = \sqrt{H_A(2H_E + H_A)}$  – поле «опрокидывания» подрешеток,  $H_E$  – поле однородного обменного взаимодействия между подрешетками.

Для поперечно намагниченного магнитного метаматериала в [4] была введена эффективная диэлектрическая проницаемость в виде

$$\varepsilon_{eff\perp} = \varepsilon_f [1 - \omega_{p\perp}^2 / (\omega^2 + i\alpha_\perp)], \quad (5)$$

где

$$\omega_{p\perp}^2 \cong 2\pi / \langle \varepsilon_f a^2 \{ \mu_0 \ln(r_2/r_1) + \mu_{eff\perp} [\ln(a/r_2) - (3 + \ln 2 - \pi/2)/2] \} \rangle, \quad (6)$$

$\alpha_\perp = \varepsilon_f \omega \omega_{p\perp}^2 / \sigma_{eff}$ ,  $\varepsilon_f = \varepsilon_0 \varepsilon$  – абсолютная диэлектрическая проницаемость магнетика,  $\varepsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$  – электрическая постоянная,  $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $\sigma_{eff} = \pi r_1^2 \sigma_0 / a^2$  – эффективная проводимость

периодической решетки из проводящих проволок,  $\sigma_0$  – электрическая проводимость проволоки. В настоящей работе мы будем пренебрегать потерями в магнитном метаматериале, а также не будем учитывать отражение ЭМВ от периодической решетки, как это делалось в [4], и не будем брать во внимание пространственные эффекты, связанные с периодичностью решетки.

## 2. Результаты численных расчетов

На рис.2 приведены ДХ необыкновенных ЭМВ, существующих в поперечно намагниченном ФМ метаматериале, которые рассчитаны на основе (1) с учетом (2), (3), (5) и (6). Расчеты выполнены для идеально проводящей 2D проволочной структуры, когда  $\alpha_{\perp} = 0$  ( $\sigma_{eff} \rightarrow \infty$ ). Из представленных на рис.2а результатов расчета следует, что в отсутствие проволочной структуры, когда плазменная частота электронов равна нулю ( $\omega_{p\perp} = 0$ ), в поперечно намагниченном ФМ существуют две необыкновенные ЭМВ: быстрая и медленная. Обе необыкновенные ЭМВ обладают положительной нормальной дисперсией. Наличие идеально проводящей 2D проволочной структуры внутри ФМ приводит к появлению в спектре третьей ЭМВ. Как следует из результатов расчета, представленного на рис.2б, данная волна является обратной ЭМВ, ДХ которой находится в области частот, где  $\mu_{eff\perp} < 0$  и  $\varepsilon_{eff\perp} < 0$ . Здесь же приведена ДХ обратной ЭМВ, рассчитанная для ФМ метаматериала с эффективной диэлектрической проницаемостью, соответствующей изотропной плазме. Видно, что в данном приближении (изоляторы имеют бесконечно большой радиус) обратная ЭМВ является более замедленной.

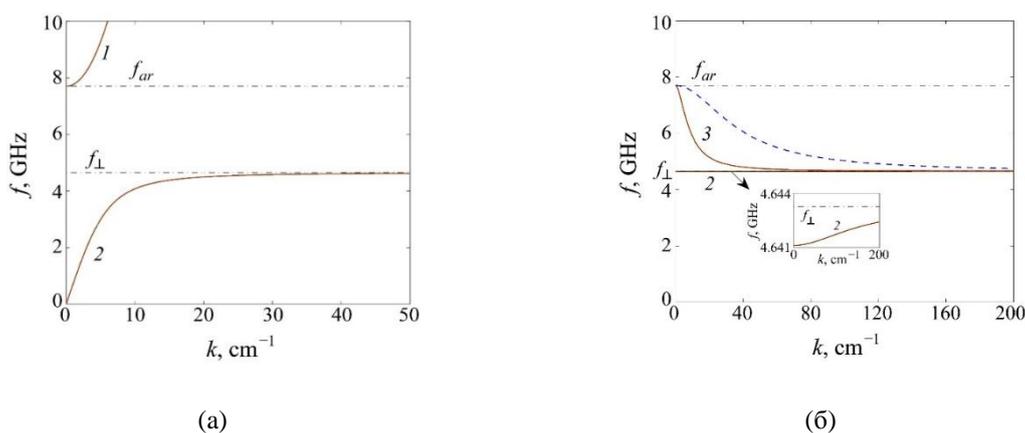


Рисунок 2. ДХ необыкновенных быстрой (кривая 1) и медленных (кривые 2 и 3) ЭМВ, рассчитанные для ФМ (а) и ФМ метаматериала (б) двух значений параметров проволочной решетки:  $\omega_{p\perp} = 0$  (а) и  $a = 0.1$  cm,  $r_1 = 10^{-5}$  cm,  $r_2 = 34 \times 10^{-3}$  cm (б). Пунктирной линией на (б) показана ДХ обратной ЭМВ, рассчитанная для поперечного намагниченного ФМ метаматериала, у которого плазменная частота задается выражением  $\omega_p^2 = 2\pi c^2 / [a^2 \ln(a/r_1)]$ . Расчеты выполнены для  $H_0 = 79.58$  kA/m,  $4\pi M_0 = 0.175$  T и  $\varepsilon_f = 16$ .

