

Министерство  
образования  
и науки  
Российской  
Федерации

Федеральное  
государственное  
автономное  
образовательное  
учреждение  
высшего  
образования  
Московский  
физико-  
технический  
институт  
(государственный  
университет)



60

60-я  
НАУЧНАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ  
МФТИ

Москва,  
Долгопрудный,  
Жуковский  
2017

# ТРУДЫ 60-Й ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ МФТИ

20-26 ноября  
2017 года

Электроника, фотоника  
и молекулярная  
физика

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего  
образования «Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»

Труды  
60-й Всероссийской научной  
конференции МФТИ

20 - 26 ноября 2017 года

Электроника, фотоника  
и молекулярная физика

Москва Долгопрудный Жуковский  
МФТИ  
2017

УДК 621.372+539.1  
ББК 32.85+22.36  
Т78

Т78            **Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ.**  
20–26 ноября 2017 г. Электроника, фотоника и молекулярная физика.  
- М.: МФТИ, 2017. - 290 с.  
ISBN 978-5-7417-0644-2

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Статьи представляют интерес для специалистов, работающих в области электроники, фотоники и молекулярной физики

**УДК 621.372+539.1**  
**ББК 32.85+22.36**

**ISBN 978-5-7417-0644-2**

© Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)», 2017

## Оглавление

Программный комитет конференции.....	14
Организационный комитет конференции.....	15
<b>Секция вычислительных моделей молекулярной физики и физико-химической механики .....</b>	<b>16</b>
<i>И.Н. Кадочников, И.В. Арсентьев</i>	
Детальная уровневая и модифицированная модовая кинетические модели для описания термически неравновесных процессов в воздушной плазме за фронтом сильной ударной волны .....	16
<i>И.В. Арсентьев, И.Н. Кадочников</i>	
О влиянии колебательной неравновесности при моделировании горения водорода за ударной волной .....	18
<i>Д.С. Якушно</i>	
Построение структурированных расчетных сеток с использованием уравнений в частных производных.....	20
<i>И.А. Корюков</i>	
Расчет аэротермодинамики двойного конуса $25^\circ/55^\circ$ .....	21
<i>Н.А. Харченко</i>	
Расчёт аэротермодинамики спускаемого летательного аппарата EXPERT .....	22
<i>Д.А. Сторожев</i>	
Расчет спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания РН Atlas II методом Монте-Карло.....	23
<i>О.Ю. Оболонская, А.С. Дикалюк</i>	
Численное исследование физико-химических процессов в релаксационной зоне за фронтом ударной волны в газе $N_2$ с помощью поуровневых кинетических моделей.....	24
<b>Секция молекулярного моделирования.....</b>	<b>25</b>
<i>Б.Ю. Валеев</i>	
Атомистическое моделирование кривой испарения газоконденсатной смеси метан– <i>n</i> -пентан .....	25
<i>М.А. Корнева</i>	
Атомистическое моделирование наноструктурированных Zr–Nb сплавов.....	26
<i>В.А. Петров, П.А. Жиляев</i>	
Атомистическое моделирование упругих свойств пористых материалов и материалов с преципитатами.....	27
<i>Г.М. Остроумова, Н.Д. Орехов, В.В. Стегайлов</i>	
Влияние металлических катализаторов на нуклеацию углеродных наноструктур из газовой фазы.....	28
<i>С.В. Павлов, С.А. Кисленко</i>	
Влияние морфологии поверхности углеродного катода на кинетику реакции восстановления кислорода в Li-воздушных системах .....	30
<i>Ю.О. Мороз, С.А. Кисленко</i>	
Влияние поверхностного заряда и кристаллографических граней Au на межфазную структуру ионной жидкости [BMIM][BF <sub>4</sub> ] .....	31



<i>В.С. Смирнов, С.А. Кисленко</i>	
Влияние растворителя на взаимодействие ионов лития и кислорода применительно к литий-воздушным аккумуляторам .....	32
<i>В.А. Кисленко, С.А. Кисленко</i>	
Влияние эффекта сегрегации на распределение дефектов между объемом и поверхностью в $\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .....	33
<i>Е.О. Левина, М.В. Венер</i>	
Гидратация карбоксильной группы диклофенака натрия. Совместное изучение методами спектроскопии НПВО, Кона-Шема и молекулярной динамики .....	34
<i>В.С. Николаев, А.В. Тимофеев</i>	
Зависимость свойств плазменно-пылевых структур от характеристик разряда .....	37
<i>И.С. Гордеев</i>	
Исследование границ ОЦК- и ГПУ- фаз циркония методами молекулярной динамики .....	38
<i>Г.Э. Норман, И.М. Саитов, Р.А. Сартан</i>	
Метастабильные состояния разогретого плотного водорода .....	39
<i>М.А. Логунов, Н.Д. Орехов</i>	
Моделирование молекулярной структуры аморфного полиэтилена с углеродными нановключениями в процессе деформации .....	41
<i>Д.Ю. Ленёв, Г.Э. Норман</i>	
Моделирование роста железных кластеров и термическая аккомодация атомов инертных газов на них .....	42
<i>С.А. Захаров</i>	
Моделирование фильтрации двухфазной бинарной системы углеводородов .....	44
<i>П.И. Чекалкина</i>	
Молекулярная динамика в большом каноническом ансамбле для расчета фазовых диаграмм .....	45
<i>В.И. Цепляев</i>	
Молекулярно-динамическое моделирование поведения дислокаций в молибдене .....	46
<i>И.А. Амелюшкин</i>	
Особенности взаимодействия переохлажденных капель воды и кристаллов льда с твердым телом .....	47
<i>А.И. Чернышов, Н.Д. Орехов, В.В. Стегайлов</i>	
Термализация электрон-ионной системы в фотовозбужденных алюминиевых нанокластерах .....	47
<i>А.С. Красиков, П.Ю. Борисовец, Г.Н. Владимиров</i>	
Учет ион-ионного взаимодействия при моделировании движения ионов в масс-анализаторах, использующих фурье-преобразование сигнала .....	48
<i>Н.Д. Кондратюк, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов</i>	
Учет квантовых эффектов ядер в жидкости методом интегралов по траекториям .....	50
<i>М.А. Орехов</i>	
Эффект аномального увеличения коэффициента диффузии ионов в жидкости .....	52
<b>Секция перспективных углеродных материалов и технологий.....</b>	<b>54</b>
<i>А.И. Рязанова, О.В. Пономарев, Н.А. Львова</i>	
NV-дефекты вблизи поверхности алмаза C(100) – (2×1) .....	54

<i>Е.В. Гладких, И.И. Масленников, А.С. Усеинов</i>	
Измерение профилей криволинейных поверхностей с использованием нанотвердомера, работающего в режиме контурографа.....	56
<i>Е.Э. Павлушкова</i>	
Исследование влияния одностенных углеродных нанотрубок на защитные свойства антикоррозионных лакокрасочных материалов .....	58
<i>С.А. Бондаренко, Б.П. Сорокин, П.Б. Сорокин</i>	
Исследование пьезоэлектрических свойств и фазового превращения в системе твёрдых растворов ALN–AL1-XSCXN–SCN .....	59
<i>Е.А. Агеева, И.Г. Соломоник, Е.А. Жукова, А.Р. Караева, В.З. Мордкович</i>	
Очистка углеродных нанотрубок газо- и жидкофазными методами.....	60
<i>В.П. Афанасьев, Г.С. Бочаров, А.С. Грязев, А.В. Елецкий, П.С. Капля, О.Ю. Ридзель</i>	
Структурные изменения оксида графена в процессе отжига .....	62
<b>Секция физики высокотемпературных процессов .....</b>	<b>64</b>
<i>Г.Э. Норман, В.В. Писарев, Д. Ю. Флейта</i>	
Анализ фазового перехода в расплаве чистого металла методом корреляционных функций высоких порядков .....	64
<i>Л.Н. Колотова</i>	
Атомистическое моделирование фазовых и структурных превращений в сплаве U–Mo под действием радиационных и термических воздействий .....	65
<i>Э.С. Карчевская, Д.В. Минаков, П.Р. Левашов</i>	
Квантовое и классическое моделирование образования и распада химических связей в конденсированном NiAl при различных условиях .....	65
<i>М.В. Морген, М.А. Кадатский, К.В. Хищенко</i>	
Квантово-статистический расчёт энтропии разгрузки металлов при высоких плотностях энергии .....	66
<i>Н.М. Аристова, Г.В. Белов, М.А. Синева, И.В. Морозов</i>	
Методы и алгоритмы аппроксимации экспериментальных данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ в конденсированной фазе .....	67
<i>Г.Ю. Бивол, С.В. Головастов</i>	
Подавление детонации в водородно-воздушных смесях.....	68
<i>М.А. Кадатский, К.В. Хищенко</i>	
Теоретическое описание относительной сжимаемости алюминия и меди в сильных ударных волнах .....	69
<b>Секция физики и химии плазмы .....</b>	<b>71</b>
<i>Ф.О. Хабанов, М.А. Драбинский, Л.Г. Елисеев, В.Н. Зенин, А.В. Мельников, Н.К. Харчев, С.А. Грашин</i>	
Измерение электрического потенциала плазмы в омических режимах токамака Т-10 с помощью диагностики пучком тяжёлых ионов .....	71
<i>В.Н. Зенин</i>	
Исследование колебаний потенциала и плотности плазмы в частотной области МГД тиринг-мод в токамаке Т-10.....	72
<i>М.А. Драбинский, Л.Г. Елисеев, Ф.О. Хабанов, А.В. Мельников, В.Н. Зенин, Н.К. Харчев</i>	
Исследование радиальной структуры ГАМ на токамаке Т-10 с помощью зондирования плазмы пучком тяжёлых ионов .....	73

<i>А.В. Пелевкин, А.С. Шарипов</i>	
Теоретическое исследование реакций электронно-возбужденного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ с молекулами $H_2$ и $H_2O$ .....	74
<b>Секция физики супрамолекулярных систем .....</b>	<b>77</b>
<i>В.Н. Гутров</i>	
Влияние краун-эфирного фрагмента на спектрально-люминесцентные и спектрально-кинетические свойства диариллиденовых производных циклопентанона и циклогексанона.....	77
<i>А.Д. Свирида</i>	
Динамика молекулярной машины на основе комплекса стирилового красителя DSMI и кукурбит[6]урилы .....	78
<i>А.С. Степко, В.Г. Авакян, А.И. Ведерников, П.В. Лебедев-Степанов, В.Г. Плотников, Н.А. Лобова, С.П. Громов</i>	
Зависимость спектров поглощения комплексов кукурбит[7]урил-стириловый краситель от длины N-Аммонииалкильного заместителя.....	79
<i>Т.В. Федотова, Г.В. Захарова, А.К. Чибисов</i>	
Изучение влияния кукурбит[8]урилы на спектрально-люминесцентные свойства 3,3'-диэтилтиакарбоцианина и его 9-метилзамещенного при комплексообразовании .....	81
<i>А.А. Медведева<sup>1</sup>, А.В. Кошкин<sup>2</sup></i>	
Исследование влияния образования твердой фазы силикагеля на фотофизические свойства красителя 3,3'-диметилтиакарбоцианина перхлората.....	82
<i>М.С. Кожухова, Н.А. Лобова, М.В. Алфимов</i>	
Изучение комплексообразования фенилацетиленов с циклодекстринами в растворах.....	83
<i>Е.А. Лач, Н.А. Александрова, Н.А. Лобова, А.И. Ведерников, С.П. Громов</i>	
Исследование стироловых красителей с сульфатоалкильными заместителями в растворах в присутствии кукурбитурилов или перхлората бария.....	84
<i>Н.В. Пекарева, А.В. Кошкин</i>	
Получение и исследование сенсорных свойств макропористых силикатных материалов .....	85
<i>В.Н. Шихта, Л.С. Атабекян, А.К. Чибисов</i>	
Фотопревращения нейтрального красного без и в присутствии кукурбит[7]урилы. ....	86
<b>Секция химии .....</b>	<b>88</b>
<i>С.С. Зыкова, С.Н. Шуров, О.Г. Карманова, Т.В. Шаврина</i>	
Антирадикальная активность 2Н- и 2-замещенных 5-арил-8,8-диметил-8,9-дигидро-2Н-пиридо[4,3,2-de]циннолин-3(7Н)-онов .....	88
<i>Д.С. Кузьмичёв, К.В. Егоров, Д.И. Мякота, А.А. Сигарёв, Ю.Ю. Лебединский, А.М. Маркеев</i>	
Атомно-слоевое осаждение плёнок оксида тантала с управляемым дефицитом кислорода для структур энергонезависимой памяти на основе эффекта резистивного переключения.....	91
<i>П.В. Бондаренко, Ле Тхи Бич Нгуен, С.Е. Журавлева, А.Г. Кузёмин</i>	
Границы естественного метаболизма лишайника <i>Xanthoria parietina</i> (L.) Th. Fr.....	93
<i>Ле Тхи Бич Нгуен, С.Е. Журавлева, П.В. Бондаренко</i>	
Исследование концентрации парамагнитных центров и пигментного состава лишайников в условиях искусственного увлажнения .....	94

<i>А.К. Исмаев, И.Р. Рахмонов, Т.Б. Николаева, Ш. Эмомадова, Ф.Мираминзода, М.У. Бобоев</i>	
Координационные соединения как активные добавки к лечебным солям для ванн .....	95
<i>А.В. Новак, В.Р. Новак, Д.И. Смирнов</i>	
Морфология и структура тонких пленок кремния, получаемых методом химического парафазного осаждения.....	97
<i>М.У. Бобоев, К.Дж. Суяров, М. Рахимова, Т.Б. Николаева</i>	
Процессы образования координационных соединений в системе Zn(II)-изолейцин-вода .....	99
<i>Т.М. Васильева</i>	
Пучково-плазменная модификация природных полимеров: механизмы и технологические подходы.....	102
<i>В.С. Талисманов, С.В. Попков, О.Г. Карманова</i>	
Синтез 2,2-дизамещенных 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланов конденсацией 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диола с кетонами.....	103
<i>С.А. Гудкова, Д.А. Винник, Д.А. Жеребцов</i>	
Синтез, структура и свойства гексаферрита стронция.....	105
<i>В.Б. Киреев, А.В. Киреева</i>	
Физико-химические, медико-демографические и экономико-правовые аспекты устойчивого развития и обеспечения безопасности.....	107
<b>Секция химической физики .....</b>	<b>109</b>
<i>В.В. Байбакова, А.Е. Бугрова, В.А. Сергеева, Н.В. Захарова, М.И. Индейкина, Н.Л. Стародубцева, А.С. Кононихин, Е.Н. Николаев</i>	
Верификация предполагаемых пептидов маркеров преэклампсии в моче беременных женщин с помощью технологии WesternBlot.....	109
<i>Е.Д. Шабратова, К.Л. Герасимов, К.Н. Графская, Д.В. Анохин, Д.А. Иванов</i>	
Исследование структурообразования активных слоев органических солнечных батарей методами рентгеноструктурного анализа в геометрии GIWAXS.....	110
<i>К.Н. Графская, Д.В. Анохин, Б.И. Зимка, Д.А. Иванов</i>	
Контролируемая самоорганизация клиноподобных амфифилов для создания кубической гироидной фазы.....	112
<i>Я.В. Пропад</i>	
Разработка и исследование гибридных наноструктурированных модификаторов грунтов на основе коллоидных частиц .....	114
<i>Э.А. Тастекова, В.А. Надточенко</i>	
Сверхбыстрые процессы переноса электрона в наноразмерных системах.....	116
<b>Секция твердотельной электроники и радиофизики .....</b>	<b>117</b>
<i>Р.А. Юсупов, М.А. Тарасов, М.Ю. Фоминский, В.С. Эдельман</i>	
Оптический отклик болометра на основе структуры сверхпроводник – изолятор–нормальный металл с подвешенным мостиком из нормального металла.....	117
<i>А.М. Чекушкин, М.А. Тарасов, Р.А. Юсупов, А.А. Гунбина, В.С. Эдельман</i>	
Влияние ловушек из нормального металла, андреевского отражения и эффект близости на охлаждение сверхпроводника в СИНИС-структурах. ....	119
<i>Е.А. Костюрина, К.В. Калашиников, Л.В. Филиппенко, В.П. Кошелец</i>	
Высокосимметричный СКВИД постоянного тока на джозефсоновских переходах Nb/AlOx/Nb для сверхчувствительных измерений магнитных полей .....	122

<i>А.В. Фролов, А.П. Орлов, А.А. Синченко, Д.А. Чареев</i>	
Особенности электронного транспорта в мезоструктурах на основе FeSe в направлении перпендикулярно плоскости слоёв .....	124
<i>Ю.Б. Минин, Е.С. Крупник, М.Н. Дубров</i>	
Разработка прецизионного лазерно-интерферометрического измерителя расстояний и перемещений .....	125
<i>А.В. Снежко, В.В. Павловский, В.И. Покалякин</i>	
Применение нестационарного эффекта Джозефсона для спектрального анализа электромагнитного излучения и характеристик электродинамических структур .....	128
<b>Секция нанотехнологий и нанoeлектроники .....</b>	<b>131</b>
<i>А.В. Цуканов, В.Г. Чекмачев</i>	
Вентиль C-NOT в системе на основе двойных квантовых точек в микрорезонаторе под управлением лазерного поля .....	131
<i>М.С. Рогачев, И.Ю. Катеев, А.В. Цуканов</i>	
Моделирование оптических характеристик резонатора-микродиска в алмазном субстрате .....	133
<i>П.В. Арсенов, А.А. Ефимов, В.В. Иванов</i>	
Исследование режимов аэрозольной печати функциональных микроструктур сфокусированными частицами .....	135
<i>М.Ю. Жук, Р.В. Киртаев, Ю.А. Матвеев, А.В. Зенкевич</i>	
Исследование эффекта обратимого резистивного переключения в структурах на основе оксида тантала .....	137
<i>Е.О. Савельева, Р.В. Киртаев, С.С. Зарубин, Ю.А. Матвеев, А.В. Зенкевич</i>	
Создание мемристоров на основе функциональных слоев a-Si:Ag для приложений в нейроэлектронике .....	140
<i>А.Р. Ханас, А.В. Зенкевич</i>	
Вариация температуры Кюри в тонкопленочных ферромагнитных слоях MnSi, выращенных на кремнии .....	142
<i>А.В. Дмитриева, И.А. Мутаев, С.А. Зайцев, А.В. Зенкевич</i>	
Исследование резистивно-переключающихся устройств на основе тонких слоев нестехиометрического оксида кремния .....	144
<i>К.И. Рудаков, А.М. Барышев, П.Н. Дмитриев, А.В. Худченко, В.П. Кошелец</i>	
Разработка приёмных структур 790-950 ГГц и 211-275 ГГц .....	146
<b>Секция эмиссионной и молекулярной электроники .....</b>	<b>149</b>
<i>Б. Бейранванд, А.С. Соболев</i>	
Гибридная линия передач с интегрированной цепочкой термопар для генерации терагерцового излучения .....	149
<i>Е.П. Шешин</i>	
Проблемы автоэмиссионных катодов .....	151
<i>П.И. Акимов, А.П. Никитин<sup>2</sup>, В.А. Сыровой</i>	
Возможности формирования и транспортировки непультсирующих электронных пучков в продольном магнитном поле, отличном от бриллюэновского .....	153
<i>С.В. Лобанов, В.М. Лобанов, Н.Н. Чадаев, И.А. Федоров, Е.П. Шешин</i>	
Карбонатный автокатод .....	153
<i>С.В. Сурков, С.Е. Шарков</i>	
Микроволновый дефростер промышленного применения .....	154

<i>С.Е. Шарков, С.В Сурков</i>	
Повышение однородности ВЧ-поля выходного резонатора МЛК .....	156
<i>А.В. Павленко, М.М. Мье, Е.П. Шешин</i>	
Световые характеристики УФ-люминофоров для нового поколения энергоэффективных ламп .....	157
<i>Хтет Вин Аунг, Е.П. Шешин</i>	
Основные свойства углеродных волокон на основе полиакрилонитрила (ПАН) .....	159
<i>Д.И. Озол</i>	
О модифицированном калориметрическом методе измерения энергетической эффективности катодлюминофоров .....	161
<i>В.Б. Киреев, Е.П. Шешин</i>	
Перспективы использования различных источников света для теплиц.....	163
<b>Секция квантовой электроники .....</b>	<b>166</b>
<i>П.О. Якушенков</i>	
Проект фотонного АЦП .....	166
<i>В.Н. Горшков, Е.Г. Ларионцев, А.А. Медведев, М.Е. Грушин, И.И. Савельев</i>	
Влияние соотношения изотопов $Ne^{20}$ и $Ne^{22}$ в активной смеси на чувствительность зеемановских лазерных гироскопов к внешним механическим воздействиям .....	167
<i>Д.Р. Харасов, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Измерение разогрева активного световода кольцевым кварцевым резонатором.....	167
<i>А.Г. Лапушкин, Э.А. Миликов, Ю.Ю. Брославец, А.А. Фомичев</i>	
Вычислительные методы обработки сигнала четырехчастотного лазерного гироскопа.....	170
<i>Д.М. Амбарцумян, Ю.Ю. Брославец, Н.С. Калмыкова, А.А. Фомичев</i>	
Связь встречных волн в лазерном гироскопе при работе с частотной подставкой.....	171
<i>В.Г. Семенов, Э.А. Миликов, Ю.Ю. Брославец, А.А. Фомичев</i>	
Особенности оптического смесителя излучения кольцевого лазера с непланарным резонатором.....	174
<i>М.Н. Мешков, П.Ю. Лобанов, О.Е. Сидорюк</i>	
Особенности использования лазерного отжига в процессах дегазации и активации геттеров .....	175
<i>А.Б. Тарасенко, В.Б. Успенский, А.А. Фомичёв</i>	
Процедуры паспортизации бесплатформенной инерциальной навигационной системы НСИ2010 .....	177
<i>Ю.Ю. Брославец, Е.А. Полукеев, А.А. Фомичев</i>	
Устойчивость положения моды к разбюстировкам непланарного резонатора лазерного гироскопа .....	179
<i>В.В. Азарова, Ю.Д. Голяев, П.И. Ищенко, А.В. Кулагин, В.В. Фокин, И.В. Чертович</i>	
Особенности контроля параметров прецизионных лазерных зеркал .....	180
<b>Секция фотоники.....</b>	<b>183</b>
<i>Н.В. Коваленко, Г.А. Алоян, О.А. Рябушкин</i>	
Определение температуры поверхности диэлектриков методом радиочастотной импедансной спектроскопии .....	183
<i>Д.Г. Никитин, О.А. Рябушкин</i>	
Ионная проводимость нелинейно-оптических кристаллов трибората лития (LBO).....	184



<i>Т.С. Тебенева, О.В. Бендеров, Б.С. Степанов</i>	
Методика изготовления и характеристика халькогенидных волоконно-оптических разветвителей .....	187
<i>Г.А. Алоян, Н.В. Коваленко, Э.М. Хабушев, О.А. Рябушкин</i>	
Измерение малых коэффициентов оптического поглощения объемных кристаллов.....	189
<i>Е.С. Голубятников, Я.А. Тезадов</i>	
Однопролетные наземные сверхдлинные волоконно-оптические линии связи на основе технологий вынужденного комбинационного рассеяния .....	192
<i>И.О. Храмов, Н.Н. Ишмаматов, Р.И. Шайдуллин, О.А. Рябушкин</i>	
Исследование термооптических свойств кварцевых световодов с медной оболочкой.....	194
<i>И.О. Храмов, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Измерение пространственного распределения интенсивности лазерного излучения на основе интерферометра Фабри–Перо.....	196
<i>Р.И. Исмаилова, Р.И. Шайдуллин, О.А. Рябушкин</i>	
Спектральное исследование термооптических свойств полисилоксановых полимеров, используемых в волоконных лазерах .....	198
<i>И.С. Ульянов, А.И. Баранов, И.Н. Бычков</i>	
Метод управления фазовой характеристикой волоконных компенсаторов дисперсии, применяемых в СРА пикосекундных волоконных лазерах.....	200
<i>А.И. Баранов, И.С. Ульянов</i>	
Прекомпенсация нелинейного набега фазы в волоконном усилителе ультракоротких импульсов с помощью дисперсии высших порядков волоконной брегговской решётки.....	202
<i>И.В. Обронов, А.С. Демкин, Д.В. Мясников</i>	
Усилитель УКИ на кристалле Yb:YAG с одномодовой накачкой .....	202
<i>В.Т. Ахтямов, И.Н. Бычков, А.И. Баранов</i>	
Измерение дисперсии групповых скоростей чирпированных волоконных брегговских решёток.....	204
<i>Н.О.Костин, А.В. Хельвас, В.М. Шабунин, Р.А. Пашков</i>	
Разработка математической модели системы связи с АНПА в подводном положении через сеть бакенов (ретрансляторов).....	205
<i>А.И. Голубева, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Пьезоэлектрический микрорезонатор для измерения поверхностной температуры полупроводников .....	206
<i>К.В. Зотов, И.А. Сабитов, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Исследование изменения оптоэлектронных свойств GaAs при воздействии лазерного излучения .....	209
<i>А.Е. Корольков, Д.И. Белоголовский, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Контроль неоднородного разогрева активной среды твердотельного лазера в условиях генерации лазерного излучения. ....	211
<i>Т.О. Базаров, В.В. Федоров, А.В. Коняшкин, О.А. Рябушкин</i>	
Новый метод регистрации оптического изображения лазерного пучка с помощью матрицы пьезоэлектрических кристаллов .....	213
<i>И.А. Ларионов, В.А. Тыртышный</i>	
Параметрическая генерация широкополосного излучения среднего ИК-диапазона в кристалле ниобата лития с регулярной доменной структурой.....	215

**Секция информационных технологий .....***В.В. Чибисов, И.О. Куров, А.В. Кудряшов*

Сравнительная оценка адаптивности сетей с помощью перегруженных связей на примере цепочки отображений ..... 217

*Д.В. Зайцев*

Применение классических алгоритмов для решения ряда квантовых задач ..... 219

*Е.М. Шаравова, А.В. Хельвас*

Разработка оптического прибора для измерения скорости автономного необитаемого подводного аппарата (АНПА) в подводном положении ..... 220

*С.К. Грачев, Д.С. Северов, А.В. Хельвас*

Разработка системы управления центром масс АНПА (автономных необитаемых подводных аппаратов) ..... 221

*И.О. Куров, Е.Н. Мескова, А.Г. Еременко*

Определение расстояния до объектов с помощью мобильного девайса ..... 222

*Н.Г. Беляйкина, А.М. Данилов, О.В. Левашов, А.В. Хельвас, Е.О. Япрынцев*

Перспективы использования нового устройства на базе акселерометрии для исследования сложной моторной деятельности человека ..... 223

*Д.В. Зайцева, А.С. Зайцев, Е.О. Япрынцев, А.С. Чвырь*

Распознавание ведущего полушария головного мозга с помощью "волшебной палочки" ..... 224

**Секция физической электроники ..... 226***Н.С. Батмановская, Д.А. Пашкеев, В.Е. Гончаров*

Вольт-фарадное профилирование концентрации носителей заряда в гетероструктурах AlGaAs/GaAs ..... 226

*Р.В. Давлетишин, А.В. Никонов, П.С. Лазарев*

Исследование пространственного распределения состава КРТ фоточувствительных элементов в матрицах ИК-диапазона ..... 228

*В.А. Стрельцов*

Численные методы расчета сигналов крупноформатных фотоприемных устройств ..... 230

*В.С. Ковшов, А.И. Патрашин, А.В. Никонов*

Разработка усовершенствованного метода и математического обеспечения измерения квантовой эффективности и темнового тока фоточувствительных элементов ИК МФПУ ..... 231

*Ю.А. Якимов, И.С. Моцев*

Стабилизированный источник опорного тока для глубокоохлаждаемых интегральных схем ..... 232

*А.Д. Юдовская, А.В. Полесский*

Установка контроля пятна рассеяния ИК-объективов на основе матричного фотоприемного устройства ..... 234

*А.В. Полесский, Н.А. Соломонова, Н.А. Семенченко*

Исследование точности определения параметров спектральной характеристики ИК и УФ ФПУ ..... 235

*М.Р. Юскаев, В.Е. Гончаров, Д.А. Пашкеев, А.В. Никонов*

Фотолюминесценция гетероэпитаксиальных структур с квантовыми ямами на основе AlGaAs/GaAs ..... 236



<i>А.К. Ильясов, В.Е. Гончаров</i>	
Методы оптической профилометрии в части технологического контроля фоточувствительных материалов для инфракрасных фотоприемных устройств.....	238
<i>А.Л. Зыбинская, Д.А. Пашкеев, А.Д. Шабрин</i>	
Выращивание эпитаксиальных слоев GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии для фотоприемных устройств на основе квантовых ям.....	240
<i>П.И. Мольков, Д.Л. Балиев</i>	
Исследование фотоэлектрических характеристик МФПУ ультрафиолетового диапазона спектра .....	242
<i>В.В. Прасков, А.В. Никонов, П.С. Лазарев</i>	
Исследование влияния рабочего режима трансимпедансного усилителя на основе каскодного включения на сигналы и шумы матричных фотоприемных устройств.....	243
<i>А.Е. Гончаров, А.Д. Шабрин, В.Е. Гончаров</i>	
Методы рентгеновской дифрактометрии в технологии фотоприемных устройств....	246
<i>П.В. Власов, К.О. Болтарь, П.С. Лазарев, А.А. Лопухин</i>	
МФПУ формата 640×512 с шагом 15 мкм на основе гомоэпитаксиальной структуры InSb .....	247
<i>Н.А. Иродов, К.О. Болтарь, М.В. Седнев, Н.И. Яковлева</i>	
Матрица фотодиодов формата 640×512 на основе nВр-структур с поглощающим слоем InGaAs .....	249
<i>А.С. Мягков, Е.А. Климанов, А.А. Лопухин</i>	
Фотоприемные матрицы на основе InSb с повышенной надежностью .....	250
<b>Секция микроэлектроники.....</b>	<b>252</b>
<i>В.В. Иванов, А.В. Кузовков, В.С. Ерушевич, А.А. Сапожкин, И.А. Кочетов</i>	
Разработка маршрута аттестации ОРС-решений при переходе на новую версию программного обеспечения.....	252
<i>А.В. Колобов, А.В. Кузовков, В.В. Иванов</i>	
Разработка инструмента для расстановки SRAF.....	253
<i>Е.Л. Харченко, А.В. Кузнецов, В.В. Иванов</i>	
Методика оптимизации источника освещения в фотолитографии .....	254
<i>Е.В. Ипатова, В.В. Иванов, А.В. Кузовков</i>	
Оптимизация разработки топологии случайной конфигурации для отработки ОРС-решений.....	255
<i>Е.И. Титова, Г.В. Баранов, А.С. Ключников</i>	
Оптимизация параметров FinFET на КНИ для применения в схемах цифровой электроники .....	256
<i>Н.А. Тсиукарис, О.П. Гуцин, И.В. Матюшкин</i>	
Исследование процессов глубокого травления кремния для технологии трехмерной интеграции .....	257
<i>А.А. Шаранов, Г.В. Баранов</i>	
Сравнительный анализ методов измерения количественных характеристик шероховатости наноразмерных структур .....	258
<i>Д.С. Мизгинов, П.В. Игнатов</i>	
Методы повышения пробойного напряжения транзисторов, ориентированных на высокое напряжение питания. ....	259
<i>Е.С. Шамин, А.В. Кузовков</i>	
Существующие методы и проблемы верификации ОРС решений.....	261

<i>М.В. Литаврин, О.П. Гуцин, Е.С. Горнев</i>	
Реализация блокирования самосовмещенных линий при мультипаттернировании для формирования линий металлизации с шагом 40 нм и менее .....	262
<i>М.А. Горчакова, Л.Г. Нидеккер</i>	
Обзор и анализ существующих подходов к реализации DET – триггеров .....	263
<i>Е.А. Ганькина, П.В. Игнатов, Е.С. Горнев</i>	
Исследование влияния конструкции и методов формирования на n-канальный LDMOS-транзистор .....	264
<i>С.С. Зюзин, К.В. Руденко, А.В. Мяконьких, О.П. Гуцин, В.А. Гвоздев</i>	
Исследование и разработка технологии атомно-слоевого осаждения оксида алюминия.....	266
<i>А.А. Марахин, М.Ю. Барабаненков</i>	
Дифракционные решетки в составе интерфейса полосковых волноводов структур микроэлектроники .....	267
<i>Е.В. Кузнецова</i>	
Моделирование методом Монте-Карло образования вторичных электронов в кристаллическом кремнии .....	269
<i>А.В. Самсонова, Ю.В. Шульга, А.Г. Итальянцев</i>	
Инерциальный варикап для БИНС .....	270
<i>А.А. Сапегин, М.Ю. Барабаненков, А.Г. Итальянцев</i>	
Применение волноводных пересечений с использованием дискретных элементов в интегральной фотонике .....	272
<i>А.А. Малыгин, Р.С. Михеев</i>	
Разработка микросхемы квадратурного цифрового супергетеродинного приемника.....	274
<i>Г.С. Теплов</i>	
Математическая модель конечного автомата абстрактного нейрона.....	275
<i>Д.А. Жевненко, Е.С. Горнев, С.С. Вергелес, Т.В. Криштон, П.В. ДУДКин, В.Г. Криштон</i>	
Вклад различных механизмов переноса ионов в электрический ток в планарных электрохимических преобразователях .....	278
<i>И.В. Годовицын, В.С. Суханов</i>	
Учет туннельной проводимости при разработке высокотемпературного кремниевого преобразователя давления на КНИ-структуре .....	280
<i>И.М. Фалалеев, Г.В. Коваль</i>	
Исследование минимальной возможной ошибки декодирования некоторых кодов .....	282
<i>М.Ю. Ларионов</i>	
Теоретическое обоснование причин изменения параметров считывания радиочастотных меток УНФ-диапазона при их контакте с плотными внешними средами .....	284
<i>Ф.А. Сидоров, А.Е. Рогожин, М.А. Брук, Е.Н. Жихарев</i>	
Механизмы снижения латерального разрешения в методе сухого электронно-лучевого травления резиста.....	286

---

---

## Программный комитет конференции

---

---

*Н.Н. Кудрявцев, ректор МФТИ – председатель*

*В.А. Баган, директор по развитию – заместитель председателя*

*А.А. Воронов, проректор по учебной работе и довузовской подготовке*

*А.В. Дворкович, директор ФРКТ*

*В.В. Киселев, директор ФФПФ*

*С.С. Негодяев, директор ФАКТ*

*В.В. Иванов, директор ФЭФМ*

*А.М. Райгородский, директор ФПМИ*

*С.В. Леонов, директор ФБМФ*

*П.К. Кашкаров, директор ИНБИКСТ*

---

---

## Организационный комитет конференции

---

---

*М.В. Милов, руководитель направления «Образование» ЦУП – председатель*

*С.О. Русскин, представитель ФРКТ*

*Е.Ю. Чиркина, представитель ФФПФ*

*Ю.О. Алексеева, представитель ФАКТ*

*В.Б. Макарова, представитель ФАКТ*

*В.А. Яворский, представитель ФЭФМ*

*С.А. Зайцев, представитель ФЭФМ*

*Е.Г. Молчанов, представитель ФПМИ*

*В.Н. Логинов, представитель ФПМИ*

*К.А. Коньков, представитель ФПМИ*

*К.И. Агладзе, представитель ФБМФ*

*В.Г. Орлов, представитель ИНБИКСТ*

*М.В. Костелева, представитель УНЦ ГСН*

*А.С. Гунаисова, начальник пресс-службы*

*Е.Д. Жебрак, директор аналитического центра*

---

---

## Секция вычислительных моделей молекулярной физики и физико-химической механики

---

---

УДК 533.6.011

### **Детальная уровневая и модифицированная модовая кинетические модели для описания термически неравновесных процессов в воздушной плазме за фронтом сильной ударной волны**

*И.Н. Кадочников, И.В. Арсентьев*

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова

При гиперзвуковом обтекании аэродинамического тела, движущегося в атмосфере Земли, в высокотемпературном газе за фронтом головной ударной волны на фоне резкого изменения газодинамических параметров происходит целый комплекс различных физико-химических процессов: диссоциация, ионизация, неравновесное возбуждение колебательных и электронных степеней свободы молекул, радиационный перенос и др. Для численного исследования данных процессов обычно используются сложные кинетические модели, причём для описания неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул существует два наиболее распространённых приближения: уровневое и модовое.

В рамках уровневого приближения описывается динамика заселённости отдельных колебательных уровней молекул, в то время как в модовом приближении предполагается, что внутри колебательной моды энергетические уровни заселены в соответствии с локальным бальмановским распределением? и для описания колебательного возбуждения моды достаточно одного параметра – колебательной температуры. Кинетические модели на базе уровневого приближения позволяют получить наиболее детальное описание протекающих в неравновесном газе физико-химических процессов, однако в связи со своей сложностью уровневые модели применяются в основном для одномерных расчетов течений двухатомных газов. Более простые модовые модели используются также и в многомерных расчетах, но их точность существенно ограничена вследствие ошибки, возникающей при определении значений факторов неравновесности [1].

На сегодняшний день существует большое количество работ, посвящённых численному исследованию термически неравновесных процессов в воздухе с использованием уровневых и модовых моделей [2, 4]. Однако в существующих уровневых моделях для воздуха [2, 3] обычно не учитываются плазмохимические реакции, а также неравновесное колебательное возбуждение молекул в электронно-возбуждённых состояниях. Нет понимания, к каким погрешностям может привести пренебрежение данными процессами. Кроме того, остаётся нерешённым вопрос о построении более простых термически неравновесных моделей на основе модового приближения, которые обладали бы высокой предсказательной способностью и известными границами применимости. Решению описанных проблем посвящена данная работа.

В данной работе создана новая термически неравновесная детальная уровневая кинетическая модель для описания процессов в высокотемпературных потоках воздушной плазмы, описывающая динамику заселённости отдельных колебательных уровней молекул  $N_2$ ,  $O_2$  и  $NO$  не только в основном, но и в возбуждённых электронных состояниях и учитывающая, помимо широкого набора химических реакций с участием нейтральных компонентов смеси, плазмохимические реакции (ионизацию, ионно-атомную ассоциацию, прилипание электрона к тяжёлой частице, возбуждение внутренних энергетических состояний атомов и молекул электронным ударом и др.). Установлено, что новая уровневая модель позволяет неплохо описывать экспериментальные данные по измерению

интенсивности излучения полос  $\text{NO}(\gamma)$  (переход  $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_r$ ) и  $\text{N}_2^+(1-)$  (переход  $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$ ) в воздухе за фронтом сильной ударной волны с начальной скоростью в диапазоне  $u_0 = 5 \div 10$  км/с.

С использованием построенной в данной работе урвневой модели была исследована кинетика элементарных физико-химических процессов, протекающих в неравновесной воздушной плазме за фронтом сильной ударной волны при различных числах Маха. Показано, что в релаксационной зоне распределения по колебательным уровням молекул  $\text{N}_2(X^1\Sigma^+)$  и  $\text{O}_2(X^3\Sigma_g^-)$  в основном электронном состоянии могут существенно отличаться от распределений Больцмана, причём данное отличие тем существеннее, чем выше интенсивность ударной волны. Так, при числе Маха  $M_0 = 24$  заселённости колебательных уровней молекул  $\text{N}_2(X^1\Sigma^+)$  и  $\text{O}_2(X^3\Sigma_g^-)$  отличаются от больцмановского распределения уже при значениях колебательного квантового числа  $V \geq 2$ . Причём доля таких колебательно-возбуждённых молекул превышает 10% от общего количества молекулярных компонентов смеси, что необходимо учитывать при расчёте параметров потока за фронтом сильной ударной волны в воздухе.

Также в данной работе была построена оригинальная модифицированная модовая модель для воздушной плазмы, использующая для определения факторов неравновесности и скоростей изменения колебательной энергии реагирующих молекул появившуюся относительно недавно методологию [5]. В отличие от традиционных модовых моделей [4], в модифицированной модовой модели для описания колебаний молекул используется приближение ангармонического осциллятора, а скорости колебательной релаксации, подобно урвневому подходу, определяются суммированием вкладов отдельных элементарных колебательно-колебательных переходов. Показано, что, несмотря на относительную простоту, модифицированная модовая модель позволяет описывать параметры воздушной плазмы за фронтом сильной ударной волны с точностью, близкой к точности детальной урвневой модели.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-01-00810) и Совета при Президенте Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (грант НШ-7018.2016.8).

### Литература

1. Lino da Silva M., Guerra V., Loureiro J. Two-temperature models for nitrogen dissociation // Chem. Phys. 2007. V. 342. P. 275–287.
2. Armenise I., Barbato M., Capitelli M., Kustova E. State-to-State Catalytic Models, Kinetics, and Transport in Hypersonic Boundary Layers // J. Thermophys. Heat Transfer. 2006. V. 20. P. 465–476.
3. Kunova O.V., Nagnibeda E.A. State-to-state description of reacting air flows behind shock waves // Chem. Phys. 2014. V. 441. P. 66–76.
4. Starik A.M., Titova N.S., Arsentiev I.V. Comprehensive analysis of the effect of atomic and molecular metastable state excitation on air plasma composition behind strong shock waves // Plasma Sources Sci. Technol. 2010. V. 19. P. 015007 (23pp).
5. Arsentiev I.V., Loukhovitski B.I., Starik A.M. Application of state-to-state approach in estimation of thermally nonequilibrium reaction rate constants in mode approximation // Chem. Phys. 2012. V. 389. P. 73–80.

## О влиянии колебательной неравновесности при моделировании горения водорода за ударной волной

*И.В. Арсентьев, И.Н. Кадочников*

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова

В данной работе исследовались неравновесные процессы воспламенения и горения водорода в воздухе за прямой ударной волной с учетом замедленного колебательного возбуждения компонентов газа. Показано, что пренебрежение этим процессом может привести к существенным погрешностям в определении параметров потока.

Кинетическая модель учитывала химические реакции, процессы колебательно-поступательных и колебательно-колебательных обменов. Для описания колебательного возбуждения компонентов использовалась модель локальных колебательных температур. Данные о константах скоростей химических реакций были выбраны в соответствии с [1].

Анализ проводился для воспламенения водорода за ударной волной в смесях  $H_2/воздух = 5/95$  и  $20/80$  при различных скоростях ударной волны, соответствующих температуре за фронтом от 1100 до 2000 К. Было проведено сравнение времени задержки воспламенения с экспериментальными данными, полученными в [2], которое представлено на рис. 1 и рис. 2 для случаев  $H_2/воздух = 5/95$  и  $20/80$ .

Для описания влияния колебательной температуры компонентов на скорости химических реакций, а также изменения колебательной энергии молекул в ходе химических реакций использовались несколько моделей: модель, предложенная в [3] и основанная на предположении о вероятности протекания реакции с конкретного колебательного уровня (сплошная линия на рисунке); уточненная модель, где дополнительно факторы неравновесности реакций  $H + O_2 = OH + O$  и  $O + H_2 = OH + H$  были взяты из [4], а фактор неравновесности реакции  $H_2 + O_2 = H + HO_2$  не зависел от колебательной температуры  $O_2$  (штриховая линия); и модель, в которой факторы неравновесности реакций вычислялись по модели Кузнецова (пунктирная линия). Также были проведены расчеты с использованием термически равновесной модели, в которой колебательные температуры компонентов считаются равными поступательной (штрихпунктирная линия).

Показано, что выбор модели колебательной неравновесности может существенно повлиять на определение времени задержки воспламенения за ударной волной, при этом модель Кузнецова завышает значения времени индукции, а модель [3] позволяет получить значения, близкие к экспериментальным. Дополнительное уточнение факторов неравновесности некоторых реакций методом квазиклассических траекторных расчетов позволяет еще точнее описать экспериментальные результаты.

Термически равновесная модель при рассмотренных условиях также позволила описать эксперимент с большой точностью. Однако это связано с тем, что, с одной стороны, отсутствует снижение скоростей реакций из-за замедленного колебательного возбуждения компонентов, а с другой, температура сразу за фронтом волны в этом случае оказывается ниже. Эти два эффекта в данных условиях компенсируют друг друга, но в общем случае это может быть не так.

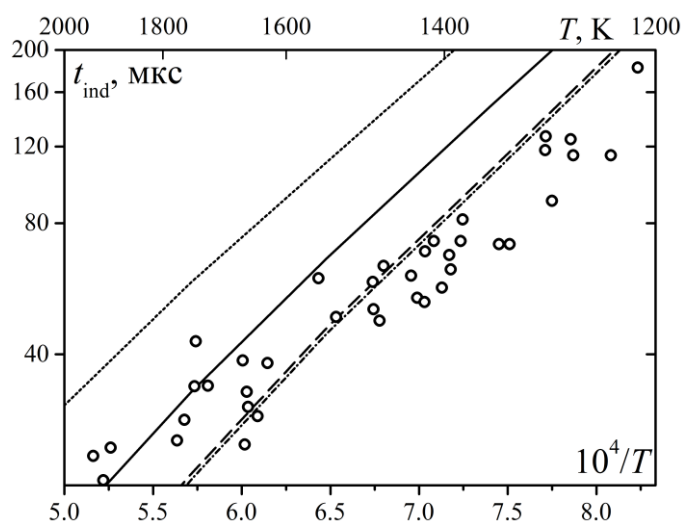


Рис. 1. Время задержки воспламенения водорода в смеси  $H_2/\text{воздух} = 5/95$

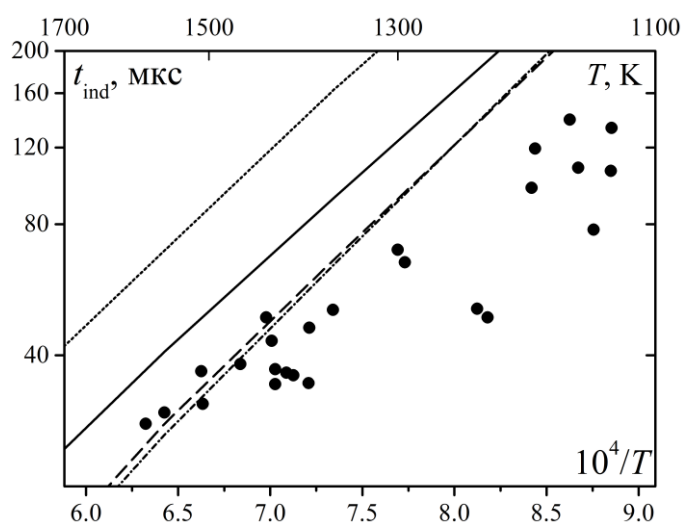


Рис. 2. Время задержки воспламенения водорода в смеси  $H_2/\text{воздух} = 20/80$

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 17-01-00810) и Советом при Президенте Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (грант НШ-7018.2016.8).

### Литература

1. Starik A.M., Kozlov V.E., Titova N.S. On the influence of singlet oxygen molecules on characteristics of HCCI combustion: a numerical study // *Combustion Theory and Modelling*. 2013. V. 17. N. 4. P. 579–609.
2. Belles F.E., Lauver M.R. Effects of concentration and of vibrational relaxation on the induction period of the  $H_2 - O_2$  reaction // *Symposium (International) on Combustion*. Elsevier, 1965. V. 10. N. 1. P. 285–293.
3. Arsentiev I.V., Loukhovitski B.I., Starik A.M. Application of state-to-state approach in estimation of thermally nonequilibrium reaction rate constants in mode approximation // *Chemical Physics*. 2012. V. 398. P. 73–80.
4. Voelkel S., Masselot D., Varghese P.L., Raman V. Analysis of hydrogen-air detonation waves with vibrational nonequilibrium // *AIP Conference Proceedings*. AIP Publishing, 2016. V. 1786. N. 1. P. 070015.



## Построение структурированных расчетных сеток с использованием уравнений в частных производных

*Д.С. Яцухно*

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Создание расчетной сетки является одним из ключевых этапов решения задач вычислительной газовой динамики. Зачастую от сеточной топологии зависит эффективность используемого численного метода, и точность получаемого решения. Важным фактором является также экономия вычислительных ресурсов, актуальная при решении задач, требующих подробной дискретизации расчетной области. К примеру, для расчета течений в зоне пограничного слоя, а также для адекватной оценки тепловых потоков, подводимых к поверхности высокоскоростного летательного аппарата из сжатого слоя, требуется использование структурированных сеток.

В настоящей работе рассматривается построение структурированных расчетных сеток для различных геометрических форм. Сам процесс представляет собой решение краевой задачи для эллиптических или параболических уравнений в частных производных [1, 2]. Существенным моментом является возможность использования безытерационных алгоритмов для численного решения уравнений [3]. В общем случае краевая задача определения координат узлов сетки для пространственной области представляет собой систему эллиптических уравнений Лапласа:

$$\begin{aligned}\xi_{xx} + \xi_{yy} + \xi_{zz} &= 0, \\ \eta_{xx} + \eta_{yy} + \eta_{zz} &= 0, \\ \zeta_{xx} + \zeta_{yy} + \zeta_{zz} &= 0,\end{aligned}\tag{1}$$

здесь  $x, y, z$  – координаты узлов в физическом пространстве,  $\xi, \eta, \zeta$  – координаты узлов в вычислительном пространстве. Для решения описанных уравнений необходимо задание координат граничных точек внешних и внутренних границ расчетной области. Для аппроксимации производных используется центрально-разностная схема. Численное интегрирование выполняется с использованием метода последовательной верхней релаксации [4]. Также настоящие уравнения могут содержать в правой части некоторые функции  $P(\xi, \eta, \zeta)$ ,  $Q(\xi, \eta, \zeta)$ ,  $R(\xi, \eta, \zeta)$ , используемые для контроля сгущения внутренних узлов сетки [5].

### Литература

1. *Sorenson R.L.* Three-Dimensional Zonal Grids About Arbitrary Shapes by Poisson's Equation // NASA-TM-101018, 1988 .
2. *Nakamura S.* Noniterative Grid Generation Using Parabolic Difference Equations for Fudelage-Wing Flow Calculations // Lecture Notes in Physics. 1982. V. 170.
3. *Edwards T.A.* Noniterative three-dimensional grid generation using parabolic differential equations // AIAA Paper 85-0485, 1985.
4. *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.
5. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т.2. М.: Мир, 1991. 552 с.

УДК 533.6.011.55

## Расчет аэротермодинамики двойного конуса $25^\circ/55^\circ$

*И.А. Корюков*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Проведено численное моделирование обтекания высокоскоростным потоком газа двойного конуса  $25^\circ/55^\circ$ . Моделирование проводилось при газах  $N_2$  и воздуха.

Для численного моделирования использовался компьютерный код UG3D, разработанный в ИПМех РАН.

В основе этого компьютерного кода лежит модель полной системы уравнений Навье–Стокса совершенного газа, решаемая на неструктурированной сетке.

Были проведены верификация и валидация полученных результатов.

Для численного моделирования обтекания была построена геометрическая модель спускаемого летательного аппарата.

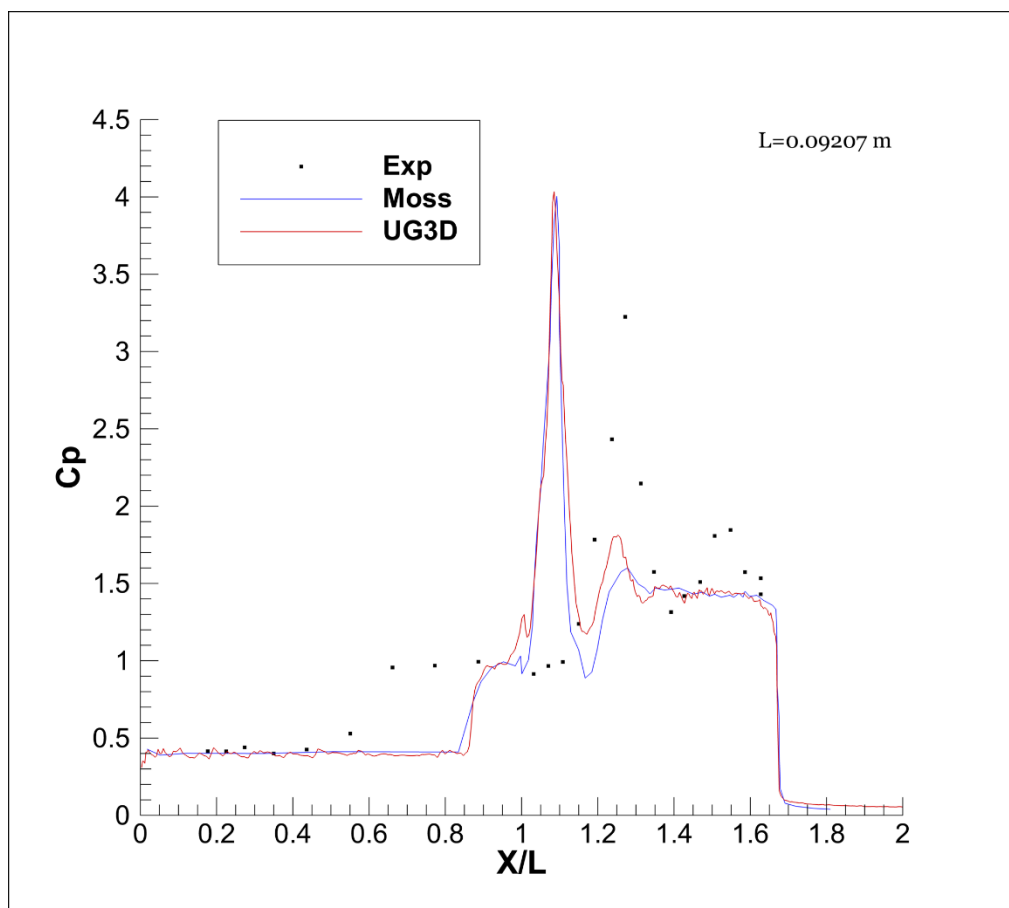


Рис.1. Теневая картина двойного конуса  $25^\circ/55^\circ$

## Расчёт аэротермодинамики спускаемого летательного аппарата EXPERT

*Н.А. Харченко*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрена задача аэротермодинамики обтекания высоко скоростным потоком газа спускаемого летательного аппарата, летящего под разными углами атаки на высоте 50 км со скоростью  $V_\infty = 5$  км/с.