На рис.3 приведены ДХ ЭМВ, существующих в поперечно намагниченном АФМ метаматериале, которые рассчитаны на основе (1) с учетом (4)-(6) и (2). Из представленных на рис.3а результатов расчета следует, что в отсутствие 2D структуры из проводящих проволок ( $\omega_{p\perp} = 0$ ), в АФМ существуют три необыкновенные ЭМВ. Две из них являются медленными ЭМВ (кривые 2 и 3), а третья – быстрой ЭМВ (кривая 1). Все три ЭМВ обладают положительной дисперсией. Наличие 2D проволочной структуры ( $\omega_{p\perp} \neq 0$ ) приводит к вырождению прямых медленных ЭМВ в колебания на их предельных частотах (см. рис.3б). Кроме того, появляются две дополнительные медленные ЭМВ (кривые 4 и 5), которые существуют в разных диапазонах частот, где  $\mu_{eff\perp} < 0$  и  $\epsilon_{eff\perp} < 0$ , и являются обратными ЭМВ.

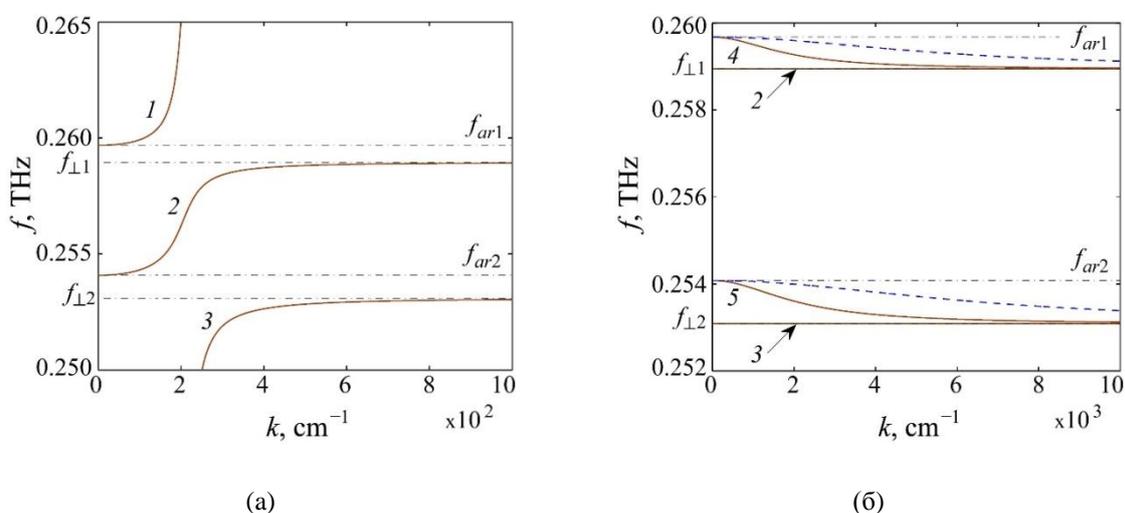


Рисунок 3. ДХ необыкновенных быстрой (кривая 1) и медленных (кривые 2, 3, 4, 5) ЭМВ, рассчитанные в отсутствие 2D периодической проволочной структуры (а) и в ее присутствии при  $\alpha_{\perp} = 0$  (б). На (б) пунктирными линиями показаны ДХ обратных ЭМВ, рассчитанные для поперечного намагниченного АФМ метаматериала с эффективной диэлектрической проницаемостью в виде  $\epsilon_{eff} = \epsilon_r (1 - \omega_p^2 / \omega^2)$ , где  $\omega_p^2 = 2\pi c^2 / [a^2 \ln(a/r_1)]$ . Расчеты выполнены для  $\omega_{p\perp} = 0$  (а) и для  $a = 10^{-3}$  см,  $r_1 = 7 \cdot 10^{-5}$  см,  $r_2 = 3.5 \cdot 10^{-4}$  см (б). Во всех случаях  $H_0 = 79.58$  кА/м,  $M_S = 0.0560$  Т,  $H_E = 40.98$  МА/м,  $H_A = 636.64$  кА/м и  $\epsilon_r = 16$ .

### Заключение

В заключении отметим, что полученные результаты представляют интерес для разработки функциональных материалов для гига- и терагерцовой магноники.

*Работа выполнена за счет гранта Российского Научного Фонда (проект № 19-79-20121)*

### Библиографический список

1. A.L. Vorja. Metamaterials. Devices and Applications / Intech Open. 2017.

2. *Веселаго В.Г.* Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями  $\epsilon$  и  $\mu$  // УФН. 1967. Т. 92. Вып. 3. С. 517-526.
3. *Smith D.R., Padilla W.J., Vier D.C., Nemat-Nasser S.C., Schultz S.* Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. No 18. P. 4184–4187.
4. *Dewar G.* Minimization of losses in a structure having a negative index of refraction // New J. Phys. 2005. Vol. 7. P. 161.
5. *Sharaevskaya A.Yu., Kalyabin D.V., Beginin E.N., Fetisov Y.K., Nikitov S.A.* Surface spin waves in coupled easy-axis antiferromagnetics films // J. Magn. Magn. Mat. 2019. Vol. 475. P. 778-781.