Расчёты проводились с использованием компьютерных кодов UST3D и UG3D, разработанных в ИПМех РАН.

Компьютерные коды реализуют численное моделирование аэротермодинамики летательных аппаратов в рамках интегрирования полной системы уравнений Навье–Стокса на неструктурированной сетке с использованием модели совершенного газа.

Для численного моделирования процесса обтекания была создана трёхмерная поверхность спускаемого летательного аппарата EXPERT.

В данной работе моделирование трёхмерного поля течения около летательного аппарата проводилось при помощи неструктурированных тетраэдральных сеток, с адаптацией сетки к фронту ударной волны.

Показана необходимость сгущения сетки на фронте ударной волны и в области ударно-волновых возмущений, что приводит к дополнительным требованиям в создании геометрии и расчётной сетки, используемых при расчёте аэротермодинамики летательных аппаратов. Рассмотрены проблемы, возникающие при использовании такого подхода.

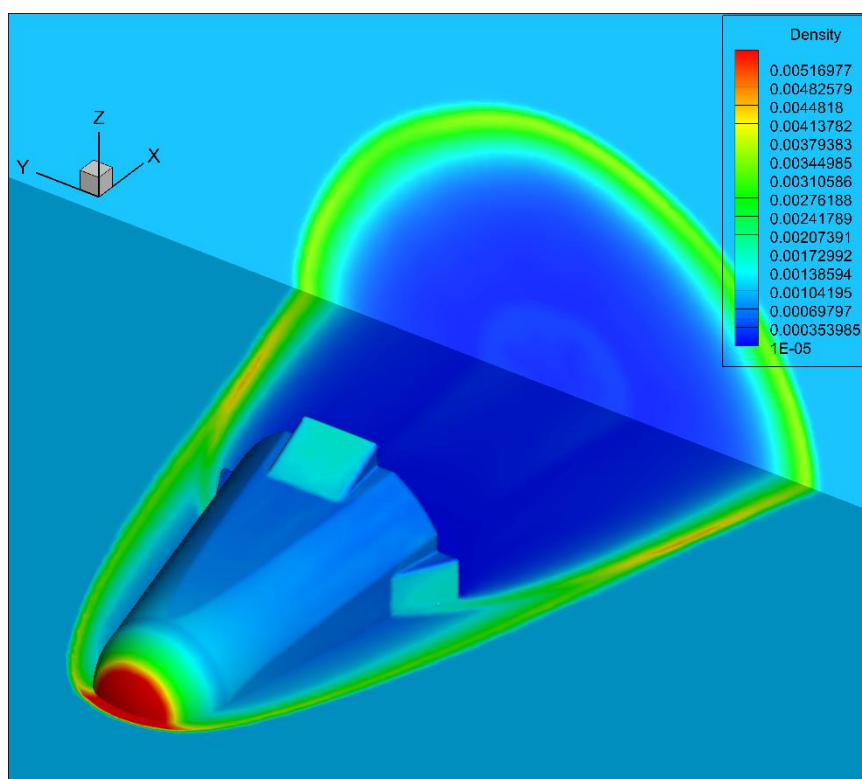


Рис. 1. Распределение плотности на поверхности и в окрестности спускаемого летательного аппарата EXPERT

### Литература

1. Суржиков С.Т. Расчетное исследование аэротермодинамики гиперзвукового обтекания затупленных тел на примере анализа экспериментальных данных. М.: ИПМех РАН, 2011. 192 с.

УДК 535.345

## Расчет спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания РН Atlas II методом Монте-Карло

Д.А. Сторожев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Задача нахождения направленной излучательной способности излучающих объектов имеет следующие особенности: первая из них связана с пространственным характером переноса излучения, а вторая – с сильной зависимостью оптических свойств излучающего объема и окружающей среды от длины волны излучения. При расчете сигнатур излучение объема (или его частей) необходимо предсказать на очень большом расстоянии  $L \gg D$ , где  $D$  есть характерный размер излучающего объема. В этом случае можно считать все исходящие из объема лучи параллельными. При относительно низкой температуре среды ( $T < 2000+3000$  К), когда еще существуют твердые и жидкие частицы, процессы взаимодействия излучения с веществом являются низкоэнергетичными и не оказывают влияния на газодинамическую структуру потока. Решение задач радиационной газовой динамики при этом существенно упрощается. Сначала решается газодинамическая часть задачи. По найденным полям температуры и концентраций газа и частиц производится однократный расчет переноса излучения (рис. 1). Однако решение самой задачи о переносе теплоты излучением является весьма сложным из-за наличия светорассеяния. В данной работе с использованием трехмерного программного кода методом Монте-Карло [1, 2] решена задача определения спектральной направленной излучательной способности струи продуктов сгорания ракетносителя AtlasII, для которой имеются расчетные и экспериментальные данные [3].

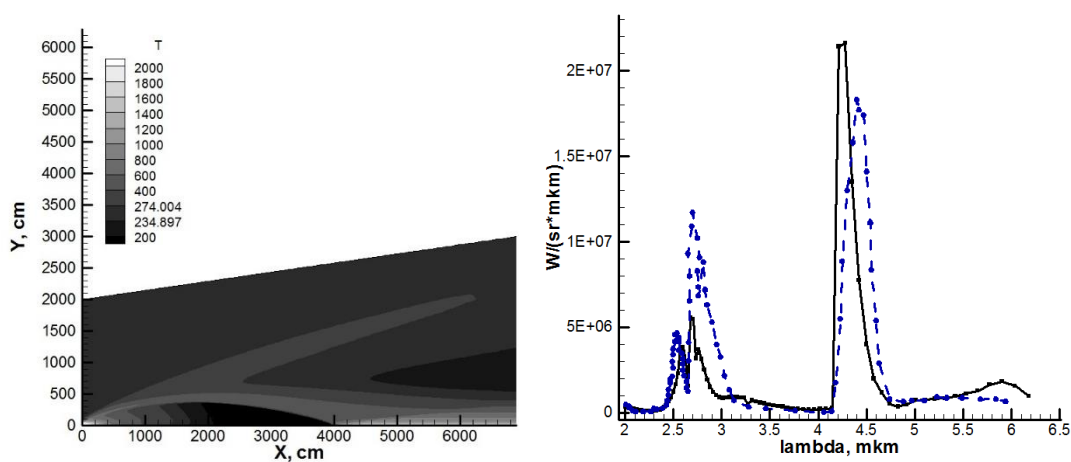


Рис. 1. Распределение температуры в струе и спектральная сигнатура струи продуктов сгорания ракетносителя AtlasII

### Литература

1. Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы // М.: Изд-во МГТУ им. НЭ Баумана. 2004. Т. 544.
2. Суржиков С.Т. Методы Монте-Карло в задачах расчета направленной излучательной способности струи продуктов сгорания // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т. 7.
3. Alexeenko A. A.[et al.]. Modeling of flow and radiation in the Atlas plume // Journal of Thermophysics and heat Transfer. 2002. V. 16. N. 1. P. 50–57.

## Численное исследование физико-химических процессов в релаксационной зоне за фронтом ударной волны в газе $N_2$ с помощью поуровневых кинетических моделей

*О.Ю. Оболонская, А.С. Дикалюк*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Азот имеет важнейшее значение во многих областях науки, включая физику электрического разряда, лазерную физику и аэродинамику. Так как азот является главной составляющей земной атмосферы, анализ физико-химических процессов, протекающих в этом газе при высокоскоростных потоках, имеет очевидную значимость для исследования движения тел (космических аппаратов (КА) или метеоритов) в плотных слоях атмосферы. При вхождении в атмосферу тело имеет относительную скорость порядка десятков км/с [1]. Частицы атмосферного газа сталкиваются с объектом при высоких скоростях, что приводит к установлению сильной ударной волны в гиперзвуковом режиме. В этом режиме происходит приобретение молекулами большого количества поступательной энергии и дальнейшего возбуждения внутренних степеней свободы посредством обмена энергией. Это приводит к установлению неравновесного состояния, где активно происходят диссоциация, ионизация, возбуждение колебательных уровней и другие физико-химические процессы, и затем релаксации к равновесию. Изучение этих процессов дает возможность рационального проектирования КА. И несмотря на тот факт, что на сегодняшний день приложено огромное количество усилий в развитии точных моделей исследования различными группами специалистов, большое число элементарных процессов все еще требует глубокого повторного рассмотрения [2].

На сегодняшний день исследование различных гидродинамических эффектов в неравновесных молекулярных газах помимо описания изменения макроскопических параметров требует еще и детального численного моделирования различных кинетических процессов, описывающих свойства среды [3]. Для этого в качестве основной модели была выбрана поуровневая модель, основывающаяся на предположении о том, что группы молекул, находящиеся на разных колебательных уровнях молекулы азота, являются отдельными компонентами газовой смеси. С помощью этой модели будет исследована эволюция параметров молекулярного газа  $N_2$  за фронтом ударной волны при различных начальных условиях.

### Литература

1. *Silva, M. Lino da, Guerra, V., Loureiro, J.* A review of non-equilibrium dissociation rates and models for atmospheric entry studies // *Plasma Sources Science and Technology*. 2009. V. 18. P. 23–34.
2. *Capitelli M., Celiberto R., Colonna G., Esposito F., Gorse C., Hassouni K., Laricchiuta A., Longo S.* Fundamental Aspects of Plasma Chemical Physics // *Plasma Physics*. 2016. V. 85.
3. *Capitelli M., Ferreira C., Gordiets B., Osipov A.* Plasma Kinetics in Atmospheric Physics.

---

---

## Секция молекулярного моделирования

---

---

УДК 536.712

### Атомистическое моделирование кривой испарения газоконденсатной смеси метан–*n*-пентан

*Б.Ю. Валеев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

В современной промышленности интересны вопросы, связанные с нефте- и газодобычей углеводородов. Для моделирования процессов, происходящих в нефтегазоносных пластах, необходимо знать уравнение состояния газоконденсата. Уравнение состояния вызывает большой интерес среди ученых при моделировании процессов извлечения полезных ископаемых из пористой среды [1].

Результаты о фазовом равновесии между паром и жидкостью являются ключевыми при решении большого количества задач, которые связаны с расчётами разделения жидких смесей [2].

Фазовая диаграмма газоконденсатной смеси включает в себя «ретроградную область», так называемую область, в которой по мере уменьшения давления может образовываться ретроградная жидкость, которая испаряется с последующим уменьшением давления. При извлечении конденсата из пласта давление вблизи забоя скважины падает и меняется температура. Газоконденсат может сконденсироваться и образовать ретроградную жидкость, которая препятствует выходу газовой фазы [3].

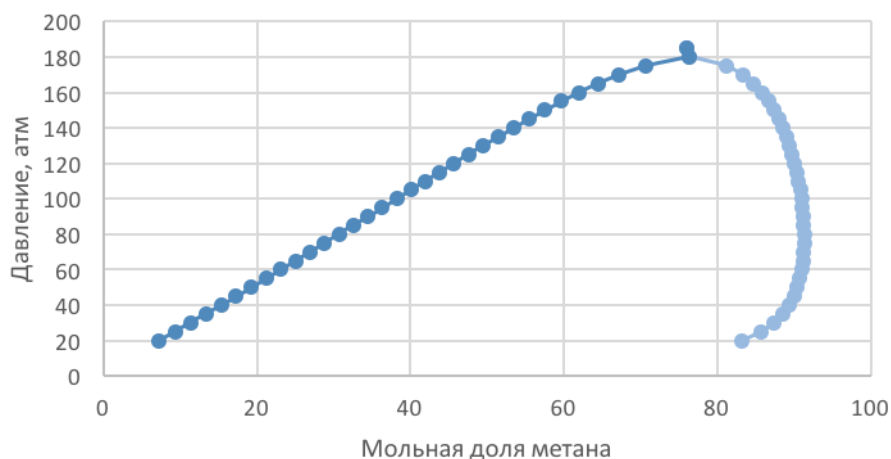


Рис.1. Фазовая диаграмма смеси метан—*n*-пентан

Цель работы состояла в том, чтобы, используя атомистический метод моделирования, построить уравнение состояния для углеводородов и добиться высокой точности в предсказании термодинамических свойств.

В ходе проведенных исследований был подобран компонентный состав бинарной смеси газоконденсата. Найдено равновесное давление при заданной температуре. Также получены равновесные профили плотности для каждой из компонент. В процессе моделирования была получена фазовая диаграмма смеси метан—*n*-пентан.

Авторы выражают благодарность Г.Э. Норману за обсуждение задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 14-50-00124.

### Литература

1. Директор Л. Б., Зайченко В. М., Майков И. Л., Косов В. Ф., Синельщиков В. А., Торчинский В. М. Теоретические и экспериментальные исследования процессов гидродинамики и теплообмена в пористых средах // Теплофизика высоких температур, 2010. Т. 48. С. 931–940.
2. Chen Bin and Ilja Siepmann J. Transferable Potentials for Phase Equilibria. Explicit-Hydrogen Description of Normal Alkanes // J. Phys. Chem. 1999. V. 103. P. 5370–5379.
3. Houck James C. High Pressure Measurements of Density, Velocity of Sound, and Bulk Moduli of Pentane and 2-Methylbutane and Their Mixtures // Institute for Basic Standards, National Bureau of Standards, Washington, D.C. 20234. 1973. P. 617–618.

УДК 538.911

### Атомистическое моделирование наноструктурированных Zr–Nb сплавов

*М.А. Корнева*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

Одной из важных задач материаловедения является получение сплавов с высокими механическими характеристиками. Сплавы с нанокристаллической структурой отличаются рядом важных показателей, поэтому изучение их свойств при различных условиях, а также разработка методов их стабилизации является актуальной задачей. В частности, кинетика формирования таких сплавов еще до конца не исследована. Сплавы Zr–Nb и Ti–Zr–Nb находят широкое применение в задачах биомедицинского материаловедения, а также являются конструкционным материалом для деталей ядерных реакторов. Для биомедицинского применения используются ОЦК-сплавы с 60–80% содержанием Zr, а для конструкционного – ГПУ сплавы Zr с содержанием Nb от 1 до 6%.

Существует множество подходов, объясняющих специфические характеристики наноструктурированных материалов. Предполагается, что именно граница раздела зерен и ее состояние сильно влияют на твердость, прочность и другие важные свойства в процессе спекания. Большая часть данных для нанокристаллических Zr–Nb и Ti–Zr–Nb сплавов представлена экспериментальными исследованиями. Но используемые методы не позволяют окончательно решить ряд прикладных вопросов, таких как поиск оптимальных условий производства наноструктурированных сплавов. Поэтому компьютерное моделирование является важным этапом в исследовании данных сплавов, поскольку на его основании можно сделать ряд предсказаний как для повышения качества экспериментальных исследований, так и для прямого расчета характеристик материала, имеющих прикладную значимость. Стоит отметить, что фазовые диаграммы титана и циркония достаточно схожи, это позволяет рассматривать ОЦК-фазу Zr–Nb сплава, с содержанием ниобия порядка 20–40%, в качестве модельного сплава. Другими словами, общие закономерности рекристаллизации, полученные для этого модельного сплава, могут быть распространены и на Ti–Zr–Nb ОЦК-сплав.

В нашей работе исследование сплавов произведено с помощью атомистического моделирования методом молекулярной динамики. Использовался пакет LAMMPS и Zr–Nb потенциал, разработанный в нашей лаборатории. Исследовались ГПУ и ОЦК сплавы с содержанием Nb от 1 до 6% и от 10 до 40% соответственно. Большое внимание было уделено границе зерен и ее поведению в моделируемых процессах. Были получены значения энергии миграции границ при различных условиях, а также значения среднего размера зерна в зависимости от температуры и состава.



УДК 538.951

## Атомистическое моделирование упругих свойств пористых материалов и материалов с преципитатами

*В.А. Петров<sup>1,2</sup>, П.А. Жилев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий

Исследование пористых материалов крайне важно во многих областях науки и техники. Например, наличие пор в объеме материала и их взаимодействие с твердой фазой – одна из ключевых задач геофизики горных пород. Кроме того, пористость материала может стать причиной изменения его свойств в худшую сторону: например, сделать материал менее прочным или подверженным коррозии. Поэтому важно иметь инструмент для предсказания свойств таких материалов.

В данной работе проведено исследование упругих свойств пористых материалов методом атомистического моделирования. В качестве упругой характеристики материала рассматривается эффективный модуль всестороннего сжатия  $B_0$ , который в данной работе вычисляется как параметр уравнения состояния Берча–Мурнагана:

$$P(V) = \frac{3B_0}{2} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} - \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left[ 1 + \frac{3}{4} (B_0' - 4) \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right],$$

где  $B_0'$  – производная модуля всестороннего сжатия по давлению,  $V_0$  – эталонный объем. Рассматриваются закрытые и открытые поры сферической формы. В качестве исследуемого материала используется алюминий, взаимодействие атомов описывается потенциалом ЕАМ. Для релаксации системы применяются два способа минимизации энергии: метод градиентного спуска и релаксация молекулярной динамикой. Проводится сравнение с результатами [2] использования микромеханических схем (Mori-Tanaka, Maxwell) и прямого численного моделирования (FEM).

В работе также рассматривается система атомов алюминия с преципитатами сферической формы из атомов меди. Взаимодействие атомов в такой системе описывается МЕАМ потенциалом. Для получения стабильной топологии использовалась релаксация молекулярной динамикой. Проводится сравнение с результатами [1] использования численных методов, упомянутых ранее (Mori-Tanaka, FEM).

### Литература

1. Trofimov A., Drach B., Sevostianov I. Effective elastic properties of composites with particles of polyhedral shapes // International Journal of Solids and Structures. 2017. V. 120. P. 157–170. I: 0020-7683.
2. Drach B., Tsukrov I., Trofimov A. Comparison of full field and single pore approaches to homogenization of linearly elastic materials with pores of regular and irregular shapes // International Journal of Solids and Structures, 2016. V. 96. P. 48–63. I: 0020-7683.



## **Влияние металлических катализаторов на нуклеацию углеродных наноструктур из газовой фазы**

*Г.М. Остроумова, Н.Д. Орехов, В.В. Стегайлов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

Свойства таких углеродных наноструктур, как графены, фуллерены, нанотрубки, привлекают внимание исследователей уже несколько десятков лет. Применимость данных соединений в промышленных областях (энергетика, электроника, авиация и т.д.) огромна, благодаря интересным свойствам материалов (повышенные прочность, износостойкость, тепло- и электропроводность и т.д.). Целью данной работы являются исследование механизмов и поиск параметров, которые позволят упростить и понять механизм нуклеации углеродных структур. Известно, что такие параметры синтеза, как температура, давление, плотность газа и присутствие катализаторов, самым критичным образом влияют не только на геометрию, но и на образование структуры в принципе. Для того чтобы выявить наименее затратный метод образования углеродных наноструктур, необходимо выяснить механизмы нуклеации и оценить степень влияния термодинамических параметров на углеродные кластеры. После такого всестороннего исследования и определения наиболее выгодных параметров можно будет получать эти соединения в промышленных масштабах.

Для изучения процесса нуклеации в данной работе используются методы молекулярной динамики (МД), т.к. образование критического зародыша – это процесс, который требует атомистического уровня описания. Помимо этого, исследование нуклеации требует точной модели, которая способна описать образование и разрыв химических связей, а также различные варианты гибридизаций ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ). Точность и скорость современных методов квантовой механики и квантовой химии позволяют достаточно точно предсказывать геометрию, вибрационный спектр и некоторые другие свойства небольших молекул. Однако вычисления с помощью квантовых методов пока еще не подходят для изучения динамических свойств больших молекул и твердых тел из-за больших затрат на компьютерные ресурсы. Вследствие этого необходимо такое силовое поле, которое быстро и точно сможет оценить различные динамические свойства и параметры систем, а также способно с большой точностью описывать образование и разрыв химических связей в процессе кластеризации соединений. Все потенциалы, которые могут описать реакционную природу соединений, называют реакционными. Принципиальное отличие таких потенциалов от традиционных классических силовых полей заключается в использовании не жесткого метода связывания, а метода порядков связей. В данной работе детальное теоретическое исследование процесса нуклеации углеродных структур проводится методами молекулярной динамики с использованием реакционного межатомного потенциала ReaxFF (ReactiveForceField) [1]. Данная модель широко используется научным сообществом, поскольку она позволяет описать химические реакции на начальных стадиях в отличие от экспериментальных исследований. Точность таких вычислений сопоставима с квантово-механической, благодаря квантово-механической/квантово-химической параметризации потенциалов. Также в работе применяются методы прямой и контролируемой молекулярной динамики, которые позволят рассмотреть кластеризацию атомов на разных масштабах моделирования (в прямом методе – молекулярный уровень, в контролируемом – атомарный). Вычисления проводятся с помощью программного пакета LAMMPS [2].

Одним из распространенных способов получения углеродных соединений является химическое осаждение из пара (chemical vapor deposition – CVD). В данной работе для нуклеации структур проводится сверхбыстрое охлаждение газовой фазы со скоростью охлаждения  $10^{10}$ – $10^{11}$  К/с. Свойства и осаждение наноструктур из пара зависят от того, как

происходил рост структуры, важно знать, каким образом влияют параметры эксперимента на синтез. Добавление металлических частиц в углеродный пар ускоряет процесс нуклеации и позволяет получать разные структуры при изменении катализаторов. В данной работе будет продемонстрирован эффект ускорения кластеризации с помощью атомов железа, помещенных в выбранную систему.

Мы используем параметризацию [3] потенциала ReaxFF для исследования процесса нуклеации в углеродно-газовой смеси. Однако в работе [4] мы показали, что данная параметризация имеет проблему высоких энергетических барьеров для взаимодействий углерод-углерод. В параметризации [5] эта проблема решена, но модель может описывать только углеродные системы. Так как пока нет такого комбинированного подхода, в котором взаимодействия углерод-железо и железо-железо рассматриваются с помощью параметризации [3], а взаимодействия углерод-углерод – с помощью параметризации [5], в данной работе мы используем только параметризацию [3], которая включает в себя данные типы взаимодействий.

Длина траекторий варьировалась от 1 пс до 1 нс с шагом моделирования 0.2 фс, система помещалась в термостат Нозе-Гувера (канонический ансамбль NVE). Для получения углеродных структур проводилось сверхбыстрое охлаждение газовой фазы с 6000 К до 2500 К со скоростью охлаждения  $10^{10} - 10^{11}$  К/с. Плотность углеродного газа составляет  $0.12 \text{ г/см}^3$ , объем ячейки моделирования  $80 \times 80 \times 80 \text{ \AA}^3$ . Атомы железа в систему добавлены в соотношении 1:8 к атомам углерода.

Различие процесса нуклеации с металлическими катализаторами и без них становится заметным уже на малых временах моделирования (20 пс). Из чистого углеродного пара на начальных шагах моделирования, когда температура еще достаточно высока ( $T = 5757 \text{ К}$ ), кластеризуются только небольшие цепочки (рис. 1а). В то время как в углеродно-железной конденсированной фазе зародыши образуются по всему объему ячейки (рис. 1б).

Задачи решаются с помощью методов компьютерного моделирования на суперкомпьютерном кластере Desmos (ОИВТ РАН).

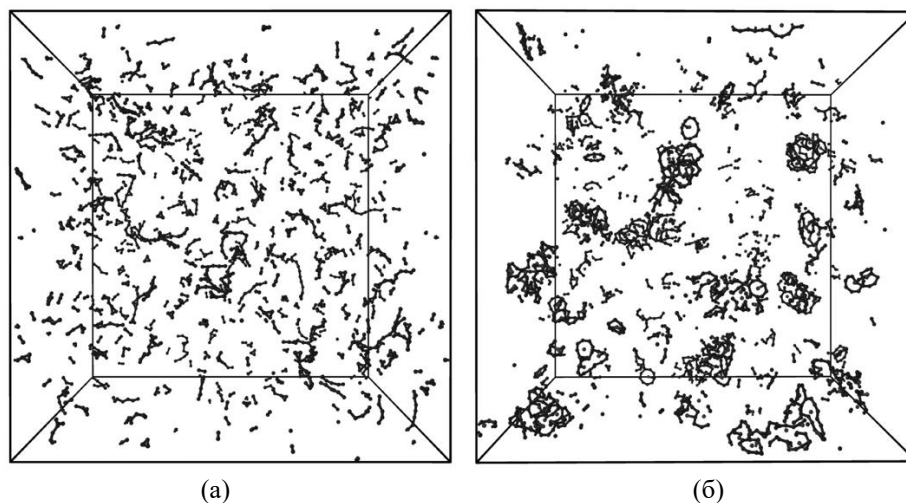


Рис. 1. Время моделирования 20 пс. Система состоит из: а) атомов углерода, б) атомов углерода и железа в соотношении 8:1.  $T = 5757 \text{ К}$ , скорость охлаждения  $35 \cdot 10^{11} \text{ К/с}$

Работа поддержана Российским научным фондом (грант 14-50-00124).

### Литература

1. *Van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A.* ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons // *Journ. of Physical Chemistry A*. 2001. V. 105. P. 9396–9409.
2. Программный пакет LAMMPS. URL: <http://lammps.sandia.gov>
3. *Aryanpour M., Van Duin A.C.T., Kubicki J. D.* Development of a Reactive Force Field for Iron-Oxyhydroxide Systems // *The Journal of Physical Chemistry A*. 2010. V. 114. N. 21. P. 6298–6307.

4. *Galiullina G.M., Orekhov N.D., Stegailov V.V.* Nucleation of carbon nanostructures: Molecular dynamics with reactive potentials // *Journal of Physics: Conference Series*. 2016. V. 774. N. 1. P. 012033.
5. *Srinivasan S. G., van Duin A. C. T., Ganesh P.* Development of a ReaxFF potential for carbon condensed phases and its application to the thermal fragmentation of a large fullerene // *The Journal of Physical Chemistry A*. 2015. V. 119. N. 4. P. 571–580.

УДК 544.636/.638

## Влияние морфологии поверхности углеродного катода на кинетику реакции восстановления кислорода в Li-воздушных системах

*С.В. Павлов<sup>1,2</sup>, С.А. Кисленко<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Увеличивающееся распространение устройств, обладающих высоким энергопотреблением, требует развития технологий в области аккумулирования энергии. В частности, остро стоит проблема развития аккумуляторов, обладающих высокой удельной энергоемкостью. Наиболее перспективными в этой области на сегодняшний день являются Li-воздушные аккумуляторы, теоретически достижимая удельная энергоемкость которых составляет 1000–1700 Вт·ч/кг против 170 Вт·ч/кг для наиболее востребованных сегодня Li-ионных аккумуляторов. Однако существует ряд проблем, в том числе фундаментальных, препятствующих созданию устройств с такими высокими энергетическими характеристиками. В частности, остается малоизученным вклад морфологии поверхности катода на кинетику гетерогенных процессов, происходящих в подобных системах.

В настоящей работе представлены результаты исследования методом классической молекулярной динамики структуры межфазной границы электрод/электролит вблизи нескольких модельных углеродных поверхностей: край одно- и многослойного графена, плоскость графена. В качестве растворителей исследовались диметилсульфоксид (DMSO) и ацетонитрил (ACN) [1, 2]. Исследовалась кинетика адсорбции реагентов реакции восстановления кислорода  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$  на моделируемые поверхности, а также равновесное распределение их концентраций в приэлектродной области.

В работе получены структурные характеристики растворителя в приэлектродной области (распределения массовой и зарядовой плотности, ориентационные параметры порядка, распределение электрического потенциала). Для реагентов реакции восстановления кислорода  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$  рассчитаны потенциалы средней силы и соответствующие им распределения концентраций вблизи исследуемых поверхностей (плоскость графита, край одно- и многослойного графена). Установлено, что морфология поверхности катода существенно влияет на структуру межфазной границы электрод/электролит. Вблизи плоскости графена и одиночного края графена электролит имеет слоистую структуру, тогда как вблизи края многослойного графена – шахматную структуру. Из рассчитанных потенциалов средней силы обнаружено существование корреляции между локальной структурой растворителя и распределением реагентов  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$ . Найдено, что изменение морфологии катода позволяет управлять распределением реагентов  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$  в приэлектродной области и, следовательно, кинетикой реакции восстановления кислорода. Обнаружено, что концентрации и скорости адсорбции реагентов реакции восстановления кислорода  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2$  на краях как одно- так и многослойного графена выше, чем вблизи плоскости графита. Это указывает на повышенную электрокаталитическую активность края графена, что согласуется с такими экспериментальными фактами, как ускоренный перенос электронов и повышенное образование продуктов реакции при разрядке Li-воздушных батарей на краях графенов. Из полученных карт распределения реагентов следует, что вблизи края многослойного графена ионы лития адсорбируются напротив выступающих графеновых листов. В этой же

области концентрация кислорода максимальна. Это говорит о том, что центры нуклеации и роста кристаллической фазы продуктов расположены напротив выступающих краев графенов. Обнаружено отсутствие потенциальной ямы адсорбции иона лития на плоскость графена в DMSO с большим донорным числом, чем у ACN (30 для DMSO и 14 для ACN), что говорит о сильной сольватации  $\text{Li}^+$  в DMSO и согласуется со смещением роста продуктов реакции с поверхности катода в область объемной фазы, наблюдаемым в экспериментах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-50-00124 «Фундаментальные основы энергетики будущего».

### Литература

1. Pavlov S.V., Kislenko S.A. Effects of carbon surface topography on the electrode/electrolyte interface structure and relevance to Li-air batteries // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016. V. 18, N 44. P. 30830–30836.
2. Kislenko S.A., Pavlov S.V. Effect of carbon cathode morphology on the electrode/electrolyte interface structure // *High Energ. Chem.* 2017. V. 51, N 1. P. 51–55.

УДК 544.72.023.222

## Влияние поверхностного заряда и кристаллографических граней Au на межфазную структуру ионной жидкости [BMIM][BF<sub>4</sub>]

Ю.О. Мороз<sup>1</sup>, С.А. Кисленко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup> Объединенный институт высоких температур РАН

Актуальность исследования межфазной структуры ионных жидкостей обусловлена перспективами их использования в ряде прикладных задач, в основу которых положены процессы, происходящие на границе раздела фаз электрод/ионная жидкость. Ранее в экспериментальных работах [1, 3] наблюдался эффект двумерного упорядочения электросорбированных ионов ионных жидкостей на низкоиндексных кристаллических гранях металлов. В этих работах предполагается, что существует корреляция между атомами поверхности и ионами двойного электрического слоя. Однако факторы, контролирующие упорядоченность ионов, в полной степени не изучены.

Целью данной работы являлось исследование фактора кристаллографической грани в формировании межфазной структуры ионной жидкости тетрафторборат 1-бутил-3-метилимидазолия ([BMIM][BF<sub>4</sub>]) на поверхности. В качестве поверхностей были рассмотрены монокристаллические поверхности золота Au(001) и Au(111), а также модельная бесструктурная поверхность. Получено распределение концентраций [BMIM]<sup>+</sup> и [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> вблизи исследуемых поверхностей для различных плотностей заряда. Поверхностная плотность заряда  $\sigma$  изменялась в диапазоне  $-70 \div 70$  мкКл/см<sup>2</sup>. Установлено, что тип подложки влияет на двумерную упорядоченность электросорбированных анионов [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> и их ориентацию относительно поверхности. На положительно заряженных поверхностях Au(001) и Au(111) при  $\sigma \sim 50$  мкКл/см<sup>2</sup> образуются треугольные молекулярные решетки размерами  $\sim 4.5 \pm 0.2$  Å и  $\sim 5 \pm 0.2$  Å соответственно, ранее наблюдавшиеся в экспериментах [4, 6]. На положительно заряженной модельной бесструктурной поверхности образуется треугольная молекулярная решетка из ионов [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> без определенного значения параметра решетки. Двухмерный порядок ионов [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> охарактеризован с помощью centrosymmetric и углового параметров порядка. При максимально плотной поверхностной упаковке анионов наблюдается формирование квадратной и треугольной молекулярной решетки на поверхностях золота Au(001) и Au(111) соответственно. Наибольшая упорядоченность ионов [BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup> на поверхности золота Au(001) наблюдается при поверхностной плотности заряда  $\sigma \sim 70$  мкКл/см<sup>2</sup>. На поверхности золота Au(111) максимальная упорядоченность анионов наблюдается при поверхностной плотности заряда

$\sigma \sim 50$  мкКл/см<sup>2</sup>. При этом к поверхности Au(001) молекула ориентирована двумя атомами фтора, к поверхности Au(111) – тремя.

### Литература

1. *Ebeling D. [et al.]*. 3 – Dimensional Structure of a Prototypical Ionic Liquid – Solid Interface: Ionic Crystal-Like Behavior Induced by Molecule – Substrate Interactions. 2016.
2. *Pan G.B., Freyland W.* 2D phase transition of PF6 adlayers at the electrified ionic liquid/Au(111) interface // *Chem. Phys. Lett.* 2006. V. 427, N 1–3. P. 96–100.
3. *Wen R.* In Situ Video-STM Study of Adlayer Structure and Surface Dynamics at the Ionic Liquid/Au (111) Interface. 2016. N 111.
4. *Su Y.Z. [et al.]*. Double layer of Au(100)/ionic liquid interface and its stability in imidazolium-based ionic liquids // *Angew. Chemie - Int. Ed.* 2009. V. 48. N 28. P. 5148–5151.
5. *Su Y. [et al.]*. Double Layer of Au ( 100 ) – Ionic Liquid Interface and Its Stability in Imidazolium-Based Ionic Liquids. 2009.
6. *Wakeham D. [et al.]*. Influence of Temperature and Molecular Structure on Ionic Liquid Solvation Layers. 2009. P. 5961–5966.

УДК 544.435.4

### Влияние растворителя на взаимодействие ионов лития и кислорода применительно к литий-воздушным аккумуляторам

*В.С. Смирнов<sup>1,2</sup>, С.А. Кисленко<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Одним из перспективных типов электрохимических источников тока являются Li-воздушные аккумуляторы. Данные устройства обладают большим потенциалом по запасанию энергии. Их теоретически достижимый предел удельной энергоёмкости составляет  $\sim 1700$  Вт·ч/кг, что на порядок превышает удельную энергоёмкость для наиболее востребованных сегодня Li-ионных батарей [1]. Однако есть проблемы, которые препятствуют эффективной работе данных аккумуляторов. Существует ряд экспериментальных работ [2, 3], показывающих, что апротонные растворители с большим донорным числом увеличивают стабильность супероксид иона  $O_2^-$  предположительно за счет образования устойчивой сольватной оболочки вокруг иона  $Li^+$ , что ингибирует реакцию ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$  и способствует увеличению циклов перезарядки Li-воздушных аккумуляторов. Для понимания процессов, происходящих в ходе реакции ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$  и влияния физико-химических свойств электролита, требуются исследования на молекулярном уровне.

В данной работе методом молекулярной динамики (МД) изучено влияние растворителя на кинетику и термодинамику реакции ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$ . В качестве электролитов были взяты три растворителя, различающиеся донорными числами (DN), а именно: ацетонитрил (DN = 14), диметоксиэтан (DN = 20), диметилсульфооксид (DN = 30). Представлены результаты по термодинамике и кинетике реакции ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$ , а также по структуре и стабильности сольватных оболочек исследуемых ионов. Для пары ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$  были рассчитаны потенциалы средней силы в исследуемых электролитах, оценены константы скорости реакции ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$  в трех растворителях. Константа скорости реакции ассоциации ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$  в диметилсульфооксиде на два порядка ниже, чем в ацетонитриле, в то время как энергетический барьер данной реакции в  $\sim 2,5$  раза выше, чем в ацетонитриле. Для оценки устойчивости сольватной оболочки исследуемых ионов было рассчитано характерное время жизни молекулы растворителя в сольватной оболочке ионов  $Li^+$  и  $O_2^-$ , координационное число и коэффициент диффузии иона в электролите. Время жизни молекулы растворителя в сольватной оболочке иона  $Li^+$  возрастает с донорным числом растворителя, достигая на два порядка большего значения в диметилсульфооксиде, чем в



ацетонитриле. В диметилсульфооксиде и диметоксиэтаноле ион  $\text{Li}^+$  диффундирует вместе со своей сольватной оболочкой, в то время как в ацетонитриле он диффундирует как свободный ион из-за слабой сольватации растворителем. В заключение в работе показывается, что несмотря на существенное влияние донорного числа на стабильность сольватных оболочек ионов  $\text{Li}^+$  и  $\text{O}_2^-$ , нет строгой корреляции между донорным числом и константой скорости реакции ассоциации ионов.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента МК-7873.2016.3.

### Литература

1. *Girishkumar G. [et al.]*. Lithium-air battery: Promise and challenges // *J. Phys. Chem. Lett.* 2010. V. 1, N 14. P. 2193–2203.
2. *Laoire C.O. [et al.]*. Influence of nonaqueous solvents on the electrochemistry of oxygen in the rechargeable lithium-air battery // *J. Phys. Chem. C.* 2010. V. 114, N 19. P. 9178–9186.
3. *Abraham K.M.* Electrolyte-Directed Reactions of the Oxygen Electrode in Lithium-Air Batteries // *J. Electrochem. Soc.* 2014. V. 162, N 2. P. A3021–A3031.

УДК 548.4

### Влияние эффекта сегрегации на распределение дефектов между объемом и поверхностью в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

*В.А. Кисленко<sup>1,2</sup>, С.А. Кисленко<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Наличие примесей в кристалле и их распределение между объемом и поверхностью оказывает значительное влияние на многие физические характеристики материала: скорость окисления [1, 2], электропроводность [3], скорость роста зерен при спекании керамик [4], оптическую прозрачность [5] и т.д. Было показано, что, например, наличие иттрия в оксиде алюминия значительно влияет на ползучесть материала [6, 9] и это неразрывно связано с эффектом сегрегации [8, 10]. Таким образом, понимание того, какие примеси и в каком виде преимущественно аккумулируются на межфазной границе, является необходимым шагом на пути к прогнозированию влияния примесей на свойства материала.

Для расчетов использовался метод молекулярной механики. Применялась ионная модель оксида алюминия.

При исследовании сегрегации отдельных примесных ионов была получена зависимость разности свободных энергий между поверхностным и объемным состояниями от радиуса и валентности примеси. Обнаружено уменьшение  $\Delta G$  при увеличении радиуса иона. Показано, что для трехвалентных ионов с радиусом, близким к радиусу  $\text{Al}^{3+}$ , таких как  $\text{Cr}^{3+}$  или  $\text{Fe}^{3+}$ , энергия сегрегации близка к нулю. Это говорит об отсутствии выраженного эффекта сегрегации, что хорошо согласуется с высокой растворимостью этих элементов в корунде [10, 13]. Для достаточно больших примесей, таких как Y, расчеты предсказывают ярко выраженную сегрегацию на поверхности кристаллических зерен и незначительную растворимость в объеме, что подтверждается экспериментально [14].

Так как примеси с валентностью не равной трем заряжены и образуют кластеры из-за электростатического взаимодействия с другими дефектами, то была предложена модель для описания равновесного распределения примесей различной валентности между объемом и свободной поверхностью оксида алюминия с учетом кластеризации дефектов за счет электростатического взаимодействия; проведена валидация модели.

Исследован эффект сегрегации в  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  допированном магнием. Показано, что Mg имеет ярко выраженную склонность к сегрегации и на поверхности он находится преимущественно в виде атомов, замещающих в решетке ионы  $\text{Al}^{3+}$ .

Так как дефект  $\text{Mg}_{\text{Al}}^{\text{surf}}$  (ионы Mg, замещающие в решетке ионы Al на поверхности кристалла) имеет наибольшую концентрацию и эффективный заряд в решетке  $-1$ , то должен существовать механизм компенсации заряда для сохранения электронейтральности кристалла. В данной работе было показано, что в зависимости от уровня примеси и температуры могут реализовываться различные механизмы компенсации заряда.

Исследование выполнено в рамках гранта РФФИ № 14-50-00124 .

### Литература

1. *Doremus R.H.* Oxidation of alloys containing aluminum and diffusion in  $\text{Al}_2\text{O}_3$  // Journal of Applied Physics. 2004. 95(6):3217–3222.
2. *Bennison S.J., Mikeska K.R.* Hf-resistant ceramics and use thereof, May 2 1995. US Patent 5,411,583.
3. *Moll'a J., Moreno R., Ibarra A.* Effect of mg doping on dielectric properties of alumina // Journal of Applied Physics. 1996. 80(2):1028–1032.
4. *Il-JoonBae and SunggiBaik.* Abnormal grain growth of alumina // Journal of the American Ceramic Society 1997. 80(5):1149–1156.
5. *Coble R.L.* Transparent alumina and method of preparation, March 20 1962. US Patent 3,026,210.
6. *Yoshida H., Takigawa Y., Ikuhara Y., Sakuma T.* Effect of Chemical Bonding State on High-temperature Plastic Flow Behavior in Fine-grained, Polycrystalline Cation-doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$  // Materialstransactions. 2002. 43(7):1566–1572.
7. *Buban J.P., Mizoguchi T., Shibata N., Abe E., Yamamoto T., Ikuhara Y.* Zr segregation and associated al vacancies in alumina grain boundaries // Journal of the Ceramic Society of Japan. 2011. 119(1395):840–844.
8. *Cho J., Wang C.M., Chan H.M., Rickman J.M., Harmer M.P.* Role of segregating dopants on the improved creep resistance of aluminum oxide // Acta Materialia. 1999. 47(15):4197–4207.
9. *Robertson G., Wilkinson D.S., C'aceres C.H.* Creep and creep fracture in hot-pressed alumina. // Journal of the American Ceramic Society, 1991. 74(5):915–921.
10. *GÜLGÜN M.A., VOYTOVYCH R., MACLAREN I., RÜHLE M.* Cation segregation in an oxide ceramic with low solubility: Yttrium doped  $\alpha$ -alumina // Interface Science 2002. 10(1):99–110.
11. *Vlaskin M. S., Grigorenko A. V., Zhuk A. Z., Lisitsyn A. V., Sheindlin A. E., Shkol'nikov E. I.* Synthesis of high-purity  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  from boehmite obtained by hydrothermal oxidation of aluminum // High Temperature 2016. 54(3):322–329.
12. *Lea C., Seah M.P.* Kinetics of surface segregation. // Philosophical Magazine 1977. 35(1):213–228.
13. *Roy S.K., Coble R.L.* Solubilities of magnesia, titania, and magnesium titanate in aluminum oxide // Journal of the American Ceramic Society 1968. 51(1):1–6.
14. *Thompson M., Soni K.K., Chan H.M., Harmer M.P., Williams D.B., Chabala J., Levi-Setti R.* Dopant distributions in rare-earth-doped alumina // Journal of the American Ceramic Society 1997. 80(2):373–376.

УДК 539.192+538.911

### Гидратация карбоксильной группы диклофенака натрия. Совместное изучение методами спектроскопии НПВО, Кона-Шема и молекулярной динамики

*Е.О. Левина<sup>1</sup>, М.В. Венер<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Взаимодействия растворенное вещество – растворитель играют важную роль в вопросах конформационных перестроек биоактивных веществ в растворах и установления их механизмов действия. ИК-спектроскопия – один из основных методов изучения строения молекул и межмолекулярных взаимодействий. Вода сильно поглощает в диапазоне средних частот, что обуславливает использование разностных спектров. Спектр растворенного вещества получают после вычитания спектра воды [1]. Молекулы многих

веществ сильно взаимодействуют с водой, что требует вычитать спектр растворителя за исключением нескольких молекул воды, связанных с растворенным веществом короткими водородными связями (Н-связями). Их число можно оценить, если вещество хорошо растворимо в воде [2]. Лекарственные средства часто плохо растворимы в воде [3], что затрудняет использование указанной методики при получении разностных спектров. В результате необходимо комбинировать экспериментальные и теоретические подходы для адекватного описания взаимодействий молекул лекарственных веществ с молекулами воды.

В данной работе в качестве объекта исследования был выбран диклофенак натрия (NaDN) как одно из наиболее популярных нестероидных противовоспалительных лекарственных средств, обладающее низкой растворимостью в воде, типичной для данного класса препаратов [4]. ИК-спектр водного раствора NaDN до сих пор не был опубликован. Он был получен методом нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) (рис. 1). Для этого использовался ИК-фурье Nicolet 6700 с приставкой с кристаллом селенида цинка. Спектры были получены для серии концентраций от 0,4 до 0,02% NaDN в области частот 550–3800  $\text{см}^{-1}$  (разрешение 8  $\text{см}^{-1}$ ).

Для установления особенностей процесса гидратации и интерпретации полученного спектра был использован подход, сочетающий методы классической молекулярной динамики (МД) и теории функционала плотности (ТФП). Для МД-моделирования использовалась программа GROMACS. Были рассчитаны 2 концентрации, первая из которых соответствовала «предельной» концентрации NaDN в воде (~1,7%) , а вторая составила ~ 0,4%. Все расчеты проводились с использованием параметров силового поля OPLS-AA в *NVT*-ансамбле при температуре 298 К. Объем ячейки, включающей в себя одну молекулу NaDN, оценивался из экспериментальных данных о плотности растворов соответствующих концентраций. Для сбора информации использовались траектории различной длины (от 10 нс до 110 нс). В ходе ТФП расчетов (B3LYP/6-311++G\*\*) исследовалась структура и ИК-спектры комплексов аниона  $\text{DN}^-$  с водой. Число молекул воды варьировалось от 0 до 5.

Особенностью изучаемой системы является структура гидратной оболочки  $-\text{CO}_2^-$  группы. В результате МД моделирования и расчетов методом ТФП было установлено, что в растворе формируется восьмичленный цикл, состоящий из двух молекул воды и  $-\text{CO}_2^-$  группы, связанный тремя межмолекулярными *H* – связями, т.н. мотив  $\text{R}_3^8(8)$  (рис. 2). Причиной его возникновения являются стерические затруднения, обусловленные строением аниона  $\text{DN}^-$  (формированием внутримолекулярной *N* – *H...O* связи, различной взаимной ориентацией бензольных колец, наличием контактов  $\text{O}_w$  – *H...Cl*). Обертона веерных колебаний молекул воды, участвующих в формировании восьмичленного цикла, перекрываются с деформационными колебаниями молекулы воды, которая образует кратчайшую *H* – связь с  $-\text{CO}_2^-$  группой, что приводит к резонансу Ферми, проявляющемуся в спектре в области 1750 $\text{см}^{-1}$  (рис. 1). Это обусловлено сильным межмолекулярным взаимодействием между растворенным веществом и растворителем.

Исходя из данных Cambridge Structure Database, мотив  $\text{R}_3^8(8)$  реализуется в кристаллосольватах и сокристаллах лекарственных соединений, молекулы которых характеризуются стерически затрудненной группой  $-\text{CO}_2^-$ . Методика, развитая в данной работе, может быть использована в дальнейших исследованиях строения и межмолекулярных *H* – связей в водных растворах биологически активных веществ, плохо растворимых в воде.



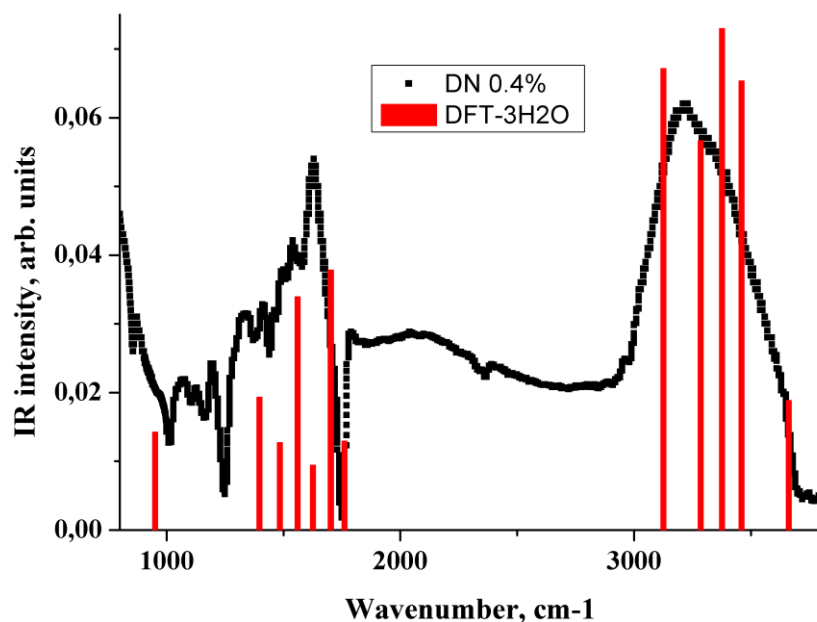


Рис. 1. ИК-спектр водного раствора NaDN, полученный методом НПВО (после вычитания спектра воды) и теоретически рассчитанный ИК-спектр комплекса DN·3H<sub>2</sub>O

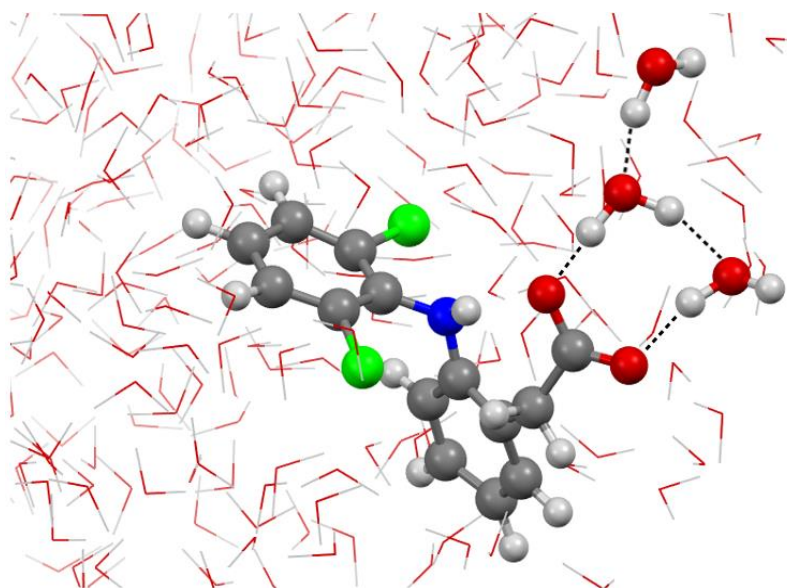


Рис. 2. Типичная структура комплекса DN<sup>-</sup> иона с молекулами воды, полученная в результате МД-моделирования 0,4% раствора NaDN. Н – связи даны пунктирными линиями

### Литература

1. *Levina E.O., Lokshin B.V., Mai B.D., Vener M.V.* Spectral features of guanidinium-carboxylate salt bridges. The combined ATR-IR and theoretical studies of aqueous solution of guanidinium acetate // *Chem. Phys. Lett.* 2016. V. 659. P. 117–120.
2. *Spitzer U.A., Toone T.V., Stewart R.* Aqueous trifluoroacetic acid as a medium for organic reactions. I. Acidity functions and the identity of the manganese(VII) species found in powerfully acidic media // *Can. J. Chem.* 1976. V. 54, P. 440–447.

3. Moutasim M.Y., ElMeshad A.N., El-Nabarawi M.A. A pharmaceutical study on lornoxicam fast disintegrating tablets: formulation and in vitro and in vivo evaluation // Drug. Deliv. Transl. Res. 2017. V. 7, P. 450–459.
4. Fini A., Laus M., Orienti I., Zecchi V. Dissolution and partition thermodynamic functions of some nonsteroidal anti-inflammatory drugs // J. Pharm. Sci. 1986. V. 75. P. 23–25.

УДК 533.9

## **Зависимость свойств плазменно-пылевых структур от характеристик разряда**

*В.С. Николаев, А.В. Тимофеев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

Частицы пыли микронных размеров, инжестрированные в плазму, заряжаются отрицательно вследствие разной подвижности электронов и ионов плазмы. В большинстве лабораторных экспериментов величина заряда частиц велика и составляет от  $1000 e$  до  $5000 e$  ( $e$  – элементарный заряд), что ведет к высокой степени неидеальности плазменно-пылевой системы и образованию устойчивых упорядоченных структур из пылевых частиц. В широком диапазоне экспериментальных параметров образующиеся структуры имеют выраженный дальний порядок. Это позволяет говорить о них как о «плазменно-пылевых кристаллах». Изучение свойств таких кристаллов позволяет лучше понять особенности взаимодействия пылевых частиц как друг с другом, так и с окружающей плазмой.

Важность исследования пылевой плазмы обусловлена, во-первых, ее широкой распространенностью: она встречается повсеместно в космосе, в ионосфере Земли, оказывает существенное влияние на свойства космических объектов. Во-вторых, отрасли производства, использующие плазменные технологии (напыление красок, травление микросхем и т.д.), а также современные подходы к созданию установок управляемого термоядерного синтеза требуют понимания физики пылевой плазмы для эффективного управления образующимися структурами.

Работа является частью проекта, целью которого является построение модели плазменно-пылевой системы, позволяющей предсказывать её структурные свойства в конкретных лабораторных условиях. В рамках проекта планируется как произвести обработку и анализ экспериментальных данных, полученных другими группами, так и на основании компьютерных и численных методов построить теоретическую модель пылевой плазмы, объясняющую экспериментальные результаты.

В работе представлены результаты обработки экспериментальных данных, полученных в тлеющем разряде гелия группой А.В. Кириллина, И.С. Самойлова и В.П. Баева в ОИВТ РАН в 2010–2012 гг. Классификация пылевых структур, приведенная в [2], уточнена и дополнена. Произведено измерение межчастичных расстояний в полученных структурах в диапазоне температур  $9 - 295$  К и концентраций нейтрального газа  $10^{14} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$  [3]. Построены структурные диаграммы плазменно-пылевой системы в координатах «ток разряда – температура нейтрального газа» и «концентрация нейтрального газа – температура нейтрального газа». Показаны предполагаемые линии структурных и фазовых переходов в плазменно-пылевой системе в условиях поставленного эксперимента.

Сравнение аналитического решения уравнения равновесия, полученного для двухчастичной модели с экранированным кулоновским взаимодействием и параболической ловушкой, с экспериментом показывает, что вместо дебаевской длины экранирования в плазме в потенциале Дебая стоит использовать эффективную длину, большую в 5–15 раз [3].

Произведено моделирование плазменно-пылевых структур с использованием метода молекулярной динамики. В цилиндрической геометрии задаётся система от 2 до 500 частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу. К центру

трубки их притягивает параболическая ловушка, обусловленная амбиполярной диффузией ионов и электронов плазмы. Параметр ловушки и параметры плазмы вводятся в программу в качестве внешних параметров, не рассчитываемых непосредственно в ней. В качестве дополнительных сил, влияющих на пылевые частицы, рассматриваются также термофоретическая сила, сила ионного увлечения и сила, обусловленная эффектом ionwake. Благодаря особенностям написанной программы они могут включаться и выключаться в произвольном порядке.

Из моделирования получена зависимость межчастичного расстояния от заряда пылевых частиц, длины экранирования в плазме и параметра параболической ловушки. Показано, что они хорошо описываются степенными функциями. Построена зависимость межчастичного расстояния в пылевых структурах от температуры при условии малости термофоретической силы. Показано, что расстояние в этом случае с падением температуры спадает монотонно. Обнаружено, что при учёте термофоретической силы в зависимости межчастичного расстояния от температуры нейтрального газа обнаруживается минимум при низких температурах. Сравнение теоретических зависимостей с экспериментальными выявляет качественное согласие. Построена зависимость температуры, соответствующей минимуму расстояния между частицами, от тока и концентрации частиц в разряде. Этот результат позволит оценивать параметры разрядной плазмы по структурным свойствам пылевой плазмы. Исследовано влияние силы ионного увлечения на расстояние между частицами, а также влияние силы, обусловленной эффектом ionwake, на образование пылевых частиц. Получены трёхмерные плазменно-пылевые структуры, совпадающие с экспериментальными.

### Литература

1. Polyakov D.N., Vasilyak L.M., Shumova V.V. Synergetics of dusty plasmas and technological aspects of the application of dusty plasma // Surf. Eng. Appl. Electrochem. 2015. V. 51. P. 143–151.
2. Самойлов И.С., Баев В.П., Тимофеев А.В., Амиров Р.Х., Кириллин А.В., Николаев В.С., Бедрань З.В. Пылевая плазма в тлеющем разряде гелия в диапазоне температур 5–300 К // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 151. №. 3. С. 582–591.
3. Nikolaev V.S., Timofeev A.V. Screening length in dusty plasma crystals //Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing, 2016. V. 774. N. 1. P. 012172.

УДК 538.91

### Исследование границ ОЦК- и ГПУ- фаз циркония методами молекулярной динамики

*И.С. Гордеев*

Объединенный институт высоких температур РАН  
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Цирконий и его сплавы широко используются как конструкционные материалы. Однако фазовая диаграмма циркония до сих пор до конца не была изучена. В данной работе представлены результаты расчетов методом атомистического моделирования ГПУ- и ОЦК-фаз циркония в широком интервале давлений и температур для двух различных потенциалов. Методом прямого двухфазного моделирования рассчитана кривая плавления вплоть до давления в 16 ГПа. Суть метода заключается в том, что в расчетной ячейке создаются две фазы при фиксированном давлении и температуре: расплав и оцк-фаза. Далее по перемещению фазовой границы делается вывод о стабильности той или иной фазы. Также в работе представлены рассчитанные области стабильности ГПУ- и ОЦК-фаз. Оценка стабильности каждой фазы производится на основе ее времени жизни при различных давлениях и температурах. С использованием уравнения Клапейрона–Клаузиуса делается оценка угла наклона кривой равновесия между кристаллическими фазами на РТ-диаграмме. Рассчитана зависимость разности удельных объемов при

различных давлениях и температурах, соответствующих границе между областями ГПУ- и ОЦК- фазами.

УДК 533.9.01

### Метастабильные состояния разогретого плотного водорода

*Г.Э. Норман<sup>1,2</sup>, И.М. Саитов<sup>2,3</sup>, Р.А. Сарпан<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Указания на фазовый переход первого рода флюид-флюид в разогретом плотном водороде и дейтерии были получены в ряде экспериментов на ударных волнах [1] и алмазных наковальнях [2, 3]. Интерпретация данных вещества при экстремальных условиях (температура от нескольких сот до тысячи Кельвин, давление от половины до нескольких мегабар) является сложной задачей. Результаты различных методик имеют значительный разброс: параметры перехода могут отличаться в несколько раз. Теоретические описания посредством молекулярного моделирования [4, 7] также имеют значительные расхождения. Качественно фазовый переход воспроизводится всеми способами одинаково, но количественно давления и температуры отличаются.

Разные положения фазового перехода в эксперименте могут являться следствием разных скоростей нагрева (сжатия) водорода. Чем больше скорость нагрева (сжатия), тем дальше от равновесного состояния и ближе к спинодали регистрируется точка фазового перехода. Чтобы подтвердить подобное объяснение, необходимо исследовать метастабильные состояния водорода, т.к. ни в каких работах по моделированию не было отмечено существование метастабильной области.

В данной работе применяется квантово-механическое моделирование на основе теории функционала плотности. В ячейке рассчитывается 512 атомов водорода вдоль изотермы 1000 К в диапазоне плотностей 0.880–0.975 г/см<sup>3</sup>. В качестве обменно-корреляционного потенциала был выбран PBE, как тот, что лучше всего воспроизводит давления и температуры фазового перехода в одном из экспериментов.

Структурные изменения водорода при фазовом переходе отражаются на его парной корреляционной функции (ПКФ)  $g(r)$ . При более низких плотностях жидкий водород молекулярен. В этом случае первый пик ПКФ на  $r = 0.74$  А соответствует межатомному расстоянию в молекуле H<sub>2</sub>. После перехода первый пик значительно снижается, что объясняется разрушением молекул H<sub>2</sub>. Таким образом, по высоте первого пика можно судить о фазе вещества.

Для получения метастабильных состояний определенным образом подбирались начальные конфигурации (координаты и скорости ионов). Важным условием сохранения метастабильности является отключение термостата.

Результаты изображены на рис. 1. Нам удалось продлить молекулярную фазу с 0.900 г/см<sup>3</sup> до 0.969 г/см<sup>3</sup>. Из-за отсутствия термостата температура имеет среднее квадратичное отклонение от 1000 К в 17 К. Метастабильная ветвь перекрывает равновесную в интервале давлений протяженностью в 300 кБар. Важно, что первая производная метастабильной ветви не уменьшается в зависимости от плотности, что означает возможное существование молекулярной фазы и при больших плотностях.

Равновесные и метастабильные серии ПКФ представлены на рис. 2. Метастабильные ПКФ имеют высокий пик в районе  $r = 0.74$  А. На вставке на рис. 2 можно увидеть, что метастабильная ветвь является продолжением молекулярной фазы. Это подтверждает то, что водород остается молекулярным при плотностях, больших плотностей перехода. Таким образом, обе фазы можно промоделировать в одной и той же области давления и температур.

В данной работе впервые было получено теоретическое подтверждение существования метастабильных состояний разогретого плотного водорода. Основными результатами являются:

1) разработка способа моделирования метастабильных состояний. В основе способа лежит подбор начальных конфигураций и расчет без термостата;

2) получение молекулярной фазы водорода в области за фазовым переходом. Метастабильная ветвь перекрывает равновесную в интервале плотностей, протяженность которого в 2.5 раза больше самого скачка плотности при фазовом переходе. Парная корреляционная функция сохраняет свою форму, что подтверждает сохранение молекулярной фазы;

3) Существование метастабильности может объяснить серьезные расхождения между разными экспериментальными работами по определению параметров фазового перехода.

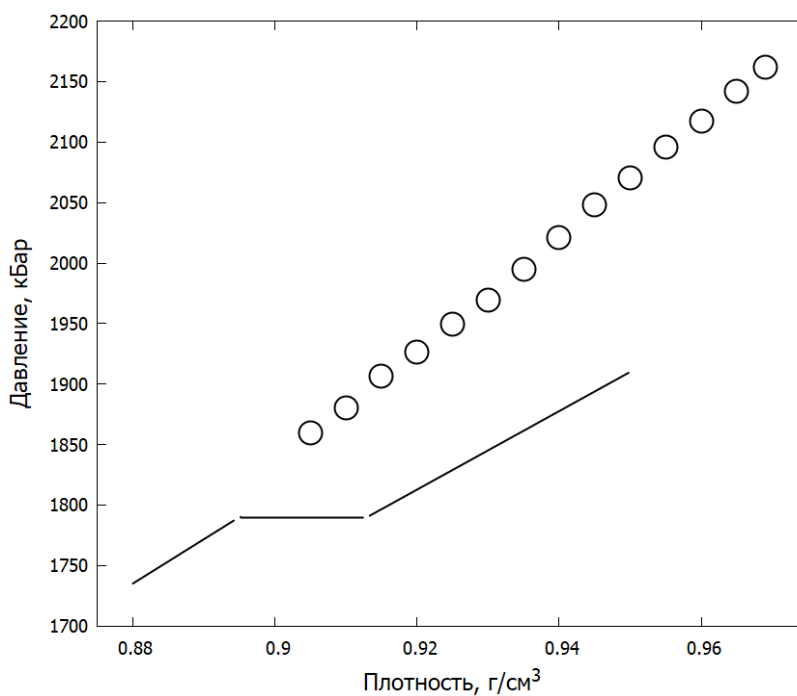


Рис. 1. Уравнение состояний плотного разогретого водорода. Линии обозначают равновесные состояния, кружки – метастабильные

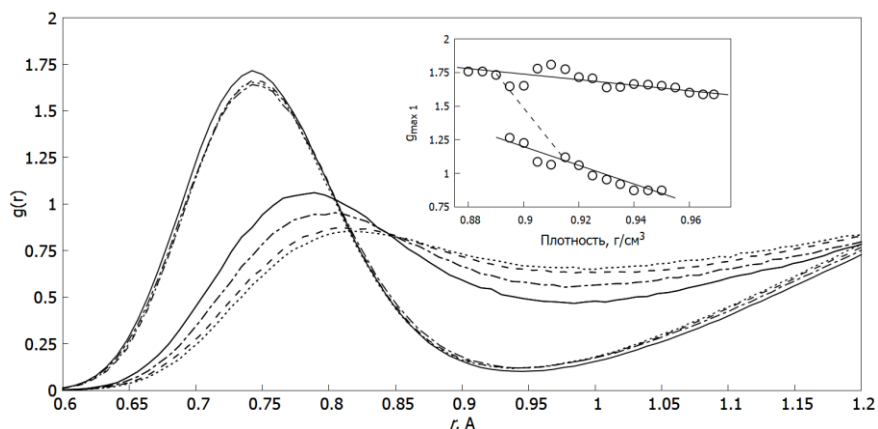


Рис. 2. Парные корреляционные функции водорода при разных плотностях. Сплошные линии – 0.920 г/см<sup>3</sup>, штрихпунктирные – 0.930 г/см<sup>3</sup>, штрихованные – 0.940 г/см<sup>3</sup>, пунктирные – 0.950 г/см<sup>3</sup>. На вставке: зависимость высот первых максимумов ПКФ от плотности. Прямые Линии нарисованы для удобства: штрихованная линия отражает равновесный процесс при фазовом переходе, две сплошные линии отражают две фазы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта 16-08-01218-а.

### Литература

1. *Mochalov M.A., Ilkaev R.I., Fortov V.E., Mikhailov A.L., Blikov A.O., Ogorodnikov V.A., Gryaznov V.K., Iosilevskiy I.L.* Quasi-isentropic compressibility of a strongly nonideal deuterium plasma at pressures of up to 5500 GPa: Nonideality and degeneracy effects // *J. Exp. Theor. Phys.* 2017. V. 124(3). P. 505.
2. *Ohta K., Ichimaru K., Einaga M., Kawaguchi S., Shimizu K., Matsuoka T., Hirao N., Ohishi Y.* Phase boundary of hot dense fluid hydrogen // *Scientific Reports.* 2015. V. 5. P. 16560.
3. *Zaghoo M., Salamat A., Silvera I.F.* Evidence of a first-order phase transition to metallic hydrogen // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 93(15). P. 155128.
4. *Scandolo S.* Liquid-liquid phase transition in compressed hydrogen from first-principles simulations // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2003. V. 100. P. 3051.
5. *Morales M.A., Pierleoni C., Schwegler E., Ceperley D.M.* Evidence for a first-order liquid-liquid transition in high-pressure hydrogen from ab initio simulations // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2010. V. 107. P. 12799.
6. *Lorenzen W., Holst B., Redmer R.* First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 82(19). P. 195107.
7. *Morales M.A., McMahon J.M., Pierleoni C., Ceperley D.M.* Nuclear Quantum Effects and Nonlocal Exchange-Correlation Functionals Applied to Liquid Hydrogen at High Pressure // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110(6). P. 065702.

УДК 544.022.346

### Моделирование молекулярной структуры аморфного полиэтилена с углеродными нановключениями в процессе деформации

*М.А. Логунов, Н.Д. Орехов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

В последнее время большой интерес в науке о материалах представляют наноконпозиты на основе аморфных полимеров с нановключениями в связи с их уникальными механическими свойствами – высокая эластичность, упругость [1, 2]. В связи с большой контактной поверхностью нановключений, даже добавление их в небольшой концентрации (порядка нескольких массовых процентов) приводит к изменению свойств наноконпозита в отличие от чистого полимера [3].

Безусловно интересно изучить механизмы, ответственные за структурные изменения, происходящие в полимере на молекулярном уровне при добавлении в него углеродных нанотрубок. Молекулярная динамика позволяет проследить на атомарном уровне поведение подобной системы и предсказать ее свойства с высокой точностью.

В данной работе, являющейся развитием статьи [4], представлены результаты расчета эволюции структуры полиэтилена (ПЭ) с углеродными нановключениями под действием деформации. Моделирование проводилось в рамках метода классической молекулярной динамики с использованием потенциала Dreiding.

Был проведен анализ роста напряжений в наноконпозите в ходе одноосной деформации в зависимости от скорости растяжения при различных конфигурациях наноразмерных включений: чистый ПЭ, ПЭ с углеродными нанотрубками (УНТ) и ПЭ с УНТ, поверхность которых модифицирована функциональными группами. Для более подробного изучения свойств полимера в процессе деформации использовалась методика расчета примитивного пути (ПП) [5, 6], которая позволяет производить анализ топологии переплетения полимерных цепей (рис. 1). На основе полученных данных делается попытка



связать параметры нанокавитации в композите, возникающей в ходе деформирования, с процессом распутывания узлов между отдельными молекулами полимера.

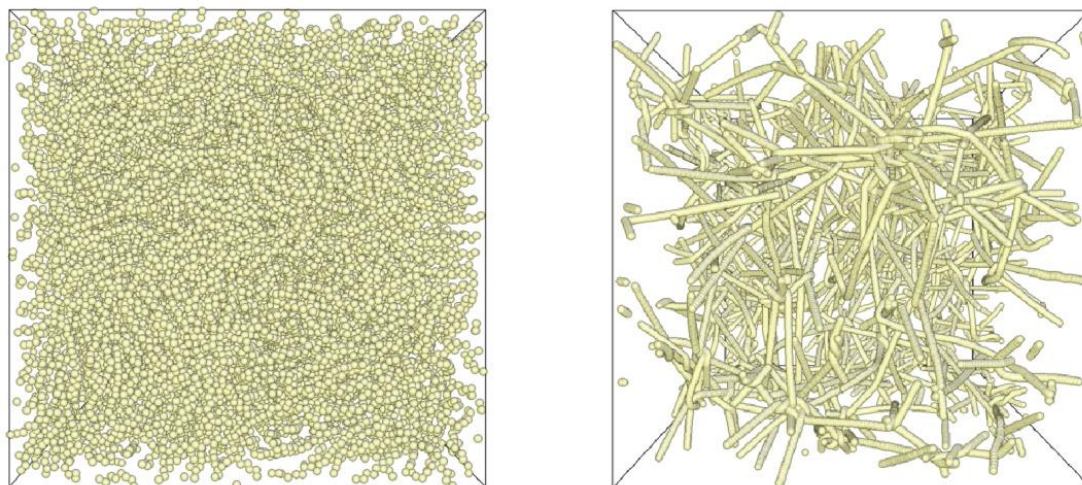


Рис. 1. Молекулярная структура полиэтилена до (слева) и после (справа) расчета примитивного пути

### Литература

1. Barber A.H., Cohen S.R., Wagner H.D. Measurement of carbon nanotube-polymer interfacial strength // Applied Physics Letters 2003. V. 82. N 23. P. 4140–4142.
2. Wong M., Paramsothy M., Xu X., Ren Y., Li S., Liao K. Physical interactions at carbon nanotube-polymer interface // Polymer 2003 V. 44 N 25 P. 7757–7764.
3. Kutvonen A., Rossi G., Puisto S.R., Rostedt N.K., Ala-Nissila T. Influence of nanoparticle size, loading, and shape on the mechanical properties of polymer nanocomposites // Journal of chemical physics 2012. V. 137 N 21 P. 214901.
4. Orekhov N.D., Stegailov V.V. Simulation of the adhesion properties of the polyethylene/carbon nanotube interface // Polymer Science Series A. 2016. V. 58 I. 3 P. 476–486.
5. Doi M., Edwards S.F. The theory of polymer dynamics // Oxford university press, 1988. V. 73.
6. Sukurmaran S.K., Grest G.S., Kremer K., Everaers R. Identifying the primitive path mesh in entangled polymer liquids // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics 2005. V. 43 N 8. P. 917–933.

УДК 544.272

### Моделирование роста железных кластеров и термическая аккомодация атомов инертных газов на них

Д.Ю. Ленёв<sup>1,2</sup>, Г.Э. Норман<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Целью работы является исследование методом молекулярной динамики закономерностей роста наночастиц железа. Производится расчет таких величин, как коэффициента прилипания и термической аккомодации. Исследуется система, состоящая из одного налетающего атома инертного газа или железа и кластера железа.

Наночастицы металлов являются перспективным объектом исследования, равно как и полезным промышленным продуктом. Они могут служить в качестве катализаторов многих химических процессов, в частности синтеза нанотрубок [1]. С помощью наночастиц металлов можно также улучшить свойства красок, масел и смазок. Также имеются проекты по использованию металлических наночастиц в медицине для точной доставки лекарств.

В данной работе исследуются большие размеры кластеров и более подходящие для них потенциалы. Кластер создается следующим образом. Ограничивается сферический



регион. В нем в узлы объемноцентрированной кристаллической решетки помещаются атомы железа. Далее им задаются скорости, соответствующие распределению Максвелла при 300 К. Затем происходит нагрев атомов термостатом Ланжевена до требуемой температуры. Рассмотрен набор температур кластера от 300 до 2500 К. Взаимодействие атомов происходит через потенциал Финниса–Синклера.

Взаимодействие между налетающим атомом и атомами кластера зависит от типа атома. Для атома железа используется потенциал Леннарда–Джонса, апробированный в работе [4], в которой исследуется конденсация железного пара за фронтом ударной волны. Для атома инертного газа, чаще всего аргона, используется потенциал Морзе [3]. Он был использован для исследования термической аккомодации инертных газов на плоской поверхности разных металлов.

Для налетающего атома задаются начальная скорость и прицельный параметр. Прицельный параметр – величина, показывающая, на каком расстоянии от центра кластера пролетит налетающий атом, если отключить взаимодействие между атомами. Он изменяется с постоянным шагом от нуля до величины, при которой исследуемые величины практически обнуляются, так, чтобы получилось 25 точек. Начальная скорость выбирается случайным образом из распределения Максвелла для заданной температуры, в основном, 300 К. Эта температура была выбрана, поскольку в эксперименте по данной теме используется буферный газ при комнатной температуре. Далее данная температура будет называться температурой налетающего атома. Рассчитывается от 10 000 до 300 000 траекторий в зависимости от размера кластера.

Коэффициент прилипания определяется через принадлежность налетающего атома к кластеру. Чтобы это определить, введены геометрическое, временное и энергетическое условия. Выполнение геометрического показывает, что атом находится в зоне действия потенциала кластера. Временного – что атом находится там на порядок дольше, чем требуется для единичного соударения. Энергетическое требует, чтобы энергия атома стала отрицательной. Поскольку изначально атом находится вне зоны действия межатомного потенциала кластера и обладает кинетической энергией, его энергия положительная.

Коэффициент термической аккомодации определяется по формуле

$$\beta = \frac{m (v_f^2 - v_i^2)}{4 k_B (T_{cl} - T)},$$

где  $\beta$  – коэффициент термической аккомодации,  $m$  – масса налетающего атома,  $v_i$  и  $v_o$  – начальная и конечная скорости налетающего атома,  $k$  – константа Больцмана,  $T$  и  $T_{cl}$  – температуры налетающего атома и кластера соответственно. Коэффициент термической аккомодации – величина, характеризующая эффективность теплообмена между налетающим атомом и кластером. Также приведены расчеты величины, представляющей собой коэффициент термической аккомодации, домноженный на знаменатель. Это количество тепла, передаваемого при взаимодействии налетающим атомом кластеру, то есть теплообмен.

Траектория рассчитывается до тех пор, пока атом не покинет зону действия потенциала кластера либо 200 пс.

Для каждой из температур налетающего атома и кластера и для каждого размера кластера рассчитывается зависимость от прицельного параметра для обеих величин. На этой зависимости имеется три участка. Первый – плато с учетом некоторого разброса. По этому участку происходит усреднение, которое даёт среднее значение, что и является значением для заданных температур и размера кластера. Разброс значений позволяет рассчитать дисперсию, а следовательно, и погрешность. Второй – падение значения до нулевого уровня. По нему возможно оценить сечение взаимодействия. Третий – ещё одно плато, со значением около нуля. Этот участок нужен для предварительной верификации. Значительное отличие от нуля свидетельствует об ошибке.

Для коэффициента прилипания были измерены зависимости от температур кластера и налетающего атома, размера кластера. Обе зависимости являются убывающими. В случае с температурой кластера он становится менее энергетически стабильным, а

налетающий атом быстро набирает энергию при соударениях с атомами кластера. Зависимость от температуры налетающего атома имеет приблизительно тот же вид, но убывает значительно быстрее. Здесь убывание объясняется значительной начальной скоростью. Из-за этого атому требуется потерять больше энергии, чтобы прилипнуть к кластеру. Что касается зависимости от размера кластера, то для коэффициента прилипания она достаточно слаба. Однако можно заметить на графике небольшое возрастание с увеличением размера кластера.

Для коэффициента термической аккомодации в первую очередь были сопоставлены зависимости теплообмена и коэффициента термической аккомодации от температуры кластера. Первая является возрастающей, что подтверждает, что при увеличении температуры кластера налетающий атом получает больше энергии. Также она пересекает ноль неподалеку от температуры налетающего атома. Вторая убывает, однако, не была измерена в окрестности точки разрыва. Это показывает, что эффективность взаимодействия между кластером и налетающим атомом падает с ростом температуры кластера. Для объяснения этого требуется привести зависимость коэффициента термической аккомодации от времени взаимодействия. Оно определяется через число шагов, которое атом проводит в зоне действия потенциала кластера. Вид этой зависимости похож на соответствующую для коэффициента термической аккомодации. Отсюда следует вывод о том, что чем выше температура кластера, тем меньше времени и меньше соударений требуется налетающему атому, чтобы набрать достаточную энергию для того, чтобы покинуть зону действия потенциала кластера. Также была измерена зависимость от размера кластера. Получено, что она близка к прямой для  $N^{-1/3}$ . Выбор этих координат основан на том, что многие величины для кластеров линейно зависят от отношения поверхностной энергии к объемной, приходящихся на один атом. Поскольку поверхностная энергия пропорциональна  $R^2$  или  $N^{2/3}$ , а объемная –  $R^3$  или  $N$ , получается именно такое отношение.

### Литература

1. Eremin A.V., Gurentsov E.V., Priemchenko K.Yu. Iron nanoparticle growth induced by Kr–F excimer laser photolysis of  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  // J. of Nanoparticle Research. 2013. V. 15 P. 1537–1553.
2. Daun K., Sipkens T.A., Titantah J.T., Karttunen M. Thermal Accommodation Coefficients for Laser-Induced Incandescence Sizing of Metal Nanoparticles in Monatomic Gases // Appl.Phys. B. 2013. V. 8. P. 409–420.
3. Insepov Z.A., Karatajev E.M., Norman G.E. The kinetics of condensation behind the shock front // Z. Phys. D – Atoms, Molecules and Clusters. 1991. V. 20. P. 449.

УДК 532.5

### Моделирование фильтрации двухфазной бинарной системы углеводородов

С.А. Захаров

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Находящаяся в естественных условиях смесь газконденсатов (газконденсантные залежи) имеет ретроградную область конденсации. Экспериментально [1] был обнаружен периодический характер выхода смеси. Предполагается, что он обусловлен ретроградной конденсацией: возникающая жидкая пробка препятствует дальнейшему выходу газконденсата.

Исследование посвящено моделированию фильтрации двухфазной системы метан–бутан. Модель включает две части: поиск фазового равновесия системы и гидродинамику смеси. На текущий момент разработана одномерная модель фильтрации, следуя алгоритму, предложенному в [1]. В качестве уравнения состояния выбрана форма Брусилковского [2] на основе сравнения с другими формами (Соаве–Редлиха–Квонга, Пенга–Робинсона):

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{(v+c)(v+d)}, \quad (1)$$

где  $P$  – давление,  $R$  – газовая постоянная,  $T$  – температура,  $v$  – молярный объем;  $a = a_c \cdot \varphi(T)$ ,  $b, c, d$  – коэффициенты.

Гидродинамика описывается системой уравнений неразрывности для фаз (жидкая и газовая), дополненная линейной формой уравнения Дарси:

$$\frac{\partial m\rho_1 s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial x} = -V, \quad (2)$$

$$\frac{\partial m\rho_2(1-s)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial x} = V,$$

где индексы 1 и 2 соответствуют газу и жидкости,  $\rho$  – плотность,  $m$  – пористость,  $s$  – газонасыщенность,  $t$  – время,  $x$  – координата,  $u$  – скорость,  $V$  – источниковый член.

$$u_i = -k \frac{f_i(s)}{\mu_i} \frac{\partial P_i}{\partial x} \quad (i = 1, 2), \quad (3)$$

где  $k$  – абсолютная проницаемость,  $f(s)$  – относительная проницаемость и  $\mu$  – динамическая вязкость.

Численный эксперимент направлен на проверку предположения о периодичности характера расхода смеси. В случае подтверждения ожидается исследование на возможность резонанса в процессе откачки, что, вероятно, увеличит расход смеси. Практическая значимость работы заключается в повышении разработки газконденсатных месторождений.

### Литература

1. Директор Л.Б., Качалов В.В., Майков И.Л., Сквородько С.Н.. Одномерная нестационарная модель двухфазной фильтрации газконденсатной смеси: препринт // ОИВТ РАН. N. 2-441. М., 2000. С. 47.
2. Баталин О.Ю., Брусиловский А.И., Захаров М.Ю. Фазовые равновесия в системах природных углеводородов. М.: Недра, 1992. 272 с.

УДК 536.777

### Молекулярная динамика в большом каноническом ансамбле для расчета фазовых диаграмм

*П.И. Чекалкина*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

Большой канонический ансамбль – это ансамбль с постоянным химическим потенциалом, объемом и температурой, но переменным числом частиц [1].

В данной научной работе проведена проверка большого канонического ансамбля методом молекулярной динамики.

Суть метода молекулярной динамики состоит в моделировании реального эксперимента и расчете равновесных процессов и процессов переноса вещества в системе. Для определения точки фазового равновесия строились зависимости давления от

химического потенциала для двух фаз. Точки пересечения двух кривых определяли равенство одновременно давления и химического потенциала, то есть точки равновесного сосуществования фаз [3].

Моделирование было проведено в потенциале Леннарда–Джонса для безразмерных частиц.

В ходе работы были получены фазовые диаграммы для жидкости и газа, по ним построены зависимости температуры и давления от плотности.

Полученные данные согласуются с экспериментальными.

Параметры LJ для метана:  $E/k = 148$  К,  $q = 3.73$  Å,  $m_0 = 0.16$  а.е.м [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-1404.2017.8.

### Литература

1. *Frenkel D., Smit B.* Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. // Academic Press, an imprint of Elsevier, 2002.
2. *Nicolas J. J., Gubbins, K. E., Streett, W. B., Tildesley, D. J.* Equation of state for the Lennard-Jones fluid // *Molecular Physics*. 37. 1429–1454.
3. *Hansen, J. P., Verlet, L.* Phase transitions of the Lennard-Jones system // *Physical Review*. 184. 151.

УДК 548.4

### Молекулярно-динамическое моделирование поведения дислокаций в молибдене

*В.И. Цепляев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

Молибден является распространенным конструкционным материалом, его сплавы широко применяются в авиационной технике и в конструкции атомных реакторов. Так как этот материал часто подвергается большим нагрузкам, то встает вопрос об изучении поведения молибдена при больших напряжениях. На сегодняшний день считается, что пластические свойства материала характеризуются такими явлениями, как мартенситные переходы, двойникование и движение дислокаций, причем в чистом молибдене наиболее выражено последнее. Отсюда следует, что исследование поведения дислокаций в молибдене является необходимым шагом для дальнейшего изучения пластичности данного материала. Также стоит заметить, что так как винтовые дислокации в молибдене менее подвижны, чем краевые, то движение именно винтовых дислокаций характеризует пластические свойства молибдена.

В данной работе исследуются винтовые и краевые дислокации в молибдене при помощи метода молекулярной динамики. Были произведены расчеты зависимости скорости движения дислокации от приложенного внешнего сдвигового напряжения. Результаты расчетов показывают, что краевые дислокации в молибдене действительно более подвижны, чем винтовые. Помимо этого было продемонстрировано наличие двух режимов движения дислокаций: термоактивационный и вязкостный. Эти два режима отличаются не только характером зависимости скорости дислокации от внешнего напряжения, но и механизмом движения. Скорость движения дислокации в термоактивационном режиме характеризуется миграцией и нуклеацией двойных изломов дислокации, когда в вязкостном режиме скорость движения в первую очередь ограничена из-за взаимодействия дислокации с фонной подсистемой. Также при помощи полученных значений мобильности дислокации получены верхние оценки напряжения

текучести молибдена и произведены оценки таких параметров дислокации, как энтальпия образования двойного излома и коэффициенты трения движения в вязкостном режиме.

Помимо метода молекулярной динамики, в работе также предлагается исследовать поведение леса дислокаций в молибдене при помощи метода дислокационной динамики, который позволяет рассмотреть эволюцию структур дислокаций уже на микроуровне. Данный метод исследования позволяет теоретически, опираясь лишь на результаты молекулярно-динамических расчетов, оценить кривую деформации материала. В работе реализованы оценки пластичности молибдена при помощи метода дислокационной динамики в простейших представлениях.

УДК 544.272

### **Особенности взаимодействия переохлажденных капель воды и кристаллов льда с твердым телом**

*И.А. Амелюшкин*

Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского

Моделирование взаимодействия аэрозольных течений с твердым телом представляет большой практический интерес, в частности в проблеме обледенения. В настоящей работе представлены результаты моделирования методом молекулярной динамики взаимодействия переохлажденных капель воды с рельефным твердым телом в пограничном слое воздуха. Приведены предварительные расчеты удара нанокристаллов льда о поверхность твердого тела, обладающей различной степенью гидрофобности. Методами квантовой химии с помощью пакета Gaussian получены потенциалы взаимодействия молекул воды с различными атомами твердого тела. На основании проведенных экспериментов получены оценки излучения, которое может сопровождать движение фронта кристаллизации в переохлажденной воде в зависимости от температуры переохлаждения. Построена статистическая диаграмма, показывающая вероятность кристаллизации метастабильной жидкости в зависимости от интенсивности и количества механических воздействий.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 16–19–10472.

УДК 539.194

### **Термализация электрон-ионной системы в фотовозбужденных алюминиевых нанокластерах**

*А.И. Чернышов, Н.Д. Орехов, В.В. Стегайлов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

В последнее время взаимодействие наночастиц с ультракороткими лазерными импульсами стали предметом пристального изучения благодаря нескольким уникальным явлениям. Прежде всего, речь идёт о способности нанокластеров поглощать излучение со значительно большей удельной интенсивностью, чем обычные материалы. Важную роль в этих процессах играет резонансное плазмонное поглощение [1], кроме того, в этих процессах наблюдается переход вещества в состояние разогретого плотного вещества (РПВ). Изучение этого явления сопряжено с априорной сложностью построения теории РПВ, особенно неравновесного, потому широко применяются методы молекулярной динамики первых принципов.

Одним из перспективных плазмонных элементов является алюминий. Частоты плазмонного резонанса у него находятся в видимой и ультрафиолетовой части спектра, что обеспечивает возможность его многочисленных применений в практической области [2, 3].

Для моделирования применяется метод электронного силового поля (eFF — electron force field), принадлежащий к числу методов молекулярной динамики с волновыми пакетами [4]. В данном методе электрон представляется в виде трёхмерного гауссового волнового пакета переменной ширины, а ионы, как и геометрические центры волновых пакетов симулируются как классические точечные частицы.

Процесс моделирования может быть условно поделён на два этапа: нагрев кластера и стадия последующей релаксации. В нашей работе исследуются процессы релаксации, происходящие в алюминиевых нанокластерах после поглощения ими энергии в результате облучения фемтосекундным лазерным импульсом высокой мощности. В частности, предлагается критерий фазового перехода и исследуется зависимость времени между импульсом и фазовым переходом от количества поглощённой энергии [5].

### Литература

1. *Bystryi R., Morozov I.* Electronic oscillations in ionized sodium nanoclusters // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2014. V. 48. P. 015401.
2. *Li G., Li J., Yang L. [et al.]*. Evolution of aluminium surface irradiated by femtosecond laser pulses with different pulse overlaps // *Applied Surface Science*. 2013. V. 276. P. 203–209.
3. *MacDonald K. F., Samson Z. L., Stockman M. I., Zheludev N. I.* Ultrafast active plasmonics. 2009. V. 3. P. 55–58.
4. *Julius T. Su* An electron force field for simulating large scale excited electron dynamics. Pasadena: California Institute of Technology, 2007.
5. *Chenard-Lemire C., Lewis L.J., Meunier M.*, Laser-induced Coulomb explosion in C and Si nanoclusters: The determining role of pulse duration // *Applied Surface Science*. 2012 V. 258. P. 9404–9407.

УДК 537.534.7

### Учет ион-ионного взаимодействия при моделировании движения ионов в масс-анализаторах, использующих фурье-преобразование сигнала

*А.С. Красиков<sup>1</sup>, П.Ю. Борисовец<sup>1,2</sup>, Г.Н. Владимиров<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт энергетических проблем химической физики РАН

В работе проводилось исследование корректности вычисления взаимодействия ионов с другими ионами, а также с проводящими стенками ловушки, при использовании particle-mesh алгоритма для моделирования движения ионных облаков в масс-анализаторе ионного циклотронного резонанса (ИЦР). Учет внешнего магнитного поля и запирающего потенциала в двух алгоритмах производился одинаково:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + [\vec{v} \times \vec{B}]),$$

$$\vec{E} = \nabla\varphi = \nabla a(x^2 + y^2 - 2z),$$

где  $q, \vec{v}$  – заряд и скорость иона,  $\vec{E}$  – электрическое поле,  $\vec{B}$  – магнитное поле. Влияние ион-ионного взаимодействия и взаимодействия с проводящей стенкой в алгоритме particle-mesh учитывались за счет решения уравнения Пуассона с заданными граничными условиями:



$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \\ \Phi \Big|_{x=\pm\frac{d}{2}} = 0, \Phi \Big|_{y=\pm\frac{d}{2}} = 0, \Phi \Big|_{z=\pm\frac{d}{2}} = 0 \end{array} \right.,$$

где  $\rho$  – пространственная плотность заряда,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная,  $d$  – координата границы ячейки. В particle-particle алгоритме силы между ионами и взаимодействие с проводящей стенкой (с зарядами образов) вычислялись непосредственно для каждой частицы по закону Кулона:

$$\vec{F} = k \frac{q^2}{r^3} \vec{r}$$

Проведено моделирование движения двух видов ионов с массами  $m_1 = 556.9094$  Да и  $m_2 = 556.9156$  Да в ловушке Пеннинга с характерным размером  $d = 2$  дюйма, постоянным магнитным полем  $\vec{B} = 7$  Тл и характерным значением запирающего потенциала  $1.56 \cdot 10^4$  В. Сопоставлены усредненные по частицам значения сил, посчитанных при помощи particle-mesh и particle-particle алгоритмов, во время столкновения ионных облаков. Исследованы эффекты, связанные с размерами сетки и общим количеством частиц в ИЦР ловушке.

На рис. 1 показана зависимость значений исследуемых сил, действующих на частицы, от размера сетки для particle-mesh и particle-particle алгоритмов для момента столкновения ионных облаков. Из графика видно, что алгоритм particle-mesh дает заниженные значения сил, связанных с взаимодействием между ионами и влиянием на них проводящей стенки.

При увеличении числа ионов в ловушке наблюдается увеличение вычисляемого значения циклотронной частоты. На рис. 2 показано смещение момента столкновения облаков при изменении числа частиц.

Исследование зависимости усредненных значений сил от размера сетки и сравнение этих результатов с «прямым» (particle-particle) подходом позволяет объяснить некоторые различия между компьютерным моделированием и экспериментом. Использование метода particle-particle или метода particle-mesh с оптимальным размером сетки может позволить предсказывать искажения интенсивностей пиков в масс-спектрах, вызванные смещением орбит ионных облаков (расстояний до электродов детектирования) с помощью компьютерного моделирования.

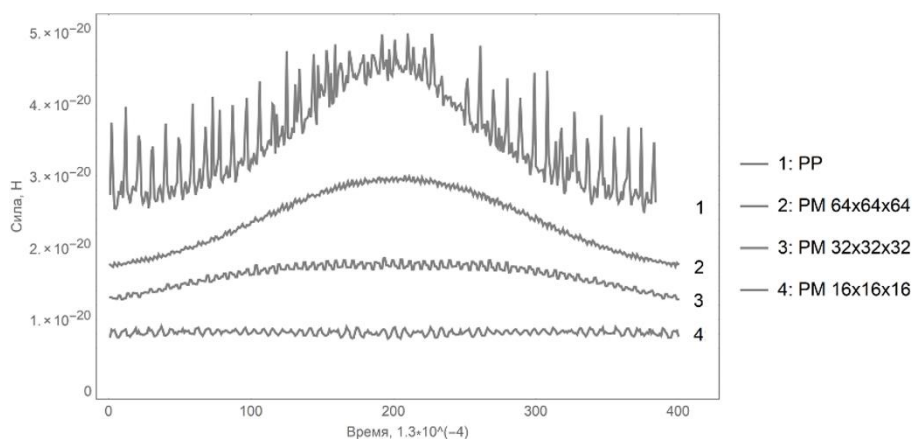


Рис. 1



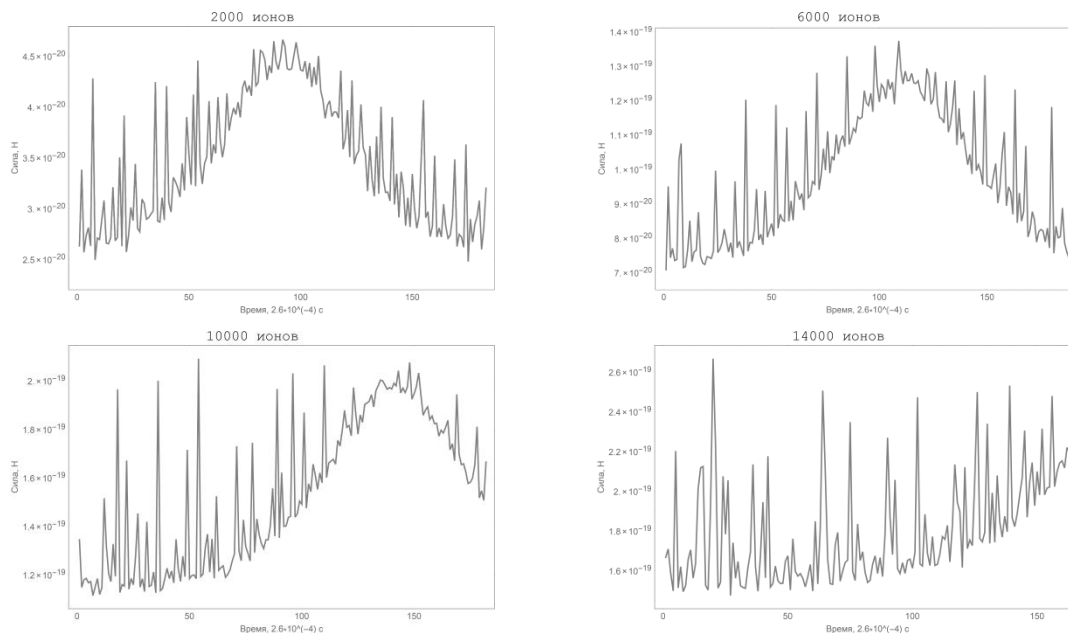


Рис. 2

### Литература

1. Nikolaev E. N., Kostyukevich Y. I., Vladimirov G. N. Fourier transform ion cyclotron resonance (FT ICR) mass spectrometry: Theory and simulations // Mass Spec Rev 35. P. 219–258.
2. Nikolaev E. N., Heeren R. M. A., Popov A. M., Pozdnev A. V., Chingin K. S.. Realistic modeling of ion cloud motion in a Fourier transform ion cyclotron resonance cell by use of a particle-in-cell approach // Rapid Commun Mass Spectrom. 2007. V. 21. P. 3527.
3. Hockney RW, Eastwood JW. Computer simulation using particles. New York: Adam Hilger, IOP Publishing Ltd, 1989. P. 523.

УДК 538.953

### Учет квантовых эффектов ядер в жидкости методом интегралов по траекториям

*Н.Д. Кондратюк, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов*

Объединённый институт высоких температур РАН

Учет квантовых свойств ядер в модели может играть ключевую роль в предсказании уравнения состояния и транспортных свойств вещества. Примерами подобных систем являются вода и жидкий водород при низких температурах. В данных случаях поведение атомов водорода имеет квантовый характер и не может быть описано средствами классической молекулярной динамики [1, 3]. Авторы данной работы также встретили ряд сложностей с воспроизведением свойств жидких углеводородов [4, 6].

Метод интегралов по траекториям, основанный на идеях Фейнмана, позволяет учесть квантовую природу ядер в модели. В докладе будут рассмотрены основные подходы, используемые для моделирования квантовых свойств подобных систем, а также представлены первые результаты по верификации реализации в программном пакете LAMMPS на примере жидкой воды (рис. 1). В работе рассчитаны квантовые радиальные функции распределения (рис. 2) и представлена зависимость термодинамических свойств от детализации квантовой модели. Также проведено сравнение с результатами, полученными с использованием программного пакета i-PI.

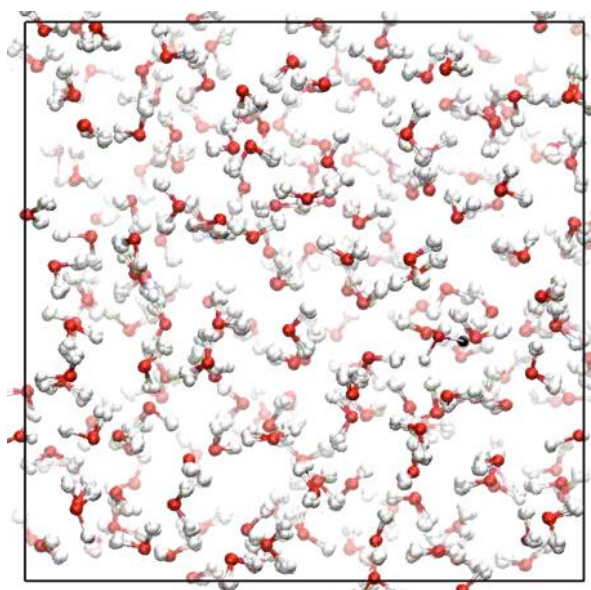


Рис. 1. Расчетная ячейка воды в модели, учитывающей квантовые свойства ядер

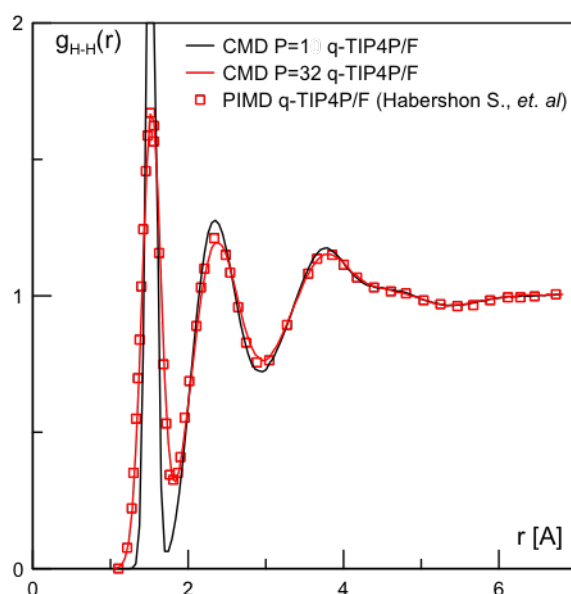


Рис. 2. Радиальная функция распределения для атомов водорода. При учете квантовых поправок (красная линия) атомы водорода более «размыты»

### Литература

1. *Tuckerman M.* Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford: Oxford University Press, 2010. 696 p.
2. *Habershon S. [et al.].* Ring-polymer molecular dynamics: quantum effects in chemical dynamics from classical trajectories in an extended phase space // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2013. V. 64. P. 387.
3. *Cerretti M. [et al.].* Nuclear Quantum Effects in Water and Aqueous Systems: Experiment, Theory, and Current Challenges // *Chem. Rev.* 2016. V.116(13). P. 7529.
4. *Кондратюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Микроскопические механизмы диффузии высших алканов // *Высокомолекулярные соединения. Серия А.* 2016. Т. 58(5). С. 519.
5. *Kondratyuk N.D., Norman G.E. and Stegailov V.V.* Self-consistent molecular dynamics calculation of diffusion in higher n-alkanes // *J. Chem. Phys.* 2016. V. 145. P. 204504.

6. Kondratyuk N.D., Norman G.E. and Stegailov V.V. Rheology of liquid n-triacontane. Molecular dynamics simulation // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 774. P. 012039.
7. Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E. and Stegailov V.V. Relaxation and transport properties of liquid n-triacontane // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 653. P. 012107.

УДК 538.931

## **Эффект аномального увеличения коэффициента диффузии ионов в жидкости**

*М.А. Орехов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

Диффузия ионов в жидкости оказывает определяющее влияние на многие процессы в электротехническом оборудовании. В частности, увеличение коэффициента диффузии ионов повышает проводимость раствора электролита, что важно для работы аккумуляторов. Диффузионный режим рекомбинации ионов влияет на развитие пробоя в электроотрицательных средах, использующихся в трансформаторной технике.

Численно и теоретически исследованы пространственные и временные свойства динамики ионов в жидкости. Получена связь этих свойств со свойствами сольватных оболочек ионов. На основе результатов расчетов и построенной теории предсказан новый эффект ускорения диффузии при определенных радиусах ионов.

Проведены молекулярно-динамические расчеты диффузии ионов в жидком ксеноне и воде. Для расчетов применялся программный пакет LAMMPS. Проверена коррекция результатов для учета конечного размера системы. Жидкий ксенон описывался потенциалом Леннарда–Джонса, вода описывалась SPC/E моделью потенциала. Выявлена немонотонная зависимость коэффициента диффузии от радиуса иона, содержащая ярко выраженные максимумы (рис. 1). Максимумы обнаружены во всех рассмотренных жидкостях. Показано, что данный эффект не может быть объяснен существующими теоретическими моделями. Его не удастся описать как классическими моделями [1], так и более современными подходами на основе локальной структуры жидкости [2, 3].

Выделены два механизма движения иона: коллективное движение вместе с сольватной оболочкой и прыжковое движение с перестройками оболочки. Отдельно проведено теоретическое исследование каждого из механизмов.

Показано, что коллективную диффузию иона вместе с сольватной оболочкой можно описать, используя теоретическую модель HSK [5], в которой отсутствует зависимость от радиуса иона.

Обнаружены отклонения молекулярно-динамических результатов от модели HSK. Они связаны со вторым механизмом диффузии иона: прыжковой диффузией с перестройками сольватной оболочки. Для ее описания построена новая теория, которая предсказывает образование множественных максимумов на зависимости коэффициента диффузии и рекомбинации от радиуса иона.

Показано хорошее согласие новой теоретической модели, молекулярной динамики и экспериментальных данных между собой (рис. 1). Согласие достигнуто, в том числе, в области аномального ускорения диффузии ионов.

Проведено согласованное молекулярно-динамическое и теоретическое исследование свойств сольватной оболочки иона и его коэффициента диффузии.

Прямым молекулярно динамическим расчетом диффузии ионов в жидком ксеноне и воде продемонстрировано наличие нового эффекта увеличения коэффициента диффузии.

Построена теоретическая модель диффузии иона, не ограниченная конкретной формой потенциала межатомного взаимодействия в системе. Данная модель также предсказывает резкое увеличение коэффициента диффузии ионов определенных радиусов.

Продemonстрировано количественное согласие молекулярно-динамического расчета, новой теоретической модели и литературных экспериментальных данных.

Количественное согласие с теоретической моделью HSK и формулой Стокса–Эйнштейна в области их применимости.

Таким образом, обнаружено возникновение нового эффекта ускорения диффузии ионов определенных размеров. Данный эффект обобщен построением соответствующей теоретической модели и подтвержден как теоретически, так и с помощью молекулярной динамики, согласованной с экспериментом.

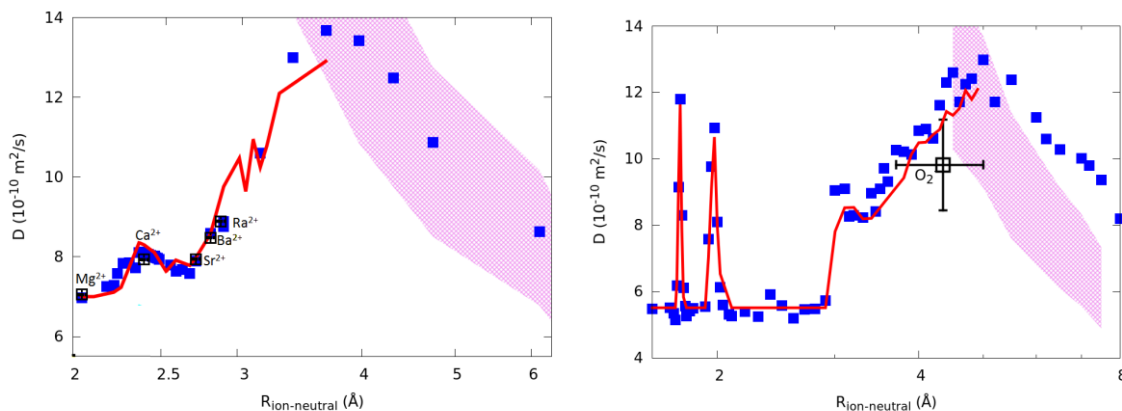


Рис. 1. Левый график – результаты для воды, правый – результаты для жидкого ксенона. Черные точки соответствуют экспериментальным данным [4, 5]

### Литература

1. Hubbard J. B., Onsager L. Dielectric dispersion and dielectric friction in electrolyte solutions. I. // J. Chem. Phys. 1977. V. 67. P. 4850
2. Kumar P., Varanasi S. R., Yashonath S. Relation between the diffusivity, viscosity, and ionic radius of LiCl in water, methanol, and ethylene glycol: A molecular dynamics simulation // J. Phys. Chem. B, 2013. V. 117. P. 8196–8208.
3. Ghorai P., Yashonath S., Lynden-Bell R.M. Size-dependent maximum in ion conductivity: The levitation effect provides an alternative explanation // J. Phys. Chem. B 2005. V. 109. P. 8120–8124.
4. Yuan-Hui L., Gregor S. Diffusion of ions in sea water and deep-sea sediments // Geochim. Cosmochim. Acta. 1974, V. 38. P. 703.
5. Hilt O., Schmidt F., Khrapak A. Ionic Mobilities in Liquid Xenon // IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 1994. V. 1. P. 648.

---

## Секция перспективных углеродных материалов и технологий

---

УДК 544.22.022.343

### NV-дефекты вблизи поверхности алмаза C(100) – (2×1)

*А.И. Рязанова<sup>1,2</sup>, О.В. Пономарев<sup>2</sup>, Н.А. Львова<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов

Комплексы «азот+вакансия» (NV-центры) занимают особое место среди многочисленных (более 100) оптических центров в алмазе [1]. В настоящее время NV-центры в алмазе привлекают огромный интерес в связи с возможным использованием этих дефектов в качестве элементарной ячейки квантового компьютера, работающей при комнатной температуре. Кроме того, комплексы азот-вакансия могут быть использованы для магнитных и электрических измерений в наномасштабе, а также медицине и биологии. Электронные и спиновые свойства заряженных NV-центров в нанокристаллах алмаза изучались полуэмпирическими, *ab initio* методами и в рамках теории функционала плотности (DFT) в работах [2, 3]. Обнаружено, что при расположении дефекта непосредственно на чистой поверхности (111) распределение спиновой плотности отличается от случая NV-центра в объеме нанокристалла.