## **ВЫПРЯМЛЕНИЕ СУБТЕРАГЕРЦЕВЫХ КОЛЕБАНИЙ С ПОМОЩЬЮ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК- ТЯЖЕЛЫЙ МЕТАЛЛ**

А.Р.Сафин<sup>1,2</sup>, Д.В. Калябин<sup>1,3</sup>, С.А. Никитов<sup>1,3</sup>, А.И. Кирилюк<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup> Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup> Национальный исследовательский университет «МЭИ»

<sup>3</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>4</sup> Университет Неймегена имени святого Радбода Утрехтского

E-mail: arsafin@gmail.com

Исследована модель выпрямителя субтерагерцевых электромагнитных волн, построенного на основе проводящего антиферромагнетика и тяжелого металла. Механизм резонансного выпрямления колебаний основан на обратном спиновом эффекте Холла в тяжелом металле при спиновой накачке из антиферромагнетика. Показано, что зависимость постоянного напряжения детектора от частоты носит резонансный характер с пиками, соответствующими частотам квазиферромагнитного и антиферромагнитного резонансов. Перестройку частоты детектора можно осуществлять с помощью постоянного электрического тока, пропускаемого через дополнительный слой тяжелого металла, расположенного на антиферромагнетике.

**Ключевые слова:** антиферромагнетик, тяжелый металл, спиновый транспорт, субтерагерцевые колебания, выпрямление.

Возбуждение и детектирование субтерагерцевых колебаний в антиферромагнитных наноструктурах является важным направлением спинтроники [1] и магноники [2]. В [3] двуслойная структура, состоящая из антиферромагнетика (АФМ) и слоя тяжелого металла (ТМ) использовалась для детектирования терагерцевого спинового тока. Легким способом перестройки частоты такого детектора является изменение анизотропии АФМ с помощью магнитострикции [4,5] или температуры [6], а также посредством спин-поляризованного тока [7]. Целью данной работы является теоретическое исследование детектора ТГц колебаний, построенного на основе проводящего АФМ с нарушенной пространственной инверсией  $Mn_2Au$  типа «легкая плоскость», активно используемого в экспериментах по спинтронике [8,9].

Физическая структура детектора ТГц колебаний представлена на

рис.1. Здесь переменное ТГц излучение падает на структуру со стороны прозрачной для ТГц подложки, возбуждая однородную прецессию магнитных подрешеток  $\mathbf{M}_{1,2}$  в АФМ. Прецессия вектора Нееля  $\mathbf{l}=(\mathbf{M}_1-\mathbf{M}_2)/M_s$  ( $M_s$  – намагниченность насыщения АФМ) приводит к спиновой накачке на границе АФМ-ТМ и возбуждению спинового тока в ТМ. За счет обратного спинового эффекта Холла возникновение спинового тока в ТМ приводит к ненулевой разности потенциалов  $V_{\text{OUT}}$  на выходных электродах. Математическая модель, описывающая динамику вектора Нееля в проводящем АФМ, имеет вид [1]:

$$\mathbf{l} \times \left[ \frac{d^2 \mathbf{l}}{dt^2} + \alpha \omega_{ex} \frac{d\mathbf{l}}{dt} + \hat{\Omega} \cdot \mathbf{l} \right] = \gamma \cdot \mathbf{l} \times \left[ \frac{d\mathbf{B}_{em}}{dt} \times \mathbf{l} - \omega_{ex} \lambda_{\text{NSOT}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}_{em} \times \mathbf{y} \right]. \quad (1)$$

где  $\omega_{ex} = \gamma \cdot H_{ex}$  - обменная частота,  $H_{ex} = 1300 \text{ T}$  - обменное поле,  $\gamma = 2\pi \cdot 28 \text{ GHz/T}$  - гиромагнитное отношение,  $\alpha = 2.5 \cdot 10^{-3}$  - постоянная затухания Гильберта,  $\hat{\Omega} = \omega_{ex} \gamma (H_e \mathbf{n}_e \otimes \mathbf{n}_e - H_h \mathbf{n}_h \otimes \mathbf{n}_h)$  - матрица анизотропии и  $H_e = 0.7 \text{ T}$ ,  $H_h = 10 \text{ T}$ ,  $\otimes$  - обозначает тензорное произведение.  $\mathbf{n}_e = \mathbf{x}$ ,  $\mathbf{n}_h = \mathbf{z}$  - орты осей легкого и трудного намагничивания. Внешнее ТГц электромагнитное излучение с частотой  $\omega$  поляризовано в плоскости образца  $\mathbf{x}$ - $\mathbf{z}$  и действует на вектор Нееля в проводящем АФМ через два вращающих момента: вызванного меняющейся во времени индукцией  $\mathbf{B}_{em} = B_{em} e^{i\omega t} \mathbf{z}$  и вызванного спин-орбитальным взаимодействием в АФМ за счет переменного электрического поля  $\mathbf{E}_{em} = E_{em} e^{i\omega t} \mathbf{x}$  [8]. В (1)  $\sigma = 3.4 \cdot 10^4 \text{ } \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$  - оптическая проводимость и  $\lambda_{\text{NSOT}} = 50 \text{ s}^{-1} \text{ A}^{-1} \text{ cm}^2$  - константа, характеризующая величину спин-орбитального взаимодействия в АФМ.