В нашей недавней работе мы обнаружили, что наиболее устойчивым положением вакансии в приповерхностных слоях чистой поверхности C(100) – (2×1) является позиция дефекта в третьем слое непосредственно под димерным рядом верхнего слоя [4]. В связи с этим представляет практический интерес определить наиболее устойчивые конфигурации соответствующих комплексов «азот+вакансия». Представляемая работа посвящена детальному исследованию нейтральных и отрицательно заряженных NV-комплексов вблизи чистой и пассивированной водородом поверхности C(100) – (2×1) с помощью DFT (в пакете Firefly [5], частично основанном на исходном коде GAMESS [6]) и полуэмпирических методов, реализованных в программном пакете MORAC [7].

Известно, что около 30% от общего количества NV-центров в объеме алмаза находятся в нейтральном состоянии. Мы исследовали 19 различных комбинаций нейтральных комплексов «азот+вакансия» при вариации номеров слоев, содержащих точечные дефекты, а также конфигураций «под димерными рядами» (1) и «в междурядьях» (2). Основным отличием чистой поверхности от гидрированной является изменение состояния наиболее устойчивого дефекта. На чистой поверхности наименьшей энергией обладает такой дефект, когда азот находится в четвертом слое, а вакансия в третьем слое под димерным рядом. На гидрированной поверхности самым устойчивым дефектом становится NV-комплекс, находящийся непосредственно в верхних двух слоях: азот во втором слое, вакансия в первом (рис. 1).

Как и в случае одиночной вакансии в третьем слое, поверхностные атомы гексагона C1-C6 объединены общими многоцентровыми гибридными *sp*-орбиталями. Таким образом, можно сделать предположение, что формирование гексагональной структуры приводит к стабилизации структуры NV-центра в приповерхностных слоях. Покрытие поверхности водородом приводит к разрушению  $\pi$ -сопряжения гексагона. Вследствие этих изменений самым устойчивым становится другой комплекс.

Далее мы исследовали те же комбинации точечных дефектов в отрицательно заряженном триплетном состоянии. Как и для нейтральных дефектов, гидрирование поверхности приводит к изменению положения отрицательных NV-комплексов на энергетической шкале. Кроме того, водород на поверхности оказывает стабилизирующее действие на рассматриваемые комплексы. Интересно, что комплекс, в котором азот

находится в четвертом слое, а вакансия – в третьем под димерным рядом, является наиболее стабильным как на чистой, так и на гидрированной поверхности.

Наличие отрицательного заряда вносит небольшие изменения в порядки связей и межатомные расстояния для комплекса на чистой поверхности по сравнению с нейтральным комплексом. Гексагон сохраняет  $\pi$ -сопряжение, состоящее из многоцентровых гибридных орбиталей. В отличие от нейтрального комплекса на гидрированной поверхности, димерная связь сохраняется, однако порядок связи уменьшается. Сохранение димерной связи и многоцентровых орбиталей является причиной устойчивости того же комплекса на гидрированной поверхности, что и на чистой.

Далее мы провели расчеты в рамках DFT с использованием кластеров  $C_{65}H_{54}N$  и  $C_{65}H_{60}N$ , моделирующих чистую и гидрированную поверхность  $C(100) - (2 \times 1)$ , соответственно. Мы исследовали конфигурацию NV-комплекса, определенную как наиболее устойчивую. Основная спиновая плотность для случая NV-комплекса на чистой поверхности равномерно распределена между атомом четвертого слоя, ближайшего к вакансии, и атомами соседнего димера.

Появление водорода на поверхности  $C(100)$  приводит к перемещению спиновой плотности от атомов димеров первого слоя к атомам углерода второго слоя, ближайших к вакансии (рис. 2). Таким образом, спиновые свойства NV-комплекса на чистой и гидрированной поверхности подобны свойствам дефекта в объеме алмаза, где плотность сосредоточена на трех атомах углерода, окружающих вакансию.

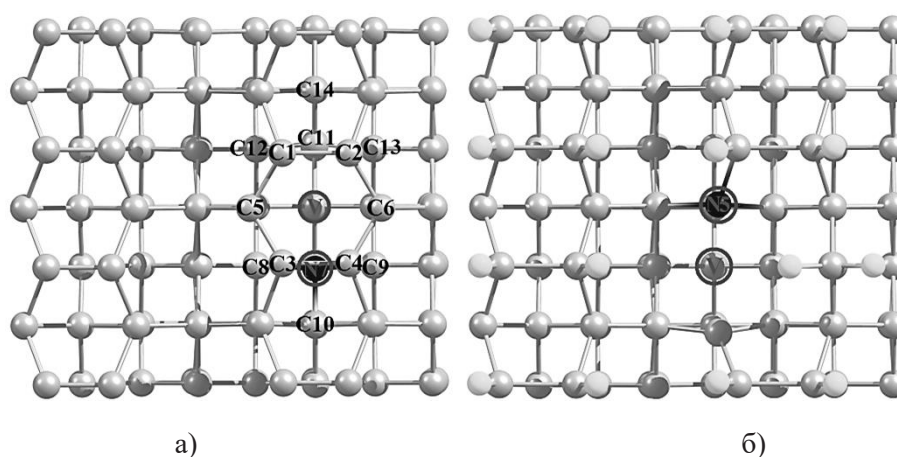


Рис. 1. Наиболее устойчивые  $NV^0$ -комплексы: чистая поверхность, азот находится в четвертом слое, вакансия – в третьем под димерным рядом а); и гидрированная поверхность, азот во втором слое, вакансия – в первом б)



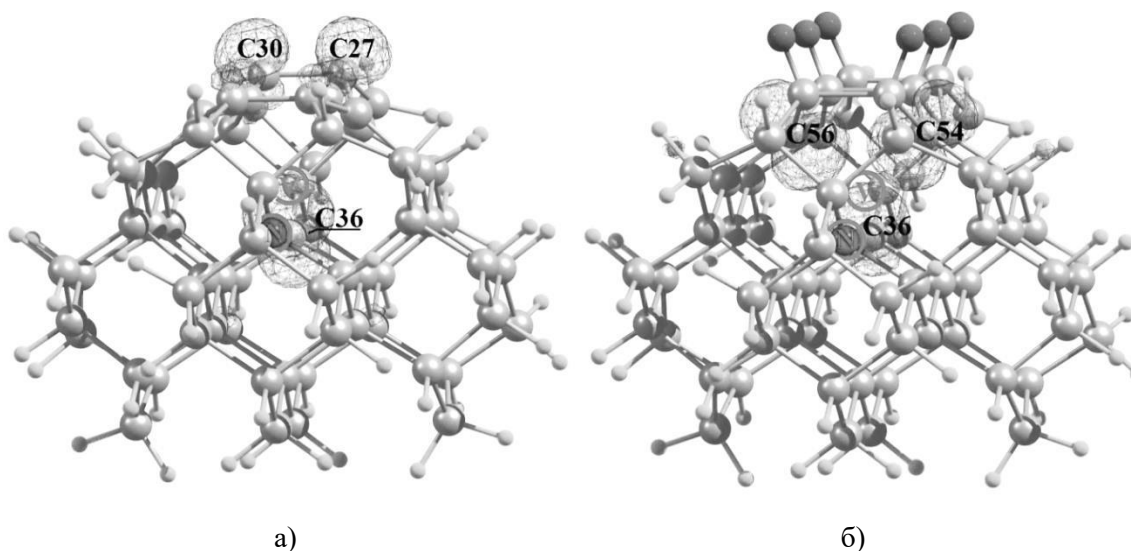


Рис. 2. Распределение спиновой плотности для отрицательно заряженного NV-комплекса: на чистой поверхности а); на гидрированной поверхности б)

### Литература

1. *Jelesko F., Wrachtrup J.* Single defect centres in diamond: A review // *Phys. Stat. Sol.(a)* 2006. V. 203. P. 3207–3225.
2. *Pushkarchuk V.A., Kilin S.Ya., Nizovtsev A.P., Pushkarchuk A.L., Borisenko V.E., von Borczyskowski C., Filonov A.B.* Ab Initio Modeling of the Electronic and Spin Properties of the [NV]<sup>-</sup> Centers in Diamond Nanocrystals // *Opt. Spectrosc.* 2005. V. 99. P. 245–256.
3. *Pushkarchuk V.A., Kilin S.Ya., Nizovtsev A.P., Borisenko V.E., Filonov A.B., Pushkarchuk A.L., Kuten S.A.* Quantum-Chemical Modeling of Structural, Electronic, and Spin Characteristics of NV Centers in Nanostructured Diamond: Surface Effect // *Opt. Spectrosc.* 2010. V. 108 P. 247–253.
4. *Lvova N.A., Ponomarev O.V., Ryazanova A.I.* Vacancies in the C(100)-(2×1) diamond surface layers// *Comp. Mater. Sci.* 2017. V. 131. P. 301-307.
5. *Granovsky A.A.*, Firefly version 8.1.1, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
6. *Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A.* General atomic and molecular electronic structure system// *J. Comput. Chem.* 1993. V. 14. P. 1347-1363.
7. MOPAC2016, [HTTP://OpenMOPAC.net/](http://OpenMOPAC.net/), Version 16.158W, J.J.P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA.

УДК 531.7.08

### Измерение профилей криволинейных поверхностей с использованием нанотвердомера, работающего в режиме контурографа

*Е.В. Гладких<sup>1,2</sup>, И.И. Масленников<sup>2</sup>, А.С. Усеинов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов

Контроль геометрической формы различных деталей и механизмов играет важную роль во многих областях техники. Разработанные ранее аналитические методы, основанные на построении компьютерных моделей, позволяют предварительно проанализировать отклонение рельефа сложной поверхности от заданной геометрии, возникающее в процессе эксплуатации изделий [1]. Однако экспериментальная проверка точности изготовления изделий остается не менее важным этапом при производстве и эксплуатации изделий. Среди применяемого на практике измерительного оборудования можно выделить два



кардинально различающихся по принципу работы класса приборов: контактные и бесконтактные. Последние для регистрации рельефа поверхности используют оптические методы [2]. Из установок, работающих в контактном режиме, наиболее широко распространены контурографы – приборы, измеряющие радиусы дуг, координаты точек, расстояния и углы посредством ошупывания специальным зондом поверхности образца. Их неоспоримым преимуществом является скорость работы и, кроме того, возможность проведения испытаний формы тел вращения вдоль нескольких направлений (в большинстве моделей предусмотрено вращение измерительного модуля, на котором закреплен щуп) [3].

Практически в любой отрасли приветствуется применение оборудования, способного решать несколько разноплановых задач. Так, совмещение в едином измерительном комплексе методов профилирования и измерения механических свойств оказывается востребовано. В данной работе была апробирована методика получения при помощи нанотвердомера профилей деталей, имеющих криволинейную поверхность с перепадом высот до 10 см. Измерение геометрических характеристик было проведено прибором, работающим в полуконтактном режиме профилирования, в котором происходит регистрация сдвига фаз между силой и возбуждаемыми ею колебаниями. Ключевым преимуществом полуконтактного режима является то, что сила прижима зонда к поверхности оказывается значительно меньше, чем в контактном режиме, что приводит, в свою очередь, к менее значительной модификации поверхности образца.

В представленном исследовании измерение профилей проводилось при помощи сканирующего нанотвердомера «НаноСкан-4D», резонансная частота системы подвеса индентора которого составляла 80 Гц, масса подвижной части – 30 г и жесткость системы подвеса – 7 кН/м. Добротность системы подвеса индентора  $Q$  при этом равнялась 30. Минимальное регистрируемое смещение составляло 0,1 нм, а порог обнаружения по силе в полосе частот 0,1 Гц, –1 кГц и –1 мкН. Реализованный в данном сканирующем нанотвердомере динамический метод контроля контакта зондирующего острия с поверхностью позволил на порядок уменьшить уровень среднего значения силы взаимодействия острия с поверхностью за счет использования резонансного режима возбуждения сенсорной системы подвеса [4].

Тестовыми объектами для проведения измерения профилей при помощи нанотвердомера стали пресс-формы, которые используются для выращивания синтетических монокристаллов алмаза в камере высокого давления в процессе НРНТ-роста. Пресс-формы имеют достаточно сложную геометрию с криволинейными поверхностями. Углубления, имеющиеся в формах, должны мало отклоняться от заданных размеров, а также формы в целом должны быть симметричны, что требуется для равномерного распределения прикладываемого прессом усилия.

На рис. 1 показаны профили поверхности пресс-формы, полученные при помощи прибора «НаноСкан-4D» (амплитуда колебаний зондирующего острия составляла 100 нм, уровень силы взаимодействия был менее 1 мкН) и «Контурографа модели 220», использованном для сравнения данных о рельефе. Проведенные измерения позволили получить информацию о контуре детали и ее отклонении от формы, заданной чертежами.

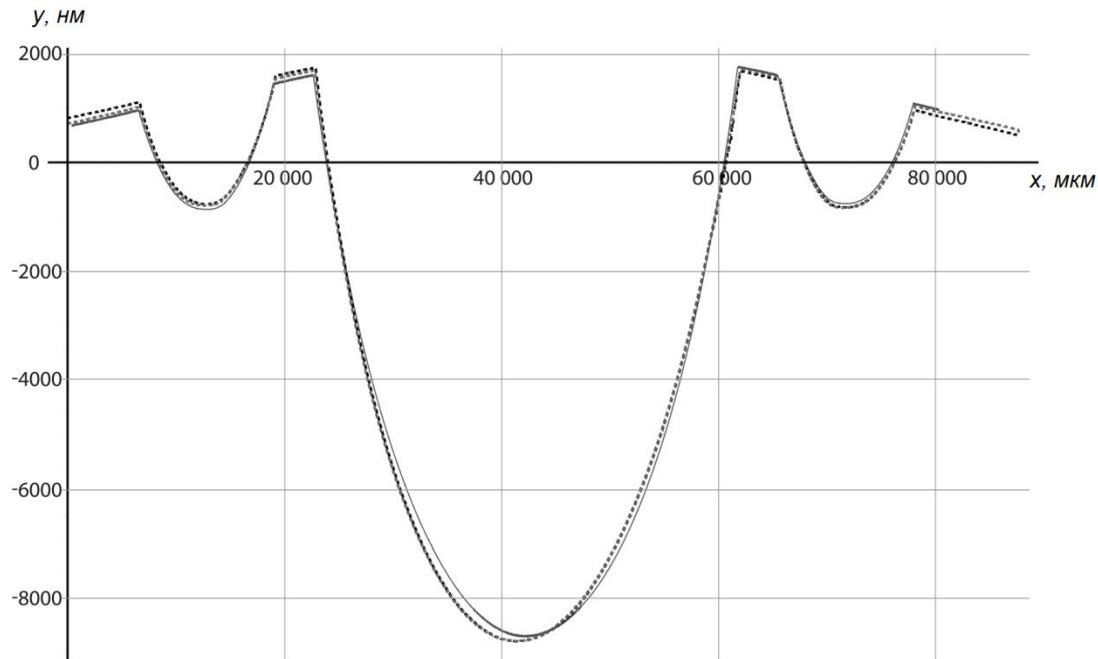


Рис. 1. Изображение профилей поверхности пресс-формы. Сплошной линией показан профиль, полученный на приборе «НаноСкан-4D», пунктирными линиями показаны профили, полученные на «Контурографе модели 220»

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках соглашения № 14.577.21.0274 (уникальный идентификатор проекта RFMEFI57717X0274).

#### Литература

1. Tsay D., Tseng K., Chen H. A Procedure for Measuring Planar Cam Profiles and Their Follower Motions // J. Manuf. Sci. Eng. 2006. V. 128. P. 697–704.
2. Chumbley L.S., Eisenmann D.J. Use of a scanning optical profilometer for toolmark characterization // Scanning Microsc. 2009. V. 7378.
3. Chang W. [et al.]. Inspecting profile errors of conjugate disk cams with coordinate measurement // J. Manuf. Sci. Eng. 2008. V. 130.
4. Масленников И.И., Решетов В.Н., Логинов Б.А., Усеинов А.С. Картографирование механических свойств наноструктурированных материалов с помощью пьезорезонансного зонда // Приборы и техника эксперимента. 2015. № 2. С. 1–7.

УДК 667.6

### Исследование влияния одностенных углеродных нанотрубок на защитные свойства антикоррозионных лакокрасочных материалов

Е.Э. Павлушкова

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Лакокрасочные материалы являются одним из самых распространенных методов борьбы с коррозией. Основные требования к лакокрасочным материалам – это адгезионная прочность, твердость и коррозионная стойкость. Поскольку данные характеристики определяют возможный срок эксплуатации покрытия, то существует необходимость их улучшения. Также на рынке лакокрасочных материалов наблюдается тенденция снижения цинкового пигмента в составе грунтовочных материалов. Это обусловлено недостаточной

барьерной защитой и высокой дефектностью поверхности в покрытиях данного типа, которые вызваны высоким (свыше 80% масс.) пигментным наполнением [1].

Исследованы способы введения одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) в состав лакокрасочных систем, изучено влияние ОУНТ на твердость, адгезионную прочность и коррозионную устойчивость в трех различных модельных системах антикоррозионного покрытия на основе эпоксидной, акриловой и поливинилхлоридной смол. В качестве антикоррозионного агента выступали фосфат цинка и цинковый порошок. Определены зависимости изменения исследуемых характеристик от концентрации ОУНТ в составе систем. Предложены гипотезы, объясняющие механизм повышения адгезии, твердости и коррозионной прочности лакокрасочных материалов в присутствии одностенных углеродных нанотрубок.

Показано, что оптимальной окружной скоростью замешивания концентратов на основе одностенных углеродных нанотрубок в состав полимерной матрицы на диссольвере является интервал от 5 до 15 м/с, обеспечивающей равномерное распределение ОУНТ без существенного изменения структуры углеродной структуры. С возрастанием окружной скорости фрезы диссольвера в процессе замешивания ОУНТ в полимерный материал соотношение G и D мод в спектре снижается, что свидетельствует о переходе атомов углерода из состояния sp<sup>2</sup> гибридизации в sp<sup>3</sup>, что говорит о повышении дефектности структуры ОУНТ [2].

Добавление одностенных углеродных нанотрубок в системе на основе эпоксидной, акриловой и поливинилхлоридной смол повышает адгезионную прочность. Во всех исследованных образцах наилучший результат наблюдался на концентрации 0,1 масс. % и составил прирост в 65%, 78%, 42% и 61% в эпоксидной цинконаполненной, цинкосодержащей, акриловой и поливинилхлоридной системах соответственно по сравнению с контрольными образцами. Наибольший скачок наблюдается в цинконаполненной грунтовке, где при введении 0,1 масс. % адгезионная прочность повысилась с 35,3 кПа до 62,8 кПа.

Одностенные углеродные нанотрубки в концентрации 0,1 масс. % повышают твердость цинконаполненной, цинкосодержащей и поливинилхлоридной систем на 34%, 25% и 100% соответственно. В случае системы на основе акриловой смолы твердость покрытия повысилась с 0 до 4 МПа при добавлении 0,1 масс. % ОУНТ.

### Литература

1. *Yunovich M., Thompson N. G.* Corrosion of highway bridges: Economic impact and control methodologies // *Concrete International*. 2003. Т. 25. N. 1. P. 52–57.
2. *Dresselhaus M. S. [et al.]*. Raman spectroscopy of carbon nanotubes // *Physics reports*. 2005. Т. 409. N 2. P. 47–99.

УДК 548.313.3

### Исследование пьезоэлектрических свойств и фазового превращения в системе твёрдых растворов $AlN-Al_1-xSc_xN-ScN$

*С.А. Бондаренко<sup>1</sup>, Б.П. Сорокин<sup>2</sup>, П.Б. Сорокин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ФГБНУ «Институт полиомиелита и вирусных энцефалитов имени М.П. Чумакова»

Твёрдый раствор замещения  $Al_{1-x}Sc_xN$  (ASN), как и AlN, обладает структурой вюрцита R63m, однако область её существования ограничивается значениями  $x < 0.58$ . При дальнейшем увеличении содержания Sc возникает сосуществование двух фаз: гексагональной пьезоэлектрической типа вюрцита для ASN и centrosymmetric кубической типа  $Fm\bar{3}m$  для ScN. При соотношении Al:Sc = 57:43 пьезомодуль  $d_{33}$  достигает максимума, превышая аналогичное значение для чистого нитрида алюминия более чем в 4 раза [1].

Существующие экспериментальные данные не позволяют однозначно определить атомную структуру раствора вблизи значения  $x = 0.43$ , что затрудняет понимание поведения пьезоэлектрических свойств материала в этой области концентраций. Также не ясна природа значительного увеличения  $d_{33}$ . Таким образом, важным для решения данной задачи является проведение теоретического анализа атомной геометрии  $Al_{1-x}Sc_xN$  в широком диапазоне  $x$ , уделяя особое внимание области концентраций вблизи  $x = 0.43$ .

Для выяснения физико-химической природы трансформации вюрцитной структуры  $Al_{1-x}Sc_xN$  в кубическую ScN нами было выполнено *ab initio* исследование с помощью метода DFT, реализованного в программном пакете VASP.

Была построена атомная геометрия структуры  $Al_{1-x}Sc_xN$  для предельных случаев концентраций  $x = 0$  (кристалл AlN),  $x = 1$  (кристалл ScN). Найдены наиболее устойчивые фазы кристаллов (фаза вюрцита и каменной соли соответственно), согласующиеся с литературными данными, после чего сконструированы сверхъядейки, эмулирующие произвольное расположение атомов в растворе для диапазона  $0 < x < 1$ . Получена критическая величина  $x$  перехода из вюрцитной в кубическую фазу, согласующаяся с экспериментом. Описана атомная структура раствора в этой области концентраций. Был произведен расчет пьезоэлектрических модулей и также получена их зависимость от концентрации  $x$ , согласующаяся с литературными данными. Получено, что пьезоэлектрические постоянные Al–Sc–N существенно увеличиваются из-за падения соответствующих величин.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (проект №16-12-10293).

### Литература

1. Teshigahara A., Hashimoto K., Akiyama M. Scandium aluminum nitride: Highly piezoelectric thin film for RF SAW devices in multi GHz range // Ultrasonics Symposium (IUS), 2012 IEEE International. IEEE, 2012. P. 1–5.

УДК 546.26, 621.382

### Очистка углеродных нанотрубок газо- и жидкофазными методами

*Е.А. Агеева<sup>1,2</sup>, И.Г. Соломоник<sup>2</sup>, Е.А. Жукова<sup>2</sup>, А.Р. Караева<sup>2</sup>, В.З. Мордкович<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают превосходными свойствами, такими как высокая прочность на разрыв, высокие показатели тепло- и электропроводности [1, 2]. Предлагается множество применений, включая композиционные материалы, покрытия и пленки, микроэлектронику. Однако широкому практическому применению УНТ препятствует присутствие примесей в получаемом углеродном материале, в особенности частиц металлов-катализаторов.

Существует [3] большое количество различных способов очистки УНТ от примесей. В данной работе были выбраны и применены такие методы очистки УНТ, как термическая обработка на воздухе при температурах 380–440 °С, СВЧ-облучение при постоянной частоте 2,45 ГГц, жидкофазное (ЖФ) окисление различными кислотами – азотной, соляной, «царской водкой», а также газофазное (ГФ) окисление хлором.

Объектом исследования являлись мало- и многослойные УНТ с диаметром в пределах от 2 до 30 нм с содержанием железа 37,8% масс. УНТ были синтезированы из смеси углеродсодержащего сырья – этанола и тиофена в присутствии железоорганического катализатора при температуре 1150 °С методом химического осаждения из газовой фазы.

Результаты исследований методами ТГА, СЭМ и ПЭМ показали следующее. В диапазоне температур 350 – 450°С такие примеси, как аморфный углерод и наночастицы графита выгорают, количество дефектов на поверхности УНТ существенно уменьшается. Очевидно, вследствие термической обработки, поверхность УНТ очищается и

сглаживается, а частицы металла становятся легкодоступными. СВЧ-облучение приводит к образованию агломератов железосодержащих частиц, которые сложно удалить. Химическая же обработка в кислотах с предварительной термической обработкой на воздухе приводит к существенному снижению содержания железа в 2–5 раз (до 1,7–4,2% масс.) и очищению поверхности УНТ.

Выявлено, что наиболее эффективными способами ЖФ очистки УНТ являются химическая обработка в 37-процентной соляной кислоте без кипячения в течение трех суток, а также химическая обработка с кипячением в течение трех часов, сначала в 65-процентной азотной кислоте, а затем 37-процентной соляной кислоте. При этом содержание железных частиц уменьшается до 4% масс.

Тем не менее ЖФ-очистка приводит к изменению внешнего вида образца УНТ, образец становится более ломким и теряет свою липучесть. Чтобы избежать такие изменения, был применен метод ГФ-хлорирования [4, 5]. Эксперименты были проведены на лабораторной установке ГФ хлорирования, блок-схема которого представлена на рис. 1, в диапазоне температур от 450 до 950 °С с парциальным давлением хлора 84 Торр, продолжительность хлорирования от 3 до 12 ч.

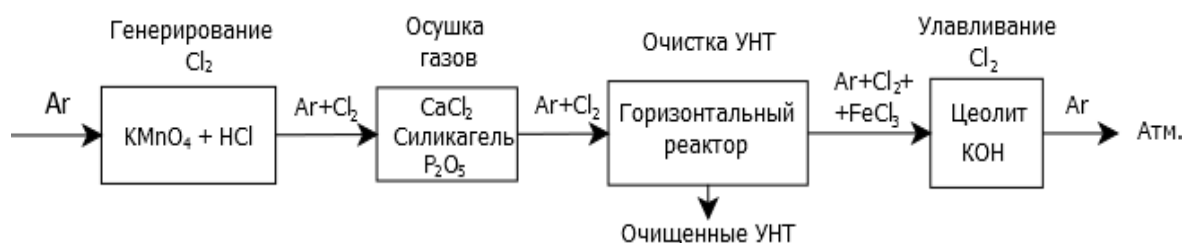


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки ГФ-хлорирования образца УНТ

Эксперименты показали, что очищенный ГФ-методом образец УНТ сохраняет свой внешний вид в отличие от очищенного ЖФ-методом. После ГФ-хлорирования, в условиях 790–822 °С и продолжительности окисления 3–12 ч, происходит существенное снижение содержания остаточного железа с 35 до 5,5% масс. При более низких температурах ГФ-хлорирования образовавшийся хлорид железа удаляется неэффективно (снижение содержания железа с 35 до 20% масс.), а при более высоких – происходит газификация самих УНТ.

Установлено, что увеличение времени ГФ-хлорирования с 3 ч до 12 ч при различных температурах не приводит к определенному уменьшению (или увеличению) остаточного содержания железа. Таким образом, оптимальное время хлорирования не превышает 3 ч.

Проведенные эксперименты с предварительно термически обработанными на воздухе образцами УНТ с последующим ГФ-хлорированием показали наилучший результат по чистоте УНТ и содержанию частиц железа (до 0,5% масс.), но при этом потеря массы образца оказалась значительно высокой (97% вес.).

В настоящее время экспериментальные работы ГФ-методом очистки продолжаются в других условиях, а также в комбинации с различными методами очистки.

### Литература

1. *Baughman R.H., Zakhidov A.A., Heer W.A.* Carbon Nanotubes the Route Toward Applications // Science 2002. V. 297, N, 5582. P. 787–792.
2. *Endo M., Strano M.S., Ajayan P.M.* Potential applications of carbon nanotubes // Topics in Applied Physics. 2008. V. 111. P. 13–62.
2. *Раков Э.Г.* Методы получения углеродных трубок // Успехи химии. 2000. №. 69. Т. 1. С. 35–52.
3. *Harutyunyan A.R., Pradhan B.K., Chang J. [et al.]*. Purification of single-wall carbon nanotubes by selective microwave heating of catalyst particles // Journal of Physical Chemistry B. 2002. V. 106. P. 8671–8675.



4. Gomez V., Irusta S., Lawal O.B. [et al.]. Enhanced purification of carbon nanotubes by microwave and chlorine cleaning procedures // RSC Advances. 2016. V. 6. P. 11895–11902.

УДК 543.428

### Структурные изменения оксида графена в процессе отжига

**В.П. Афанасьев<sup>1</sup>, Г.С. Бочаров<sup>1</sup>, А.С. Грязев<sup>1,2</sup>, А.В. Елецкий<sup>1</sup>, П.С. Капля,  
О.Ю. Ридзель<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «МЭИ»

<sup>2</sup>АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. академика А.А. Бочвара»

<sup>3</sup>Vienna University of Technology, Institute of Applied Physics

В настоящее время графен является одним из самых перспективных материалов и находит применение в современных технологических областях, таких, как нанoeлектроника, биотехнологии и т.д. Актуальной технологической задачей является получение графена в достаточных количествах. Для создания технологии получения графена необходимо иметь методики анализа, способные однозначно определить аллотропный вид получаемого углеродного материала.

Энергетические спектры как отраженных от углеродных образцов электронов (ХПЭ), так и энергетические спектры фотоэлектронной эмиссии (РФЭС) позволяют определить как аллотропные виды углерода [1], так и число слоев в многослойном графене [2]. Однозначную характеристику данного аллотропного вида углерода дают сечения неупругого рассеяния электронов  $x_{in}(\Delta)$ , отысканию которых посвящена настоящая работа. Единственным методом последовательного восстановления величин  $x_{in}(\Delta)$  является процедура подбора, основанная на многократном решении прямой задачи, для решения которой необходима модель формирования спектров РФЭС [3].

В качестве исходного материала использовался оксид графена, полученный методом Хаммерса [4]. Термическая обработка образцов оксида графена в интервале 100–1000 °С проводилась в высокотемпературной печи установки PlanarGROW-2S. Измерение энергетических спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии выполнялось на установке – KratosAxisUltraDLD. Спектры потерь энергии, примыкающие к пику  $C_{1s}$ , измерялись в интервале 60 эВ и представлены на рис. 1а.

Дифференциальную по энергии и углам плотность потока фотоэлектронов  $Q(E, \Omega_0 \rightarrow \Omega)$  будем искать, используя представление парциальных интенсивностей. Решение граничной задачи с внутренними источниками (каковыми являются атомы мишени, перешедшие в возбужденное состояние под действием рентгеновского излучения) получено методом инвариантного погружения.

Полученные дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов (в приповерхностных слоях мишени –S, в однородном массиве, удалённом от поверхности –В; рис. 1б) не совпадают с сечениями графена.

Одним из результатов является совпадение по многим параметрам сечений  $x_{in}(\Delta)$  графита и оксида графена, отожженного при температуре, превышающей 600 °С. Комбинационные спектры оксида графена, отожжённого при температуре 1000 °С, и комбинационные спектры графита показали заметные отличия [5]. Проведенный анализ показывает, что получен материал, обладающий электронными свойствами графита, но имеющим значительно более низкую плотность. Результаты РФЭС-анализа и спектры комбинационного рассеяния указывают, что материал представляет собой пористую структуру, состоящую из фрагментов, размеры которых не превышают нескольких тысяч ангстрем.

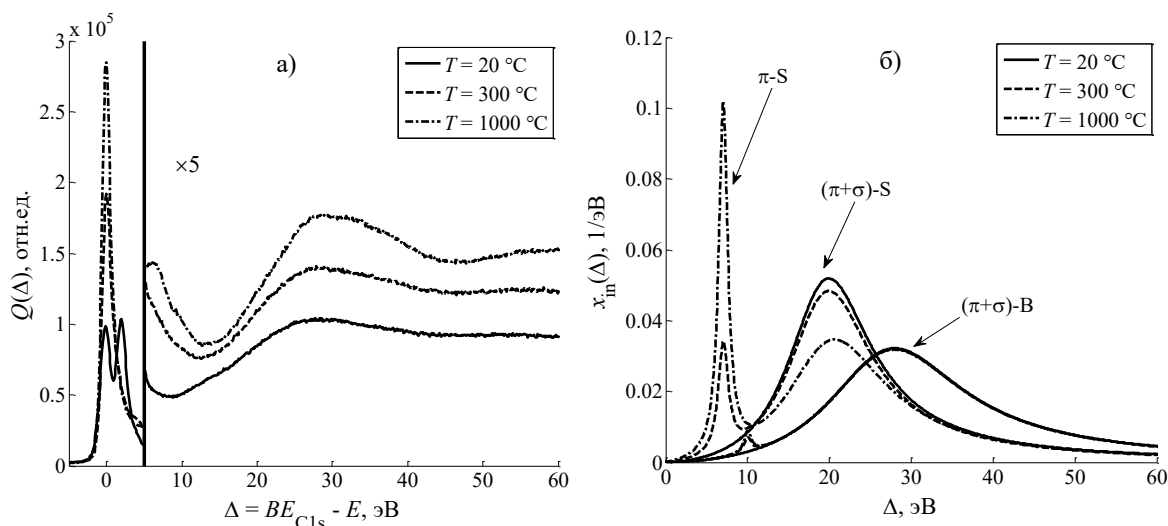


Рис. 1. Спектр рентгеновской фотоэлектронной эмиссии линии C1s (а) и восстановленные дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов (б)

Работа выполнена в рамках Госзадания №3.1414.2017/ПЧ и Госзадания №3.7131.2017/ВУ.

### Литература

1. Pauly N., Novák M., Tougaard S. Surface excitation parameter for allotropic forms of carbon // Surf. Interface Anal. 2013. V. 45. P. 811.
2. Eberlein T., Bangert U., Nair R.R., Jones R., Gass M., Bielech A.L., Novoselov K.S., Geim A., Briddon P.R. Plasmon spectroscopy of free-standing graphene films // Phys. Rev. B. V. 77. P. 233406.
3. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Differential inverse inelastic mean free path and differential surface excitation probability retrieval from electron energy loss spectra // Vacuum. 2017. V. 136. P. 146.
4. Hummers W.S., Offeman R.E. Preparation of Graphitic Oxide // J. Am. Chem. Soc. V. 80. P. 1339.
5. Ganguly A., Sharma S., Papakonstantinou P., Hamilton J. Probing the thermal deoxygenation of graphene oxide using high-resolution in situ X-ray-based spectroscopies // J. Phys. Chem. C. 2011. V. 115. P. 17009.



УДК 538.913

**Анализ фазового перехода в расплаве чистого металла методом корреляционных функций высоких порядков****Г.Э. Норман<sup>1,2,3</sup>, В.В. Писарев<sup>1,2,3</sup>, Д. Ю. Флейта<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН<sup>3</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Алюминиевый сплав является одним из веществ, которые широко используются в качестве конструкционных материалов. Но также известно, что аморфный сплав является более прочным видом вещества, чем поликристаллическая заготовка без обработки поверхности. В данной работе обсуждаются результаты анализа метода [1] пространственных корреляционных функций применительно к процессу охлаждения стеклообразующей жидкости из чистого алюминия, в окрестности фазовой точки перехода из жидкого состояния в твердое. Мы определяем различные корреляционные функции [2], которые количественно оценивают пространственную корреляцию движения частиц жидкости и в аморфных системах. Кроме того, мы анализируем различия между моделями [3], вырабатываем другой критерий температуры фазового перехода. Переохлажденные жидкости могут остекловываться, если можно избежать кристаллизации в таких условиях, как быстрое охлаждение или смешение расплава с другим крупнозернистым материалом. Поэтому мы исследовали, как ведет себя расплав после ультрабыстрого охлаждения в переохлажденной области.

Исследованию проблемы поиска различий в динамике переохлажденного и нормального расплава и посвящена настоящая работа. Работа включает, с одной стороны, построение динамики различных систем атомов в различных условиях с помощью молекулярной динамики, а также расчет семейства различных двухчастичных корреляторов. При расчетах использовался потенциал типа «погруженного атома» (EAM) для системы 13824 атомов алюминия с периодическими граничными условиями. При моделировании процесса поддерживалось состояние микроканонического ансамбля.

В процессе работы получено различие между некоторыми корреляторами. Однако в целом переохлажденные жидкости имеют, как правило, аналогичную динамику движения атомов. Расчеты смещения молекул могут быть использованы для получения коэффициентов диффузии, и найдена особенность в поведении одного из корреляторов.

**Литература**

1. *Voloshin V.P., Naberukhin Y.I.* // J. Struct. Chem. 2013. V. 54. P. 233–51.
2. *Kolotova L.N., Norman G.E., Pisarev V.V.* // J. Non-Cryst. Solids 42998–103.
3. *Poole P.H., Donati C.* // Physica A. 1998. V. 261. P. 51–59.

УДК 538.911, 544.344.015.4, 539.2

## Атомистическое моделирование фазовых и структурных превращений в сплаве U–Mo под действием радиационных и термических воздействий

*Л.Н. Колотова*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный Институт Высоких Температур РАН

Несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических исследований по фазовой диаграмме, структуре и кинетике фазовых переходов в системе уран–молибден, выполненных в 50-х – 70-х годах [1, 2] интерес к исследованию свойств металлических топлив и оптимизации дизайна топливных структур (например, дисперсное топливо) сохраняется. Во многом он поддерживается стремлением к переходу на низкообогащенное плотное топливо для исследовательских реакторов.

Данная работа посвящена теоретическому анализу явлений, происходящих в материале ядерного топлива в условиях эксплуатации, а именно изучению фазовых переходов между различными метастабильными состояниями. Эти процессы определяют стабильность изотропной кубической фазы (твердый раствор Mo в ОЦК фазе урана в метастабильном состоянии), обеспечивающей приемлемое распухание материала топлива при наработке газовых продуктов деления, и, как следствие, допустимые режимы фабрикации или эксплуатации топлива. Проводится исследование механизмов фазовых превращений. Кроме того, в работе исследованы превращения между различными однородными ОЦК-подобными фазами сплава.

Показано, что при небольших концентрациях молибдена более стабильной является фаза, обладающая тетрагональной решеткой. Данную структуру можно характеризовать как близкую к объемноцентрированной решетке с небольшим смещением центрального атома из центра базисной ячейки. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными и подтверждают анизотропию решетки при малых концентрациях молибдена. Обнаружено, что анизотропия является следствием локального расположения атомов урана в структуре сплава U–Mo.

Также в работе рассматриваются процессы генерации дефектов и структурных превращений при облучении. Рассчитаны пороговые энерговклады быстрых ионов, облучение которыми приводит к формированию дефектов в различных условиях. Показано, что образование дефектов может происходить без плавления и последующей кристаллизации системы.

### Литература

1. *Konobeevskii S.T. [et al.]*. An investigation of structural changes caused by neutron irradiation of a uranium molybdenum alloy // *J. Nuclear Materials. Journal of Nuclear Energy. Part B. Reactor Technology*. 1959. V. 9. P. 75–89.
2. *Howlett B.W.* A study of the shear transformations from the gamma-phase in uranium-molybdenum alloys containing 6.0–12.5 at % molybdenum // *J. Nucl. Mater.* 1970. V. 35. P. 278–292.

УДК 538.9

## Квантовое и классическое моделирование образования и распада химических связей в конденсированном NiAl при различных условиях

*Э.С. Карчевская<sup>1,2</sup>, Д.В. Минаков<sup>1,2</sup>, П.Р. Левашов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Высокоплотные реактивные материалы (ВПРМ) представляют собой класс композитов, в которых может происходить экзотермическая реакция при механическом

или термическом воздействии. Преимуществом данных материалов является быстрое взаимодействие и высокая температура реакции без значительного увеличения объема и образования газовых продуктов. Такие характеристики делают ВПРМ перспективными кандидатами для приложений, где требуются сильные, локализованные источники тепла, в том числе в качестве экологически чистых детонаторов, наноразмерных источников энергии для поражения биоагентов и точечного лечения, в тепловых батареях, для сварки и др. Система Ni–Al является важным подклассом ВПРМ. Реакционные процессы в многослойных системах Ni–Al стали предметом активных экспериментальных и теоретических исследований из-за их потенциала для прикладного использования как в военной, так и в гражданской промышленности, а также вследствие интересного химического и физического поведения материала во время реакции, включающего диффузию, нагрев, структурные изменения и фазовые переходы.

Атомистическое моделирование может предоставить подробную фундаментальную информацию о реакционных процессах. Реактивные системы Ni–Al изучаются в основном использованием эмпирических вычислительных моделей или методом классической молекулярной динамики (МД) с использованием межатомных потенциалов модели погружённого атома (ЕАМ). Эти расчеты показали наличие чрезвычайно сложного сочетания физических и химических процессов, происходящих одновременно.

Экспериментально было установлено, что сплав Ni–Al не является полностью случайным неупорядоченным состоянием, но имеет тенденцию к образованию локального структурного порядка. Это явление также широко изучается с использованием моделирования как классической, так и квантовой молекулярной динамики (КМД). Однако неопределенности по-прежнему сохраняются в теоретических моделях связи, структуры и термодинамики сплавов. Измерение коэффициента самодиффузии остается сложной задачей, поэтому в этом случае также может быть интересна МД-симуляция.

В то же время расчетные свойства жидких сплавов Ni–Al сильно зависят от выбранного межатомного потенциала при использовании метода классической МД.

В данной работе представлен анализ времени жизни химических связей в расплавах Ni–Al в зависимости от температуры и давления, а также приведено сравнение данного параметра для методов квантовой и классической молекулярной динамики. Метод КМД реализуется посредством вычислительного пакета VASP [1], основанного на методе функционала плотности, в рамках которого ионы подчиняются уравнениям движения Ньютона, а электроны считаются квантовыми частицами. Моделирование методом классической МД проводится с использованием пакета LAMMPS, взаимодействие между частицами описывается при помощи межатомного потенциала, в работе [2].

### Литература

1. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558.
2. Purja Pun G.P., Mishin Y. 2009 Phil. Mag. 89 3245.

УДК 536.71

### Квантово-статистический расчёт изоэнтроп разгрузки металлов при высоких плотностях энергии

*М.В. Морген<sup>1,2</sup>, М.А. Кадатский<sup>1,2</sup>, К.В. Хищенко<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Для теоретического описания физических процессов, происходящих в веществе, подвергающемся интенсивным силовым и тепловым нагрузкам, необходимо знание его уравнения состояния (УРС) в широком диапазоне давлений и температур [1].

УРС — фундаментальная характеристика вещества, связывающая между собой термодинамическую параметры системы (внутреннюю энергию, температуру, объём и давление), находящейся в состоянии равновесия. Наряду с экспериментальными данными по ударно-волновому сжатию, данные по изоэнтропическому расширению являются одним из основных источников информации об УРС металлов при высоких плотностях энергии, но экспериментальное получение таких данных с приемлемой точностью технически затруднительно. И для получения уравнений состояния металлов при рассматриваемых условиях успешно применяются различные квантово-статистические модели, использующие приближение самосогласованного атомного потенциала.

В настоящей работе производится квантово-статистический расчёт уравнений состояния металлов на основе комбинации модели Томаса–Ферми с поправками (ТФП) [2], которая описывает электронный вклад в термодинамику, и одной из трёх моделей для учёта ионного вклада. А именно, моделей идеального газа, однокомпонентной плазмы и заряженных твёрдых сфер [3]. Рассчитанные уравнения используются для построения изоэнтроп разгрузки металлов [1]. Произведено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными [1] и с результатами по другим моделям [3].

### Литература

1. *Al'tshuler L.V., Bushman A.V., Zhernokletov M.V., Zubarev V.N., Leont'ev A.A., Fortov V.E.* Unloading isentropes and the equation of state of metals at high energy densities // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 1980. V. 78. P. 741–760.
2. *Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В.* Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. // М.: ИПМ АН СССР, 1975.
3. *Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V.* Shock compressibility of iron calculated in the framework of quantum-statistical models with different ionic parts // *Journal of Physics: Conference Series.* 2016. V. 774. P. 012005.

УДК 544.3

### Методы и алгоритмы аппроксимации экспериментальных данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ в конденсированной фазе

*Н.М. Аристова<sup>1</sup>, Г.В. Белов<sup>1,2</sup>, М.А. Синева<sup>1</sup>, И.В. Морозов<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Разнообразные задачи, в том числе ключевые задачи физико-химических процессов в энергетике, технологии получения полупроводниковых материалов и элементов микроэлектроники, изучение процессов образования минералов и атмосфер планет и многие другие не могут быть решены без предварительных теоретических исследований, которые осуществляются посредством термодинамического моделирования. Для проведения таких исследований необходимы экспериментальное и теоретическое изучение термодинамических свойств все новых классов веществ, накопление получаемых данных с последующей систематизацией в справочных изданиях и базах данных. Важнейшим элементом термодинамической модели является информация о термодинамических свойствах индивидуальных веществ. Существует необходимость компактного представления большого массива термодинамических данных, полученных в результате экспериментальных исследований или компьютерного моделирования. Самой удобной формой хранения информации о термодинамических свойствах веществ являются представления термодинамических функций в виде коэффициентов аппроксимационных полиномов. Поэтому актуальной является проблема развития методов аппроксимации

термодинамических функций как более общих, так и специфичных для отдельных функций и классов веществ.

Значительный вклад в накопление термодинамических внесла информационно-справочная система ИВТАНТЕРМО [1]. На данный момент база содержит сведения о свойствах около 3500 веществ, образованных из 96 химических элементов. Для аппроксимации энтальпии и теплоемкости в базе данных ИВТАНТЕРМО используется метод Шомейта [2]. Он имеет приемлемую точность для экспериментальных данных на отрезках без фазовых переходов, достаточно чувствителен к выставлению погрешности экспериментальных данных, которую эксперт может посчитать нужным выставить вручную.

Для аппроксимации термодинамических свойств веществ в конденсированной фазе разработана программа с гибким пользовательским интерфейсом, которая позволяет пользователю самостоятельно выбирать интервалы разбиения и методы аппроксимации, сравнивать результаты и критически оценивать исходные данные.

Основные задачи, решаемые разработанной программой:

- 1) обработка первичных данных по экспериментально измеренным или полученным в результате компьютерного моделирования приращениям энтальпии и/или изобарной теплоемкости для веществ в конденсированном состоянии;
- 2) сохранение полученных в результате обработки рекомендуемых значений термодинамических функций в формате базы данных «ИВТАНТЕРМО-Онлайн»;
- 3) графическое представление термодинамических функций в зависимости от температуры для сопоставления расчетных и экспериментальных данных, вариации параметров, создания отчетов.

Обработка данных состоит из нескольких этапов, при этом выходные данные одного этапа являются входными данными для другого. Каждый из этапов обработки представлен в виде отдельной вкладки на главном окне графического интерфейса рассматриваемого приложения.

При помощи разработанной программы были рассчитаны свойства диоксида урана и получено уравнение теплоемкости кристаллического  $UO_2$  в интервале температур 298.15–313.0 К. Уточненные значения термодинамических функций (приведенная энергия Гиббса, приращения энтальпии, энтропия), рассчитанные с помощью этих уравнений, внесены в базу данных ИВТАНТЕРМО.

### Литература

1. *Gurvich L.V., Bergman G.A., Veys I.V.* Thermodynamic Properties of Individual Substances. V 4. Parts One, Two. Moscow, 1984.
2. *Shomate C. H.* High-Temperature Heat Contents of Magnesium Nitrate, Calcium Nitrate and Barium Nitrate // Journal of the American Chemical Society. 1944. V. 66. N. 6. P. 928–929.

УДК 544.45

### Подавление детонации в водородно-воздушных смесях

*Г.Ю. Бивол<sup>1,2</sup>, С.В. Головастов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

Динамика детонационной волны в газах, ее интенсивность и распад на ударную волну и фронт пламени существенно зависят от наличия акустически поглощающих элементов. Основными причинами подавления детонации, по-видимому, являются исчезновение поперечных волн, потери тепла в пористой среде и растяжение пламени [1].

Целью данной работы было изучение динамики фронта пламени и ударной волны в пористом канале с помощью теневой съемки, определение динамики пористого материала и влияние этой динамики на процесс распада детонации в смесях водорода с воздухом.



Распад детонации и распространение пламени в водородно-воздушной смеси были экспериментально исследованы в детонационной трубе прямоугольного сечения с твердыми стенками и двумя типами пористых покрытий. Были использованы два типа пористого покрытия: пенополиуретан с пористостью 95% и стальная шерсть с пористостью 99% и средним размером волокна 0.03 мм.

Распад детонационной волны на ударную волну и фронт пламени был изучен с помощью теневого прибора ИАБ-451 и искрового источника света с длительностью импульса 1 мкс. Динамика фронта пламени фиксировалась с помощью скоростной камеры «Видеоспринт» с кадровой частотой до 200 000 кадров в секунду. Представлены теневые снимки распада детонационной волны на ударную волну и фронт пламени. Распад наблюдался при использовании как при использовании пенополиуретана, так и при использовании стальной шерсти. Было выяснено, что расстояние между ударной волной и фронтом пламени увеличивается по мере движения волны вдоль пористой секции детонационной трубы.

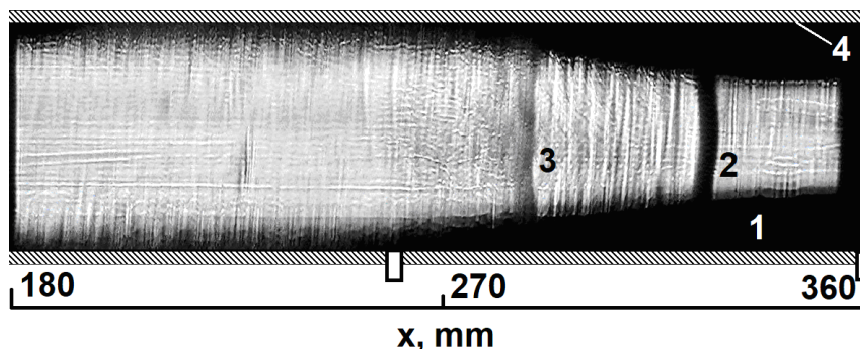


Рис. 1. Типичный снимок детонационной волны в секции, покрытой пенополиуретаном, 200 мкс после входа в пористую секцию. Расстояние от начала пористой секции показано в нижней части изображения. 1 – пенополиуретан, 2 – ударная волна, 3 – фронт пламени, 4 – стальная стенка. Волна распространяется слева направо

Была определена динамика фронта пламени в смесях с соотношением топлива и окислителя от 0.8 до 1.5 при использовании пенополиуретана и стальной шерсти на стенке. После вхождения детонационной волны в пористую секцию наблюдалось падение скорости фронта пламени до акустической скорости Чепмена–Жуге.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 16-38-00682 мол\_а.

### Литература

1. *Di Mare L., Mihalik T., Continillo G., Lee J.* Experimental and numerical study of flammability limits of gaseous mixtures in porous media // *Exp. Therm. Fluid Sci.* 2000. V. 21. P. 117.

УДК 536.71

### Теоретическое описание относительной сжимаемости алюминия и меди в сильных ударных волнах

*М.А. Кадатский<sup>1,2</sup>, К.В. Хищенко<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Для проведения численного моделирования различных теплофизических процессов, в частности, с помощью методов вычислительной гидродинамики, необходимо знание уравнения состояния (УРС) исследуемого вещества. УРС является фундаментальной характеристикой, связывающей между собой термодинамические



параметры систем, находящихся в состоянии термодинамического равновесия, а именно температуру, объём, давление, внутреннюю энергию и др.

Для построения УРС металлов в широком диапазоне температур и плотностей успешно применяются различные квантово-статистические модели, использующие приближение самосогласованного атомного потенциала. Выбор металлов как исследуемых веществ обусловлен тем, что в этих моделях не учитывается образование химических связей, а также тем, что согласованно описывается только электронная подсистема. Применение данных приближений тем более оправдано, чем выше температура и плотность вещества.

В настоящей работе производится квантово-статистический расчёт УРС алюминия и меди по моделям Томаса–Ферми с поправками (ТФП) и Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) [1]. Рассчитанные УРС используются для построения ударных адиабат этих веществ.

Построение ударных адиабат является удобным способом изучения УРС материалов различного типа, так как соотношение выражает термодинамические свойства вещества в форме простой кинематической зависимости  $D = f(U)$ , где  $U$  — массовая скорость вещества,  $D$  — волновая скорость. Кроме того, имеются экспериментальные данные по ударной сжимаемости ряда металлов в сильных ударных волнах, где температура и плотность достаточно велики для применения приближений квантово-статистического подхода.

Помимо рассчитанных ударных адиабат, в докладе приводится анализ результатов экспериментов по относительной сжимаемости алюминия и меди в сильных ударных волнах. В качестве эталонных веществ выбраны железо, молибден, свинец и кварц. Произведены расчеты зависимости волновой скорости в выбранных эталонных веществах от скорости ударной волны в алюминии и меди в диапазоне от 10 до 600 км/с.

### Литература

1. *Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B.* Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter: Methods for Computation Opacity and Equation of State. Basel: Birkhäuser Verlag, 2005. 428 с.

---



---

## Секция физики и химии плазмы

---



---

УДК 533.9.082.76

### Измерение электрического потенциала плазмы в омических режимах токамака Т-10 с помощью диагностики пучком тяжелых ионов

**Ф.О. Хабанов<sup>1,2</sup>, М.А. Драбинский<sup>1,2</sup>, Л.Г. Елисейев<sup>2</sup>, В.Н. Зенин<sup>1,2</sup>, А.В. Мельников<sup>2,3</sup>,  
Н.К. Харчев<sup>2</sup>, С.А. Грашин<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В работе представлены результаты измерений абсолютных значений электрического потенциала, а также их радиальных зависимостей в плазме токамака Т-10 с помощью зондирования пучком тяжелых ионов.

Зондирование пучком тяжелых ионов – уникальный метод диагностики термоядерной плазмы, основанный на инжекции в плазму перпендикулярно тороидальному магнитному полю пучка однозарядных ионов тяжелых металлов ( $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Pb}^+$ ,  $\text{Au}^+$  – первичный пучок) и регистрации в энергетическом анализаторе частиц этого пучка, испытавших ионизацию в плазме ( $\text{Cs}^{++}$ ,  $\text{Pb}^{++}$ ,  $\text{Au}^{++}$  – вторичный пучок) [1]. Электрический потенциал плазмы в зоне ионизации определяет разницу в энергиях первичного и вторичного пучка, полный ток вторичного пучка зависит от плотности электронов, а тороидальное смещение пучка связано с полоидальным магнитным полем [1, 2].

На токамаке Т-10 в омических режимах с  $B = 2,42$  Тл,  $I = 220$  кА и  $B = 1,7$  Тл,  $I = 200$  кА были измерены абсолютные значения электрического потенциала плазмы в различных областях плазменного шнура. В обоих режимах была исследована зависимость потенциала от плотности. В режиме  $B = 1,7$  Тл,  $I = 200$  кА при изменении плотности электронов от  $0,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$  до  $2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$  значения потенциала в области  $r \sim 10$  см изменялись от  $-300$  В до  $-800$  В; в режиме  $B = 2,42$  Тл,  $I = 220$  кА при изменении плотности от  $0,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$  до  $4 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$  значения потенциала в области  $r \sim 18$  см изменялись от  $-200$  В до  $-800$  В. Для измерений в горячей области шнура использовалось зондирование пучком тяжелых ионов [3], а на периферии – ленгмюровский зонд. Зондирование проводилось пучком однозарядных ионов  $\text{Pb}^+$  с энергией диагностического пучка от 115 до 210 кэВ в режиме  $B = 1,7$  Тл,  $I = 200$  кА и от 210 до 295 кэВ в режиме  $B = 2,42$  Тл,  $I = 220$  кА (большие энергии соответствуют более внутренним точкам измерений). Полный радиальный профиль потенциала был составлен из фрагментов, полученных при зондировании с разными энергиями. Положение точек наблюдения было получено путем расчета траекторий частиц зондирующего пучка в плазме.

Представленные результаты являются первыми измерениями электрического потенциала в плазме токамака Т-10 с вольфрамовым лимитером. В дальнейшем они будут использованы для изучения поведения радиального электрического поля.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 14-22-00193.

### Литература

1. *Jobes F.C. and Hickok R.L.* A direct measurement of plasma space potential // Nucl. Fusion, 1970. V. 10. P. 195–197.
2. *Dnestrovskij Yu.N., Melnikov A.V., Krupnik L.I. and Nedzelskij I.S.* Development of Heavy Ion Beam Probe Diagnostics // IEEE Trans. Plasma Sci. 1994. V. 22. P. 310–331.
3. *Drabinskii M.A., Khabanov P.O., Melnikov A.V., Krupnik L.I., Kozachek A.S., Komarov A.D. and Zhezhera A.I.* The upgraded heavy ion beam probe diagnostics on the T-10 tokamak // J. Phys.: Conf.

УДК 533.9.01

**Исследование колебаний потенциала и плотности плазмы в частотной области  
МГД тиринг-мод в токамаке Т-10*****В.Н. Зенин***

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
Московский физико-технический институт (государственный университет)

В данной работе исследуются колебания потенциала и плотности плазмы в частотном диапазоне 2–7 кГц, в котором доминируют низкочастотные магнитогидродинамические тиринг-неустойчивости. В начальной фазе разряда при подъеме плазменного тока обнаружены колебания потенциала и плотности плазмы. Кроме того, колебания в данном частотном диапазоне обнаружены и в стационарной фазе разряда. Наличие электростатических колебаний в области чисто магнитной активности представляет несомненный интерес.

Для исследований были использованы две основные диагностики. В горячей зоне плазмы измерения проводились с помощью зондирования пучком тяжёлых ионов (НВР), уникального метода прямого измерения электрического потенциала [1]. Данная диагностика характеризуется достаточно высоким временным (1 мкс) и пространственным (~ 1 см) разрешением. С помощью данной диагностики на токамаке Т-10 можно одновременно измерять потенциал в нескольких близко расположенных элементах объёма плазмы. На периферии плазмы измерения проводились с помощью ленгмюровских зондов (отстоящих на половину тора от НВР). Области измерения на периферии перекрывались по малому радиусу.

Обнаруженные колебания характеризуются наличием высокой когерентности (до 0.7–0.8) между локальными сигналами потенциала и плотности плазмы, измеренными каждой из диагностик в соседних точках, расположенных на расстоянии до 1 см друг от друга.

Установлено также наличие дальних корреляций между сигналами двух диагностик, зарегистрированными на расстоянии половины тора. Статистически значимая когерентность наблюдается между потенциалом плазмы, измеренным тяжёлым пучком и плавающим потенциалом, измеренным ленгмюровским зондом, а также между сигналами, отражающими колебания плотности плазмы: током вторичного пучка НВР и ионным током насыщения зонда. Обнаружены перекрестные корреляции между сигналами плотности и потенциала.

Работа проведена при финансовой поддержке российского научного фонда, Проект 14-22-00193. Эксперименты на Т-10 частично поддержаны Государственной корпорацией Росатом, Госконтракт № Н.4х.241.9Б.17.1011.

**Литература**

1. *Dnestrovskij Y.N. [et al.]*. Development of Heavy Ion Beam Probe Diagnostics // IEEE Trans. Plasma Sci. 1994. V. 22. P. 310–331.

УДК 533.9.082.76

## Исследование радиальной структуры ГАМ на токамаке T-10 с помощью зондирования плазмы пучком тяжёлых ионов

*М.А. Драбинский<sup>1,2</sup>, Л.Г. Елисеев<sup>1</sup>, Ф.О. Хабанов<sup>1,2</sup>, А.В. Мельников<sup>1,3</sup>, В.Н. Зенин<sup>1,2</sup>,  
Н.К. Харчев<sup>1,4</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

<sup>4</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Зондирование плазмы пучком тяжёлых ионов (ЗППТИ) – единственный метод прямого измерения электрического потенциала плазмы тороидальных установок в горячей её области. Наряду с измерениями абсолютного значения электрического потенциала ЗППТИ позволяет одновременно и независимо измерять колебания трёх физических величин – потенциала плазмы, её плотности, а также полоидального магнитного поля. Плазменный потенциал определяет изменение энергии диагностического пучка ионов в точке его вторичной ионизации в плазме, плотность плазмы – его интенсивность, а полоидальное магнитное поле – его тороидальный сдвиг.

Геодезическая акустическая мода (ГАМ) – это высокочастотный класс зональных потоков, который рассматривается как механизм саморегуляции турбулентности в плазме [1, 2]. Было показано, что ГАМ может взаимодействовать с широкополосной турбулентностью в области ионно-дрейфовых частот (100–300 кГц) [3, 4], поэтому исследование совокупности этих процессов очень важно для понимания механизмов турбулентного переноса частиц и энергии в горячей области плазмы.

С помощью ЗППТИ было проведено исследование радиальной структуры ГАМ в широком пространственном диапазоне плазменного шнура токамака T-10 ( $0,2 < r/a < 1$ ). Измерения проводились в режиме с током плазмы  $I_{pl} = 200$  кА и магнитным полем на оси  $B_0 = 1,7$  Тл. Радиальная структура ГАМ была получена в серии повторяющихся импульсов токамака, в каждом из которых область измерений сдвигалась по радиусу плазмы. Были получены спектрограммы ГАМ для центральной области плазмы (вплоть до зоны переворота фазы пилообразных колебаний  $r_s$ ), градиентной области, а также периферийной, включая SOL. В периферийной области плазмы было проведено сравнение характеристик ГАМ по данным, полученным с помощью ЗППТИ и Ленгмюровского зонда.

Работа выполнена за счет Российского научного фонда, проект № 14-22-00193.

### Литература

1. Winsor N., Johnson J.L., Dawson J.M. Geodesic acoustic waves in hydromagnetic systems. // *Phys. Fluids*, 1968. V. 11. P. 2448.
2. Diamond P.H., Itoh S.-I., Itoh K., Hahn T.S. Zonal flows in plasma. // *Plasma Phys. Control. Fusion*. 2005. V. 47. R 35.
3. Nakashima Y., Hoshino K., Ejiri A. [et al.]. Observation of nonlinear coupling between small-poloidal wave-number potential fluctuations and turbulent potential fluctuations in ohmically heated plasmas in the JFT-2M tokamak. // *Phys. Rev. Lett.*, 2005. V. 95. P. 095002.
4. Ido T., Miura Y., Kamiya K. [et al.]. Geodesic-acoustic-mode in JFT-2M tokamak plasmas // *Plasma Phys. Control. Fusion*. 2006. V. 48. P. S41.

## Теоретическое исследование реакций электронно-возбужденного азота

### $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ с молекулами $H_2$ и $H_2O$

*А.В. Пелевкин<sup>1,2</sup>, А.С. Шарипов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова

В последнее время особый интерес вызывают задачи инициирования и интенсификации процессов горения топлив при воздействии на горючую смесь термически неравновесной плазмы или лазерного излучения [1]. При таком воздействии в смеси образуются электронно-возбужденные атомы и молекулы, которые, как правило, обладают большей реакционной способностью, чем те же атомы и молекулы в основном состоянии [2]. Большую часть воздуха составляет молекулярный азот, который в основном состоянии практически инертен. Однако молекулярный азот имеет метастабильное возбужденное состояние  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ , энергия которого выше энергии основного состояния на  $T_e = 6.22$  эВ, что превосходит энергию связи многих двухатомных и многоатомных молекул [3]. Стоит также отметить, что элементарные процессы с участием  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$  играют важную роль в атмосферных процессах, за сильными ударными волнами в воздухе, в разряде в азотной и воздушной средах и в плазмохимии [4, 6]. Водородное топливо является одним из перспективных видов топлив, поскольку основным продуктом сгорания для этого топлива является  $H_2O$ . Также во многих случаях для водородо-содержащих видов топлив процесс окисления рассматривается в воздушной среде, поэтому особый интерес при исследовании процессов горения водорода в воздухе при плазменном воздействии вызывают реакции  $H_2$  и  $H_2O$  с возбужденными молекулами  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ .

В данной работе представлены результаты теоретического исследования систем  $H_2+N_2$  и  $H_2O+N_2$  методами квантовой химии. Расчеты проводились методом многоконфигурационного самосогласованного поля в полном активном пространстве (CASSCF) с применением расширенного метода теории возмущения XMCQDPT2 [7], а также дополнялись расчетами методом функционала электронной плотности DFT. Для системы  $H_2-N_2$  был выбран размер активного пространства (10o, 12e), а для системы  $H_2O+N_2$  – (11o, 12e). В качестве основного базиса был выбран дополненный базис Даннинга *aug-cc-pvXZ*, где  $X = D, T, Q$ . В базисе *aug-cc-pvDZ* проводились оптимизация геометрий продуктов, реагентов и переходных состояний и анализ частот нормальных колебаний этих компонентов. Для полученных геометрий компонентов проводились уточняющие расчеты в более полных базисах *aug-cc-pvTZ* и *aug-cc-pvQZ*, которые дополнялись расчетом методом XMCQDPT2.

На рис. 1 приведена диаграмма энергий обеих систем. Несложно заметить, что реакции  $N_2H+H \rightarrow H_2+N_2$  и  $N_2H+OH \rightarrow H_2O+N_2$  протекают безбарьерно вдоль синглетной поверхности. Для этих элементарных процессов константа скорости реакции была рассчитана по модели захвата, для остальных по стандартной теории переходного состояния для бимолекулярных реакций. На рис. 2 представлены результаты расчетов для реакции  $H_2+N_2(A^3\Sigma_u^+)$  по невариационной теории переходного состояния с учетом и без учета эффекта туннелирования, а также поточечно нанесены значения, известные по экспериментальным данным [8, 9]. Как видно по рис. 2, в области низких температур ( $T < 300$  К) за счет эффекта туннелирования константа скорости реакции увеличивается на 3–5 порядков. Это позволяет достигнуть хорошего согласования полученных значений константы скорости реакции с экспериментальными данными [8, 9].

Таким образом, было показано, что реакции  $N_2H+H \rightarrow H_2+N_2$  и  $N_2H+OH \rightarrow H_2O+N_2$  являются безбарьерными, и были установлены основные каналы для реакций с возбужденным азотом:  $H_2+N_2(A^3\Sigma_u^+) \rightarrow N_2H+H$  и  $H_2O+N_2(A^3\Sigma_u^+) \rightarrow N_2H+OH$ . Для двух последних реакций при температурах  $T < 600$  К константа скорости реакции существенно увеличивается за счет эффекта туннелирования. Константа скорости реакции  $H_2+N_2(A^3\Sigma_u^+) \rightarrow N_2H+H$ , оцененная по невариационной теории переходного состояния с

учетом эффекта туннелирования, хорошо согласуется с экспериментальными данными [8, 9].

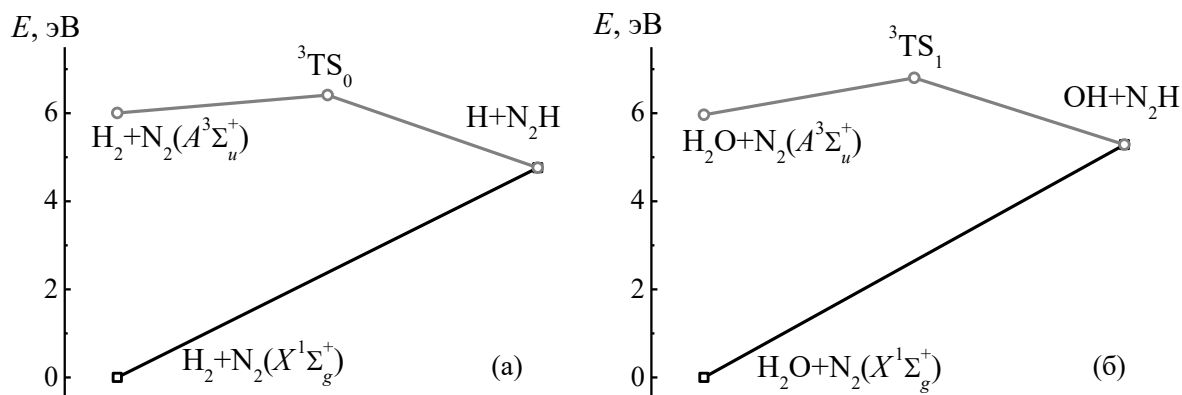


Рис. 1. Энергетическая диаграмма для систем  $\text{H}_2+\text{N}_2$  (а) и  $\text{H}_2\text{O}+\text{N}_2$  (б). Значения энергий были получены методом ХМCQDPT2 в базисе aug-cc-pvQZ с учетом энергии нулевых колебаний

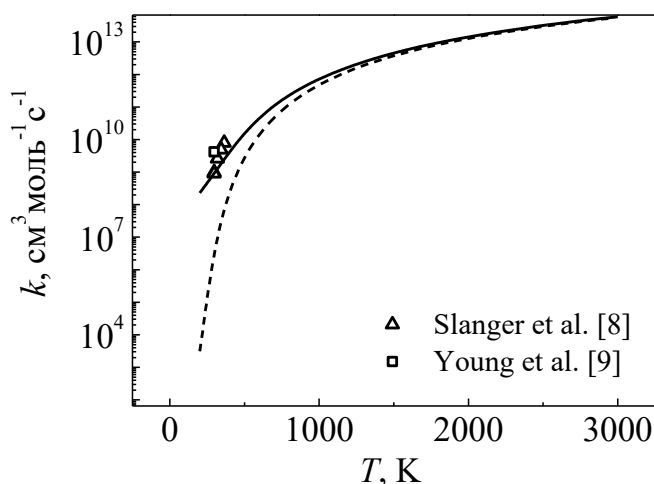


Рис. 2. Константа скорости реакции  $\text{H}_2+\text{N}_2(A^3\Sigma_u^+)$ , оцененная по невариационной теории переходного состояния (пунктирная линия) и с учетом эффекта туннелирования (сплошная линия); точками отмечены экспериментальные данные [8, 9]

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №17-01-00810) и РНФ (проект №16-19-00111).

### Литература

1. Starik A.M., Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., Titova N.S. Physics and Chemistry of the Influence of Excited Molecules on Combustion Enhancement // Phil. Trans. R. Soc. A 2015. V. 373. P. 20140341.
2. Starik A., Sharipov A. Theoretical Analysis of Reaction Kinetics with Singlet Oxygen Molecules // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. P. 16424–16436.
3. Golde M. F. Reactions of  $\text{N}_2(A^3\Sigma_u^+)$  // Int. J. Chem. Kinet. 1988. V. 20. P. 75–92.
4. Loureiro J., Sa P.A., Guerra V. Role of Long-lived  $\text{N}_2(X^1\Sigma_g^+, v)$  Molecules and  $\text{N}_2(A^3\Sigma_u^+)$  and  $\text{N}_2(a^1\Sigma_u^-)$  States in the Light Emissions of an  $\text{N}_2$  afterglow // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. V. 34. P. 1769–1778.
5. Kirillov A.S. Influence of Electronically Excited  $\text{N}_2$  and  $\text{O}_2$  on Vibrational Kinetics of These Molecules in the Lower Thermosphere and Mesosphere during Auroral Electron Precipitation // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2012. V. 81. P. 9–19.
6. Starik A.M., Titova N.S., Arsentiev I.V. Comprehensive Analysis of the Effect of Atomic and Molecular Metastable State Excitation on Air Plasma Composition behind Strong Shock Waves // Plasma Sources Sci. Technol. 2010. V. 19. P. 015007.
7. Granovsky A.A. Extended Multi-configuration Quasi-Degenerate Perturbation Theory: The New Approach to Multi-state Multi-reference Perturbation Theory // J. Chem. Phys. 2011. V. 134 P. 214113.



8. *Slanger T.G., Wood B.J., Black G.* Temperature-dependent  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$  quenching rate coefficients // *J. Photochem.* 1973. V. 2. P. 63–66.
9. *Young R.A., Black G., Slanger T.G.* Vacuum Ultraviolet Photolysis of  $N_2O$ . II. Deactivation of  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$  and  $N_2(B^3\Sigma_g^-)$  // *J. Chem. Phys.* 1969. V. 50. P. 303–308.

---



---

Секция физики супрамолекулярных систем

---



---

УДК 541.14+543.42

**Влияние краун-эфирного фрагмента на спектрально-люминесцентные  
и спектрально-кинетические свойства диариллиденовых производных  
циклопентанона и циклогексанона**

*В.Н. Гуров*

Центр фотохимии РАН

Кетоцианиновые красители применяются в лазерах на красителях, используются в качестве фотосенсибилизаторов, для оптической регистрации информации и в органическом синтезе. Особый интерес вызывают диеноны, которые содержат фрагменты краун-эфиров и образуют комплексы с катионами щелочных и щелочноземельных металлов. Флуоресцентные свойства диенонов связаны со способностью их молекул к интеркомбинационный конверсии в триплетное состояние.

Приведены результаты исследования спектральных, люминесцентных и спектрально-кинетических свойств бис-(диэтиламинобензилиден)производного циклопентанона и циклогексанона, а также их бис-азакраунсодержащих аналогов в средах различной полярности (циклогексан, ацетонитрил, метанол). Введение краун-эфирного фрагмента приводит к гипсохромному сдвигу максимума поглощения. Увеличение полярности среды приводит к батохромному сдвигу максимума поглощения.

При облучении лазерным импульсом обескислороженных растворов бис-(диэтиламинобензилиден) производных циклопентанона и циклогексанона в ацетонитриле наблюдаются три промежуточных продукта. Первый продукт относится к триплетному состоянию с временем жизни 0,2–2,5 мкс. Второй промежуточный продукт, с временем жизни 10–20 мкс относится к фотоизомеру. Третий промежуточный продукт, с временем жизни более 1 с, также относится к фотоизомеру. Введение краун-эфирного фрагмента приводит к увеличению времени жизни триплетного состояния в 10 раз для бис-(диэтиламинобензилиден) циклогексанона, а также увеличению времени превращения *транс-цис* изомера в исходный *транс-транс* изомер. В то же время введение краун-эфирного фрагмента в молекулу бис-(диэтиламинобензилиден)циклопентанона приводит к уменьшению выхода в триплетное состояние в 1,5 раза.

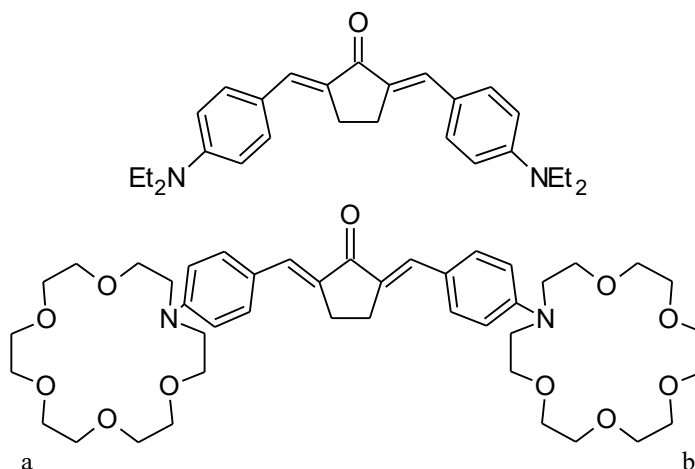


Рис. 1. Объекты исследования

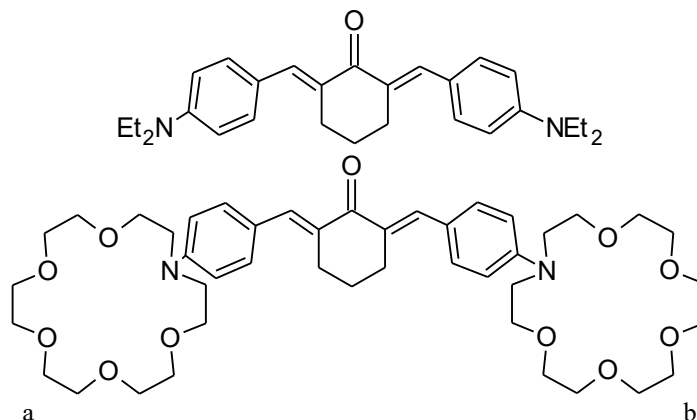


Рис. 2. Объекты исследования

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №14-13-00076).

УДК 543.42

### Динамика молекулярной машины на основе комплекса стирилового красителя DSMI и кукурбит[6]урилла

*А.Д. Свирида*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Центр фотохимии РАН

Благодаря недавним исследованиям сверхбыстрой релаксации электронно-возбужденного состояния комплексов включения стироловых красителей с кукурбит[ $n$ ]уриллами ( $n = 6, 7$ ), было выявлено, что при возбуждении стироловый краситель меняет свое пространственное положение относительно основного состояния, погружаясь глубже в полость кавитанда [1]. Иными словами, такая супрамолекулярная система работает как циклическая молекулярная машина под действием возбуждающего света (рис. 1).

В этой работе представлены результаты измерений сверхбыстрой деполяризации флуоресценции для комплексов стиролового красителя DSMI (транс-4-[4-(диметиламино)стирил]-1-метилпиридинийиодид) с кукурбит[6]урилом, а также свободного красителя в водном растворе и в этиленгликоле. Также было показано, что окружение красителя в присутствии кукурбит[6]урилла по своим свойствам более сходно с вязкой сольватной оболочкой молекул этиленгликоля, чем с гидратной оболочкой, окружающей свободный краситель в водном растворе. Исходя из спектров анизотропии флуоресценции, можно определить, что характерное время движения молекулы красителя в полость кукурбитурилла не меньше 500 фс [2], что согласуется с простой теоретической моделью.

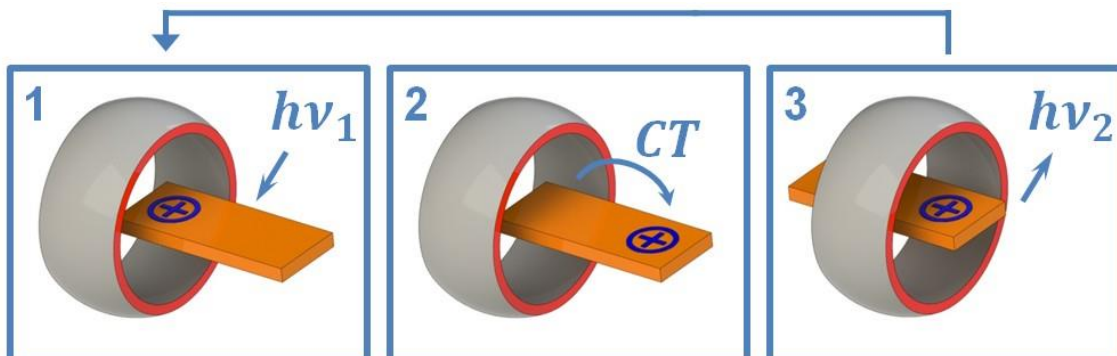


Рис. 1. Иллюстрация движения молекулы красителя в полость кукурбитурила под действием возбуждающего света

### Литература

1. *Petrov N.Kh.; Ivanov D.A.; Shandarov Yu.A.; Kryukov I.V.; Avakyan V.G.; Alfimov M.V.; Sazonov S.K.; Gromov S.P.* // Nanotechnol. Russ. 2016. V. 11. P. 221.
2. *Petrov N. Kh.; Ivanov D.A.; Kryukov I.V.; Shandarov Yu.A.; Svirida A.D.; Alfimov M.V.* // High Energy Chem. 2017. V. 51. P. 72.

УДК 544.183.2

### Зависимость спектров поглощения комплексов кукурбит[7]урил-стириловый краситель от длины N-Аммониаалкильного заместителя

*А.С. Степко, В.Г. Авакян, А.И. Ведерников, П.В. Лебедев-Степанов, В.Г. Плотников, Н.А. Лобова, С.П. Громов*

Центр фотохимии РАН

С использованием квантово-химического метода РМЗ (стандартные параметры, программа FireFly А. А. Грановского [3, 4] ) были рассчитаны оптимизированные структуры комплексов включения кукурбит[7]урил (СВ7) – стириловый краситель [1, 2] (СК) рис. 1. Длина N-заместителя красителя была проварьирована. Константы устойчивости комплексов СК@СВ[7] в воде были оценены экспериментально методом спектрофотометрического титрования.

Обнаружена корреляция между сдвигом максимума ДПП красителя при комплексообразовании и положением его хромофора относительно молекулы-кавитанда СВ7. В случае частичного погружения хромофора красителя в полость кукурбитурила (СК1, СК2) bathochromный сдвиг максимума ДПП красителя при образовании комплекса достигает 30 нм. Для комплексов включения красителя с N-аммониопропильным заместителем (СК3) наблюдается небольшой сдвиг максимума ДПП в синюю область. В оптимизированных структурах комплексов включения расстояние от центра масс СВ7 для красителей с N-аммониаалкильным (СК1) и N-аммониопропильным (СК2) заместителями составляют 0.4 Å и 1.1 Å соответственно, и СВ7 расположен над винилпиридиновым фрагментом красителя, а для красителя СК3 – 4 Å, при этом винилпиридиновый фрагмент красителя расположен вне полости СВ7.

Проведенное исследование представляет интерес для хемосенсорики.

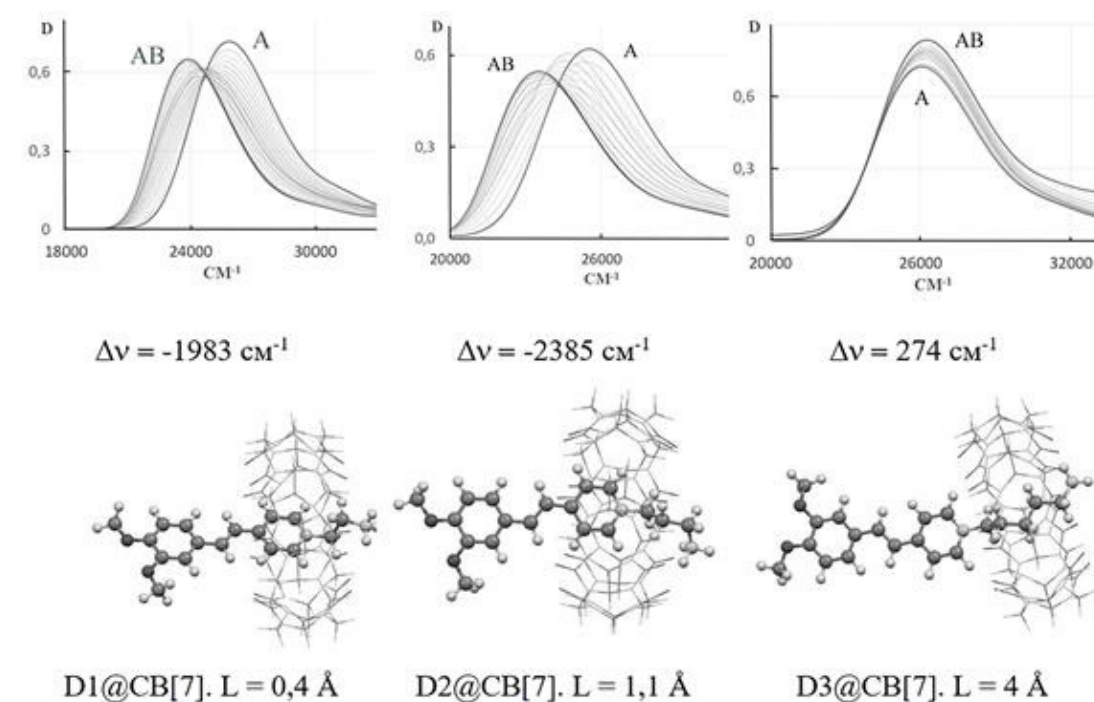


Рис. 1. Сравнение спектров поглощения комплексов СК@CB[7] в зависимости от структуры комплекса включения, где L – расстояние от центра масс кукурбит[7]урилла до хромофора стирилового красителя. (A – краситель, AB – комплекс)

Работы выполнялись при поддержке гранта Президиума РАН.

### Литература

1. Vedernikov A.I., Lobova N.A., Kuz'mina L.G., Howard A.K., Strelenko Y.A., Alfimov M.V., Gromov S.P. Pseudorotaxane complexes between viologen vinylogues and cucurbit[7]uril: New prototype of photocontrolled molecular machine // Journal of Molecular Structure 989. 2011. С. 114–121.
2. Vedernikov A.I., Lobova N.A., Kuz'mina L.G., Howard A.K., Strelenko Y.A., Alfimov M.V., Gromov S.P. Photoinduced and dark complexation of unsaturated viologen analogues containing two ammonium tails with cucurbit[8]uril // New J. Chem. 2006. V. 30. С. 458–466.
3. Granovsky A.A., Firefly version 8, www <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
4. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. // J. Comput.Chem. 1993. V.14. P. 1347–1363.

УДК 544.34, 535.21

## Изучение влияния кукурбит[8]урилла на спектрально-люминесцентные свойства 3,3'-диэтилтиакарбоцианина и его 9-метилзамещенного при комплексообразовании

*Т.В. Федотова<sup>1</sup>, Г.В. Захарова<sup>2</sup>, А.К. Чибисов<sup>1,2</sup>*

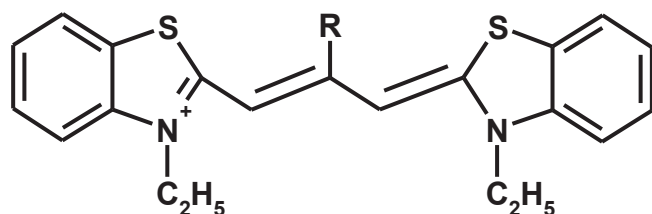
<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Центр фотохимии РАН

Кукурбит[*n*]урилы – молекулы-кавитанды, представляют собой молекулярные контейнеры, построенные из повторяющихся гликоурильных фрагментов, соединенных между собой метиленовыми мостиками. Благодаря большому отрицательному заряду на карбонильных порталах кукурбитурилы способны образовывать комплексы «гость-хозяин» с катионами металлов, а также с положительно заряженными органическими молекулами.

В качестве «молекул-гостей» в работе использовали катионные полиметиновые красители [1, 3] (рис. 1), содержащие нечетное числа метиновых групп между двумя атомами азота с делокализованным зарядом. Ранее было показано [4], что краситель 1 в водном растворе присутствует в виде транс-формы, а краситель 2 находится преимущественно в цис-форме, на что указывает положение их максимумов в спектрах поглощения.

В работе показано, что взаимодействие красителей с кукурбит[8]урилом приводит к образованию комплексов включения состава 2:2, что сопровождается изменением спектрально-люминесцентных свойств красителей. Полученные димерные комплексы обладают люминесценцией, при этом димерный комплекс красителя 1 проявляет как быструю (обычную), так и замедленную (термически активированную) флуоресценцию, а димерный комплекс красителя 2 – фосфоресценцию. Интенсивно люминесцирующие комплексы полиметиновых красителей с кукурбитурилами могут быть использованы в качестве флуоресцентных меток в биологически активных средах.



Краситель	R
1	H
2	CH <sub>3</sub>

Рис. 1. Структурная формула 3,3'-диэтилтиакарбоцианина (1) и его 9-метилзамещенного (2)

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 15-03-01524а и № 16-29-11765 офи\_м).

### Литература

1. Под ред. Алфимова М.В. Центр фотохимии РАН. Фундаментальные и прикладные исследования. М.: ООО «ИПЦ «Маска»», 2013. 566 с.
2. Zakharova G.V., Zhizhimov D.A. [et. al.]. Photoprocesses of alkyl meso-thiacarbocyanine dyes in the presense of cucurbit[7]uril // Journal of Photochemistry and Photobiology. 2015. P. 69–77.
3. Захарова Г.В., Авакян В.Г. Маркелов В.П. [и др.]. Влияние кукурбитурилла на первичные фотопроеессы индокарбоцианиновых красителей в воде // Химия высоких энергий. 2015. Т. 49. № 6. С. 1–8.



4. Владимирова К.Г., Фрейдзон А.Я., Багатурьянц А.А., Захарова Г.В., Чибисов А.К., Алфимов М.В. Моделирование структуры, спектров поглощения и *цис-транс*-изомеризации тиакрбоцианиновых красителей // Химия высоких энергий. 2008. Т. 42, № 4. С. 317–324.

УДК 543.42

### Исследование влияния образования твердой фазы силикагеля на фотофизические свойства красителя 3,3'-диметилтиакрбоцианина перхлората

А.А. Медведева<sup>1</sup>, А.В. Кошкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Центр фотохимии РАН

Полиметиновые красители привлекают к себе внимание, поскольку широко используются в научной деятельности и технике в качестве среды для лазерной техники, оптической метки в биологии и медицине, в производстве химических сенсоров. На сегодняшний день в литературе описаны исследования свойств цианиновых красителей в растворе, но об их свойствах в пористых матрицах сведения практически отсутствуют. Краситель 3,3'-диметилтиакрбоцианинаперхлорат был выбран нами в качестве объекта исследования, поскольку его свойства были исследованы ранее в ЦФ РАН [1].

В процессе золь-гель синтеза была получена силикатная матрица на основе водорастворимого соединения тетракис(2-гидроксиэтил)ортосиликата, влияние которой на равновесие мономер-димер 3,3'-диметилтиакрбоцианина перхлората было исследовано с помощью флуоресцентных методов анализа.

В результате проведенных исследований было установлено, что вследствие изменения соотношения концентрации мономера к димеру, изменяется интенсивность флуоресценции (рис. 3)

Полученные результаты были сопоставлены с аналогичными данными для красителя 4-DASPI, чувствительного к вязкости микроокружения молекулы. Было обнаружено, что обе системы дают схожие изменения сигнала флуоресценции.

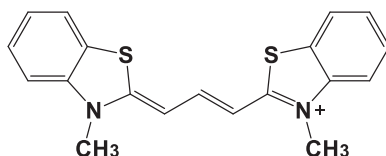


Рис. 1. 3,3'-диметилтиакрбоцианин

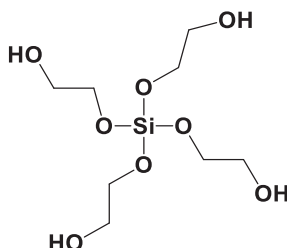


Рис. 2. Тетракис (2-гидроксиэтил) ортосиликат

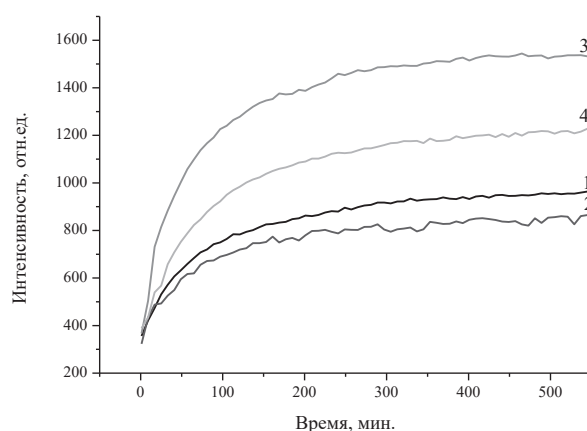


Рис. 3. Изменение интенсивности флуоресценции растворов красителя с разным содержанием силикагеля в воде (100 мкл – образец 1, 250 мкл – образец 2, 500 мкл – образец 3, 750 мкл – образец 4)

### Литература

1. Атабекян Л.С., Авакян В.Г., Чибисов А.К. Первичные фотопроцессы 3,3-диэтилкарбоцианина в присутствии кукурбит[7]урилы: лазерный импульсный фотолиз и квантово-химический расчет // Химия высоких энергий. 2011. V. 45. P. 7.

УДК 544.52, 544.34

### Изучение комплексообразования фенилацетиленов с циклодекстринами в растворах

*М.С. Кожухова<sup>1</sup>, Н.А. Лобова<sup>1,2</sup>, М.В. Алфимов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Центр Фотохимии РАН

Циклодекстрины (ЦД) – природные макроциклические олигосахариды, состоящие из остатков глюкозы. Внешняя поверхность молекулы гидрофильна, полость – гидрофобна, что позволяет им образовывать водорастворимые комплексы включения «гость–хозяин». В полостях ЦД существенно изменяются фотофизические свойства и реакционная способность молекул-гостей.

В работе исследуется комплексообразование производных ацетиленового ряда (рис. 1–6) с  $\alpha$ - и  $\beta$ - ЦД.

Измерены спектры поглощения и флуоресценции растворов веществ (рис. 1–6) в этаноле до и после добавления циклодекстринов, для фенилацетилена и толана проведены спектрофотометрическое и флуоресцентное титрование.

Было проанализировано изменение спектра поглощения для начальной и конечной точек титрования раствора толана в этаноле в присутствии  $\alpha$ -ЦД (рис. 7). Константу комплексообразования  $\alpha$ -ЦД с толаном оценили методом спектрофлуориметрического титрования,  $\lg K = 3,83$ . В растворе этанола была оценена константа для комплекса фенилацетилена с  $\alpha$ -ЦД,  $\lg K = 1,05$ .

Были рассчитаны частоты колебаний полосы 0–0 и 0–1, а также стоксов сдвиг для исследованных соединений. Оценено влияние тройной связи и фенильного кольца в составе соединения на положение полосы 0–0. Кроме того, для толана было определено, что комплексообразование с ЦД улучшает разрешение колебательной структуры (рис. 8).

Исследование комплексообразования циклодекстринов с ацетиленами может быть использовано для фундаментального описания влияния однородного микроокружения на свойства материалобразующих органических соединений.



Рис. 1. Фенилацетилен

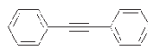


Рис. 2. Толан

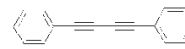


Рис. 3. 1,4-дифенилбутадиин



Рис. 4. 1,4-диэтинилбензол

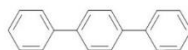


Рис. 5. Пара-терфенил



Рис. 6. Пирен

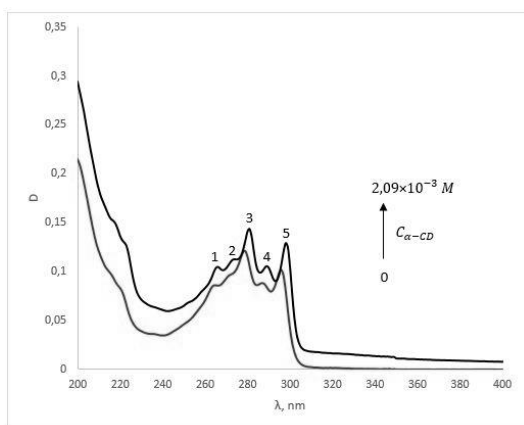
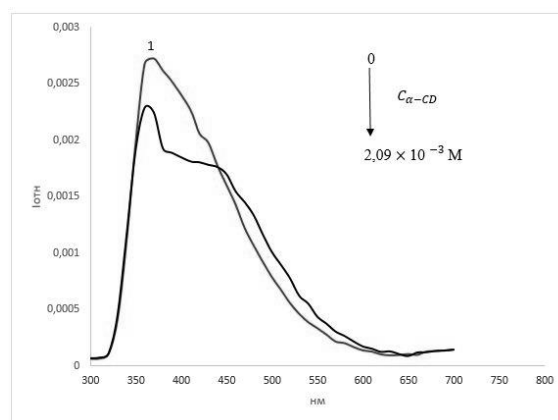
Рис. 7. Спектры поглощения толана,  $\Delta\lambda$  до 3нм

Рис. 8. Спектры флуоресценции толана

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (15-13-00163).

УДК 544.52+544.34

### Исследование стироловых красителей с сульфonatoалкильными заместителями в растворах в присутствии кукурбитурилов или перхлората бария

*Е.А. Лач<sup>1,2</sup>, Н.А. Александрова<sup>2</sup>, Н.А. Лобова<sup>1,2</sup>, А.И. Ведерников<sup>2</sup>, С.П. Громов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Центр Фотохимии РАН ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Были синтезированы сульфonatoалкильные производные стироловых красителей 1–4 (рис. 1) бетаиновой структуры, обладающие высокой растворимостью в воде. Эти соединения перспективны в качестве ионофоров в водной среде, а также могут образовывать псевдоротоксановые комплексы включения с кукурбит урилами [7, 8] (СВ [7, 8]) составов 1:1 и 2:1.

Нами были исследованы супрамолекулярные комплексы стироловых красителей с кукурбитурилами или катионами  $Ba^{2+}$ , а именно их устойчивость и спектральные свойства.

Ранее показано, что комплексы диметоксизамещённых бетаиновых красителей как с СВ [7], так и с СВ [8] менее устойчивы по сравнению с их катионными аналогами:  $\Delta/g K_{1:1} = 0,9$ ;  $\Delta/g K_{2:1} = 1,5$  (<sup>1</sup>H ЯМР титрование в  $D_2O/[D_3]MeCN$ , 10:1 при 30 °C) [1].

Комплексообразующие свойства краунсодержащих соединений были изучены в ацетонитриле (MeCN) и воде (H<sub>2</sub>O) в присутствии перхлората бария (Ba(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>). В процессе комплексообразования длинноволновая полоса поглощения (ДПП) испытывает гипсохромный сдвиг до 23 нм. Константы устойчивости комплексов достигают значений до  $lgK = 4,8$  в MeCN и до  $lgK = 2$  в H<sub>2</sub>O.

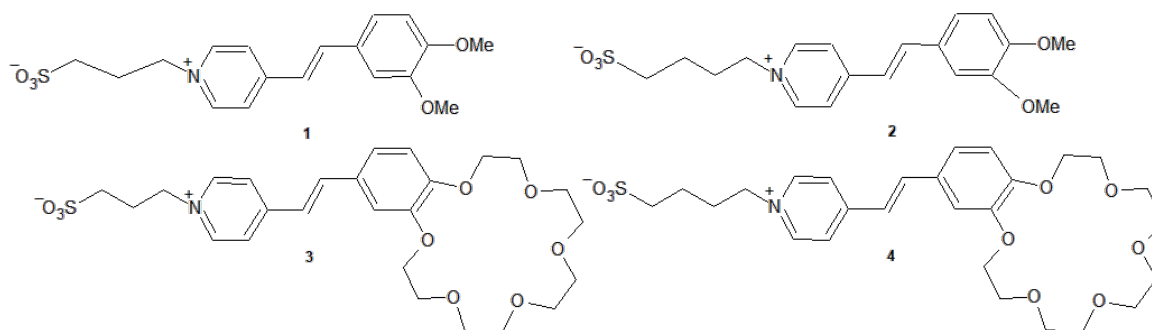


Рис. 1. Структурные формулы красителей 1-4

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 15-13-00163).

### Литература

1. Gromov S.P., Vedernikov A.I., Kuz'mina L.G., Kondratuk D.V., Sazonov S.K., Strelenko Y.A., Alfimov M.V., Howard A.K. Photocontrolled Molecular Assembler Based on Cucurbit [8] uril: [2+2] – Auto photo cyclo addition of Styryl Dyes in the Solid State and in Water // Eur. J. Org. Chem. 2010. P. 2587–2599.

УДК 535.372, 546.284-31

### Получение и исследование сенсорных свойств макропористых силикатных материалов

*Н.В. Пекарева<sup>1,2</sup>, А.В. Кошкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Центр фотохимии РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Изучение свойств макропористых сорбентов на основе силикатных материалов является одним из перспективных направлений современных исследований. Такие материалы находят свое применение в качестве матриц для сенсоров или материала-носителя для ВЭЖХ. Особый интерес представляют монолиты диоксида кремния, поскольку являются более практичными, чем тонкие пленки или спрессованные порошки, благодаря их надежности и простоте обработки [1]. В литературе широко исследованы свойства различных пористых материалов, но для макропористых сорбентов на основе диоксида кремния были проведены только анализ пористости, исследован механизм реакции.

В работе нами была поставлена задача по разработке методики получения макропористых кремниевых монолитных материалов с адсорбированным красителем методом осаждения.

В качестве объектов исследования были получены образцы диоксида кремния на основе водорастворимого тетракис(2-гидроксиэтил)ортосиликата (THEOS) с нанесенным на его поверхность красителем Нильский красный и Родамин 6G. Проведен сравнительный

анализ зависимости объема добавляемого прекурсора на диаметр пор полученных сорбентов, исследованы спектры флуоресценции адсорбированного красителя.

Было изучено влияние паров ацетона на спектр флуоресценции красителей. Установлено, что в процессе сорбции интенсивность флуоресценции Нильского красного увеличивается, а Родамина 6G, наоборот, падает.

Проведено сравнение поверхности образцов макропористого сорбента с образцами ксерогелей, полученных на основе тетраэтилортосиликата (TEOS), содержащего аналогичные красители.

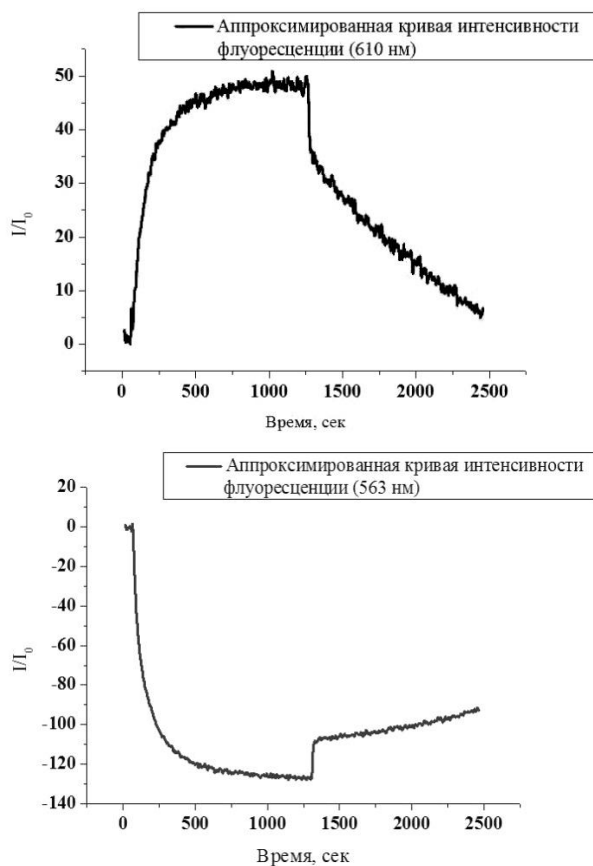


Рис. 1. Графики зависимости интенсивностей флуоресценции красителей Нильского красного и Родамина 6G соответственно от времени в процессе сорбции паров ацетона

### Литература

1. *Drisko Glenna L., Zelcer Andres, Caruso Rachel A., Galo J., Soler-Illia A.A.*. One-pot synthesis of silica monoliths with hierarchically porous structure // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2012. V. 148 P. 137–144.

УДК: 541.14+543.42

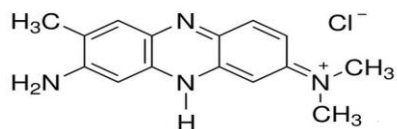
### Фотопревращения нейтрального красного без и в присутствии кукурбит[7]урила.

*В.Н. Шихта<sup>1</sup>, Л.С. Атабекян<sup>2</sup>, А.К. Чибисов<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт(государственный университет)

<sup>2</sup>Центр фотохимии РАН

Методом лазерного импульсного фотолиза исследованы промежуточные продукты фотопревращения нейтрального красного (НК) в воде без и в присутствии кукурбит[7]урила (КБ7):



Установлено участие триплетного состояния в фотопревращениях НК. Измерен спектр Т-Т поглощения. В присутствии КБ7 наблюдается значительное увеличение эффективности интеркомбинационной конверсии НК в триплетное состояние, наблюдается также перенос электрона в результате триплет-триплетной аннигиляции с образованием радикала. Исследована кинетика дезактивации триплетного состояния и кинетика гибели радикалов.

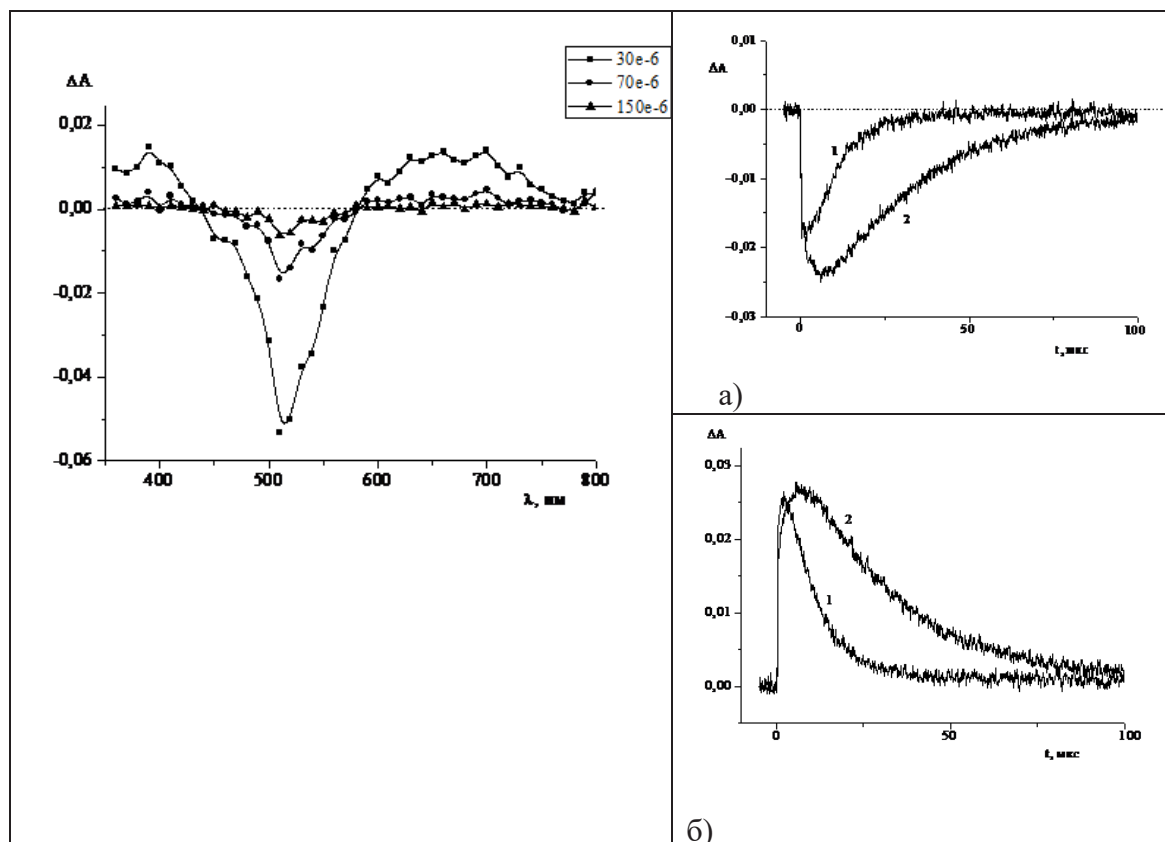


Рис. 1. Разностный спектр поглощения НК в присутствии КБ7. Кинетические кривые воздушнонасыщенного и обескислороженного растворов при 460 (а) и 380 нм (б)



УДК 615.012.1

### Антирадикальная активность 2Н- и 2-замещенных 5-арил-8,8-диметил-8,9-дигидро-2Н-пиридо[4,3,2-de]циннолин-3(7Н)-онов

*С.С. Зыкова<sup>1</sup>, С.Н. Шуров<sup>2</sup>, О.Г. Карманова<sup>3</sup>, Т.В. Шаврина<sup>2</sup>*

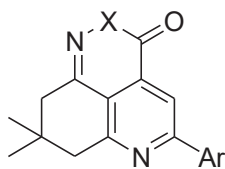
<sup>1</sup>Пермский институт федеральной службы исполнения наказаний

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Современная практическая фармакотерапия использует антиоксиданты для профилактики последствий окислительного стресса. Группа антиоксидантов расширяется за счет увеличения числа биологически активных добавок, созданных на основе растительных экстрактов. Как основное действующее начало фармацевтических и парафармацевтических фитопрепаратов флавоноиды обладают широким спектром биологических (гиполипидемический, антиоксидантный (радикалсвязывающий, мембранстабилизирующий)) эффектов, а также эндотелиотропными и антипролиферативными свойствами [1]. Но интерес представляет поиск основных действующих веществ, обладающих широкими заданными и изученными фармакологическими свойствами и низкой токсичностью среди новых веществ антропогенного происхождения.