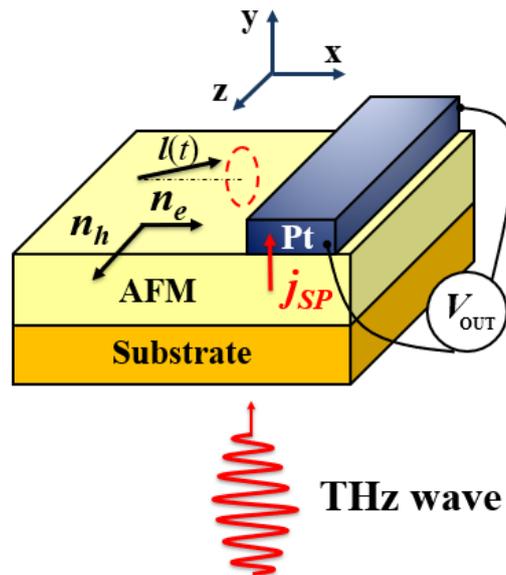


Рисунок 1. Структурная схема детектора ТГц колебаний, выполненного на основе тяжелого металла (Pt) и антиферромагнетика (АФМ), выращенного на подложке (Substrate), прозрачной для ТГц излучения.

Перепишем уравнение (1), параметризуя вектор Нееля в сферической системе координат  $\mathbf{l} = (\cos \phi \cdot \sin \theta, \sin \phi \cdot \sin \theta, \cos \theta)$ , следующим образом:

$$\frac{\sin 2\theta}{2} \cdot \left( \frac{d^2 \phi}{dt^2} + \alpha \omega_{\text{ex}} \dot{\phi} + \frac{\omega_e \omega_{\text{ex}}}{2} \cdot \sin 2\phi + \gamma \frac{dB_{\text{em}}(t)}{dt} \right) + \cos^2 \theta \cdot \left( 2 \frac{d\phi}{dt} \frac{d\theta}{dt} \right) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{d^2 \theta}{dt^2} + \alpha \omega_{\text{ex}} \frac{d\theta}{dt} - \omega_{\text{ex}} \cdot \frac{\sin 2\theta}{2} \left( \left( \frac{d\phi}{dt} \right)^2 + \omega_h - \omega_e \cdot \cos^2 \phi \right) -$$

$$- \omega_{\text{ex}} \lambda_{\text{NSOT}} \sigma E_{\text{em}}(t) \cdot \sin \theta = 0$$

Стационарное направление вектора Нееля  $\mathbf{l}_0$  совпадает с направлением оси легкого намагничивания, т.е.  $\phi_0 = 0, \theta_0 = \frac{\pi}{2}$  и  $\mathbf{l}_0 = \mathbf{x}$ .

Уравнения для малых углов отклонений  $\delta\phi, \delta\theta$  вблизи положения равновесия  $\phi_0, \theta_0$  из (2), (3) имеют вид (с учетом  $H_h \gg H_e$ ):

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\theta \end{pmatrix} + \gamma_0 \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\theta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma B_{\text{em}} \omega \\ \omega_{\text{ex}} \lambda_{\text{NSOT}} \sigma E_{\text{em}} \end{pmatrix} e^{i\omega t}, \quad (4)$$

где  $\omega_{1,2} = \sqrt{\omega_{\text{ex}} \omega_{\text{e,h}}}$  - нижняя и верхняя частоты антиферромагнитного резонанса, соответственно, а  $\gamma_0 = \alpha \omega_{\text{ex}}$  - ширина спектральной линии. Для  $\text{Mn}_2\text{Au}$  имеем  $\omega_1 / 2\pi = 0.85$  THz и  $\omega_2 / 2\pi = 3.2$  THz, а  $\gamma_0 / 2\pi = 0.3$  THz.

Решение (4) представим в виде:

$$\begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_\phi(\omega) e^{i\Phi_\phi(\omega)} \\ A_\theta(\omega) e^{i\Phi_\theta(\omega)} \end{pmatrix} e^{i\omega t}, \quad (5)$$

где  $A_{\phi,\theta}(\omega)$  и  $\Phi_{\phi,\theta}(\omega)$  соответствуют амплитудной и фазочастотной характеристикам системы (4), соответственно, а именно:

$$A_{\phi,\theta}(\omega) = \frac{\Lambda_{\phi,\theta}(\omega)}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_{1,2}^2)^2 + (\omega\gamma_0)^2}}, \quad \tan \Phi_{\phi,\theta} = \frac{\gamma_0 \omega}{\omega^2 - \omega_{1,2}^2}, \quad (6)$$

где  $\Lambda_\phi = -\gamma B_{\text{em}} \omega$  и  $\Lambda_\theta = \omega_{\text{ex}} \lambda_{\text{NSOT}} \sigma E_{\text{em}}$ .