Отдельные представители синтезированных нами трициклических соединений, содержащих 5,6,7,8-тетрагидрохинолиновый фрагмент



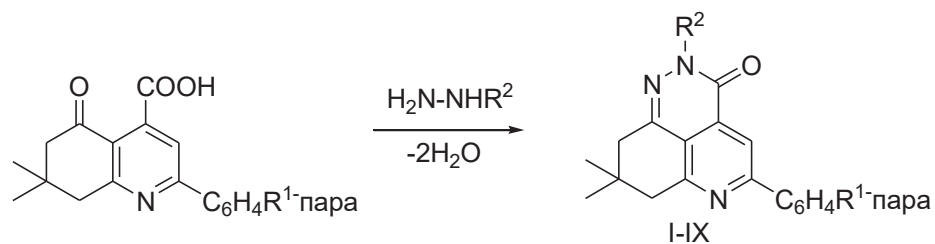
**X=O, NH, NR**

обладают различными спектрами биологической активности: антиоксидантной и антигипоксической активностями [2, 3, 4].

Ранее был проведен скрининг антиоксидантной активности синтезированных соединений с использованием тест-системы бактерий *Escherichia coli* [5], а также сделаны попытки прогноза антирадикальной активности на основе квантово-химических расчетов [6] полных энергий молекул и образующихся из них возможных радикалов методом теории функционала плотности.

В настоящей работе изучена радикалсвязывающая активность 2Н- и 2-замещенных 5-арил-8,8-диметил-8,9-дигидро-2Н-пиридо[4,3,2-de]циннолин-3(7Н)-онов (I-IX) методом связывания стабильного радикала 2,2-дифенил-1-пикрилгидразила (ДФПГ) с последующей фиксацией степени изменения окраски фотоколориметрически. Оценку радикалсвязывающей активности проводят исходя из величины убыли радикалов Q [7]. Результаты исследований приведены в таблице 1.

Исследованные в работе соединения были получены взаимодействием 2-арил-7,7-диметил-6-оксо-5,6,7,8-тетрагидрохинолин-4-карбоновых кислот и гидразином и монозамещенными гидразинами.



I:  $R^2=H$ ,  $R^1=Br$ ; II:  $R^2=C_2H_5$ ,  $R^1=CH_3$ ; III:  $R^2=C_2H_5$ ,  $R^1=OC_2H_5$ , V:  $R^2=C_6F_5$ ,  $R^1=Br$ ;  
 V:  $R^2=C_6F_5$ ,  $R^1=OCH_3$ ; VI:  $R^2=C_6F_5$ ,  $R^1=OC_2H_5$ ; VII:  $R^2=SO_2C_6H_4CH_3$ ,  $R^1=CH_3$ ;  
 VIII:  $R^2=SO_2C_6H_4CH_3$ ,  $R^1=Br$ ; IX:  $R^2=SO_2C_6H_4CH_3$ ,  $R^1=OCH_3$ ;

Таблица 1

**Радикалсвязывающая активность 2H- и 2-замещенных 5-арил-8,8-диметил-8,9-дигидро-2H-пиридо[4,3,2-de]циннолин-3(7H)-онов (I-IX)**

Соединение	Убыль радикалов, Q, %
I	14.92±3.80
II	42.10±4.08
III	44.29±3.01
IV	28.14±2.96
V	30.05±2.78
VI	36.33±3.80
VII	46.63±2.59
VIII	30.69±2.57
IX	25.04±3.17

Наибольшей активностью, как следует из таблицы, обладают соединения II, III, VII, два из которых (II и VII) содержат *para*-толильный заместитель в положении 5 гетероцикла. Дальнейший поиск антиоксидантов в ряду 2H- и 2-замещенных 5-арил-8,8-диметил-8,9-дигидро-2H-пиридо[4,3,2-de]циннолин-3(7H)-онов является перспективным.

### Литература

- Ильина И.Г., Рудакова И.П., Самылина И.А. Антиоксиданты: фармацевтические и биохимические аспекты применения // Фармация. 2013. N 8. С. 3–6.
- Руденко Д.А., Шаврина Т.В., Шуров С.Н. Синтез и антиоксидантная активность трициклических соединений, содержащих 5,6,7,8-тетрагидрохинолиновый фрагмент // Химико-фармацевтический журнал. 2014. Т. 48. N 2. С. 32–37.
- Зыкова С.С., Одегова Т.Ф., Руденко Д.А. Синтез и антигипоксическая активность трициклических соединений, содержащих 5,6,7,8-тетрагидрохинолиновый фрагмент // Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии. 2014. N 9. С. 14–17.

4. *Зыкова С.С., Шуров С.Н.* Антигипоксическая активность трициклических гетероциклов, содержащих фрагмент 3-замещенных 5,6,7,8-тетрагидрохинолина // Современные достижения химических наук: материалы Всероссийской юбилейной конференции с международным участием, посвященной 100-летию Пермского государственного университета. Пермь: ПГНИУ, 2016. 236 с.
5. *Зыкова С.С., Одегова Т.Ф., Шуров С.Н.* Способ скрининга антиоксидантной активности синтезированных соединений с использованием тест-системы бактерий *Escherichia coli* // Актуальные вопросы и перспективы развития медицины: сборник научных трудов по итогам Международной научно-практической конференции. Н. Новгород: ООО «Ареал», 2014. С. 165–167.
6. *Зыкова С.С., Шуров С.Н.* Квантово-химическое прогнозирование антирадикальной активности гетероциклов: материалы 59-й Всероссийской конференции с международным участием, посвященной 70-летию Московского физико-технического института. г. Долгопрудный, 2016. С. 376.
7. *Molyneux P.* The Use of Stable Free Radical Diphenilpicrylhydrazyl (DPPH) for Estimating Antioxidant Activity // The Songklanakarin Journal of Science and Technology. 2004. V. 26. N 2. P. 211–219.

УДК 544.023

**Атомно-слоевое осаждение плёнок оксида тантала с управляемым дефицитом кислорода для структур энергонезависимой памяти на основе эффекта резистивного переключения**

*Д.С. Кузьмичёв<sup>1</sup>, К.В. Егоров<sup>1</sup>, Д.И. Мякота<sup>1</sup>, А.А. Сигарёв<sup>1</sup>, Ю.Ю. Лебединский<sup>1,2</sup>,  
А.М. Маркеев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В настоящее время метод атомно-слоевого осаждения (АСО) является широко распространенным в микро- и нанoeлектронной технологии, особенно в применении к росту оксидов с высокой диэлектрической проницаемостью для полевых МОП-транзисторов и трёхмерных (3D) конденсаторов в применении к динамической памяти с произвольным доступом. Следует отметить, что оксиды металлов, выращенные АСО, обладают высокой степенью стехиометричности [1]. Однако существуют приложения АСО, где возможность изменения стехиометрии оксидов металлов весьма желательна: датчики высокой производительности, устройства хранения и преобразования энергии, электро- и фотокатализаторы [2]. Одной из активно развивающихся областей применений АСО являются плёнки оксидов для ячеек памяти на основе резистивного переключения (ReRAM). Данное направление интенсивно исследуется в последнее десятилетие и считается одной из наиболее перспективных технологий для будущей энергонезависимой памяти. Стоит также отметить, что в наиболее перспективных ячейках ReRAM диэлектрический слой на основе оксида металла имеет дефицит кислорода [3]. Слои  $TaO_x$  с дефицитом кислорода могут быть относительно легко получены с помощью реактивного ионного распыления тантала или с помощью ВЧ ионного распыления мишени с наперёд заданным и известным соотношением Ta/O.

Хорошо известно, что наиболее широко распространённая энергонезависимая память (Flash-память) была произведена в трехмерном виде (3D) несколько лет назад, что сделало её ещё более ёмкой по сравнению с двухмерными видами памяти. Таким образом, чтобы превзойти флэш-память в ёмкости, требуется технологическое решение для создания 3D-ячеек ReRAM. Ввиду своей экономической эффективности, концепция 3D-ReRAM считается одним из самых перспективных решений для будущей памяти массового хранения данных [4]. Предлагаемая в настоящее время архитектура 3-D ReRAM требует высокой конформности осаждения оксидов металла на структурах с развитой поверхностью, что делает применение метода осаждения на основе ионного распыления невозможным. Таким образом, представляет интерес найти способы контроля содержания кислорода в оксидах металлов непосредственно в процессе АСО роста.

В данной работе описывается подход, основанный на АСО с использованием плазменно-активированного водорода в качестве реактанта и этоксида тантала  $Ta(OC_2H_5)_5$  в качестве прекурсора. Плазменно-активированный водород используется в качестве реагента, так как он может удалить все  $C_2H_5$  группы путем формирования летучих соединений  $C_2H_6$  во время воздействия на  $O-C_2H_5$  связь. Более того, становится возможным восстановить растущий оксид металла контролируемым образом путём воздействия активного водорода на связи Ta-O.

Наличие в плёнках кислородный вакансий было подтверждено с помощью РФЭС исследований линий Ta4f и валентной зоны  $TaO_x$ , а также подтверждается данными электрофизических исследований. Сравнение спектров РФЭС и анализ спектров времяпролётной вторичной масс-спектрометрии позволило сделать вывод о том, что нестехиометрия главным образом связана с образованием кислородных вакансий, а не Ta-H связей. Так же для исследования чистоты полученных плёнок был использован метод инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье (ИСПФ). На спектре поглощения были исследованы участки, отвечающие линиям поглощения Ta-H ( $1830\text{cm}^{-1}$ ), C-H ( $3000-2800\text{cm}^{-1}$ ), O-H ( $3300-3600\text{cm}^{-1}$ ). На всех трёх участках линий поглощения

обнаружено не было. Таким образом, было установлено, что углерода и водорода в плёнках очень мало, меньше, чем предел чувствительности метода ИСПФ. Помимо этого, в МИМ-структурах TiN/TaO<sub>x</sub>/Pt было продемонстрировано увеличение плотности тока утечки в слоях оксида тантала в диапазоне четырех порядков путём увеличения содержания водорода в плазме в процессе роста. Наблюдаемое увеличение плотности токов утечки было связано с наличием кислородных вакансий в плёнках TaO<sub>x</sub>. Тестовая ячейка памяти на основе резистивного переключения с применением полученных слоёв TaO<sub>x</sub> продемонстрировала приемлемые для дальнейшей разработки характеристики.

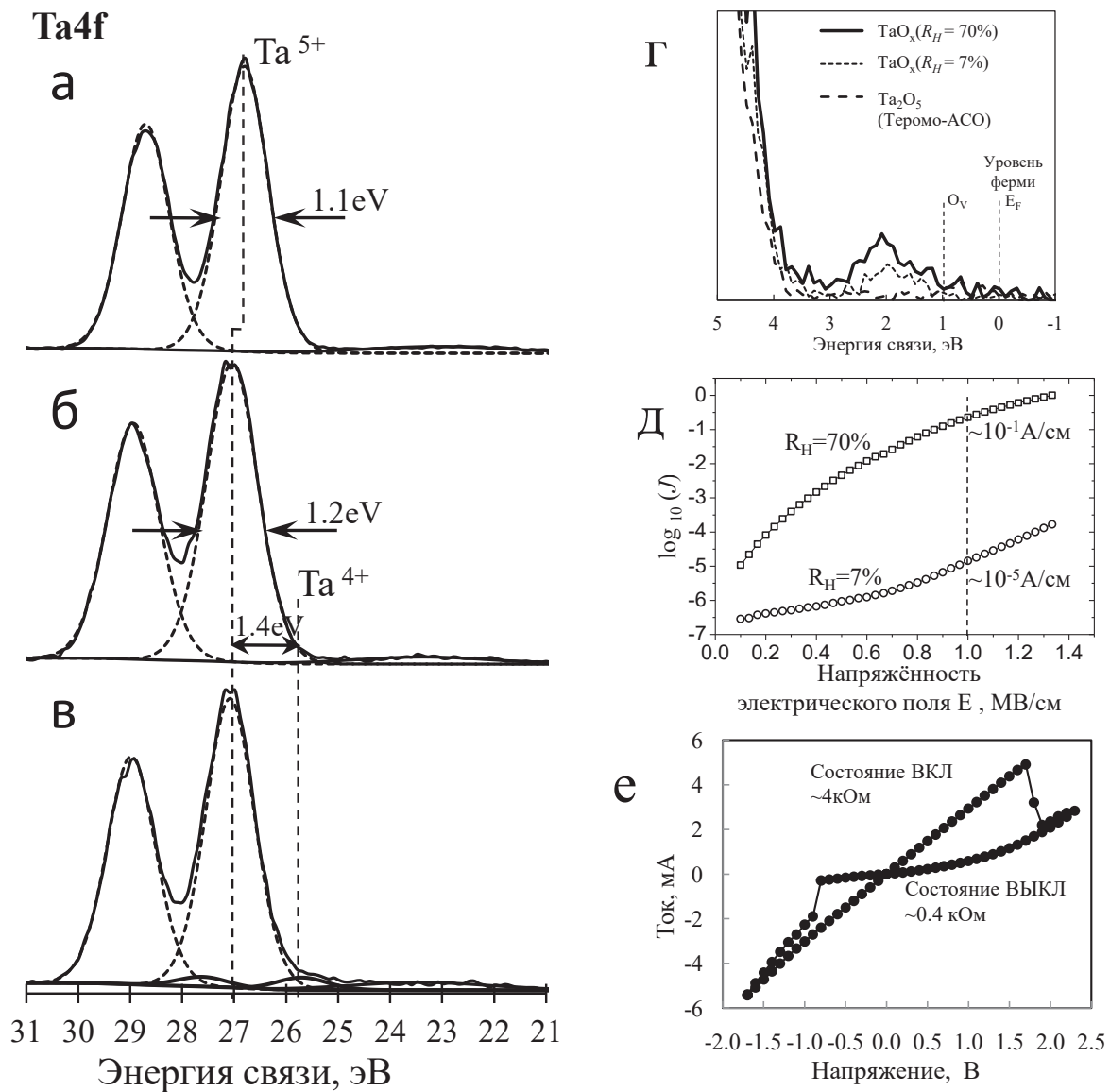


Рис. 1. Спектры РФЭС линии Ta4f, полученные от плёнки Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, выращенной термо-АСО (а), TaO<sub>x</sub> выращенной ПСАСО при  $R_H = 7\%$  (б), и TaO<sub>x</sub>, выращенной ПСАСО при  $R_H = 70\%$  (в), а также валентной зоны диэлектриков (г). Сравнение токов утечек (д) и эффекта резистивного переключения (е) для МИМ-структур на основе TaO<sub>x</sub>.

### Литература

1. Kukli K., Ritala M. and Leskela M. Atomic Layer Epitaxy Growth of Tantalum Oxide Thin Films from Ta(OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>5</sub> and H<sub>2</sub>O // J. Electrochem. Soc. 1995. V. 142. P. 1670–1675.
2. Seo J., Zhao L., Cha D., Takanabe K. [et al.]. Highly Dispersed TaO<sub>x</sub> Nanoparticles Prepared by Electrodeposition as Oxygen Reduction Electrocatalysts for Polymer Electrolyte Fuel Cells // J. Phys.

- Chem. 2013. V. 117. P. 11635–11646.
3. Lee M.-J., Lee C. B., Lee D., Lee S. R. [et al.]. A fast, high-endurance and scalable non-volatile memory device made from asymmetric Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-x/TaO<sub>2</sub>-x bilayer structures // Nature Mater. 2011. V. 10. P. 625–630.
  4. Seok J.Y., Song S.J., Yoon J.H., Yoon K.J. [et al.]. A Review of Three-Dimensional Resistive Switching Cross-Bar Array Memories from the Integration and Materials Property Points of View// Adv. Funct. Mater. 2014. V. 24. P. 5316–5339.

УДК 574.24 582.29; 543.429.22; 543.423.1

### Границы естественного метаболизма лишайника *Xanthoria parietina* (L.) Th. Fr.

*П.В. Бондаренко, Ле Тхи Бич Нгуен, С.Е. Журавлева, А.Г. Кузёмин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Один из методологических подходов к мониторингу состояния окружающей среды, называемый биоиндикацией, состоит в изучении реакции на происходящие в экосистемах изменения определенных групп организмов, чувствительных к воздействию поллютантов. К числу таких организмов относятся лишайники.

В отличие от развивающихся химико-аналитических методов анализа состояния окружающей среды лишайноиндикация является оперативным, объективным методом характеристики биологической активности (опасности) среды обитания. Основаниями для лишайноиндикации состояния воздушной среды служат низкая способность лишайников к авторегуляции и высокая степень их зависимости от физико-химических параметров среды. В рамках этого направления становится возможной разработка биологического теста качества среды с учетом синергетического эффекта, основанного на физико-химических показателях метаболизма лишайника.

Таким тестом является метод ЭПР-спектроскопии в лишайноиндикации окружающей среды. Этот метод основан на том, что увеличение антропогенной нагрузки приводит к увеличению содержания парамагнитных центров в талломе лишайника. Результаты предыдущих исследований ЭПР-спектроскопии показывали, что у образцов талломов лишайника есть два пика: узкий пик со значением  $g_1$ -фактора от 2,0032 до 2,0039 и шириной сигнала  $\Delta H = 6,4 \pm 0,4$  Гс; широкий пик со значением  $g_2$ -фактора от 2,1 до 2,2 и шириной сигнала  $\Delta H = 640 \pm 90$  Гс. Сигнал со значением  $g_1$ -фактора характерен для семихинонных свободных радикалов. Природа парамагнитных центров в талломах лишайника, которые дали сигнал со значением  $g_2$ -фактора, определяется ионами металлов железа, марганца, меди и их комплексами.

Было предположено, что увеличение концентрации парамагнитных центров в талломах лишайника можно связать с влиянием загрязняющих веществ на процессы метаболизма, что свидетельствует о протекании окислительных процессов в нем. Как известно, железо в окружающей среде находится в форме сульфата железа (II), оксида железа (III) и хлорида железа (III), медь – в форме хлорида меди (I), хлорида меди (II), оксида меди (II), сульфита и сульфата меди (II), а марганец – в форме сульфата марганца (II), оксида марганца (IV). Лишайники по своим физиологическим особенностям способны поглощать эти соединения металлов из атмосферного воздуха, что объясняет увеличение концентрации парамагнитных центров широкого пика. Кроме того, в талломах лишайника парамагнитные металлы с переменной валентностью участвуют в переносе электронов, поэтому изменение их концентрации оказывает влияние на окислительно-восстановительные процессы организма. Увеличение концентрации одновалентной меди и двухвалентного железа стимулирует образование высокотоксичных гидроксильных радикалов, вызывающих окислительное повреждение липидов. Так же марганец, который обладает более высоким окислительным потенциалом, чем железо, способствует окислению ионов  $Fe^{2+}$  в  $Fe^{3+}$  в клетках лишайника, что увеличивает концентрации парамагнитных центров широкого пика. С другой стороны, в талломах лишайника фенолы



и полифенолы, например париедин для *Xanthoria parietina* (L.) Th. Fr.), вступают в реакции со свободными радикалами, образующимися в ходе окисления липидов мембран с образованием малоактивных долгоживущих радикалов семихинонного типа, что отражается на увеличении концентрации парамагнитных центров узкого пика.

Поэтому представляет интерес изучить влияние парамагнитных металлов (железа, меди, марганца) разной валентности на естественный метаболизм лишайника *Xanthoria parietina* (L.) Th. Fr. методами ЭПР- и оптико-спектрометрией для определения устойчивости к загрязнению окружающей среды.

УДК 582.29; 543.429.22; 535.243.25

### **Исследование концентрации парамагнитных центров и пигментного состава лишайников в условиях искусственного увлажнения**

*Ле Тхи Бич Нгуен, С.Е. Журавлева, П.В. Бондаренко*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время лишайники являются одними из основных объектов исследований для выявления механизмов взаимодействия живого организма и окружающей среды. Из-за отсутствия покровных тканей процессы метаболизма лишайников в значительной мере зависят от экологических факторов среды, к которым также относится фактор влажности [1, 2].

Был проведен эксперимент по изучению влияния данного фактора на лишайник в условиях искусственного увлажнения. В эксперименте использовали гербарные высушенные образцы лишайника *Xanthoria parietina* (L.) Th. Fr., которые хранили до эксперимента в закрытых бумажных конвертах при комнатной температуре одиннадцать месяцев. Для восстановления процессов метаболизма талломы лишайника опрыскивали дистиллированной водой (регидратация) в течение семи недель. Раз в неделю часть образцов отбирали для определения в них концентрации парамагнитных центров (ПМЦ) и пигментного состава спектрометрическими методами исследования.

По результатам ЭПР-спектроскопии было обнаружено равномерное увеличение концентрации ПМЦ в талломах лишайника в течение пяти недель, которое затем уменьшалось, при этом: максимальная концентрация ПМЦ узкого сигнала увеличилась в 1,3 раза, а ПМЦ широкого сигнала увеличилась в 4,5 раза от их начальных значений.

Методом спектрофотометрии было обнаружено, что содержание экранирующих пигментов (антрахинонов) в микобионте лишайника увеличивалось в 1,4 раза к концу третьей недели, затем уменьшалось до исходного значения. Установлено, что концентрация фотосинтетических пигментов достигает максимального значения к концу четвертой недели. Такие показатели соответствуют росту хлорофиллов и более эффективному процессу фотосинтеза.

Таким образом, установлено, что регидратация восстанавливает процессы метаболизма в сухих талломах лишайника, приводя к росту фотосинтетических и экранирующих пигментов, при этом концентрация ПМЦ отражает внутриклеточные процессы жизнедеятельности лишайника, которые зависят от экологических факторов среды.

### **Литература**

1. Lichen biology / ed. by Nash. T.H. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. 486 p.
2. Бязров Л.Г. Лишайники в экологическом мониторинге. М.: Научный мир, 2002. 336 с.

УДК 541.572.52

## Координационные соединения как активные добавки к лечебным солям для ванн

*А.К. Исमतов<sup>1</sup>, И.Р. Рахмонов<sup>1</sup>, Т.Б. Николаева<sup>2</sup>, Ш. Эмомадова<sup>1</sup>, Ф.Мираминзода<sup>1</sup>,  
М.У. Бобоев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Таджикский национальный университет

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Жизнь современного человека наполнена большим количеством стрессовых ситуаций и риском, высокими психологическими, информационными и физическими нагрузками, что требует создания препаратов с меньшей токсичностью и высокой активностью. Это невозможно без фундаментальных и прикладных исследований в фармацевтической, органической, координационной химии, биологии и медицине.

Последние годы для снятия усталости, напряжения, аллергии как эффективные противовоспалительные, обезболивающие и успокаивающие средства часто используют различные ароматизированные, лечебные соли для ванн. Они состоят из морской соли, солей минеральных источников или йодированного хлорида натрия, ароматизаторов – эфирных масел шиповника, чайного дерева, сои, лесного ореха, розмарина, оказывающие ещё и положительное воздействие на кожу, а также активно борющиеся с проявлениями целлюлита [1, 2].

Следует отметить, что использование одной поваренной соли может уменьшать физиологически важное внутриклеточное соотношение элементов  $K^+/Na^+$  и снижать общую концентрацию не менее важных ионов ( $Ca^{+2}$ ,  $Mg^{+2}$ ). Поэтому солевые составы для ванн с добавками различных экстрактов растительного и животного происхождения обычно оказываются более эффективными. В связи с этим перед нами была поставлена цель – разработать солевой состав для лечебных ванн с экстрактами можжевельника, базилика, мяты перечной и лепестков роз (источников макро- и микроэлементов, витаминов) и биоактивных координационных соединений – гетеровалентных комплексов железа с ацетат, сукцинат, цитрат и салицилат ионами, способствующих транспорту кислорода и окислительно-восстановительным реакциям.

Как основной компонент была использована чистая поваренная соль Гиссарского месторождения республики Таджикистан, которая содержит до 0,002 % йода, имеет розоватый цвет и не содержит примесей. Второй компонент – экстракты указанных выше трав (четыре варианта). Их составы отличаются от большинства пряных трав, богаты эфирными маслами, гликозидами, сапонинами, дубильными и минеральными веществами, витаминами групп С и А, каротином, фитонцидами, растительными жирами и простыми сахарами, поэтому стимулируют деятельность сердца и дыхательной системы, оказывают благоприятное действие на желудочно-кишечный тракт, кровообращение, центральную нервную систему [3]. Своими лечебными свойствами все используемые травы, в том числе и вечнозеленое деревце, можжевельник, славятся издавна. Ещё тысячу лет тому назад Абуали ибн Сино называл туркестанский можжевельник горным кипарисом и отмечал, что он помогает при разрыве мышц, от болей в груди, от кашля, заболеваниях женской репродуктивной системы, открывает закупорки в желУДКе и в печени [4].

Все ценные свойства использованных трав связаны с их элементным составом, который был определен с помощью атомно-эмиссионного спектрального анализа. Исследовано содержание 39 элементов, установлено, что тяжелых, канцерогенных металлов нет. Максимальное содержание приходится на фосфор, калий, барий, натрий, а затем марганец, цинк и медь. Необходимо отметить, что базилик и плодоягоды можжевельника содержат даже золото и серебро. Эти элементы принимают активное участие во всех окислительно-восстановительных процессах, усиливают интенсивность дыхания, тем самым увеличивают синтез белка и углеводный обмен, оказывают стабилизирующее влияние на коллоидные белковые вещества, составляющие протоплазму клеток, усиливая её вязкость и уменьшая проницаемость. Часть из этих элементов

задействована при кроветворении, функциях центральной нервной системы и печени, половых желёз, ферментативных реакциях, они влияют на рост, стимулируют работу антиоксидантов. Кроме того, они входят в состав различных комплексных соединений ферментов, витаминов, участвуют в процессе их накопления [5].

Экстракты трав готовили в 60% водно-спиртовом растворе, растирая их в деревянной (фарфоровой) ступке с однородным пестиком. Измельченную траву (плодоягоды можжевельника) помещали в стеклянную банку, полностью заливали водно-спиртовым раствором. Через 3 дня экстракты готовы к применению.

Следующий компонент лечебной соли – гетеровалентные комплексы железа с ацетат, сукцинат, цитрат и салицилат ионами. Процессы комплексообразования железа с указанными лигандами изучены методом окислительного потенциала Кларка–Никольского. При увеличении  $pH$  рабочих растворов возрастает возможность образования смешаннолигандных, полиядерных и гетеровалентных координационных соединений. В каждой из систем определены оптимальные условия формирования гетеровалентных комплексов железа состава  $[Fe^{III}Fe^{II}L_2(H_2O)_T]$ , где  $L$  – один из четырех лигандов. Для осуществления быстрых и точных расчетов с помощью современных компьютерных программ использована окислительная функция (f) Юсупова. Истинные значения констант образования комплексов найдены итерацией значений теоретической окислительной функции с экспериментальной по компьютерной программе Excel.

Для использования в солевом составе для лечебных ванн гетеровалентный комплекс с цитрат ионами состава  $[Fe^{III}Fe^{II}L_2(H_2O)_6]$ , например, получен в интервале  $pH$  5,5–6,0 при соотношении Fe (III):Fe (II): лимонная кислота 1:1:2 при температуре 60 °С. В растворы солей железа (сульфаты, нитраты) при медленном нагревании постепенно необходимо приливать предварительно приготовленный раствор лимонной кислоты, а затем при перемешивании довести температуру до 60 °С и выдерживать в течение 7–8 часов. Затем оставшийся раствор охладить и выпавший в осадок комплекс отфильтровать, высушить. Полученные координационные соединения были использованы для элементного анализа и определения содержания двух- и трехвалентного железа, а затем добавлены в состав лечебных солей в количестве 1 г на 1 кг соли [6, 7].

Конечный продукт готовился перемешиванием хлорида натрия, высушенного при невысоких температурах (до 40–45 °С) с экстрактами трав (плодоягод можжевельника) на 1 кг соли до 60 мл. Предварительно 1 г комплекса растворяли в теплом растворе экстракта. Полученные солевые составы для ванн имеют специфический цвет (темно-зеленый, зеленый, салатный, розовый) и очень приятный аромат базилика, мяты перечной, можжевельника, а также роз.

Как показали результаты фармакологических испытаний, проведенных в лаборатории фармакологии института химии им. В.И. Никитина АН РТ, в санатории «Бахористон» Согдийской области Таджикистана, гетеровалентные координационные соединения значительно повышают лечебно-профилактическую эффективность солей для ванн и усиливают их специфическую активность [8].

### Литература

1. *Минеджян Г.З.* Сборник по народной медицине и нетрадиционным способам лечения. М.: Техноэкос, 1991. 329 с.
2. *Лавренов В.К.* Современная энциклопедия лекарственных растений. М.: ЗАО «ОЛМА Медиа Групп». 2009. 272 с.
3. *Русских З.А.* Влияние хлоридно-натриевой бромйодной воды на систему крови человека: автореферат диссертации кандидата медицинских наук. Пермь, 1965. 20 с.
4. *Абуали ибн Сино (Авиценна).* Канон врачебной науки: перевод с арабского П.Г. Булгакова и М.А. Салье Ташкент: Фан. 1980. Т.2. Книга 2. Изд. 2. С. 446–493.
5. *Юсуфов Н.З.* [и др.]. Свойства и элементный состав таджикского базилика. Материалы республиканской конференции «Координационная химия и ее значение в развитии народного хозяйства» с международным участием. Душанбе: ТНУ. Сино. 2011. С. 193–198.

6. Юсуфов Н.З. [и др.]. Способ получения лечебных солей с биодобавками для ванн. Патент РТ № ТЈ 514. Заявка № 1200699 от 01.02.2012. Опубликовано в официальном бюллетене «Патентный Вестник» № 73.
7. Юсуфов Н.З. [и др.]. Способ получения лечебных солей с биодобавками для ванн. Патент РТ № ТЈ 512. Заявка № 1200697 от 01.02.2012. Опубликовано в официальном бюллетене «Патентный Вестник» № 74.
8. Рахимова М. [и др.]. Разработка состава лечебной соли для ванн с экстрактом базилика и цитратным комплексом железа. Материалы IX Международной научно-практической конференции «Наука и образование». Прага: Издательский дом «Образование и наука». Серия 29. Медицина. 2013. С. 38–44. ISBN.978-966-8736-05-6.

УДК 621.382, 539.232

### **Морфология и структура тонких пленок кремния, получаемых методом химического парофазного осаждения**

*А.В. Новак<sup>1</sup>, В.Р. Новак<sup>2</sup>, Д.И. Смирнов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

<sup>2</sup>ООО «НТ – МДТ»

В последнее время объектом исследований являются различные тонкопленочные трехмерные электронные устройства с вертикальными стенками (например, V-NAND, P-ViCS, TSCAT [1]) с каналом из поликристаллического кремния (poly-Si). Согласно опубликованным работам [1, 2] в качестве поликремниевого канала (имеющего толщину около 50 нм и менее), используются пленки poly-Si, полученные кристаллизацией пленки аморфного кремния (a-Si), осажденной методом химического осаждения из газовой фазы при низком давлении (LPCVD) при температуре около 550 °С. Поскольку постоянная миниатюризация тонкопленочных устройств приводит к уменьшению толщины канала, сформированного из a-Si, то это в свою очередь может привести к тому, что на электрофизические свойства приборов будет оказывать существенное влияние шероховатость и морфология поверхности осаждаемых слоев [3]. Считается, что пленки PECVD и LPCVD a-Si, а также пленки poly-Si, полученные кристаллизацией слоев a-Si, имеют достаточно гладкую поверхность [3,4], однако ранее в основном изучалась морфология достаточно толстых пленок.

В данной работе исследовалась морфология и структура тонких LPCVD пленок кремния, осаждаемых при температуре 550 °С, при которой согласно [3, 4] пленки состоят из аморфной фазы, и поликристаллического кремния с полусферическими зёрнами (HSG-Si — Hemispherical Grain Si), осаждаемых при температуре 584 °С и имеющих большую шероховатость поверхности. Толщина получаемых слоев кремния варьировалась от 5 до 500 нм. Давление при осаждении составляло 0,2 Торр. Изучение морфологии производили посредством атомно-силового микроскопа Солвер Р47 (НТ-МДТ, г. Зеленоград). Рентгенофазовый анализ пленок проводился при помощи дифрактометра «РИКОР-8».

Из анализа АСМ-изображений (Рис. 1) видно, что морфология поверхности тонких пленок Si ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) существенно зависит от средней толщины. Так, при толщинах 40 нм и более пленки имеют сравнительно гладкую поверхность, а тонкие пленки, наоборот, имеют зернообразную структуру, которая аналогична структуре HSG-Si слоев (Рис. 2б). Особенно сильно зернистая структура выражена при средней толщине около 20 нм.



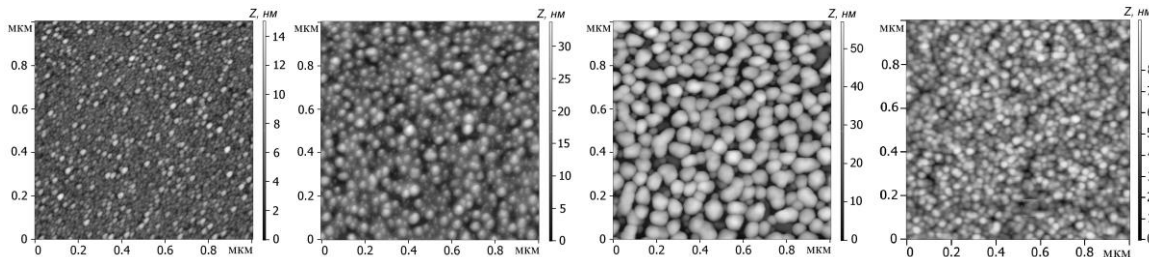


Рис. 1. АСМ-изображения пленок кремния, осажденных при 550 °С для средних толщин: 5, 10, 20 и 40 нм.

Найдено, что для пленок кремния, осажденных при 550 °С (Рис.2в), с ростом толщины на начальном участке от 5 до 20 нм среднеквадратическая шероховатость  $S_q$  значительно возрастает от 2 до 11,5 нм, и затем с ростом средней толщины шероховатость резко убывает и при  $d \approx 40$  нм  $S_q$  составляет 1,2 нм. Далее с ростом толщины  $S_q$  монотонно убывает и при  $d \approx 500$  нм  $S_q$  составляет 0,5 нм. Для HSG-Si пленок зависимость  $S_q$  от  $d$  имеет возрастающий вид, соответственно от 3,7 до 19,8 нм для всего интервала толщин от 8 до 160 нм. Видно, что для образца пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) со средней толщиной 20 нм величина шероховатости  $S_q$  составляет 11,5 нм, что практически совпадает со значениями  $S_q = 10,7 \div 13,4$  нм для HSG-Si пленок в интервале  $d$  от 30 до 70 нм.

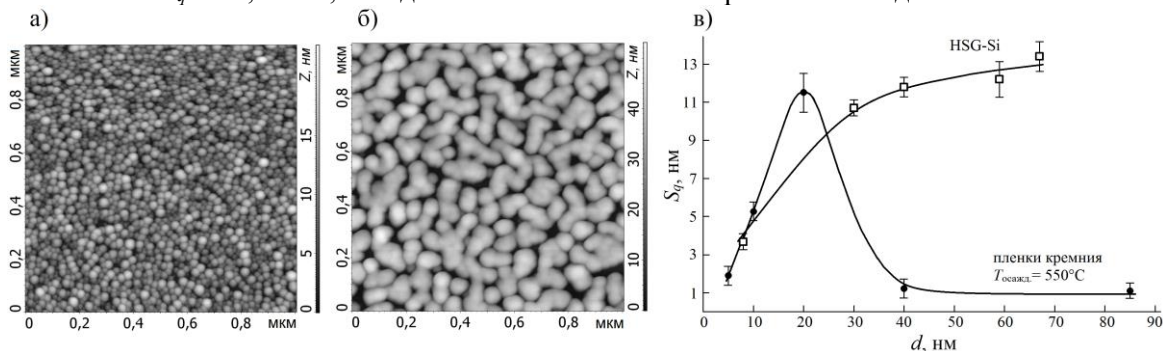


Рис. 2. АСМ-изображения пленок HSG-Si ( $T_{\text{осажд.}} = 584$  °С) со средней толщиной: а) – 8 нм, б) – 30 нм; в) - зависимости  $S_q$  от  $d$  для пленок кремния, осажденных при 550 °С и HSG-Si.

Найдено, что для пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) при толщине 20 нм относительное приращение площади поверхности  $S_{dr}$  имеет значение около 80%, это соответствует значениям  $S_{dr}$  получаемым для HSG-Si пленок толщиной  $\approx 40$  нм. В то время как толстые пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) при толщинах более 40 нм имеют величину  $S_{dr}$  не более 1%, а для «гладкого» poly-Si, получаемого при  $T_{\text{осажд.}} = 620$  °С относительное приращение  $S_{dr}$  составляет 3% (относительное приращение площади поверхности  $S_{dr}$ , определяется как отношение приращения полной площади поверхности к площади выборочной области в плоскости XY [4]).

Найдено, что дифрактограммы пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) при толщине 20 нм и поликристаллической HSG-Si пленки практически идентичны, везде наблюдается широкий пик Si(311) от наноразмерных кристаллитов кремния. Поскольку пики от других кристаллографических ориентаций кремния отсутствуют, то можно сказать, что выращенные на поверхности подложки кристаллиты строго ориентированы и образуют текстуру. Это позволяет сделать вывод, что пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) при толщине 20 нм состоят из поликристаллических зерен, аналогично HSG-Si пленкам. Кроме того, отжиг пленки кремния ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) толщиной 20 нм в атмосфере азота при 900 °С не приводит к изменению структуры, что также указывает на то, что пленка ( $T_{\text{осажд.}} = 550$  °С) при этой толщине состоит из поликристаллических зерен. Можно заключить, что в случае тонких пленок Si, осаждаемых при 550 °С, на начальном этапе до 20 нм имеет место механизм роста, аналогичный пленкам HSG-Si. Известно, при формировании HSG-Si структуры вначале происходит зарождение зерен в тонкой аморфной пленке Si вблизи поверхности подложки и далее зерна растут за счет миграции атомов Si на поверхности

осажденного аморфного кремния в процессе осаждения и последующего отжига [5]. В случае пленок кремния, осажденных при 550°C вначале происходит образование зародышей и последующий рост закристаллизованных полусферических зерен (до средней толщины 20 нм), в этот момент пленка является не сплошной. Шероховатость  $S_q$  и перепад высот на этом интервале значительно возрастают. Далее, с ростом средней толщины от 20 нм преобладает механизм зарастания образовавшихся полусферических зерен аморфным кремнием и сверху нарастает слой аморфного кремния. С ростом толщины поверхность становится все более гладкой.

### Литература

2. *Nguyen Manh-Cuong [et al.]*. Analysis of trap distribution in polysilicon channel transistors using the variable amplitude charge pumping method // *Solid-State Electronics*. 2015. V. 104. N 2. P. 86 – 89.
3. *Wu Chun-Yu [et al.]*. Novel Dielectric-Engineered Trapping-Charge Poly-Si-TFT Memory With a TiN-Alumina-Nitride-Vacuum-Silicon Structure // *IEEE Electron Device Letters*. 2011. V. 32. N 8. P. 1095 – 1097.
4. *Nasrullah J., Tyler G. L., Nishi Y.* An Atomic Force Microscope Study of Surface Roughness of Thin Silicon Films Deposited on SiO<sub>2</sub> // *IEEE Trans. on Nanotech.* 2005. V. 4. N 3. P. 303 – 311.
5. *Новак А.В. Новак В.Р. Смирнов Д.И.* Эволюция морфологии поверхности при росте пленок аморфного и поликристаллического кремния // *Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования*. 2017. N 10. С. 18 – 25.
6. *Watanabe H. et al.* Device application and structure observation for hemispherical-grained Si // *J. Appl. Phys.* 1992. V. 71. N 7. P. 3538 – 3543.

УДК 546.47

### Процессы образования координационных соединений в системе Zn(II)-изолейцин-вода

*М.У. Бобоев<sup>1</sup>, К.Дж. Суяров<sup>1</sup>, М. Рахимова<sup>1</sup>, Т.Б. Николаева<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Таджикский национальный университет

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Исследование процессов комплексообразования металлов с различными природными аминокислотами, содержащими О, N-донорные группы, является одним из наиболее перспективных и приоритетных направлений бионеорганической, координационной, физической и неорганической химии. Наиболее важными являются координационные соединения *d*-элементов, которые входят в состав сложных биоккомплексов, биополимеров, и, следовательно, имеют большую практическую и теоретическую значимости.

Процессы комплексообразования цинка с изолейцином изучены методом *pH*-метрического титрования, в основе которого лежит кислотно-основное равновесие или реакция нейтрализации. Для определения *pH* среды использовали стеклянный электрод, а электродом сравнения служил хлорсеребряный. Постоянную ионную силу рабочих растворов 0,1 моль/л при температуре 298,16 К создавали с помощью 1 М раствора NaClO<sub>4</sub>. Растворы изолейцина (Ile), ацетата цинка и их смеси определенной концентрации титровали 0,1 н NaOH.

Полученные данные обработаны с помощью специальной компьютерной программы, определены количество и состав образующихся в системе координационных соединений [1]. Результаты показали, что в системе Zn(II)–Ile–H<sub>2</sub>O образуются 6 координационных соединений следующего состава: [Zn(HL)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>; [Zn(HL)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>; [Zn(HL)(OH)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>; [ZnL(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>; [Zn(L)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>0</sup>; [Zn(L)(OH)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>0</sup>, где HL<sup>±</sup> – цвиттер ион изолейцина; L<sup>-</sup> – анион изолейцина; β<sub>gslk</sub> – константа образования комплекса, *g* – количество атомов цинка; *s* – число протонов лиганда; *l* – число координированного лиганда и *k* – количество гидроксильных групп во внутренней координационной сфере.



Для определения констант формирования комплексных форм использовали функцию образования Бьеррума. Она представляет собой среднее число лигандов, связанных с ионом металла-комплексообразователя, и рассчитывается по уравнению

$$\bar{n} = \frac{C_L - [L]}{C_M}, \quad (1)$$

где  $C_L$  – общая концентрация лиганда,  $[L]$  – равновесная концентрация лиганда,  $C_M$  – общая концентрация иона металла-комплексообразователя.

Взаимосвязь свободной концентрации комплексов цинка с константами их образования и ионные равновесия системы Zn(II)-Ile-H<sub>2</sub>O при температуре 293,16 К, ионной силе раствора 0,1 и  $C_{Zn(II)} = 0,01$ ;  $C_{Ile} = 0,01$  моль/л представлена в табл. 1.

Таблица 1

Свободная концентрация комплексов	Реакции образования комплексов
$[Zn(HL)]^{2+} = \beta_{1110} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [HL^{\pm}]$	$[Zn(H_2O)_4]^{2+} + HL^{\pm} \leftrightarrow [Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+} + H_2O$
$[Zn(HL)_2]^{2+} = \beta_{1220} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [HL^{\pm}]^2$	$[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+} + HL^{\pm} \leftrightarrow [Zn(HL)_2(H_2O)_2]^{2+} + H_2O$
$[Zn(HL)OH]^+ = \beta_{1111} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [HL^{\pm}] / [H^+]$	$[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+} + H_2O \leftrightarrow [Zn(HL)OH(H_2O)_2]^+ + H_3O^+$
$[ZnL]^+ = \beta_{1010} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [L^-]$	$[Zn(H_2O)_4]^{2+} + L^- \leftrightarrow [Zn(L)(H_2O)_3]^+ + H_2O$
$[Zn(L)_2]^+ = \beta_{1020} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [L^-]^2$	$[Zn(L)(H_2O)_3]^+ + L^- \leftrightarrow [Zn(L)_2(H_2O)_2]^0 + H_2O$
$[Zn(L)OH]^+ = \beta_{1011} \cdot [Zn^{2+}] \cdot [L^-] / [H^+]$	$[Zn(L)_2(H_2O)_2]^0 + H_2O \leftrightarrow [Zn(L^-)OH(H_2O)_2]^+ + HL$

Равновесную концентрацию лиганда  $[L^-]$  рассчитывали по формуле

$$[L^-] = \frac{(C_{NaOH}^0 - [OH^-] + [H^+]) \cdot ([H^+]^2 + K_1(K_2 + [H^+]))}{(K_1(K_2 + [H^+]) \cdot (1 + [H^+]/K_2 + [H^+]^2/K_1 \cdot K_2))}, \quad (2)$$

где  $K_1$  и  $K_2$  – первая и вторая константы диссоциации изолейцина,  $C_{NaOH}^0$  – начальная концентрация щелочи.

Значения констант устойчивости комплексных форм рассчитывали методом итерации экспериментальной ( $n_{\text{э}}$ ) и теоретической ( $n_{\text{т}}$ ) функции образования. Теоретическая функция образования определена с учетом формирования указанных выше комплексных форм использованием выражения материального баланса по следующему уравнению:

$$\bar{n} = (\beta_{1110}K_1h^3C_L + 2\beta_{1220}K_1^2h^2C_L^2 + \beta_{1111}K_1h^2C_L + \beta_{1010}K_1K_2h^2C_L + 2\beta_{1020}K_1^2K_2^2C_L^2 + \beta_{1011}K_1K_2hC_L) / (h^4 + \beta_{1110}K_1h^3C_L + 2\beta_{1220}K_1^2h^2C_L^2 + \beta_{1111}K_1h^2C_L + \beta_{1010}K_1K_2h^2C_L + 2\beta_{1020}K_1^2K_2^2C_L^2 + \beta_{1011}K_1K_2hC_L). \quad (3)$$

Расчеты численных значений констант образования комплексов осуществлены по программе «Excel» (табл. 2).

Таблица 2

№ п/п	Состав Комплекса	Константа образования, $\beta_{\text{gslk}}$	Константа нестойкости, $K_{\text{нест}}$
1	$[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+}$	$2,00 \cdot 10^{30} \pm 0,015$	$5,00 \cdot 10^{-31} \pm 0,015$
2	$[Zn(HL)_2(H_2O)_2]^{2+}$	$6,25 \cdot 10^{11} \pm 0,015$	$1,60 \cdot 10^{-12} \pm 0,015$
3	$[Zn(HL)(OH)(H_2O)_2]^+$	$3,70 \cdot 10^{26} \pm 0,015$	$2,70 \cdot 10^{-34} \pm 0,015$
4	$[ZnL(H_2O)_2]^+$	$8,15 \cdot 10^{18} \pm 0,015$	$1,22 \cdot 10^{-19} \pm 0,015$
5	$[Zn(L)_2(H_2O)_2]^0$	$7,50 \cdot 10^{32} \pm 0,015$	$1,33 \cdot 10^{-33} \pm 0,015$
6	$[Zn(L)(OH)(H_2O)_2]^0$	$1,03 \cdot 10^{28} \pm 0,015$	$9,71 \cdot 10^{-29} \pm 0,015$

Полученные результаты использованы для определения мольных долей (степеней накопления) комплексов в зависимости от  $pH$  среды. Если состав образующихся комплексов металла в общем виде представить как  $M_gH_sLe_l(OH)_k$ , то для изученной системы имеем

$$\Sigma [Zn_gH_sLe_l(OH)_k] + [HL] + [L] = 1. \quad (4)$$

С учетом вышеприведенных уравнений, рассчитаны степени накопления каждого комплекса. Кроме того, вычислены концентрации каждой комплексной формы и свободных лигандов, а по численным значениям их степеней накопления построена диаграмма их распределения. Построенная диаграмма распределения координационных соединений цинка и данные максимальных степеней накопления комплексов (табл. 3) показывают, что первый комплекс состава  $[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+}$  образуется в интервале  $pH$  1,48–5,84, максимальная его степень накопления 99,85 % соответствует  $pH$  0,8.

Таблица 3

№ п/п	Состав Комплекса	Максимальная степень накопления, %	$pH$ среды
1	$[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+}$	99,85	0,8
2	$[Zn(HL)_2(H_2O)_2]^{2+}$	6,40	5,3
3	$[Zn(HL)(OH)(H_2O)_2]^+$	78,13	4,7
4	$[ZnL(H_2O)_2]^+$	12,92	5,7
5	$[Zn(L)_2(H_2O)_2]^0$	94,64	9,7
6	$[Zn(L)(OH)(H_2O)_2]^0$	99,45	13,5

Таблица 3. Максимальная степень накопления координационных соединений цинка с изолейцином при температуре 293,16 К, ионной силе раствора 0,1 и  $C_{Zn(II)} = 0,01$ ;  $C_{Le} = 0,01$  моль/л.

Второй комплекс состава  $[Zn(HL)_2(H_2O)_2]^{2+}$  формируется при  $pH$  2,50–8,90, имеет очень продолжительный интервал существования (6,4 единиц  $pH$ ), причем максимальная его степень накопления небольшая, всего 6,40% соответствует  $pH$  5,3. Третий комплекс состава  $[Zn(HL)(OH)(H_2O)_2]^+$  существует в очень большом интервале  $pH$  1,00–10,50 (9,5 единиц), имеет наибольшую степень накопления 78,13% при  $pH$  4,7. Четвертый комплекс состава  $[ZnL(H_2O)_2]^+$  доминирует в области  $pH$  1,8 – 9,0. Максимальная его степень накопления небольшая и составляет всего 12,92 % при  $pH$  5,7. Пятый комплекс  $[Zn(L)_2(H_2O)_2]^0$  образуется в интервале  $pH$  6,0 – 14,0 и имеет область доминирования 8,0 единиц  $pH$ , максимальная степень его накопления составляет при  $pH$  9,7 94,64%. Последний комплекс состава  $[Zn(L)(OH)(H_2O)_2]^0$  имеет область существования от  $pH$  8,80 до 13,80. Максимальная степень его накопления 99,45 % при  $pH$  13,5.

### Литература

1. Чернова С.П., Трубочева Л.В. Потенциометрическое изучение поведения ионов  $Zn(II)$  в водных растворах аминокислот и комплексонов. Аналитика и контроль // 2006. Т.10. № 3–4. С. 336–341.

## Пучково-плазменная модификация природных полимеров: механизмы и технологические подходы

*Т.М. Васильева*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Экспериментально доказана перспективность использования низкотемпературной сильнонеравновесной плазмы для получения соединений и материалов, обладающих биологической активностью.

Для этого различные биополимеры (целлюлоза, хитин и его деацетилированное производное хитозан) были модифицированы в электронно-пучковой плазме (ЭПП) и комбинированной плазме, генерируемой инжекцией электронного пучка в область ВЧ-разряда.

ЭПП генерировалась при инжекции электронного пучка в различные газы, пары неорганических и органических веществ, а также парогазовые смеси и аэрозоли. В типичных условиях генерации ЭПП сильно неравновесна: в ее составе присутствуют молекулы, атомы, радикалы и ионы в основном и в возбужденном состояниях, а также электроны плазмы и электроны инжектируемого пучка. Концентрации тяжелых частиц плазмы существенно их равновесные значения, что и определяет высокую химическую активность ЭПП. Таким образом, пучково-плазменная модификация биополимеров представляет собой сложный многофакторный процесс. Обработка биополимеров проводилась в электронно-пучковом плазмохимическом реакторе, устройство и принцип действия которого представлены в [1]. Экспериментально доказано, что температуру материала в процессе обработки удается поддерживать на заданном уровне в диапазоне 300—2500 К, при этом снижение температуры вплоть до комнатной практически не сказывается на высокой химической активности плазмы [1].

В результате плазмохимического воздействия были получены пептиды и низкомолекулярные водорастворимые олигосахариды целлюлозы хитина и хитозана, а также функционализированные тонкие пленки этих полисахаридов. Структура полученных соединений и материалов была исследована методами ИК Фурье-спектроскопии, высокоэффективной гель-проникающей и обращенно-фазовой хроматографии,  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР и других современных методов анализа. Также была охарактеризована биологическая активность олигосахаридов. Например, было установлено, что водорастворимые олигосахариды хитина и хитозана, ингибируют рост и размножение ряда патогенных микроорганизмов и дрожжевых грибов.

При этом были разработаны и оптимизированы методы управления плазменно-стимулированными процессами деструкции и функционализации перечисленных соединений, установлены основные закономерности взаимосвязи между условиями плазмохимического воздействия, физико-химическими свойствами полученных продуктов и их биологической активностью. В частности, был установлен пороговый характер зависимости, связывающей степень деструкции полимера с длительностью пучково-плазменного воздействия.

Процесс управляемой ЭПП-стимулированной деградации биополимеров возможно масштабировать и получать водорастворимые низкомолекулярные биоактивные продукты с заданными свойствами в количествах, достаточных для практического использования.

Биоактивные продукты пучково-плазменной обработки могут быть основой для лекарственных препаратов, стимуляторов роста растений, включены в состав гибридных материалов и композитных покрытий, обладающих высокой биосовместимостью с тканями организма, а также различных мембран, фильтров и биосенсоров.

Работа поддержана грантом РФФИ 15-08-05724\_а.

### Литература

1. *Vasilieva T.* A beam-plasma source for protein modification technology // *IEEE Transactions on Plasma Sciences.* 2010. V. 38. N 8, P. 1903—1907.

УДК 632.95/547.7

## Синтез 2,2-дизамещенных 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланов конденсацией 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолов с кетонами

*В.С. Талисманов<sup>1</sup>, С.В. Попков<sup>2</sup>, О.Г. Карманова<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Замещенные 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланы представляют интерес как перспективные фунгициды, регуляторы роста растений, антимикробные препараты [1–4].

Основной разработанный нами способ получения 2,2-дизамещенных 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланов заключается в алкилировании хлорметил-1,3-диоксоланами натриевых солей азолов и протекает в 2 стадии. Требуется дополнительной хроматографической очистки на стадии получения каждого азольного производного, при этом варьирование заместителей происходит на первой стадии, что усложняет синтез широких рядов, необходимых для более эффективного изучения связи структура—активность. В связи с этим синтез разнообразных целевых производных в одну стадию — конденсацией кетонов с 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолами — представляет интерес.

Необходимые для циклизации 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диола синтезировали тремя альтернативными способами (рис. 1).