Выпрямленное напряжение  $V_{\text{OUT}}$  на выходных контактах тяжелого металла находится из расчета спинового тока [4-6], текущего из АФМ в ТМ и пропорционального  $\left[ \mathbf{l} \times \frac{d\mathbf{l}}{dt} \right]$  вида:

$$V_{\text{OUT}}(\omega) = \text{щ} \cdot L \cdot \omega \cdot A_\phi(\omega) \cdot A_\theta(\omega) \cdot \sin(\Phi_\theta(\omega) - \Phi_\phi(\omega)). \quad (7)$$

На рис.2 представлена резонансная зависимость выходного нормированного к максимальному значению выпрямленного напряжения (его абсолютного значения) от частоты входного воздействия. Как видно, зависимость имеет резонансный характер с двумя пиками,

соответствующими резонансным частотам 0,85 THz и 3,2 THz выбранного АФМ. Отметим, что представленная зависимость изоморфна амплитудно-частотной характеристике двух индуктивно-связанных колебательных контуров. Для приведенных выше параметров структуры Mn<sub>2</sub>Au/Pt выходное выпрямленное напряжение при резонансе  $\omega = \omega_{1,2}$  равно 100  $\mu$ V, что при входной мощности 100 nW соответствует чувствительности 1400 V/W.

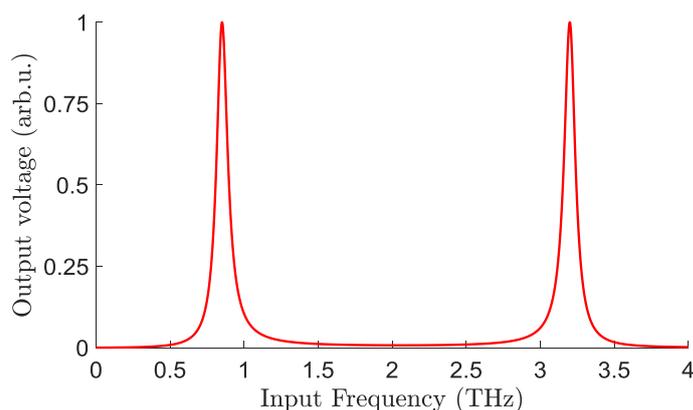


Рисунок 2. Зависимость нормированного выпрямленного напряжения от частоты внешней электромагнитной волны.

Таким образом, в работе исследована теория резонансного выпрямления суб-ТГц сигналов с помощью гетероструктуры антиферромагнетик-тяжелый металл. Показано, что зависимость постоянного напряжения детектора от частоты носит резонансный характер с пиком, соответствующим частоте антиферромагнитного резонанса. Чувствительность к переменному ТГц сигналу предложенной структуры выпрямителя сравнима с чувствительностью современных детекторов. Эксперименты [9,10], выполненные за последние годы, по спиновой накачке антиферромагнетиков подтверждают резонансный характер детектирования ТГц сигналов за счет обратного спинового эффекта Холла в структурах, содержащих АФМ.

*Работа выполнена при поддержке гранта правительства РФ для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных учреждениях высшего образования, научных учреждениях и государственных научных центрах Российской Федерации (проект № 075-15-2019-1874).*

#### Библиографический список

1. Baltz V., Manchon A., Tsoi M., Moriyama T., Ono T., Tserkovnyak Y. Antiferromagnetic spintronics // Rev. Mod. Phys. 2018. Vol. 90. P. 015005.

2. Никитов С.А., Сафин А.Р., Калябин Д.В., Садовников А.В., Бегинин Е.Н., Логунов М.В., Морозова М.А., Одинцов С.А., Осокин С.А., Шараевская А.Ю., Шараевский Ю.П., Кирилюк А.И. Диэлектрическая магноника – от гигагерцев к терагерцам // Успехи физических наук. 2020. Т. 190. № 10. С. 1009-1040.
3. *Khymyn R., Tiberkevich V., Slavin A.* Antiferromagnetic spin current rectifier // AIP. Adv. 2017. Vol. 7. P. 055931.
4. *Popov P.A., Safin A.R., Kirilyuk A., Nikitov S.A., Lisenkov I., Tyberkevich V., Slavin A.* Voltage-Controlled Anisotropy and Current-Induced Magnetization Dynamics in Antiferromagnetic-Piezoelectric Layered Heterostructures // Phys. Rev. Applied. – 2020. Vol. 13, No. 044080.
5. *Consolo G., Valenti G., Safin A.R., Nikitov S.A., Tyberkevich V., Slavin A.* Theory of the electric field controlled antiferromagnetic spin Hall oscillator and detector. Physical Review B. 2021. Vol. 103. No. 134431.
6. *Meshcheryakov A., Safin A., Kalyabin D., Nikitov S., Mednikov A., Frolov D. and Kirilyuk A.* Temperature tunable oscillator of THz-frequency signals based on the orthoferrite/heavy metal heterostructure. J. Phys. D: Appl. Phys. 54 (2021) 195001.
7. Safin A., Puliafito V., Carpentieri M., Finocchio G., Nikitov S., Stremoukhov P., Kirilyuk A., Tyberkevich V., Slavin A. *Electrically tunable detector of THz-frequency signals based on an antiferromagnet* // Applied Physics Letters. 2020. Vol. 117 No. 222411.
8. *Bhattacharjee N., Sapozhnik A., Bodnar S., Grigorev V., Agustsson S., Cao J., Dominko D., Obergfell M., Gomonay O., Sinova J., Kläui M., Elmers H.-J., Jourdan M., and Demsar J.* Néel Spin-Orbit Torque Driven Antiferromagnetic Resonance in Mn<sub>2</sub>Au Probed by Time-Domain THz Spectroscopy // Phys. Rev. Lett. 2018. Vol. 120. No. 237201.
9. *Barthem V., Colin C., Mayaffre H., Julien M., Givord D.* Revealing the properties of Mn<sub>2</sub>Au for antiferromagnetic spintronics // Nature Communication. 2013. Vol. 4. No. 2892.
10. *Vaidya P., Morley S., Tol J., Liu Y., Cheng R., Brataas A., Lederman D., del Barco E.* Subterahertz spin pumping from an insulating antiferromagnet // Science. 2020. Vol. 368. P. 160–165.
11. *Li J., Wilson C., Cheng R., Lohmann M., Kavand M., Yuan W., Aldosary M., Agladze N., Wei P., Sherwin M., Shi J.* Spin current from sub-terahertz-generated antiferromagnetic magnons // Nature. 2020. Vol. 578. P. 70-74.

## КВАНТОВЫЙ ОТКЛИК АТОМНОЙ СИСТЕМЫ КОЛОННОГО ГРАФЕНА НА ВНЕШНЕЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ: ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

*А.А Петрунин, О.Е Глухова*

Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского  
E-mail: sach.petrunin@gmail.com

В работе изучаются электронные свойства колонного графена на основе трубки (20, 0) при взаимодействии с внешним электромагнитным излучением. Особое внимание в исследовании уделяется зонной структуре и динамической проводимости. Изучается также влияние на электронные свойства и динамическую проводимость метрических параметров колонного графена.

**Ключевые слова:** колонный графен, зонная структура, динамическая проводимость

Открытие в начале XXI века тонкой углеродной пленки – графена [1] – оказало значительное влияние на всю современную физику наноструктур. Однако графен не стал неожиданностью для ученых, ведь еще в прошлом веке исследователь Сумио Иидзима [2] открыл углеродные нанотрубки, что во многом предсказало появление слоистых структур графена. Уникальные электрофизические свойства углеродных нанотрубок и монослоев графена натолкнуло исследователей на мысль объединить эти наноматериалы в новый гибридный молекулярный комплекс, который впоследствии назовут колонным графеном.

Исследователями колонного графена [3, 4] отмечаются его весьма выдающиеся свойства, гарантирующие широкий спектр практического применения в различных областях приборостроения. Сообщается о возможности применения колонного графена в качестве сверхчувствительного наномеханического сенсора масс [5]. Пористая структура колонного графена позволяет накапливать и разделять газы [6]. С помощью накопления ионов лития предлагается реализовать аккумуляторы и суперконденсаторы на основе колонного графена [7, 8]. Также созданию электронных наноустройств на основе колонного графена способствует высокая электрическая [8] и термическая [9] проводимость.

Однако при всем многообразии проводимых исследований динамическая проводимость колонного графена до сих пор не изучена в полной мере. Это исследование призвано пролить свет на природу квантового отклика структур колонного графена на внешнее излучение при изменении геометрических параметров структур с дальнейшим изучением динамической проводимости материалов.

Для исследования электронных свойств, в частности зонной структуры, применялся метод SCC-DFTB [10]. Полная энергия системы в рамках этого подхода определяется выражением

$$E_{tot} = \sum_{i\mu\nu} c_{\mu}^i c_{\nu}^i H_{\mu\nu}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta} \Delta q_{\alpha} \Delta q_{\beta} + E_{rep}, \quad (1)$$

где  $c_{\mu}^i$  и  $c_{\nu}^i$  – весовые коэффициенты при разложении по атомным орбиталям,  $\Delta q_{\alpha}$  и  $\Delta q_{\beta}$  – флуктуации заряда на атомах  $\alpha$  и  $\beta$ , соответственно,  $\gamma_{\alpha\beta}$  – функция, экспоненциально убывающая с ростом расстояния между атомами  $\alpha$  и  $\beta$ ,  $E_{rep}$  – терм, описывающий отталкивательное взаимодействие на малых расстояниях.

Для расчета тензора динамической проводимости  $\sigma_{\alpha\beta}(\Omega)$  применялась формула Кубо-Гринвуда [11], которая определяет проводимость, как функцию энергии фотона  $\Omega$ , и записывается в следующем виде [12]

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{2e^2\hbar}{im_e^2 S_{cell}} \frac{1}{N_k} \sum_{k \in BZ} \sum_{m,n} \frac{\hat{P}_\alpha^{nm}(\mathbf{k}) * \hat{P}_\beta^{nm}(\mathbf{k})}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k}) + \Omega + i\eta} \times \frac{f_\beta[E_n(\mathbf{k}) - \mu] - f_\beta[E_m(\mathbf{k}) - \mu]}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})} \quad (2)$$

Здесь  $f_\beta(x) = 1/(1 + \exp[\beta(x - \mu)])$  – функция Ферми-Дирака зависящая от электрохимического потенциала  $\mu$  и обратной тепловой энергии  $\beta = 1/k_B T$ .  $S_{cell}$  – площадь супер-ячейки.  $N_k$  – число - точек разбиения зоны Бриллюэна (BZ).  $\hat{P}_\alpha^{nm}(\mathbf{k})$  – элементы матрицы, соответствующие  $\alpha$ -компоненте вектора оператора импульса.  $E_n(\mathbf{k})$  и  $E_m(\mathbf{k})$  – энергии подзон. Вырождение спина учитывается умножением на 2 в начале формулы,  $\eta$  – параметр характеризующий процесс рассеяния электронов.