По первому способу 3-(1,2,4-триазол-1-ил)пропан-1,2-диол и 3-(имидазол-1-ил)пропан-1,2-диол с количественными выходами (86% и 99% соответственно) синтезировали гидролизом соответствующих 4-(азол-1-илметил)-2,2-диметил-1,3-диоксоланов кипячением в метаноле в присутствии эквимолярного количества соляной кислоты. Гидролиз 4-(азол-1-илметил)-2,2-диметил-1,3-диоксоланов не протекал при кипячении в 50% уксусной кислоте в течение 40 ч. Необходимый для синтеза целевых соединений 2,2-диметил-4-хлорметил-1,3-диоксолан был получен по реакции кетализации ацетона эпихлоргидрином с выходом 58%, поскольку более эффективный способ конденсации с 3-хлорпропан-1,2-диолами не мог быть применен в данном случае ввиду того, что температура кипения ацетона ниже температуры кипения азеотропообразующего растворителя бензола.

По второму способу диолы синтезировали окислением 1-аллилазолов по реакции Вагнера. Промежуточный 1-аллил-1,2,4-триазол получали с выходом 53% алкилированием натриевой соли 1,2,4-триазола полуторакратным избытком аллилбромидом в абсолютном этаноле при 0 °С. Среди продуктов алкилирования при помощи хромато-масс спектрометрии были обнаружены 1,4-диаллил-1,2,4-триазолий бромид и 1,3-бис-(1,2,4-триа-золил) пропан. Для уменьшения доли побочных продуктов алкилирования 1-аллил-имидазол получали алкилированием пятикратного избытка имидазола аллилбромидом в метаноле в присутствии гидрокарбоната натрия при комнатной температуре в течение 5 суток, при этом выход существенно повысился — до 93%. Промежуточные 1-аллилазолы были гладко окислены раствором перманганата калия с выходами 65% и 73% при 0–5 °С. Существенным недостатком данного метода являлась необходимость длительного фильтрования мелкодисперсного оксида марганца и удаление из гигроскопичного продукта воды.

По третьему способу 3-(1H-имидазол-1-ил)пропан-1,2-диол был получен с выходом 65% конденсацией имидазола с эквимолярным количеством глицидола в ацетонитриле, однако в индивидуальном виде получить продукт не удалось, от примеси 3-[2-гидрокси-1-(1,2,4-триазол-1-илметил)этокси]пропан-1,2-диола (продукта присоединения молекулы глицидола к целевому продукту) он был очищен с помощью флеш-хроматографии.

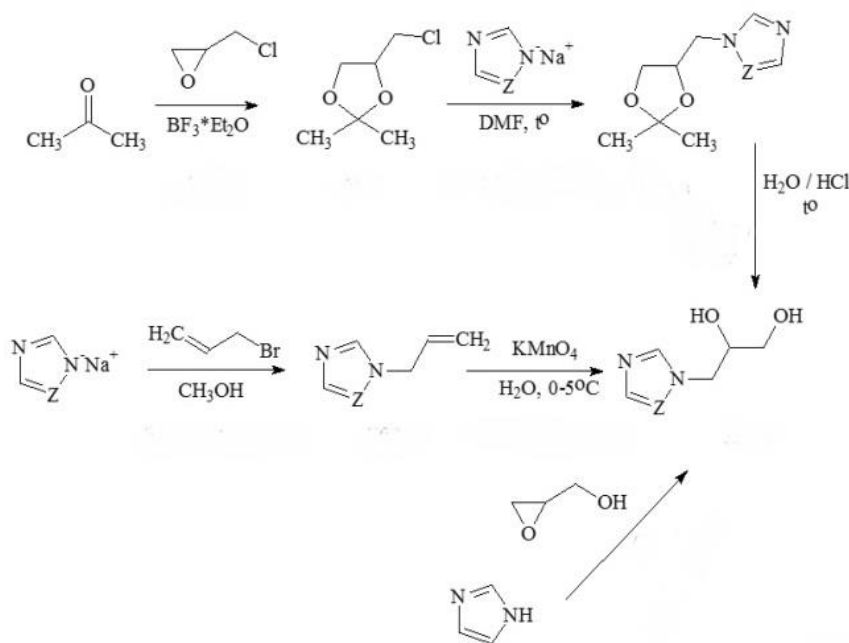


Рис. 1. Схема синтеза 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолов. Z = CH, N

Учитывая суммарный выход и количество стадий, оптимальным способом получения 3-(1H-имидазол-1-ил)пропан-1,2-диола является взаимодействие имидазола с глицидолом, поскольку продукт получают в одну стадию и с наибольшим суммарным выходом – 65%. Однако при гидролизе 4-(1H-азол-1-илметил)-2,2-диметил-1,3-диоксоланов целевые диолы были получены со спектральной чистотой без дополнительных методов очистки.

На первоначальном этапе работы мы использовали для конденсации 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолов с кетонами уже отработанный нами ранее метод циклизации кетонов с 3-хлор-1,2-пропандиолом в бензоле с азеотропной отгонкой воды при катализе *n*-толуолсульфокислотой. Однако использование как каталитического (5% мольн.), так и эквимольного и даже пятикратного избытка катализатора не приводило к получению целевых 1,3-диоксоланов даже в следовых количествах. Не улучшила результата и замена бензола на более высоко кипящие толуол или *n*-ксилол. Применение в качестве катализатора серной кислоты в тех же соотношениях и растворителях также не привело к получению 4-азолилметил-1,3-диоксоланов. Не привели к получению целевых производных и эксперименты по циклизации диолов с кетонами в присутствии молекулярных сит 3Å как в абсолютированных полярных растворителях (этанол, ДМСО, ТГФ, уксусная кислота), так и при кипячении в бензоле, толуоле, *n*-ксилоле при катализе: эфиратом трехфтористого бора, безводными хлористым цинком, сульфатами меди и магния. Не дали положительных результатов и опыты по сплавлению диолов с кетонами под вакуумом как в присутствии *n*-толуолсульфокислоты, серной кислоты, хлористого аммония, оксида фосфора, так и без катализатора. Неудачными оказались и опыты по циклизации бензофенона с имидазолилметилоксираном как при катализе эфиратом трехфтористого бора в четыреххлористом углероде, так и четыреххлористым оловом в тетрагидрофуране. Модификация кетонов (бензофенона и ацетофенона) в более реакционноспособные диметилкетали также не позволила получить целевые диоксоланы. Предварительная модификация гидроксигрупп 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолов триметилсилильными группами как триметилсилилхлоридом, так и гексаметилдисилазаном, как *insitu*, так и с предварительным выделением силилированного диола, также не привела к получению целевых диолов.

Положительные результаты реакции были достигнуты только при использовании для азеотропной отгонки смеси растворителей бензол:бутанол (2:1) при катализе 106%

мольн. *n*-толуолсульфонокислоты. Тем не менее конверсия исходных соединений была далеко не полной, и выходы целевых диоксоланов не превышали 24% (рис. 2).

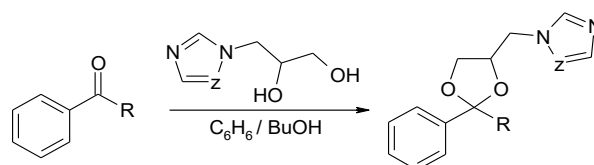


Рис. 2. Схема синтеза 2,2-дизамещенных 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланов конденсацией кетонов с 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолами

С учетом результатов проведенного исследования можно заключить, что оптимальным методом синтеза 2,2-дизамещенных 4-(азол-1-илметил)-1,3-диоксоланов является алкилирование натриевых солей 1,2,4-триазола или имидазола 4-хлорметил-1,3-диоксоланами, а способ циклизации с 3-(азол-1-ил)пропан-1,2-диолами не имеет широкого препаративного значения.

### Литература

1. *Talimanov V.S., Popkov S.V.* Synthesis and fungicidal activities of 1-[(2,2-diaryl-1,3-dioxolan-4-yl)methyl]-1H-azoles // *Russian Chemical Bulletin*, 2007. V. 56. N 5. P. 975–979.
2. *Талисманов В.С., Попоков С.В.* Синтез и фунгицидная активность 4-(азол-1-илметил)-2-алкил-2-арил-1,3-диоксоланов // *Агрохимия*. 2007. N 5. С. 53–57.
3. *Талисманов В.С., Попоков С.В.* Синтез и фунгицидная активность 2-(1,2,4-триазол-1-илметил)-1,4-диоксаспиро[4.5]деканов // *Известия вузов. Химия и химическая технология*. 2007. N 7. С. 98–102.
4. *Талисманов В.С., Попоков С.В., Архипова О.Н.* Синтез и фунгицидная активность азол-1-илметилдиоксолановых производных ариленпинаколина – аналогов диниконазола // *Химическая промышленность сегодня*. 2007. N 5. С. 32–35.

УДК 544.22

### Синтез, структура и свойства гексаферрита стронция

*С.А. Гудкова<sup>1,2</sup>, Д.А. Винник<sup>2</sup>, Д.А. Жеребцов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Южно-Уральский государственный университет

Благодаря высоким значениям коэрцитивной силы, температуры Кюри, химической и коррозионной стойкости гексаферрит стронция представляет интерес для электроники высоких, сверхвысоких и крайне высоких частот [1]. За счет анизотропии свойств наиболее перспективными являются монокристаллы SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>. В данной работе для получения монокристаллов применялся метод спонтанной кристаллизации с использованием растворителя Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>. Соотношение исходных компонентов шихты представлено в табл. 1. На следующем этапе монокристаллы были перетерты в агатовой ступке и спрессованы в таблетки для изучения изотропных свойств материала.

Соотношение компонентов в исходной шихте

Таблица 1

компонент	масса, г	содержание, мас. %
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	17,330	70,73
SrCO <sub>3</sub>	2,670	10,90
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	4,500	18,37



Исследование морфологии и элементного состава образцов проводилось с помощью электронного микроскопа Jeol JSM-7001F с энергодисперсионным рентгенофлуоресцентным спектрометром Oxford INCA X-max 80. Рентгенофазовое исследование полученных образцов проводилось на порошковом рентгеновском дифрактометре Rigaku Ultima IV, а обработка рентгенограмм – с помощью PDXL Integrated X-ray powder diffraction software. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии с помощью Netzsch 449C Jupiter определялась температура Кюри образцов. По средством дилатометра Netzsch DIL 402 CC установлены линейные коэффициенты теплового расширения в диапазоне 200–400 °С и 500–700 °С. Температурный участок 400–500 °С исключен из рассмотрения в связи с нелинейными эффектами вблизи точки Кюри.

В результате работы получены кристаллы гексагональной формы, перетерты в порошок и спрессованы в таблетки высотой 6 мм, диаметром 5 мм. По данным порошковой рентгеновской дифрактометрии образцы имеют структуру гексаферрита стронция с параметрами решетки  $a = 5,8832(4) \text{ \AA}$ ,  $c = 23,0361(14) \text{ \AA}$ ,  $V = 690,51(6) \text{ \AA}^3$ , что согласуется с референсными значениями базы данных PDF-2 [2]. Элементный анализ представленных образцов показал наличие кислорода, железа и стронция, соотношение интенсивностей спектров каждого элемента соответствует Брутто формуле  $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ .

### Температура Кюри и коэффициент линейного расширения гексаферрита стронция

Таблица 2

	кривая нагрева	кривая охлаждения	Средняя величина
Температура Кюри* (ДСК)	468,0±1,1 °С	450,2±1,8 °С	459,1 °С
Температура Кюри** (дилатометрия)	461,1±0,8 °С	450,2±1,2 °С	455,7 °С
Коэффициент теплового расширения (200°С-400°С) $\alpha_{200-400} \times 10^6$	12,2±0,3 К <sup>-1</sup>	12,0±0,2 К <sup>-1</sup>	12,1 К <sup>-1</sup>
Коэффициент теплового расширения (500°С-700°С) $\alpha_{500-700} \times 10^6$	11,4±0,8 К <sup>-1</sup>	12,4±0,3 К <sup>-1</sup>	11,9 К <sup>-1</sup>

При изучении теплового эффекта по кривым изменения массы материала от температуры установлено, что экстремумы кривых смещены относительно друг друга на 18 °С, что объясняется инерционностью нагрева и охлаждения. По этой причине за температуру Кюри принимаем среднее значение, которое составило 459,1 °С (см. табл. 2). На кривых изменения линейных размеров образца от температуры нагрева и охлаждения замечены точки экстремума при температурах, близких к точкам Кюри. Значения температур в этих точках 461,1 °С и 450,2 °С соответственно. Таким образом, можно считать, что это механический отклик кристаллической решетки на изменения магнитного момента системы, т.е. еще один способ измерения точки Кюри материалов.

Коэффициент линейного расширения при исключении области температуры Кюри составил в пределах погрешности  $12 \times 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ .

### Литература

1. Винник Д.А., Машиковцева Л.С., Гудкова С.А., Жеребцов Д.А. Выращивание ферритов стронция из раствора // Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy. 2016. V. 16 (2). P. 34.
2. Gudkova S.A., Vinnik D.A., Zhrebtsov D.A. Structural properties of partially substituted barium hexaferrite. // IBCM-2017 (The International Baltic Conference on Magnetism) \_Book-of-Abstracts. — Svetlogorsk, 2017. — P. 116.

УДК 57.04

**Физико-химические, медико-демографические и экономико-правовые аспекты устойчивого развития и обеспечения безопасности***В.Б. Куреев<sup>1</sup>, А.В. Куреева<sup>1,2</sup>*<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>Российская академия народного хозяйства и государственной службы при Президенте Российской Федерации

Необходимость учёта и физико-химических, и медико-демографических, и социально-экономических, и экономико-правовых аспектов при решении проблем обеспечения безопасности жизнедеятельности и очевидный междисциплинарный характер возникающих при этом задач создают определенные проблемы и при формировании программ учебной дисциплины «Безопасность жизнедеятельности» (БЖД). Трудность решения этих проблем усугубляется тем, что за последние годы учебные планы по основным направлениям подготовки МФТИ «Прикладные математика и физика» и «Прикладная математика и информатика» непрерывно подвергаются модификациям, в ходе которых, с одной стороны, существенно сократилась учебная нагрузка по курсу «Безопасность жизнедеятельности», а также по дисциплинам экологического, социально-экономического и гуманитарного профиля, а с другой стороны, со стороны администраторов системы образования различного уровня постоянно поступают указания по включению в учебные программы в рекомендуемых объёмах трудоёмкости тех или иных «актуальных на данный момент» вопросов, связанных с экологической, социальной и экономической обстановкой в стране, регионе, городе, например, вопросов здорового образа жизни, борьбы с алкоголизмом, наркоманией и другими вредными привычками (включая их биохимические, медико-социальные и экономико-правовые аспекты), вопросов безопасного поведения на улице, производственной безопасности, нормирования вредных воздействий и мониторинга состояния окружающей среды, экологических вопросов безопасности, проблем террористической безопасности, коррупции, стратегических рисков глобального и регионального развития и т.д., что создаёт избыточное административное давление на содержание курса БЖД.

В данной работе рассмотрены подходы к формированию программ и содержания курса «Безопасность жизнедеятельности», исходя из системного анализа, основанного на физико-химическом ресурсно-энергетическом подходе с учётом вынесенных в заголовок данной работы аспектов, и предлагаются обоснованные рекомендации по совершенствованию содержания и увеличению объёмов трудоёмкости этого курса в учебных планах МФТИ.

В работе также обсуждаются перспективы применения физико-химического ресурсно-энергетического подхода как системной основы не только для преподавания данной дисциплины, но и для решения задач управления природными, технологическими, демографическими и социально-экономическими системами, в частности, для правового анализа экономической деятельности, и последствий тех или иных социально-экономических явлений, например, коррупции и методов эффективного контроля.

Например, в настоящее время активно рассматриваются вопросы совершенствования законодательства [8] и его применения для борьбы с коррупцией и в сфере усиления контроля государства за нарушениями в области экономической деятельности, в том числе и с помощью оценок финансово-экономических рисков. Те проблемы, которые возникают при решении этих вопросов, в значительной мере обусловлены отсутствием количественных методов оценки ущерба и рисков их реализации для различных экономических агентов в результате соответствующей экономической активности, включая в том числе и осуществление противоправных действий. Подход к количественному анализу этих явлений возможен при использовании концепции биосферной цены [1, 2], применяя оценки результатов тех или иных действий с точки зрения изменения потоков и запасов ресурсов (в том числе и денежных) для

участников, имеющих отношение к рассматриваемым явлениям. Эта возможность аналогична тому, как может быть оценен ущерб и риски его реализации в случае природных и техногенных воздействий на экологические и антропогенные системы в рамках теории рисков. С точки зрения правовых аспектов использования подобных оценок возникает необходимость разработки и юридической легализации методик расчета рисков и ущербов. Эта ситуация, ранее не встречавшаяся в юридической практике, по нашему мнению, стимулирует развитие новых подходов в юридической науке и создает дополнительные возможности использования естественнонаучных наработок в социологии, экономике и юриспруденции.

В работе обосновывается вывод, что прямым следствием применения физико-химического ресурсно-энергетического анализа является то, что ключевыми показателями контроля состояния и управления развитием систем в области экологии и производственно-технологической деятельности, а также в области экономико-правового регулирования, в первую очередь, должны быть параметры, характеризующие распределение и потоки ресурсов между частями системы и окружающей систему внешней средой.

В частности, с точки зрения такого физического анализа экономики страны одним из ключевых параметров контроля, управления (а значит, и оценки качества государственного управления) должны быть размеры и структуры распределения доходов и потребления населения и интегрально-связанных с ними величины и распределения богатства населения, что хорошо согласуется с точкой зрения, изложенной в [9]. В этой связи в работе также обсуждаются возможные критерии оптимизации и методы управления данными параметрами.

### Литература

1. *Kireev V.B.* Canecological safety and sustainable development be treated as a physical concept // CEES Working paper (The Center for Energy and Environmental Studies. Princeton University). 1996. V. 134. P. 11.
2. *Киреев В.Б.* Физико-химические аспекты устойчивого развития и обеспечения безопасности // Труды 59-й научной конференции МФТИ. Молекулярная и химическая физика – М.: МФТИ, 2016. С. 127. (<http://conf59.mipt.ru/static/prog.html>)
3. *Киреев В.Б., Яворский В.А.* Экономико-демографическая модель эволюции численности и возрастной структуры социально-однородного населения // Моделирование управляемых динамических систем – М.: МФТИ. 1998, С 4–6.
4. *Киреев В., Сойнов Л., Яворский В.* Макроэкономическая модель устойчивой динамики населения // Демограф. Вып. 23– Киев: Ин-т экономики НАН Украины, 2001, С. 259–273:
5. *Киреев В.Б.* Устойчивое развитие, приоритеты в инновационной деятельности и фундаментальные исследования // Вторая международная научная школа для молодежи «Прикладные математики и физика: от фундаментальных исследований к инновациям. Сборник трудов. 2011. С. 99–102.
6. *Киреев В.Б.* Физика живых систем, технологии и социально-экономическое развитие // II Международная конференция «PhystechMED»: сборник тезисов «Физика живых систем: прошлое настоящее будущее» 2015. С. 1
7. *Бугаев А.С., Киреев В.Б., Шешин Е.П., Колодяжный А.Ю.* Катодолюминесцентные источники света (современное состояние и перспективы) // Успехи физических наук. 2015. Т. 185, С. 853–883
8. *Золотарёва А.Б., Киреева А.В.* Возможные пути реформирования ответственности за нарушения налогового законодательства // Журнал российского права. 2016. №10, С. 121–133.
9. *Чернавский Д.С., Старков Н.И., Щербаков А.В.* О проблемах физической экономики // Успехи физических наук. 2002. Т. 172. С. 1045–1066.

---

---

## Секция химической физики

---

---

УДК 577.322

### Верификация предполагаемых пептидов маркеров преэклампсии в моче беременных женщин с помощью технологии WesternBlot

*В.В. Байбакова<sup>1,5</sup>, А.Е. Бугрова<sup>2,4</sup>, В.А. Сергеева<sup>1,3</sup>, Н.В. Захарова<sup>1,4</sup>,  
М.И. Индейкина<sup>3,4</sup>, Н.Л. Стародубцева<sup>2</sup>, А.С. Кононихин<sup>2</sup>, Е.Н. Николаев<sup>1,3,4,5</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии и перинатологии им. академика В.И. Кулакова

<sup>3</sup>Институт энергетических проблем химической физики

<sup>4</sup>Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

<sup>5</sup>Сколковский институт науки и технологий

Преэклампсия (ПЭ) – гипертензивное осложнение беременных с повышенной протеинурией. Поиск биомаркеров ПЭ осуществлен на основе множества подходов, включая протеомику. Наиболее эффективным методом выявления пептидов-маркеров является: масс-спектрометрия высокого разрешения.

Цель работы: исследовать пептидом мочи беременных женщин с преэклампсией с применением масс-спектрометрии высокого разрешения, подтвердить полученные результаты с помощью технологии WesternBlot.

Материалы и методы: в центре акушерства, гинекологии и перинатологии имени В.И. Кулакова было получено 97 образцов мочи трех групп пациенток (здоровые, с умеренной и с тяжелой степенью ПЭ) с их письменного согласия. Пептиды выделены при помощи ультрафильтрации (Vivaspin-4 MWCO 10kDa, Sartorius, Германия), пептидная фракция очищена с использованием гель-фильтрации (PD-10, GE Healthcare, Великобритания). По результатам MS анализов на MALDI-TOF и ВЭЖХ-МС/МС была определена панель специфических для ПЭ-пептидов.

Присутствие белков предшественников выявленных пептидов было показано при помощи технологии WesternBlot. Белки прошли разделение в двумерном градиентом ПААГ (200В 1ч). Затем они были перенесены на нитроцеллюлозную мембрану с силой тока, соответствующей 1мА/см<sup>2</sup>, мембрана окрашена антителами (поликлональные антитела к эпитопам альфа-1-антитрипсин и олигомер A11). Пептидные фракции также прошли разделение в градиентом ПААГ-электрофорезе и были перенесены на мембрану.

Статистический анализ выявил 112 пептидов, с высокой степенью достоверности дифференцирующих пациенток по группам. Были сравнены разные техники ПААГ для белков и для пептидов в отдельности, и в качестве наиболее эффективной выбран градиентный гель-электрофорез. Хемилюминесценция присутствующих связей подтвердила наличие искомым белков альфа-1-антитрипсин в ПЭ-образцах. Однако в силу низких концентраций пептидов наличие пептидов-маркеров на данном этапе удалось зарегистрировать лишь в ряде случаев.

ПААГ-электрофорез эффективно реализован для белков и пептидов. Наличие предполагаемых белков-маркеров подтверждено.

Работа по подготовке ПЭ-образцов выполнена при поддержке гранта РФФИ 17-18-01537 А, 16-54-21011\_SNF\_a, исследование пептидов с помощью масс-спектрометрии высокого разрешения осуществлено при поддержке гранта РНФ 14-24-00114.

## Литература

1. *Buhimshi I.A. [et al.]*. Protein misfolding, congophilia, oligomerization, and defective amyloid processing in preeclampsia // *Sci. Transl. Med.* 2014.
2. *Kononikhin A.S. [et al.]*. An untargeted approach for the analysis of the urine peptidome of women with preeclampsia // *J. Proteomics.* 2016. V. 149. P. 38–43.

УДК 539.262

### Исследование структурообразования активных слоев органических солнечных батарей методами рентгеноструктурного анализа в геометрии GIWAXS

*Е.Д. Шабратова<sup>1</sup>, К.Л. Герасимов<sup>1,2</sup>, К.Н. Графская<sup>1</sup>, Д.В. Анохин<sup>1,2</sup>, Д.А. Иванов<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

<sup>3</sup>Институт наук о материалах Мюлуза

Был изучен процесс допирования полимеров PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT и PЗНТ (рис. 1), часто используемых в органической электронике, а также влияние получившихся структур на проводимость материалов.

Выбор допантов производился из энергетических соображений: если НСМО допанта лежит сильно ниже ВЗМО политиофенов (–4.8 до –5.1 эВ) и тиофеновых производных DPP (–4.9 до –5.5 эВ), то допирование достигает высокой эффективности. Таким образом, полимер PDPP(6-DO)<sub>2</sub>Tt допировался веществом CN6-CP (рис. 1), значение энергии НСМО которого равно –5.87 эВ. Свойства получившейся смеси были изучены в предыдущем исследовании [1]. Также было замечено, что анион-радикал CN6-CP• – все еще обладает высоким сродством к электрону (–5.07 эВ) и это значение оказалось более электроотрицательным, чем значение энергии ВЗМО полимера PЗНТ (–4.8 эВ). Из-за дополнительных преимуществ использования анионов в данной работе исследовалась структура смеси PЗНТ:СРТВА (рис. 1), и был проведен анализ влияния морфологии на проводимость материалов. Образцы были нанесены на кремниевые подложки методом spincoating, и получившиеся тонкие пленки были исследованы методом GIWAXS на источнике синхротронного излучения ESRF (EuropeanSynchrotronRadiationFacility). Смеси PЗНТ:СРТВАи PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP наносились на подложки при различных концентрациях, а получающиеся двумерные спектры интегрировались по меридиональному и экваториальному направлениям для получения более подробной информации.

В случае пленок PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP (рис. 2) видна серия пиков с  $q_1 \approx 0.20 \text{ \AA}^{-1}$  (это значение практически не меняется при увеличении концентрации допанта), что соответствует упаковке молекул в слое с межплоскостным расстоянием  $d_{100}^{DPP} \approx 30.7 \text{ \AA}$ . Также на спектрах видны пики с  $q_2 \approx 1.68 \text{ \AA}^{-1}$ , которые соответствуют  $\pi - \pi$  стекингу с межплоскостным расстоянием  $d_{010}^{DPP} \approx 3.7 \text{ \AA}$ . Важно отметить, что на одномерных спектрах смесей PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP не наблюдаются пики, соответствующие допанту. Из этого можно сделать вывод о том, что полимер и допант сокристаллизуются и образуют гомогенную фазу [1].

В свою очередь в случае пленок PЗНТ:СРТВА (рис. 2) наблюдается серия пиков вдоль меридионального направления с  $q_1 \approx 0.37 \text{ \AA}^{-1}$ , что является следствием упаковки молекул в слое из-за упорядочения боковых цепей полимера. Таким образом, межплоскостное расстояние равно  $d_{100}^{PЗНТ} \approx 17 \text{ \AA}$ . Также видна серия пиков на меридиане и экваторе при  $q_2 \approx 1.6 \text{ \AA}^{-1}$ , которая указывает на присутствие  $\pi - \pi$  стекинга с расстоянием  $d_{010}^{PЗНТ} \approx 4 \text{ \AA}$ . Приведенные величины указаны для чистого полимера и практически не меняются при добавлении к нему допанта. Следует отметить, что одномерный спектр образца с концентрацией допанта 0.25 содержит в себе не только пики полимера, но и профиль пиков допанта (рис. 2). Исходя из полученных данных можно сделать вывод о том, что при небольших концентрациях допант остается в аморфной фазе, в то время как



полимер кристаллизуется, вследствие чего на спектрах этих пленок видны только пики чистого РЗНТ. Напротив, при концентрации допанта 0.25, СРТВА и РЗНТ образуют две независимые кристаллические фазы, что и дает пики и того и другого вещества на спектре образца.

В результате допирования проводимость образцов сильно возросла. Подробные зависимости проводимостей пленок от величины MDR (количество допанта, отнесенное к количеству полимера) показаны на рис. 3. Из получившейся кривой (рис. 2) видно, что проводимость пленок PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP постепенно возрастает с увеличением допантов смеси до некоторого насыщения, что объясняется сокристаллизацией веществ. В свою очередь проводимость пленок РЗНТ:СРТВА резко возрастает при определенной концентрации допанта и далее практически не меняется. Такой эффект может объясняться тем, что в результате образования в материале двух независимых фаз, его проводимость определяется явлением перколяции. Также стоит отметить, что допант CN6-CP оказывает существенно более сильное влияние на проводимость полимера PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT (от 10<sup>-8</sup> См/см до 10<sup>1</sup> См/см), чем допант СРТВА на полимер РЗНТ (от 10<sup>-5</sup> См/см до 10<sup>1</sup> См/см). Таким образом, образование сокристалла (PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP) имеет лучшее влияние на проводимость пленок, чем образование двух независимых кристаллических фаз (РЗНТ:СРТВА). Это объясняется различием в механизмах появления проводимости у материалов с разной структурой.

В целом работа продемонстрировала, что структура материала оказывает сильный эффект на его электрические свойства и, впоследствии имеет большое значение для производительности устройств.

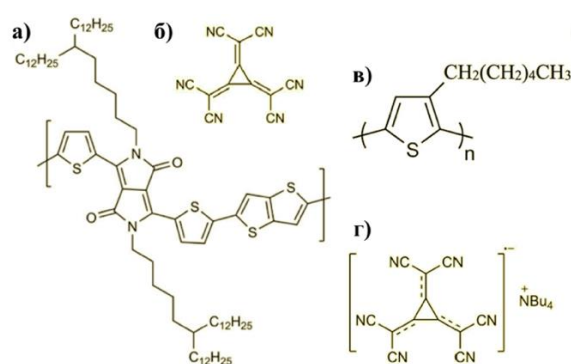


Рис. 1. Структуры а) производной дикетопирролопиррола PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT, б) гексациано-триметилциклопропана CN6-CP, в) поли(3-гексилтиофен)а РЗНТ, г) CN6-CP•-ТВА, где ТВА – тетрабутиламмоний или СРТВА

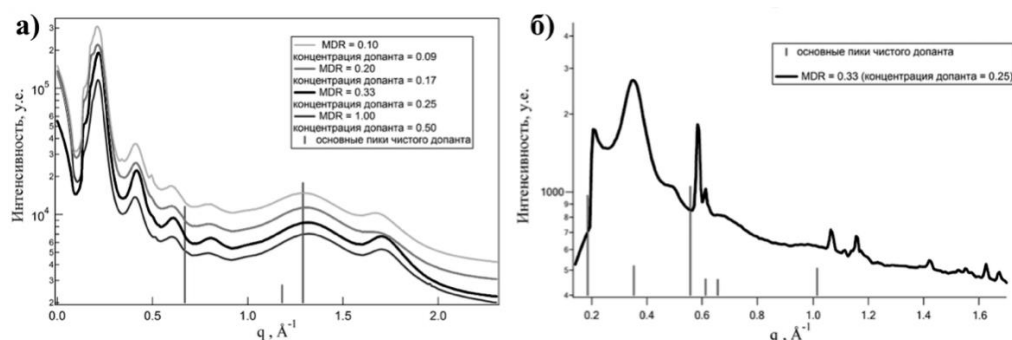


Рис. 2. Одномерные спектры а) смеси PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP, б) смеси РЗНТ:СРТВА



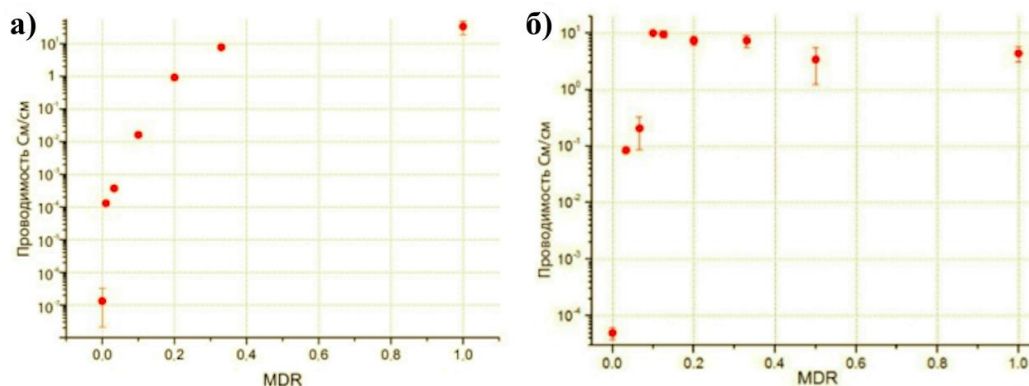


Рис. 3. Проводимость пленок со смесями а) PDPP(6-DO)<sub>2</sub>TT:CN6-CP, б) P3HT:СРТВА в зависимости от MDR

Работа была выполнена в рамках проекта ФЦП, соглашение N14.587.21.0034 от 10 октября 2016 г.

### Литература

1. *Karpov Y. [et. al.]. High Conductivity in Molecularly p-Doped Diketopyrrolopyrrole-Based Polymer: The Impact of a High Dopant Strength and Good Structural Order // Adv. Mater. 2016. V. 28. P. 6003–6010.*

УДК 539.22

### Контролируемая самоорганизация клиноподобных амфифилов для создания кубической гироидной фазы

*К.Н. Графская<sup>1,2</sup>, Д.В. Анохин<sup>1,2</sup>, Б.И. Зимка<sup>1</sup>, Д.А. Иванов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Разработан способ получения цеолитоподобной органической структуры при помощи контролируемого процесса самоорганизации амфифильных соединений. В качестве амфифильной молекулы в работе исследовалась клиноподобная пиридиновая соль C8Pugc линейными боковыми группами (рис. 1а). На конце молекулярного клина соединения C8Pugc расположена сульфоновая группа, необходимая для дальнейшего использования тонких пленок, образованных клиноподобными молекулами, в качестве ион-проводящего материала. Комбинированное взаимодействие насыщенных паров метанола и нагрева приводит к формированию стабильной кубической гироидной фазы, представляющей собой сеть непересекающихся каналов (рис. 1б) [1]. Полученная структура остается стабильной при нагреве и охлаждении до комнатной температуры даже после удаления растворителя из образца. Такое поведение жидко-кристаллического материала значительно отличается для известных аналогичных систем. Кроме того, полученные тонкие пленки способны набухать в условиях высокой влажности. В результате такого процесса формируются водные каналы внутри образца, что является важным фактором для дальнейшего применения такого материала в области разработок нового вида высокоэффективных ион-проводящих мембран для топливных элементов.

На основе фазового соотношения молекул воды и амфифильных соединений в структуре тонкой пленки были рассчитаны средние молекулярные слои формирующие гироидную фазу [2] при помощи следующего уравнения:

$$\varphi_{molecule} = 2A_0 \cdot \left(\frac{l}{a}\right) + \frac{4\pi\chi}{3} \left(\frac{l}{a}\right)^3, \quad (1)$$

здесь  $\varphi_{molecule}$  – фазовое содержание амфифильного соединения в тонкой пленки,  $l$  – толщина молекулярного слоя,  $a$  – параметр решетки,  $A_0 = 3,091$  и  $\chi = -8$  константы для гироидной кубической фазы Ia3d. Зависимость  $\varphi_{mesogen}$  от параметра решетки представлена на рис. 1в. Черными точками на рис. 1в обозначены экспериментальные данные, а красная кривая отображает математическую зависимость фазового содержания амфифильного соединения от параметра решетки при условии постоянного молекулярного слоя в структуре равного  $l = 25 \text{ \AA}$ . Было установлено, что при повышении влажности, а соответственно, и фазового содержания молекул воды в каналах гироидной структуры, наблюдается увеличение молекулярного слоя (несовпадение черных точек с красной кривой на рис. 1 в. Это явление может быть объяснено изменением конформации молекулы в структуре. При низкой влажности и максимальном содержании амфифильных молекул в структуре молекулы находятся под углом относительно оси канала, что соответствует  $l = 25 \text{ \AA}$ . При повышении содержания воды в образце молекула начинает вытягиваться, располагается по нормали к оси канала, а структура тонкой пленки становится более рыхлой. При максимальной влажности наблюдается  $l = 32 \text{ \AA}$ . Кроме того, был оценен средний радиус внутреннего водного канала  $r_{water}$  гироидной фазы в условиях различной относительной влажности при помощи следующего уравнения:

$$r_{water} = \sqrt{\frac{A_0}{2\pi|\chi|}} a - l. \quad (2)$$

Как и ожидалось, средний радиус значительно возрастает при повышении влажности. Также был оценен основной параметр характеризующий способность проводить ионы в конечной тонкой пленке, а именно  $\lambda$  – количество молекул воды приходящееся на одну сульфоновую группу:

$$\lambda = \frac{N_{water}}{N_{molecules}} = \alpha \cdot \frac{(1-\varphi_{molecule})}{\varphi_{molecule}} \cdot \frac{M_{molecule}}{M_{water}},$$

где  $\alpha$  – константа, соответствующая соотношению плотности воды к плотности амфифильных молекул (данная величина всегда больше 1, но для оценки нижней грани параметра  $\lambda$  мы приняли ее равной 1), молекул  $N_{water}$  и  $N_{molecules}$  – количество молекул воды и амфифильных соединений соответственно. Молекулярный вес амфифильных соединений  $M_{molecule}$  равен 844 г/моль. Было установлено, что при 100% влажности параметр  $\lambda$  равен 10, что составляет половину от значения  $\lambda$  для Nafion-материала, наиболее широко известного и используемого для создания ион-проводящих мембран топливных элементов. Данный факт подтверждает эффективность использования исследуемого материала для разработки ион-проводящих мембран в применении для топливных элементов.

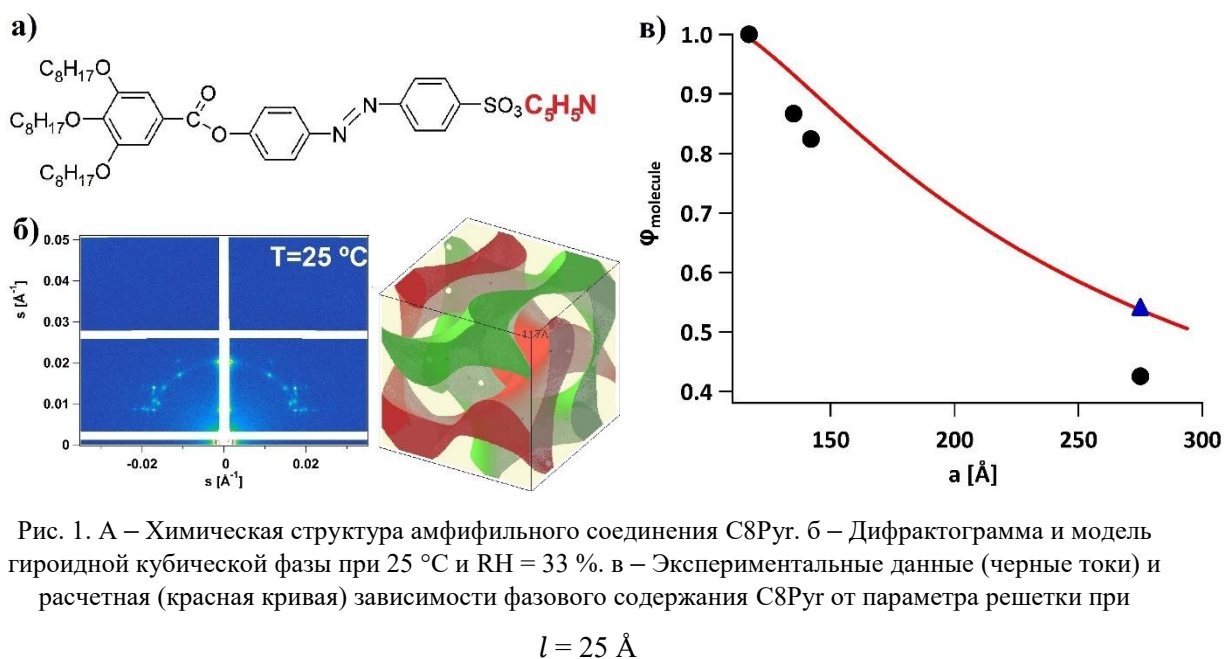


Рис. 1. а – Химическая структура амфифильного соединения С8Руг. б – Дифрактограмма и модель гироидной кубической фазы при 25 °С и RH = 33 %. в – Экспериментальные данные (черные точки) и расчетная (красная кривая) зависимости фазового содержания С8Руг от параметра решетки при

$$l = 25 \text{ \AA}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №16-13-10369).

### Литература

1. *Grafskaia K.N., Anokhin D.V., Hernandez Rueda J.J., Ivanov D.A.* Engineering of ion channels topology in self-assembled wedge-shaped amphiphiles by combination of temperature and solvent vapor treatment // *Applied Mechanics and Materials*. 2015. V. 792. P. 623.
2. *Turner D., Wang Z.-G., Gruner S., Mannoock D., Mcelhaney R.* Structural study of the inverted cubic phases of di-dodecyl alkyl-β-D-glucopyranosyl-rac-glycerol // *Journal de Physique II*. 1992. V. 2. P. 2039.
3. *Grafskaia K., Zimka B., Zhu X., Anokhin D., Ivanov D.* In situ studies of molecular self-assembling during the formation of ion- conducting membranes for fuel cells // *AIP Conf. Proc.* 2016. V. 1748. P. 040009.

УДК 544.773.32

### Разработка и исследование гибридных наноструктурированных модификаторов грунтов на основе коллоидных частиц

*Я.В. Пропад*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Разработана методика одноэтапного миниэмульсионного синтеза монодисперсных наноразмерных частиц с морфологией ядро-оболочка. Лабораторная методика синтеза состояла из двух частей: получение прекурсорананочастиц (полиэтоксисилоксан, ПЭОС) [1] и получение гибридных наночастиц на основе оксида кремния и синтетического полимера. На рис. 1 изображена реакция синтеза ПЭОС ацетоксильным способом, отличающимся полностью гомогенным характером на всех стадиях процесса. В присутствии органических мономеров превращение ПЭОС в оксид кремния сопровождалось полимеризацией органического мономера с образованием наногридных частиц. Миниэмульсия из ПЭОС/мономер-смеси в воде стабилизируется частично гидролизированным ПЭОС, без добавления ПАВ [2], как показано на рис. 2. Варьирование

концентрации ПЭОС позволяет получать оболочку из диоксида кремния различной толщины.

Методом эмульсионной полимеризации с сомономерами, протекающей по радикальному механизму, были также получены чисто полимерные коллоидные амфифильные частицы, состоящие из гидрофобного стирола и гидрофильных акрилатов. Сополимер представлял собой композицию полимеров: полистирол (75 %), поли-н-бутилакрилат (20 %), поли-трет-бутилакрилат (5 %).

Получены микрофотографии высушенных образцов синтезированной эмульсии в диапазоне температур 25–330 °С. Проведено исследование методами просвечивающей электронной микроскопии и спектроскопии рентгеновского излучения. Результаты, представленные на рис. 3, показали, что атомы кремния сосредоточены на периферии частиц, в то время как атомы углерода наблюдаются в основном в ядре частиц. Частицы типа ядро-оболочка имеют сферическую форму. Методом динамического светорассеяния установлены размеры наночастиц.

Сняты ИК-спектры с фурье-преобразованием и проведен термогравиметрический анализ для синтезированных наночастиц. Из полученных данных определены физико-химические свойства частиц типа ядро-оболочка и чисто полимерных коллоидных частиц, сделан их сравнительный анализ.

Проведен опыт травления наночастиц кислотой HCl различных концентраций. Для полученных образцов построены ИК-спектры и кривые ТГА, показано, что воздействие слабого раствора кислоты на сополимер приводит к появлению гидрофильных свойств, что позволяет удерживать воду в связанном состоянии. Таким образом, полученные с помощью разработанной методики миниэмульсии на основе стирола и гидрофильных акрилатов не требуют ПАВ, что значительно снижает экологические риски при их применении и могут быть использованы в качестве альтернативы современным иностранным модификаторам грунтов.

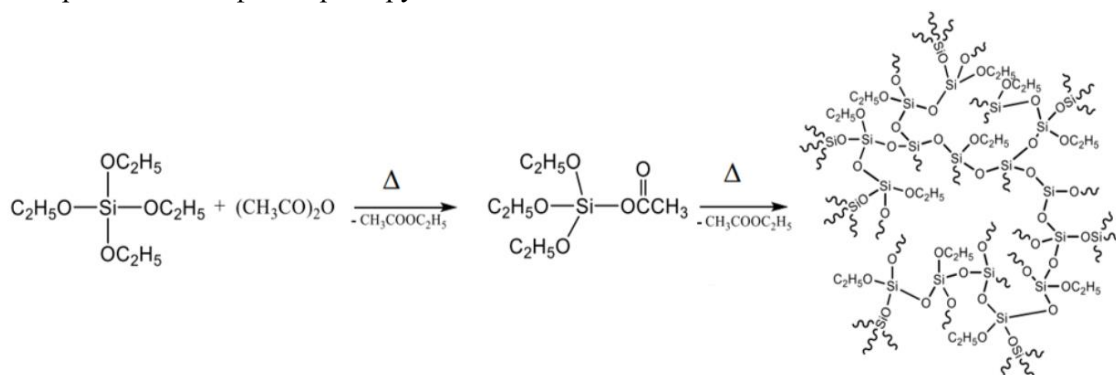


Рис. 1. Реакция синтеза ПЭОС ацетоксильным способом

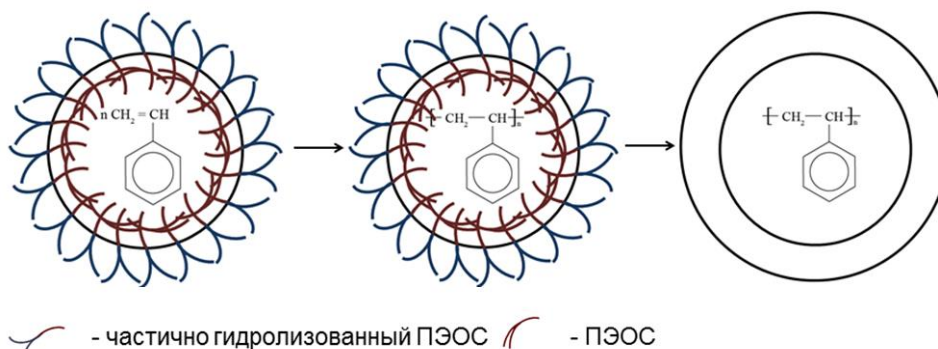


Рис. 2. Схема образования гибридных наночастиц полимер/SiO<sub>2</sub> с морфологией ядро-оболочка

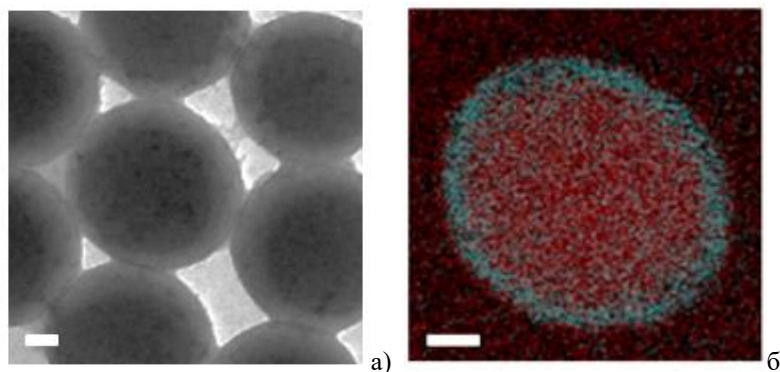


Рис. 3. Фотографии частиц типа ядро-оболочка, полученные методами просвечивающей электронной микроскопии (а) и спектроскопии рентгеновского рассеяния (б), шкала соответствует 100 нм

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки (проект ФЦП «Создание высокотехнологичных гибридных нано-структурированных модификаторов для укрепления грунтов», соглашение №14.578.21.0190 от «03» октября 2016 г.).

### Литература

1. Wang H.L., Agrawal G., Tsarkova L., Zhu X.M., Moller M. Self-templating amphiphilic polymer precursors for fabricating mesostructured silica particles: a water-based facile and universal method // *Adv. Materials*. 2013. V. 25 P. 1017.
2. Zhao Y., Chen Z., Moller M. Polymer@SiO<sub>2</sub> core-shell nanoparticles via a surfactant-free miniemulsion polymerization technique // *Macromolecules*. 2016. V. 49, N 5. P. 1552.

УДК 577.34

### Сверхбыстрые процессы переноса электрона в наноразмерных системах

*Э.А. Тастекова, В.А. Надточенко*

Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

В докладе сообщается об изучении фотоиндуцированного межфазного переноса электрона на границе раздела металлическая наночастица/полупроводник (М/ПП) и разработке на основе этого эффекта новых функциональных материалов для фотоники. В ходе проделанной работы была разработана методика синтеза системы М/ПП на основе золотых наночастиц и наночастиц оксида титана TiO<sub>2</sub>. Контакт был сформирован по методике фотокаталитического восстановления ионов золота на диоксиде титана. Динамика переноса электрона и изменения морфологии частиц при возбуждении в видимом диапазоне спектра в полосе поглощения плазмона была исследована при помощи спектроскопии поглощения и просвечивающей электронной микроскопии. Были проведены различные эксперименты для исследования механизмов реакций, проходящих в данной системе М/ПП при возбуждении плазмонного резонанса в золотых наночастицах.

Работа была выполнена в рамках гранта РФФИ, идентификационный номер 17-03-00746.



---

---

## Секция твердотельной электроники и радиофизики

---

---

УДК 538.915

### **Оптический отклик болометра на основе структуры сверхпроводник – изолятор–нормальный металл с подвешенным мостиком из нормального металла**

*Р.А. Юсупов<sup>1,2</sup>, М.А. Тарасов<sup>1,3</sup>, М.Ю. Фоминский<sup>1</sup>, В.С. Эдельман<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН

Ранее болометры на основе структуры сверхпроводник–изолятор–нормальный металл–изолятор–сверхпроводник (СИНИС) изготавливались с поглотителем из тонкой пленки алюминия, с подслоем окиси хрома или железа для подавления сверхпроводимости. Поглотитель в такой конструкции лежал непосредственно на подложке [1], что влекло за собой большие утечки тепла и в подложку, и в электроды. Предлагается новый тип СИНИС-болометра, в котором мостик из нормального металла подвешивается между двумя сверхпроводниковыми электродами. Структуры на основе переходов сверхпроводник–изолятор–нормальный металл (СИН) известны как высокочувствительные приемники терагерцового излучения. В качестве болометров используют симметричную структуру: два СИН-перехода с общим нормальным металлом (СИНИС). Поглощение терагерцового излучения в таких структурах вызывает разогрев абсорбера, который может быть зарегистрирован по увеличению туннельного тока. Обычно для оценки чувствительности считают, что энергия поглощённого излучения эквивалентна нагреву постоянным током. Предполагается, что электронная система перегревается до некоторой повышенной электронной температуры  $T_e$ . В случае довольно высокой энергии фотона  $f \gg kT$  распределение энергии электронов сложным образом зависит от электрон-электронных, электрон-фононных, фонон-электронных, фононных-фононных взаимодействий и туннелирования возбужденных электронов через СИН-переход. Функция распределения электронов в таком случае может существенно отличаться от функции распределения Ферми. Если снизить утечку тепла через фононную систему в подложку и электроды путем оптимального проектирования абсорбера, квантовый отклик детектора может быть улучшен вплоть до величины  $f/kT$  вследствие увеличения числа возбужденных электронов [2].

В данной работе предлагается оригинальный дизайн СИНИС-болометров (рис. 1а). Процесс изготовления несколько проще по сравнению с ранее используемой техникой теневого напыления. Пленки могут быть нанесены различными способами, такими как термическое испарение, электронно-лучевое испарение или магнетронное распыление. Структура обоих слоев может быть сделана с использованием простого процесса «взрывной» литографии. В первую очередь мы наносим TiAuPd разводку и контактные площадки, далее в едином цикле напыления без разрыва вакуума наносится трехслойка Al–оксид–нормальный металл. В конце мы избирательно протравливаем слой алюминия под абсорбером в области, определяемой окном в резисте [3]. Алюминий под мостиком полностью удаляется травлением в слабом основании; результаты хорошо видны в сканирующем электронном микроскопе (рис. 2b). В дальнейшем был добавлен еще один шаг: травление верхнего слоя нормального металла, который позволил решить нам сразу несколько проблем. Основная проблема изначального варианта была связана с подавлением сверхпроводимости нормальным металлом на границах СИН-переходов. Также с помощью травления абсорбера можно легко менять размеры области СИН-перехода и получать переходы с субмикронными размерами.



Болометры, интегрированные в двойную щелевую антенну и в логопериодическую антенну, исследованы в терагерцовом диапазоне частот. В качестве сверхпроводника использовался алюминий, в качестве нормального металла исследованы различные варианты, такие как палладий, гафний, медь. Образцы измерены в криостате растворения в диапазоне температур 75–480 мК. Электрический отклик составил более  $10^9$  В/Вт при нагреве структуры постоянным током через дополнительную пару контактов в специальной структуре. Далее проводились непосредственно измерения отклика на внешние излучение болометров, интегрированных в двойную щелевую антенну и логопериодическую антенну. Оптическая схема эксперимента приведена на рис. 2а. Источником излучения было черное тело, расположенное на 4 К ступени криостата, из широкого спектра которого вырезалась необходимая полоса с помощью фильтров на частоту 350 ГГц. Оптический отклик, измеренный на частоте 350 ГГц при температуре 100 мК, составил более  $2 \cdot 10^8$  В/Вт (рис. 2б). Отклик по току при такой же температуре составил 0,7 нА, что соответствует чувствительности по току  $1,1 \cdot 10^4$  А/Вт. Ток 0,7 нА – это  $4,3 \cdot 10^9$  электронов в секунду, а мощность 0,6 пВт соответствует  $2,8 \cdot 10^8$  квантов с частотой 350 ГГц в секунду, следовательно, квантовая эффективность достигла 15 электронов на квант. Достигнутая эффективность заметно выше значений 1–2 электронов на квант в традиционных СИНИС-болометрах и приближается к теоретическим оценкам в статье [1].