В данной работе исследовался колонный графен на основе трубки (20, 0), при этом длина трубки составляла 0.86, 1.31, 1.75 и 2.18 нм. Площадь листов, образующих колонный графен, составляла 5.5 и 5.95 нм<sup>2</sup> (рисунок 1). Таким образом, всего было получено 8 моделей супер-ячеек колонного графена. После определения уровня Ферми исследуемых структур мы провели расчет динамической проводимости колонного графена при воздействии внешней электромагнитной волны с энергией от 0.62 eV до 6.2 eV, что соответствует частотам от 150 THz до 1500 THz.

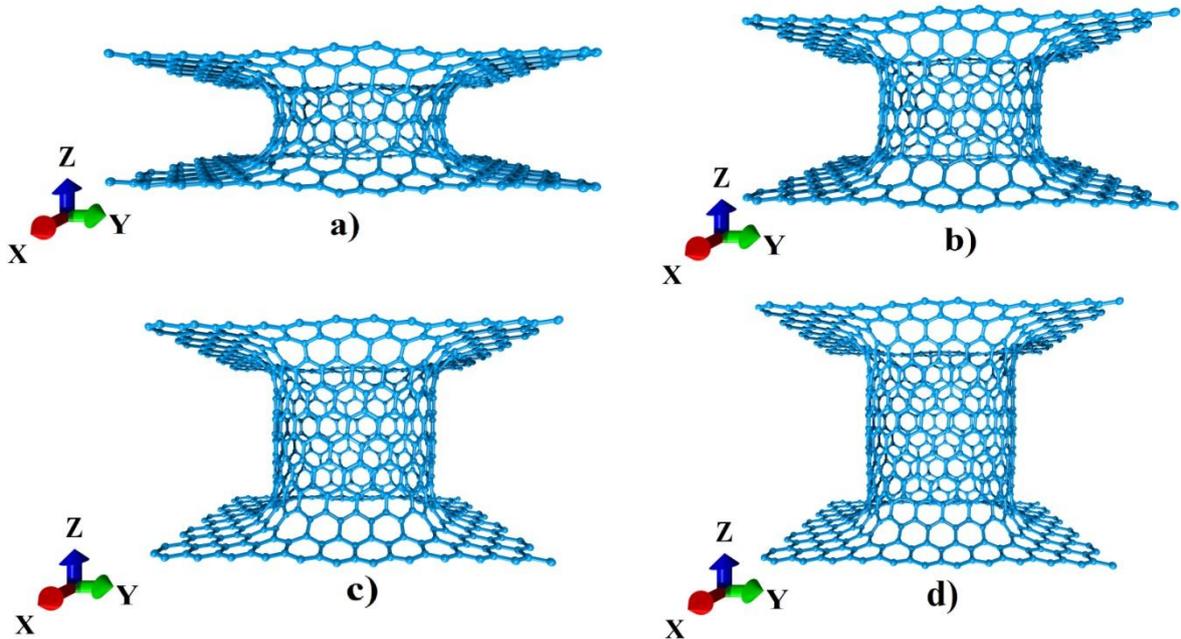


Рисунок 1. Супер-ячейка структуры колонного графена с площадью листов 5.5 нм<sup>2</sup> при длине трубки: а) 0.86 нм; б) 1.31 нм; в) 1.75 нм и д) 2.18 нм

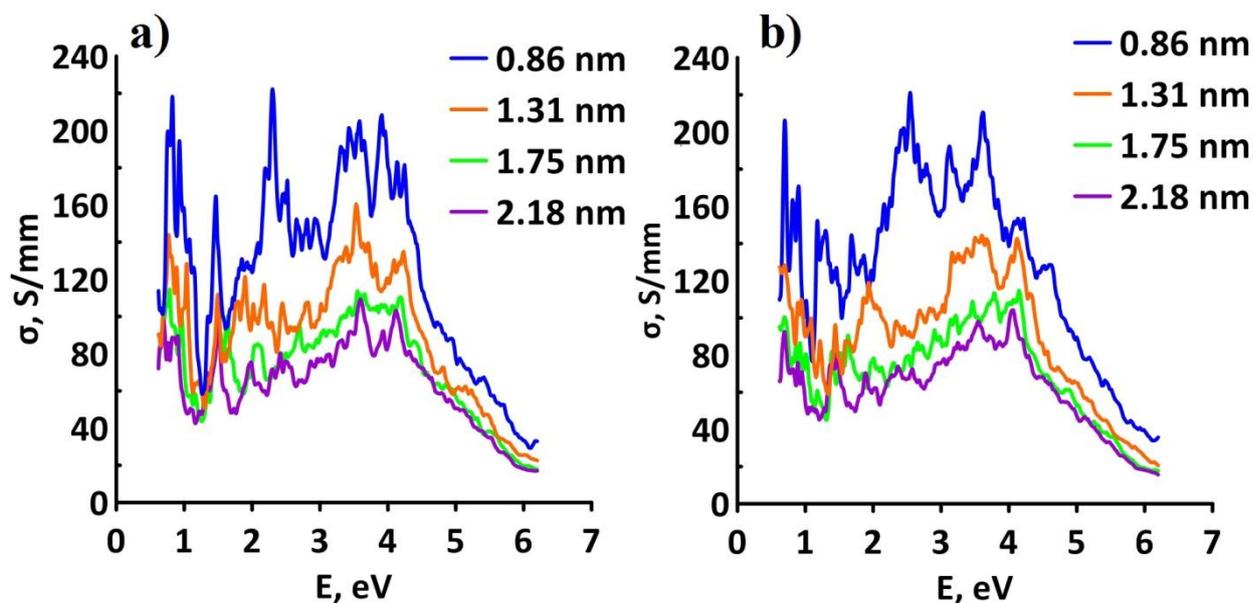


Рисунок 2. Действительная часть динамической проводимости колонного графена при площади листа графена: а)  $5.5 \text{ nm}^2$ ; б)  $5.95 \text{ nm}^2$

Как видно из рисунка 2, наблюдается монотонное падение на всем интервале энергии оптической проводимости при увеличении длины трубки. Сравнивая рисунок 2.а) и рисунок 2.б) можно заметить, что при площади листа равной  $5.5 \text{ nm}^2$  наблюдается большее число пиков проводимости с большей интенсивностью, чем при листе площадью  $5.95 \text{ nm}^2$ .

Таким образом, в результате *in silico* исследования было показано изменение динамической проводимости при изменении геометрических параметров (20, 0) колонного графена. При этом структуры с меньшей площадью листов графена обладают более заметной квантовой отзывчивостью на внешнее излучение видимого спектра. Дальнейшее изучение динамической проводимости различных моделей колонного графена позволит расширить знания о квантовых эффектах в этих структурах.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0004).*

#### Библиографический список

1. Geim, A.K. and Novoselov, K.S. The Rise of Graphene // Nature Materials, 2007, V. 6, № 3, P. 183-191.
2. Iijima S., Ichihashi T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter // Nature V. 363, 1993, P. 603-605.
3. Yingpeng W., Tengfei Z., Fan Z., Yan W., Yanfeng M., Yi H., Yiyang L., Yongsheng C. In situ synthesis of graphene/single-walled carbon nanotube hybrid material by arc-discharge and its application in supercapacitors // Nano Energy, 2012, V. 1, № 6, P. 820-827.

4. *Kondo D, Sato S, Awano Y.* Self-organization of novel carbon composite structure: graphene multi-layers combined perpendicularly with aligned carbon nanotubes // *Appl. Phys. express*, 2008, V. 1, № 7. P. 074003
5. *Duan K., Li L., Hu Y. et al.* Pillared graphene as an ultra-high sensitivity mass sensor // *Sci. Rep.*, 2017, V. 7, 14012.
6. *Pedrielli A., Taioli S., Garberoglio G., Pugno N. M.* Gas adsorption and dynamics in Pillared Graphene Frameworks // *Micro. Mat.*, 2018, V. 257, P. 222-231
7. *Kolosov D. A., Glukhova O. E.* Theoretical Study of a New Porous 2D Silicon-Filled Composite Based on Graphene and Single-Walled Carbon Nanotubes for Lithium-Ion Batteries // *Appl. Sci.*, 2020. V. 10, № 17, P. 5786.
8. *Wang G., Sun X., Lu F., Sun H., Yu M., Jiang W., Liu C. and Lian J.* Flexible Pillared Graphene-Paper Electrodes for High-Performance Electrochemical Supercapacitors // *Small*, 2012, V. 8: P. 452-459.
9. *Varshney V., Patnaik S. S., Roy A. K., Froudakis G., Farmer B. L.* Modeling of Thermal Transport in Pillared-Graphene Architectures // *ACS Nano*, 2010, V. 4, № 2, P. 1153–1161
10. *Frauenheim T., Seifert G., Elstner M., Niehaus T., Kohler C., Amkreutz M., Sternberg M., Hajnal Z., Di Carlo A. , Suhai S.* Atomistic simulations of complex materials: ground-state and excited-state properties // *J. Phys. Condens. Matter*, 2002, V. 14, № 11, P. 3015.
11. *Marder M. P.* Condensed Matter Physics – New York: Wiley; 2011. p 954
12. *Mitrofanov V. V., Slepchenkov M. M., Zhang G., Glukhova O. E.* Hybrid Carbon Nanotube–Graphene Monolayer Films: Regularities of Structure, Electronic and Optical Properties // *Carbon*, 2017, V. 115, P. 803-810.

Научное издание

**Взаимодействие сверхвысокочастотного,  
терагерцового и оптического излучения  
с полупроводниковыми микро- и наноструктурами,  
метаматериалами и биообъектами**

Сборник статей восьмой Всероссийской научной школы-семинара

Под редакцией профессора *Ал.В. Скрипаля*

---

Подписано в печать 19.05.2021 г. Формат 60×84/16.  
Усл.-печ. л. 17,5. Тираж 100 экз. Заказ № 52

---

Издательство «Саратовский источник»  
г. Саратов, ул. Кутякова 138б, 3 этаж.  
Тел. (8452) 52-05-93  
E-mail: saristoch@bk.ru  
Отпечатано в типографии «Саратовский источник»