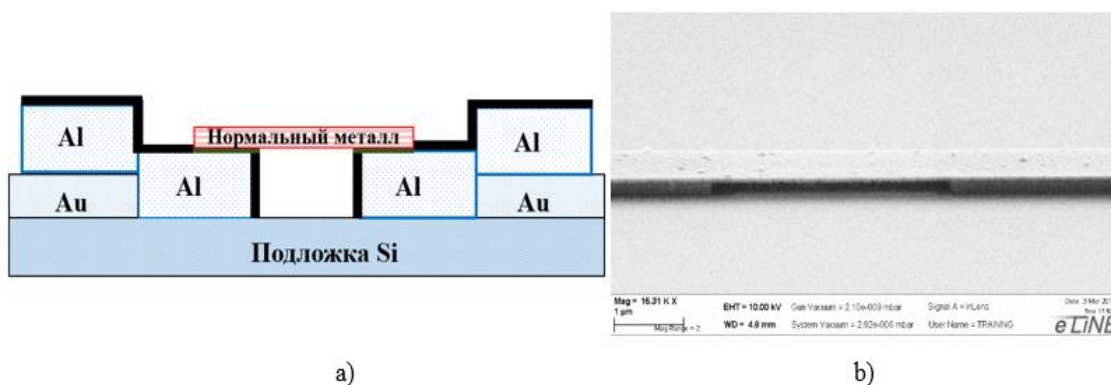


Рис. 1. а) – Схематическое изображение предлагаемой конструкции болометра, б) СЭМ – изображение изготовленной СИНИС-структуры, снятое под углом 60 градусов. Толщина слоев: Al – 80 нм,  $Al_2O_3$  ~ 1 нм, Hf – 20 нм

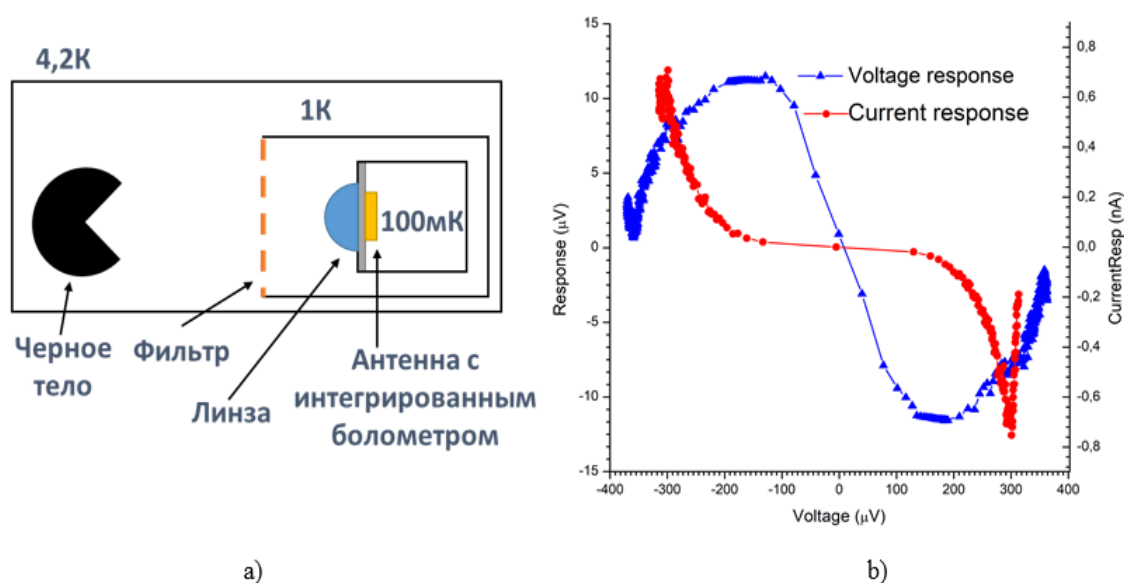


Рис. 2. а) Оптическая схема измерений в криостате; б) Оптический отклик по напряжению и току болометра с медным абсорбером в логопериодической антенне на температуру черного тела 4,5 К

### Литература

1. Tarasov M.A., Kuzmin L.S., and Kaurova N.S. Thin multilayer aluminum structures for superconducting devices // Instruments and Experimental Techn., El. 2009. V. 52, N 6. P. 877–881.
2. Devyatov I.A., Kupriyanov M.Y., High-sensitivity microwave detector based on a Josephson heterostructure // JETP Letters. 2009. V. 89, N 9. P. 451–456.
3. Nguyen H.Q., Pascal L.M.A., Peng Z.H., Buisson O., Etching suspended superconducting tunnel junctions from multilayer // Appl. Phys. Lett. 2012. P. 100. 252602.

УДК 538.915

### Влияние ловушек из нормального металла, андреевского отражения и эффект близости на охлаждение сверхпроводника в СИНИС-структурах.

А.М. Чекушкин<sup>1,2</sup>, М.А. Тарасов<sup>1,2,3</sup>, Р.А. Юсупов<sup>1,2</sup>, А.А. Гунбина<sup>4</sup>, В.С. Эдельман<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН

<sup>4</sup>Институт прикладной физики РАН

Охлаждение сверхпроводящего электрода влияет на предельные характеристики СИНИС-болометров, электронных охладителей, криогенных термометров. Перегрев сверхпроводника сопровождается понижением сверхпроводящей щели, обратным туннелированием горячих квазичастиц в нормальный электрод и повышением электронной температуры абсорбера. В случае ограниченной площади сверхпроводящих электродов применяют т.н. сверхпроводящие ловушки и стоки (trap and drain), представляющие собой пленки нормального металла, расположенные сверху и снизу от сверхпроводника и отделенные от него некоторым потенциальным барьером. Существует мнение, что ловушку из нормального металла можно наносить непосредственно на сверхпроводящий электрод, но в этом случае возникают сразу две проблемы: подавление сверхпроводимости обратным эффектом близости и андреевское отражение от границы раздела сверхпроводник–нормальный металл (СН).

Мы изготовили серию образцов и провели измерения энергетической щели СИН-переходов в зависимости от размеров сверхпроводника, наличия непосредственного контакта с нормальным металлом и расстояния от этой границы до туннельного перехода. Из рис. 1 можно сделать вывод, что нормальная ловушка с непосредственным контактом со сверхпроводником не способствует охлаждению сверхпроводящего электрода, но при этом может заметно подавить щель сверхпроводника, как за счет обратного эффекта близости, так и за счет джоулева разогрева малого объема сверхпроводника. Помимо этого участок с подавленной щелью существенно уменьшает площадь сверхпроводящего электрода. Если же между сверхпроводником и нормальной ловушкой присутствует небольшой потенциальный барьер, то при оптимальном выборе высоты барьера и прозрачности можно добиться более эффективного выноса горячих квазичастиц из сверхпроводника [1].

Улучшение охлаждения в [2] с использованием золотых подводящих электродов вблизи СИН-переходов объясняется специфическим свойством интерфейса Au–Al, который представляет собой интерметаллический компаунд, т.е. может быть описан как туннельный барьер с относительно высокой прозрачностью. Детальное исследование прозрачности границы алюминия и нормальной ловушки было проведено в [1], где доза окисления обычного туннельного барьера давление  $p = 1.3$  мбар время окисления  $t = 300$  с, тогда как для туннельного барьера ловушек доза составляет  $p = 0.18$  мбар,  $t = 1$  с, т.е. отличается на три порядка. По нашему мнению, Al–Au + интерфейс представляет собой сравнимый барьер. Вопросы влияния барьера ловушки из нормального металла были изучены в [3], где использовали разные дозы окисления туннельного барьера для термометра, охладителя и ловушки с удельным сопротивлением  $145\ 000$  Ом/мкм<sup>2</sup>,  $1200$  Ом/мкм<sup>2</sup>,  $70$  Ом/мкм<sup>2</sup>. Утверждается, что оптимальным для ловушки может оказаться предельно низкое сопротивление на уровне единиц Ом на квадратный микрон, при этом толщина сверхпроводника и нормальной ловушки должна быть увеличена до  $1$  мкм и более.

Теплоотвод от сверхпроводника с использованием нормальной ловушки с непосредственным контактом оказывается менее эффективным, чем в случае СИН-перехода с высокой прозрачностью. Это утверждение можно проиллюстрировать на энергетической диаграмме рис. 2. Аналогично Н–С теплопроводности, в случае С–Н границы транспорт горячих квазиэлектронов из С в Н сопровождается перемещением в противоположном направлении куперовской пары и квазидырки. В этом случае выполняется сохранение энергии и заряда.

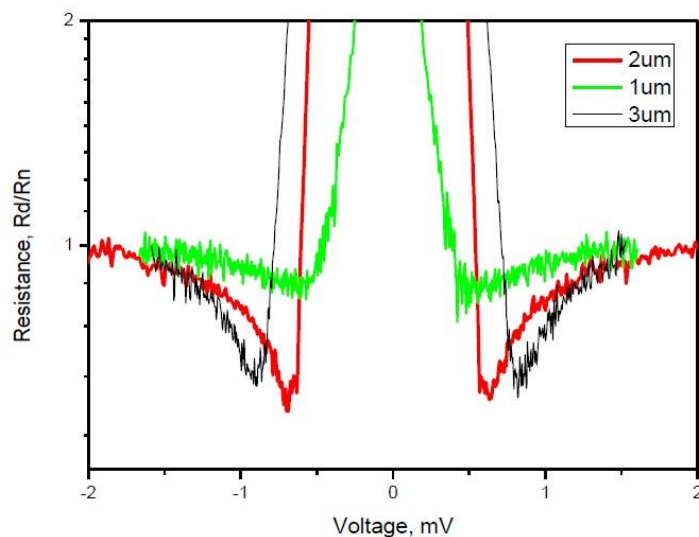


Рис. 1. Дифференциальное сопротивление четырех последовательно соединенных СИН-переходов с энергетической щелью 0.1 мВ, 0.155 мВ, 0.2 мВ для образцов с ловушкой из нормального металла на расстоянии 1, 2, 3 мкм от сверхпроводящего электрода

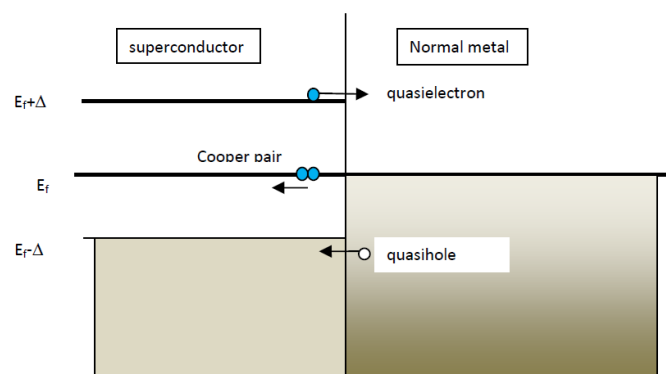


Рис. 2. Энергетическая диаграмма, иллюстрирующая, как горячий квазиэлектрон с энергией выше щели пересекает границу сверхпроводник–нормальный металл. Его перемещение сопровождается движением куперовской пары и горячей квазидырки из нормального металла, обеспечивая таким образом сохранение заряда и энергии

### Литература

1. Pekola J., Anghel D., Suppila T. [et.al]. Trapping of quasiparticles of a nonequilibrium superconductor // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 2782.
2. Kuzmin L., [et al]. Optimization of electron cooling by SIN tunnel junctions // Supercond. Sci. Technol. 2000. V 17. P. 400–405.
3. O'Neil G.C. [et al.]. Measurement and modeling of a large-area normal-metal/insulator/superconductor refrigerator with improved cooling, Phys.Rev.B 2012. V. 85. 134504.

## Высокосимметричный СКВИД постоянного тока на джозефсоновских переходах Nb/AlO<sub>x</sub>/Nb для сверхчувствительных измерений магнитных полей

*Е.А. Костюрина<sup>1,2</sup>, К.В. Калашников<sup>1,2</sup>, Л.В. Филиппенко<sup>2</sup>, В.П. Кошелец<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Разработана и оптимизирована топология сверхпроводникового квантового интерферометра (СКВИД) [1] на основе туннельных переходов Nb/AlO<sub>x</sub>/Nb с интегрированной входной катушкой для использования в системах неразрушающего контроля материалов, а также в магнитокардиографии.

СКВИД разрабатывался на основе уже зарекомендовавшей себя высокосимметричной конструкции [2, 3] (рис. 1). Базовым электродом является плёнка ниобия, в которой имеются четыре отверстия, щели от которых соединяются в центре электрода под прямым углом. Два отверстия диаметрами 70 мкм индуктивно соединяются с входными катушками, а два других, диаметрами 30 мкм, – с катушками модуляции [1, 4]. Ширина щелей равна 4 мкм, а длины – 600 и 300 мкм. Два джозефсоновских перехода Nb/AlO<sub>x</sub>/Nb площадью  $S = 2 \text{ мкм}^2$  расположены по разные стороны от пересечения щелей. Для обеспечения безгистерезисности вольт-амперной характеристики (ВАХ) переходы шунтировались полосками молибдена, имеющими общее сопротивление 5 Ом. С целью уменьшения индуктивности СКВИД [5] и, как следствие, безразмерной индуктивности [1] щели экранировались расположенными над ними через слой изолятора дополнительными полосками ниобия. Исследование показало, что полоска шириной 30 мкм уменьшает индуктивность щелей примерно на 60%. Отметим, что сконструированный таким образом СКВИД является градиентометром первого порядка, который не чувствителен к внешним постоянным магнитным полям.

Проблемой первых серий СКВИД были области большого дифференциального сопротивления в рабочем диапазоне напряжений СКВИД (рис. 2а). Исследования показали, что им отвечает два типа резонансов: собственный LC-резонанс СКВИД [6], соответствующий напряжению 32 мкВ (рис. 2а), и резонанс, связанный с возникновением стоячих волн в микрополосковой линии, образованной базовым электродом и линиями задания тока. Частота первого резонанса была увеличена в 2 раза, путём уменьшения индуктивности и емкости СКВИД (резонанс на 60 мкВ на рис. 2б). Частоты второго типа резонансов были выведены из рабочей области путем формирования под подводящими линиями щелей, уменьшивших длину резонатора в три раза. Вольт-амперная характеристика оптимизированного СКВИД изображена на рис. 2б.

Шумовые характеристики СКВИД исследовали с помощью электроники, описанной в работе [7]. Для различных топологий измеренные значения среднеквадратичного шума по магнитному потоку находились в диапазоне  $2.5\text{--}7 \text{ мкФ}_0/\sqrt{\text{Гц}}$  (рис. 3), что открывает возможности для использования данного СКВИД практически во всех магнитометрических приборах.

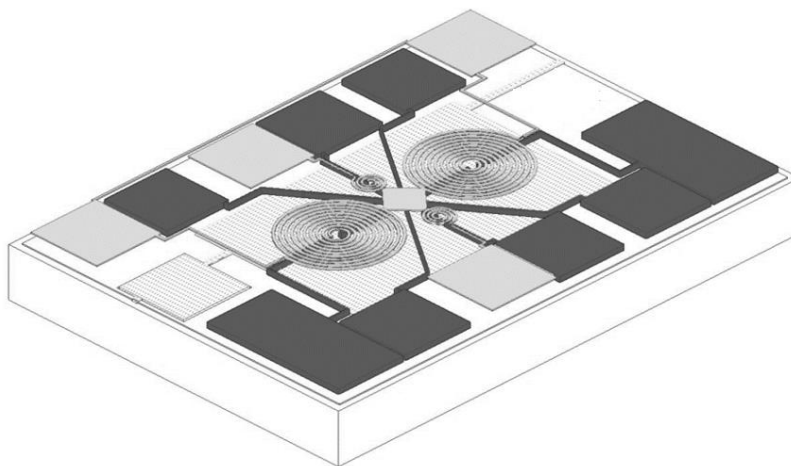


Рис. 1. Топология высокосимметричного СКВИД постоянного тока

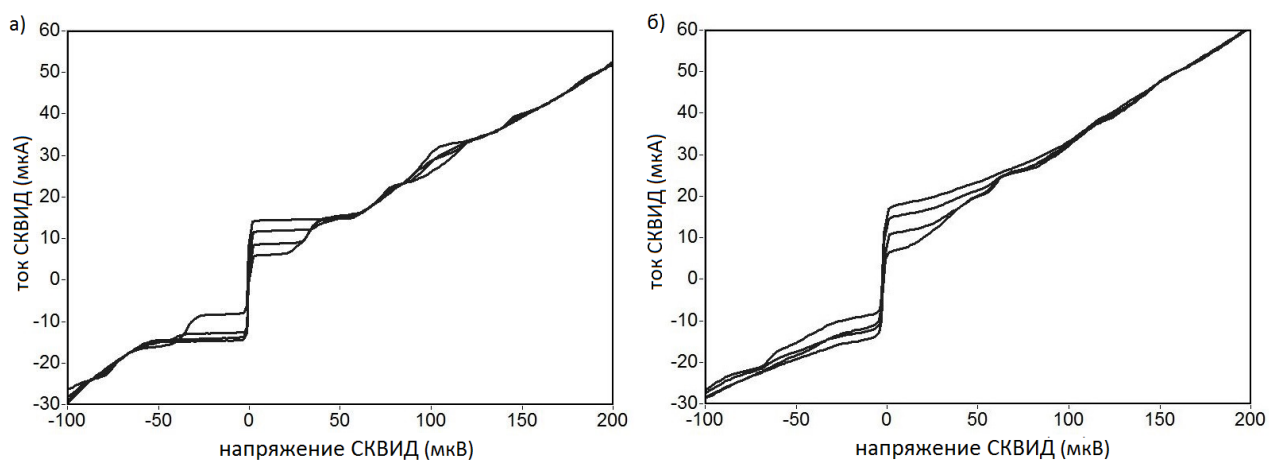


Рис. 2. Зависимость вольт-амперных характеристик СКВИД от потока магнитного поля через СКВИД для неоптимизированной топологии СКВИД-датчика (а); оптимизированной топологии СКВИД-датчика (б)

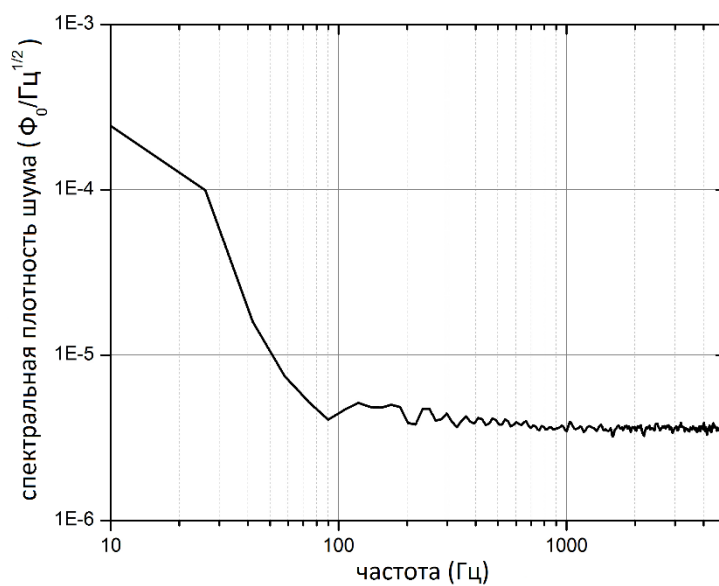


Рис. 3. Спектральная плотность шума СКВИД



### Литература

1. *Clarke J., Braginski A.I.* The SQUID Handbook: Applications of SQUIDS and SQUID Systems. Hoboken: John Wiley & Sons, 2006. 633 с.
2. *Simmonds M.B.* High symmetry DC SQUID system. Patent USA 1991. N 5. 053. 834.
3. *Костюрина Е.А., Калашиников К.В., Филиппенко Л.В., Кошелец В.П.* Разработка топологий тонкопленочных СКВИД-датчиков для сверхчувствительных измерений магнитных полей // ФТТ. 2016. Т. 58. № 11. С. 2127–2130.
4. *Knuutila J. [et al.].* Design, optimization, and construction of a DC SQUID with complete flux transformer circuits // Journal of low temperature physics. 1988. V. 71, N 5–6. P. 369–392.
5. *Ketchen M.B.* Design considerations for dc SQUIDS fabricated in deep sub-micron technology // IEEE Trans. 1991. V. M-27, N 2. P. 2916–2919.
6. *Enpuku K., Cantor R., Koch H.* Modeling the dc superconducting quantum interference device coupled to the multiturn input coil. III // J. Appl. Phys. 1992. V. 72, N 3. P. 1000–1006.
7. *Бурмистров Е.В. [и др.].* Модуляционная СКВИД-электроника для работы с высокотемпературными СКВИДами в открытом пространстве // Радиотехника и электроника. 2008. Т. 53, N 10. С. 1333–1340.

УДК 538.945

### Особенности электронного транспорта в мезоструктурах на основе FeSe в направлении перпендикулярно плоскости слоёв

*А.В. Фролов<sup>1,2</sup>, А.П. Орлов<sup>1</sup>, А.А. Синченко<sup>1</sup>, Д.А. Чареев<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Институт экспериментальной минералогии РАН

Исследован электронный транспорт в мезоструктурах на основе FeSe, изготовленных так, чтобы ток в них протекал поперёк слоёв монокристалла. Для получения структуры нужной геометрии исходный кристалл сначала становился тоньше до микронных толщин с помощью адгезионной ленты, а затем в полученной плёнке вырезался поперечный мостик (вставка к рис. 1а) с помощью фокусированного ионного пучка [1]. Необходимая форма структуры достигалась с помощью травления под разными углами ионного пучка относительно плёнки.

Были измерены температурные зависимости сопротивления и вольт-амперные характеристики полученных структур при разных температурах. Обнаружено отклонение зависимости  $dV/dI(V)$  от ожидаемого параболического вида вплоть до 35–40 К (рис. 1а), что указывает на наличие в FeSe остаточной сверхпроводимости при температурах много выше сверхпроводящего перехода [2]. Обнаруженный эффект мы объясняем существованием в FeSe высокотемпературных сверхпроводящих включений эллиптической формы [3]. Их вклад проявляется именно в поперечном транспорте ввиду малой проводимости поперёк слоёв FeSe. Для более тщательного исследования природы включений были изготовлены структуры с разными геометрическими размерами мостика. Было обнаружено, что при уменьшении длины мостика температура сверхпроводящего перехода возрастает (рис. 1б). Это согласуется с нашими предположениями о существовании в FeSe сверхпроводящих включений – в коротком мостике его длина становится сопоставимой с размером включений, в результате их вклад в проводимость возрастает.

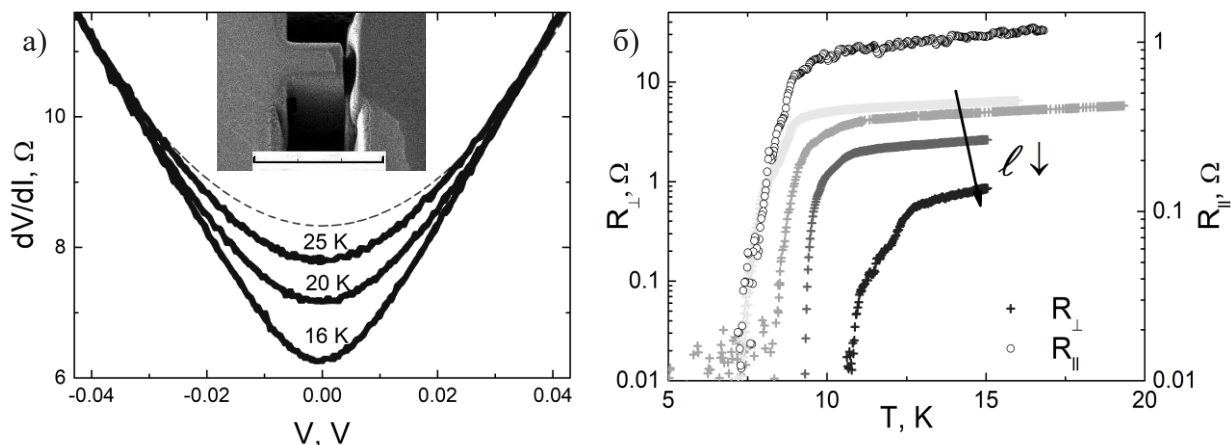


Рис. 1. Зависимость  $dV/dI$  от  $V$  на а) для поперечного мостика при разных температурах. Пунктирное обозначение соответствует параболическому виду. На вставке – изображение мезоструктуры, вытравленной поперёк слоёв FeSe, полученное фокусированным ионным пучком. Шкала соответствует 6 мкм. Сверхпроводящий переход б) в зависимости от геометрии мостика. При уменьшении длины мостика  $T_c$  возрастает. Для сравнения приведён сверхпроводящий переход для мостика, вытравленного вдоль слоёв (обозначен кружками)

Работа поддержана программами РАН.

### Литература

1. *Latyshev Y. I. [et al.]*. Interlayer tunnelling spectroscopy of the charge density wave state in NbSe<sub>3</sub> // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2003. V. 36. N 35. P. 9323.
2. *Sinchenko A. A. [et al.]*. Gossamer high-temperature bulk superconductivity in FeSe // Physical Review B. 2017. V. 95. N 16. P. 165120.
3. *Григорьев П. Д. [и др.]*. Анизотропное влияние зарождающейся сверхпроводимости на электронный транспорт в FeSe // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. V. 105. N. 12. P. 748–753.

УДК 531.715.1

### Разработка прецизионного лазерно-интерферометрического измерителя расстояний и перемещений

Ю.Б. Минин<sup>1,2</sup>, Е.С. Крупник<sup>1</sup>, М.Н. Дубров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН

Рассмотрен новый метод выполнения высокоточных измерений абсолютного расстояния до отражающего объекта. Предлагаемый принцип измерения объединяет радиотехнический метод определения расстояний и интерферометрический метод регистрации перемещений с использованием измерителя дробной доли интерференционной полосы.

Существуют измерительные установки и приборы определения расстояний, основанные на использовании модуляторов света, управляемых радиосигналом. Для измерений подсчитывается количество пространственных периодов огибающей амплитудной модуляции, равных  $\lambda_0/2$ , где  $\lambda_0$  – длина волны радиосигнала. Например, при  $\lambda_0 = 1-2$  дм может быть достигнута точность измерений порядка 0.1–0.2 мм [1]. С другой стороны, интерферометрические методы определения расстояний позволяют достичь интерференционной точности, составляющей доли  $\lambda_0/2$ , где  $\lambda_0$  – это длина волны лазерного излучения. Целью настоящей работы является создание устройства, объединяющего

преимущества устройств, основанных на интерферометрическом и радиоптическом методах определения расстояний и перемещений.

Работа предлагаемого устройства основывается на физическом существовании амплитудной модуляции лазерного излучения, являющегося следствием наличия оптических мод. Количество мод лазера определяется параметрами лазера: длиной резонатора лазера, свойствами его активной среды, кривизной зеркал и др.

Частота межмодовых биений  $\Delta\nu$  двухмодового лазера определяется величиной  $c/(2Ln)$ , где  $L$  – длина резонатора,  $c$  – скорость света в вакууме,  $n$  – показатель преломления активной среды [2, 3]. Для грубого измерения расстояния до отражающего объекта подсчитывается количество пространственных периодов огибающей оптического модулированного сигнала. Для настройки используется особенность интерферометра, работающего на нескольких оптических частотах, в частности, зависимость видности интерферограммы от соотношения измеряемой длины, длины резонатора и амплитуд генерируемых мод. При этом частота межмодовых биений изменяется путем увеличения длины резонатора, например, при его нагреве. Оптимальная точность достигается путем настройки на частоту, которой соответствует минимум видности интерференционной картины. В нашем случае видность интерференционной картины имеет вид

$$V(l) \approx V_0 \frac{\sqrt{U_{10}^4 + U_{20}^4 + 2U_{10}^2 U_{20}^2 \cos(2\pi \Delta\nu l/c)}}{U_{10}^2 + U_{20}^2}, \quad (1)$$

где  $V_0$  – видность в одномодовом режиме,  $U_{10}$  и  $U_{20}$  – амплитуды интерферирующих волн,  $l$  – оптическая разность хода,  $c$  – скорость света. Для точных измерений в интерферометре вычисляется количество интерференционных полос, период которых равен  $\lambda/2$ , где  $\lambda$  – длина волны излучения используемого лазера, и определяется дробная доля интерференционной полосы.

В схеме устройства используется He-Ne-лазер ( $\lambda = 633$  нм), ширина доплеровского контура усиления  $\Delta\nu_D$  равна 1.5 ГГц, в пределах которой двухмодовый режим реализуется при  $L=10-20$  см. С изменением температуры резонатора лазера меняется расположение оптических мод относительно доплеровского контура, а значит, и амплитуда каждой оптической моды.

Расстояния и перемещения проводились на экспериментальной установке, включающей лазер ОКГ-16, трехзеркальный интерферометр, гетеродинный фотоприемник, осциллограф и частотомер. Изучались изменения видности интерференционной картины и частоты межмодовых биений при нагреве резонатора.

График зависимости видности от изменения длины резонатора приведен на Рис. 1а. В точке минимума  $l_0$  при  $U_{10} \approx U_{20}$  функция (1) имеет вид  $k|l - l_0|$ , где коэффициент  $k$  зависит от амплитуд  $U_{10}$ ,  $U_{20}$  и  $V_0$ . Такое резкое изменение видности используется для оптимальной настройки частоты лазера при изменении расстояния  $l$  (Рис. 1, 2). Экспериментальная зависимость изменения частоты межмодовых биений от изменения длины резонатора, приведенная на рис. 1б, имеет периодический характер с периодом  $\lambda/2$ . Наблюдаемый характер изменения частоты связан с формой доплеровского контура [4] и используется для управления расстоянием между частотами генерируемых мод.

Предложенный прибор состоит из четырех блоков: блока лазера БЛ, блока подвижного зеркала БЗ, блока гетеродинного фотоприемника БФПГ и аналитического блока АБ. Пучок с выхода лазера поступает на зеркало БЗ, закрепленное на измеряемом объекте, и отражается обратно. На выходе фотодиода ФД формируется интерференционный сигнал  $ch1$  и сигнал  $ch2$  межмодовых биений, которые с выхода БФПГ поступают на аналитический блок. Микроконтроллер МК производит обработку этих сигналов и управляет работой прибора. Если заданная точность измерений расстояний и перемещений составляет  $\delta l = \lambda/2$ , где  $\lambda = 633$  нм, то частота межмодовых биений должна измеряться с точностью  $\delta(\Delta\nu) \approx c\lambda/(2lLn)$ . Для более точных измерений расстояний определяется дробная доля интерференционной полосы. По этой схеме может быть

разработан прибор для детектора гравитационных волн ELISA, который будет построен в 2034 году.

Разработана схема нового лазерного прибора для измерения абсолютных расстояний и перемещений. Подтверждена возможность использования изменения длины резонатора лазера для применения в точных интерференционных и дальномерных устройствах при измерении частоты межмодовых биений методом гетеродинирования. В дальнейшем разработанный прибор можно модернизировать для повышения точности и дальности измерений.

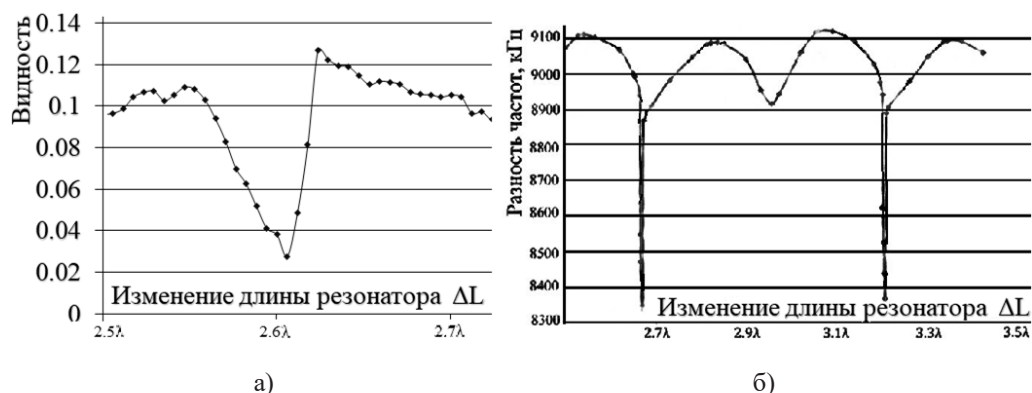


Рис. 1. Зависимость видности а) и частоты межмодовых биений б) от длины резонатора

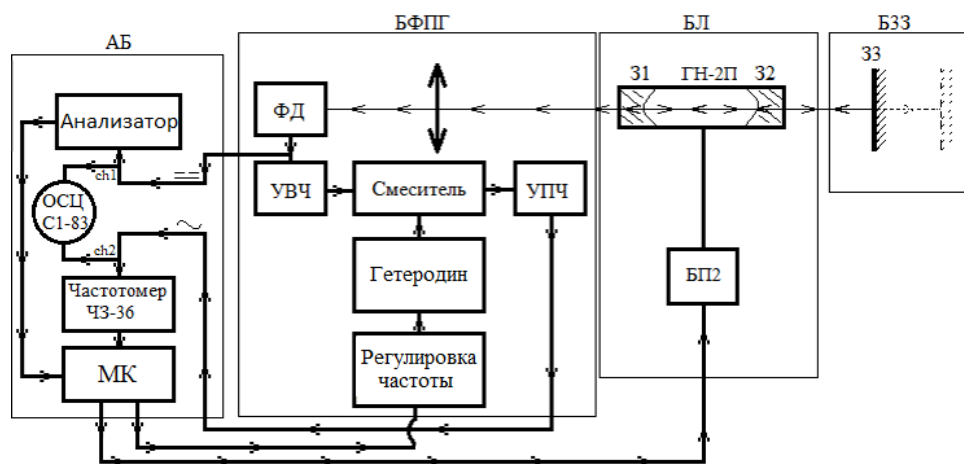


Рис.2. Блок-схема лазерно-интерферометрического измерителя расстояний и перемещений

### Литература

1. Данилов Е.А., Кочегаров И.И., Фильчиков Р.С. Анализ методов лазерной дальнометрии высокой точности. Университетское образование (МКУО-2015). Пенза. 2015. 111–113.
2. Ярич А. Квантовая электроника: пер. с англ / под ред. Я.И. Ханина. М.: Сов. Радио. 1980. 498 с.
3. Дубров М.Н. Длиннобазовая лазерная интерферометрия: учет обратного рассеяния: учебно-методическое пособие. М. МФТИ. 2011. 20 с.
4. Лэмб У. Квантовая оптика и квантовая радиофизика: пер. с англ. и фр. – М.: Мир. 1966. 452 с.

## Применение нестационарного эффекта Джозефсона для спектрального анализа электромагнитного излучения и характеристик электродинамических структур

*А.В. Снежко<sup>1,2</sup>, В.В. Павловский<sup>1</sup>, В.И. Покалякин<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

До сих пор в терагерцовом диапазоне частот отсутствуют компактные, быстро перестраиваемые и коммерчески выгодные как источники излучения, так и анализаторы. Связано это с тем, что эффективность таких источников и анализаторов существенно ухудшается, когда их рабочий частотный диапазон продлевается в терагерцовый из традиционных СВЧ- или ИК-диапазонов. Создание и разработка новых устройств необходима для современных задач физики, медицины и т.д. Существование нестационарного эффекта Джозефсона позволяет проводить спектральный анализ внешнего электромагнитного излучения [1] и характеризацию частотно-зависимых внешних структур [2]. Открытие высокотемпературных сверхпроводников расширило частотный диапазон приборов на основе данного эффекта до терагерцового.

При воздействии монохроматического излучения с частотой  $f$  на джозефсоновский переход (ДП) аналитическое решение для отклика  $\Delta I(V) = I(V) - I_0(V)$  ДП, то есть разницы между вольт-амперной характеристики (ВАХ) под действием внешнего излучения и без, в приближении малого сигнала [3]:

$$\Delta I(V) = \frac{\pi I_c^2 R_n^2}{8 I(V) V} \left( -\frac{1}{\pi} \right) P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S(f) df}{f - f_j}, \quad (1)$$

где  $P$  – главное значение интеграла по Коши,  $S(f)$  – спектр внешнего сигнала. Применяя обратное гильберт-преобразование к экспериментально измеряемой величине, можно найти спектр излучения  $S(f)$ . С помощью гильберт-спектроанализатора были проведены измерения спектральных характеристик цепочек умножителей на планарных диодах Шоттки с общим коэффициентом умножения  $\times 30$  (рис. 1).

Также джозефсоновский переход чувствителен к внешнему электродинамическому окружению. Анализ такого окружения упрощается, если ДП описывается резистивной моделью, а окружение представляется в виде частотно-зависимого импеданса. В этом случае изменение ВАХ ДП пропорционально действительной части адмиттанса электродинамического окружения  $Y_{ext}(f)$  [2]:

$$\delta V(I) = R_n (I R_n - V) \operatorname{Re}[Y_{ext}(f)]. \quad (2)$$

Результат взаимодействия ДП с внешним планарным открытым резонатором с длиной стороны квадрата  $d = 235$  мкм представлен на рис. 2.

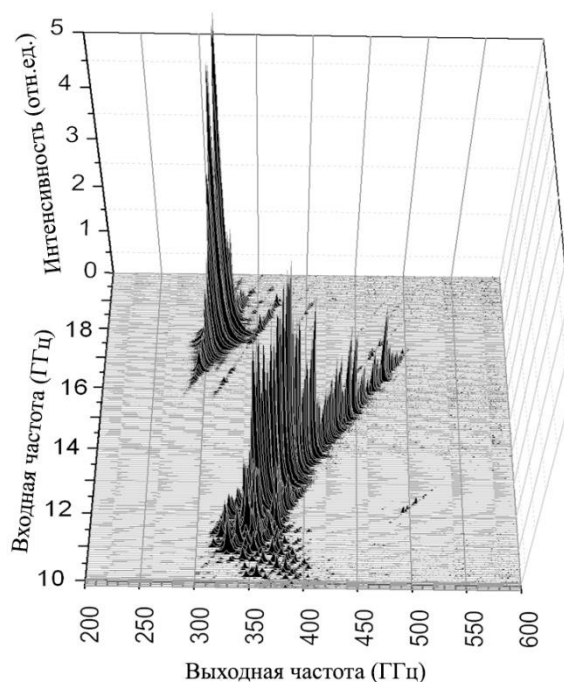


Рис. 1. 2D-спектр  $S(f_{in}, f_{out})$  интенсивности излучения от цепочки частотных умножителей с расчетным фактором умножения  $\times 30$ . 201 спектр был измерен с помощью гильберт-спектроанализатора для входных частот в диапазоне от 10 до 20 ГГц с временем сканирования 500 мкс [4]

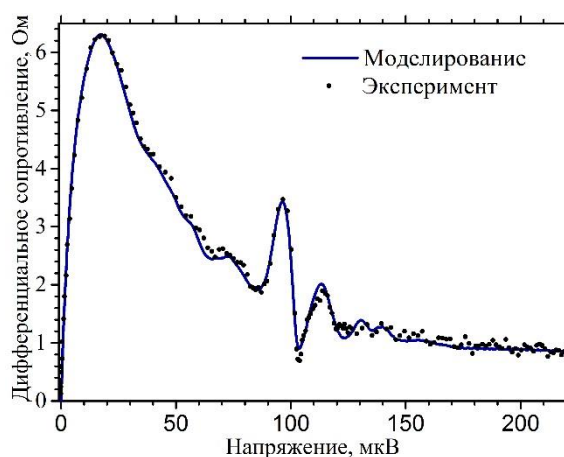


Рис. 2. Экспериментальная и расчетная зависимости дифференциального сопротивления джозефсоновского перехода, взаимодействующего с планарным открытым резонатором с  $d = 235$  мкм [5]

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-07-00938.

### Литература

1. Likharev K.K. Dynamics of Josephson Junctions and Circuits. New York: Gordon and Breach, 1986. 423 p.
2. Волков А.Ф. Влияние импеданса внешней цепи на вольтамперную характеристику джозефсоновского перехода // Радиотехника и электроника. 1972. Т.17. С. 2581–2583.
3. Дивин Ю.Я. [и др.]. Спектроскопия некогерентного излучения с помощью эффекта Джозефсона // Письма в Журнал технической физики. 1980. Т 6. Вып. 17. С.1056–1061.
4. Snezhko A. and [et al.]. Terahertz Josephson spectral analysis and its applications // Superconductor Science and Technology. 2017. V. 30. I 4.



5. *Volkov O. and [et al.]*. Josephson spectroscopy for local diagnostics of planar resonator systems in the millimeter wave band // *Journal of Communications Technology and Electronics*. 2015. V. 60. 19.

---



---

## Секция нанотехнологий и наноэлектроники

---



---

УДК 530.145

### Вентиль C-NOT в системе на основе двойных квантовых точек в микрорезонаторе под управлением лазерного поля

*А.В. Цуканов<sup>1,2</sup>, В.Г. Чекмачев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Физико-технологический институт РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Полупроводниковые квантовые точки (КТ) широко используются в различных областях науки и техники [1, 2], что обусловлено, в первую очередь, возможностью задать необходимые спектроскопические свойства структуры, регулируя форму, химический состав, размеры и другие параметры КТ. Одной из перспективных областей, в которой могут применяться системы на их основе, является квантовая информатика, в частности, для реализации элементарных носителей квантовой информации – кубитов [3]. Интегрирование КТ в высокодобротные оптические микрорезонаторы (МР) позволяет осуществлять многокубитные вентили за счет создания запутанных состояний посредством взаимодействия КТ с модой МР. Эта особенность гибридной системы «КТ+МР» дает принципиальную возможность построения квантового регистра на ее основе. Стоит однако заметить, что современные МР не обладают достаточным уровнем добротности ( $Q \sim 10^4 - 10^5$  для резонаторов выполненных в виде микродисков [4]) для сохранения значительного времени когерентности (выполнения хотя бы нескольких элементарных операций). Одним из решений данной проблемы является использование дополнительного канала возбуждения – лазерного поля, что позволит минимизировать взаимодействие системы с диссипативными процессами в МР при инициализации кубита и во время вычислений.

В нашей работе рассматриваются две одноэлектронные двойные квантовые точки (ДКТ) помещенные в моду МР и управляемые лазерным полем. Нами разработана математическая модель, позволяющая описать квантовомеханическую эволюцию системы с учетом ряда диссипативных процессов, происходящих в структуре. Для решения этой задачи используется подход, базирующийся на основе уравнения Линдблада [5] для матрицы плотности электрон–фотонной системы. Базис представлен состояниями  $|k, p, n\rangle$  для всех  $k = \{A1, B1, T1\}$ ,  $p = \{A2, B2, T2\}$  - уровни ДКТ и  $n = \{0, 1\}$  - количество фотонов в резонаторе, а динамика описывается уравнением

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[\tilde{H}, \rho] + L_s \rho,$$

где  $\rho$  – матрица плотности,  $\tilde{H}$  – полный гамильтониан системы,  $L_s \rho = \sum_m \gamma_m L_m \rho$  –

суммарный оператор Линдблада, а  $L_m \rho = 2A_m \rho A_m^\dagger - A_m^\dagger A_m \rho - \rho A_m^\dagger A_m$  – парциальный оператор Линдблада, характеризующий распад некоторой величины, которой соответствует оператор  $A_m$  ( $\gamma_m$  – скорость распада). В расчетах учитываются неидеальность резонатора, случайные переходы между основными и возбужденными уровнями системы, дефазировка состояний ДКТ, а также процессы комбинированного фонон–фотонного рассеяния.

Результаты моделирования для подобной системы с реалистичными характеристиками [4] приведены на рис.1. Логические состояния кубитов отождествляются с основными уровнями ДКТ. Контролирующий кубит является ассиметричным в том смысле, что взаимодействие лазерного поля происходит только с правой КТ, отвечающей за логическое состояние  $|10\rangle$ . Переход  $|B1, A2\rangle \rightarrow |B1, B2\rangle$  ( $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$ ) соответствует

выполнению инверсии, необходимой для вентиля C-NOT. В силу симметрии контролируемого кубита  $|B1, B2\rangle \rightarrow |B1, A2\rangle$  ( $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$ ) происходит за то же время и с такой же вероятностью, что и  $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$ . Важной особенностью является то, что при задании других начальных состояний системы переноса заселенностей не происходит ( $|01\rangle \rightarrow |01\rangle$  и  $|00\rangle \rightarrow |00\rangle$ ). Это полностью соответствует применению оператора C-NOT к кубитам.

На рис. 1 введены следующие обозначения:  $P_{A1,A2}, P_{A1,B2}, P_{B1,A2}, P_{B1,B2}$  – вероятности нахождения в соответствующих состояниях,  $g_{A1}, g_{B1}$  и  $g_{A2}, g_{B2}$  – коэффициенты связи ДКТ с МР,  $\Omega_{A1(B1)}$  и  $\Omega_{A2(B2)}$  – коэффициенты связи ДКТ с лазерным полем,  $\kappa$  – скорость диссипации фотонов из МР,  $\gamma$  – спонтанные переходы между уровнями ДКТ,  $\gamma_D$  – дефазировка,  $\gamma_{PH}$  – комбинированная фотон-фононная релаксация.  $\omega_c$  и  $\omega_L$  – частоты МР и лазера соответственно,  $E_{A1(B1,T1)}$  и  $E_{A2(B2,T2)}$  – энергии уровней двух ДКТ,  $\omega_{A1T1(B1T1)}$  и  $\omega_{A2T2(B2T2)}$  – частоты переходов в ДКТ.

Двухкубитный квантовый вентиль C-NOT реализуется в системе за время порядка 100 пс (для  $\omega_L \sim 0.1$  эВ) с точностью 93%, что находится на одном уровне с экспериментальными реализациями данной операции в полупроводниковых системах при гелиевых температурах [6]. В результате улучшения когерентных свойств структуры возможно достижение выполнимости вплоть до 99,999999% для идеального случая. Параметры подобраны таким образом, что заселенность состояний с фотоном в резонаторе минимальна. Это позволяет получить относительно высокую точность выполнения даже для низкой добротности МР ( $Q \sim 10^4$ ).

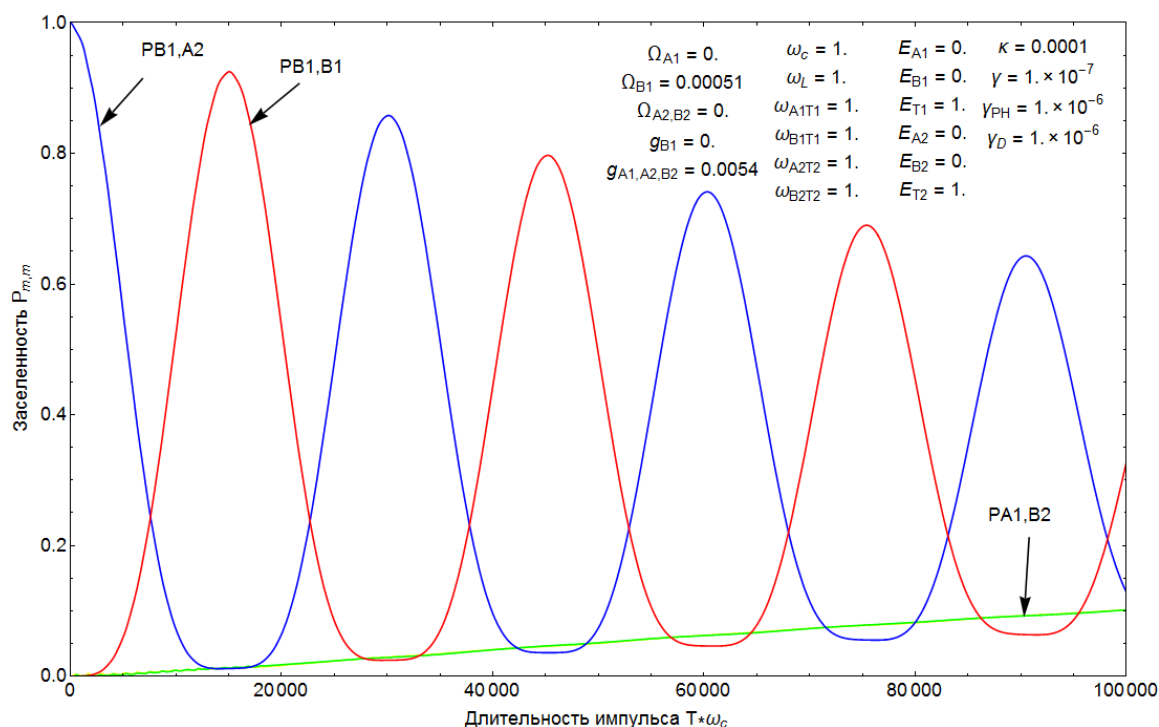


Рис. 1. Эволюция состояний системы

Работа поддержана программой фундаментальных научных исследований ОНИТ РАН «Элементная база квантовых компьютеров» (проект 1.5).

### Литература

1. Freeman R. [et al.]. Optical molecular sensing with semiconductor quantum dots (QDs) // Chem. Soc. Rev. 2012. V. 41. P. 4067–4085.
2. Цуканов А.В., Чекмачев В. Г. Сенсор электрического поля на основе двойной квантовой точки в микрорезонаторе // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51. С. 1249.
3. Цуканов А.В., Чекмачев В. Г. Моделирование спектроскопического отклика и динамики электрона в двойной квантовой точке // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. С. 1.
4. Srinivasan K. [et al.]. Linear and nonlinear optical spectroscopy of a strongly coupled microdisk–quantum dot system // Nature. 2007. V. 450. P. 862.
5. Walls D.F. [et al.]. Quantum Optics. Springer. 2008.
6. Hyeon K. [et al.]. A quantum logic gate between a solid-state quantum bit and a photon // Nature Photonics. 2013. V. 7. P. 373.

УДК 530.145

## Моделирование оптических характеристик резонатора-микродиска в алмазном субстрате

*М.С. Рогачев, И.Ю. Катеев, А.В. Цуканов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В течение последних лет было создано несколько прототипов гибридных квантовых устройств, в которых спиновое и орбитальное состояния NV-центров определяются фотонным состоянием высокодобротных микрорезонаторов (МР) оптического диапазона [1]. Это обусловлено взаимодействием NV-центров с оптическими модами микросфер [2], микродисков [3], микроколец [4, 5], поддерживающих моды шепчущей галереи, волноводов [6], а также с дефектными модами фотонных кристаллов [7]. Подбирая определённым образом материал и геометрию этих объектов, оказывается возможным задавать и контролировать их спектральные свойства. Обычно алмазные микродисковые МР изготавливаются путём нанесения монокристаллической плёнки на подложку с последующим подтравливанием с целью формирования пьедестала МР. В работе [8] развита технология создания таких резонаторов на основе массивного алмазного монокристалла, где полученные диски оказывались окружёнными субстратом (рис. 1). В настоящей работе было проведено моделирование оптических характеристик микродиска в алмазном субстрате.

Спектр ТМ-мод микродиска в алмазном субстрате рассчитывается путём сведения трёхмерных уравнений Максвелла к следующей системе:

$$\begin{cases} [J_{m+1}(kR)J_m(k\tilde{n}R) - \tilde{n}J_{m+1}(k\tilde{n}R)J_m(kR)][\tilde{n}H_{m+1}(k\tilde{n}(R+d))N_m(k(R+d)) - N_{m+1}(k(R+d))H_m(k\tilde{n}(R+d))] = \\ = [\tilde{n}J_{m+1}(k\tilde{n}R)N_m(kR) - N_{m+1}(kR)J_m(k\tilde{n}R)][J_{m+1}(k(R+d))H_m(k\tilde{n}(R+d)) - \tilde{n}H_{m+1}(k\tilde{n}(R+d))J_m(k(R+d))] \\ \sqrt{n_c^2 - \tilde{n}^2} \operatorname{tg}\left(\frac{kh}{2}\sqrt{n_c^2 - \tilde{n}^2}\right) = n_c^2 \sqrt{\tilde{n}^2 - 1}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь  $k$  – собственный вектор,  $\tilde{n}$  – эффективный показатель преломления,  $n_c = 2.4$  – показатель преломления алмаза,  $R$  – радиус диска,  $d$  – зазор между диском и субстратом,  $h$  – высота диска и субстрата,  $J_m$  – функция Бесселя первого рода,  $N_m$  – функция Неймана,  $H_m$  – функция Ганкеля первого рода,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  – азимутальное число.

Нами была разработана программа для численного решения системы (1), позволяющая рассчитать оптический спектр и распределение электрического поля мод шепчущей галереи микродиска в алмазном субстрате. Оказалось, что собственные частоты практически не зависят от величины зазора  $d$  между микродиском и субстратом. В то же время субстрат оказывает сильное влияние на добротность  $Q$  мод (рис. 2). Сначала с увеличением зазора  $d$  добротность монотонно растёт, достигая добротности микродисков в отсутствии алмазного субстрата, а затем осциллирует около этих значений. Анализ распределения электромагнитного поля показал, что рост добротности вызван увеличением

степени локализации поля внутри резонатора, а осцилляции определяются интерференцией поля в зазоре и не зависят от радиуса  $R$  микродиска.

Таким образом, в работе численно рассчитаны спектральные характеристики алмазного микродиска, находящегося в субстрате. Показано, что зазор между микродиском и субстратом существенно влияет на добротность мод шепчущей галереи. Обнаружены осцилляции добротности при увеличении зазора.

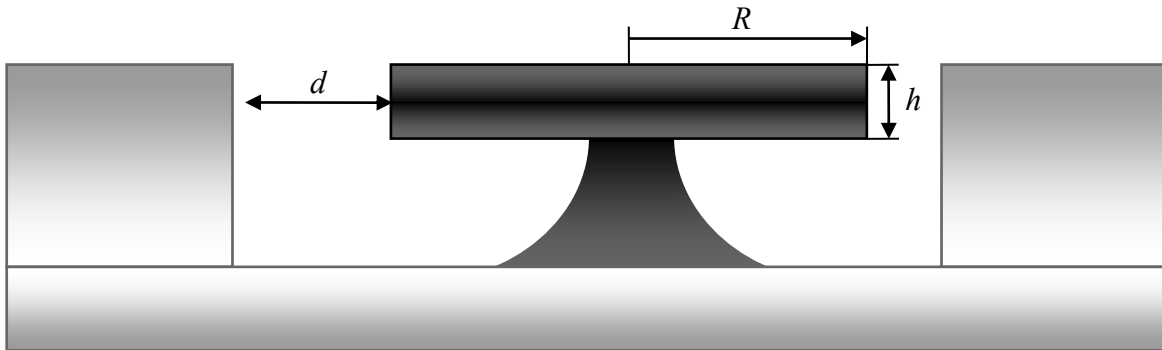


Рис. 1. Схематичное изображение микродиска в алмазном субстрате

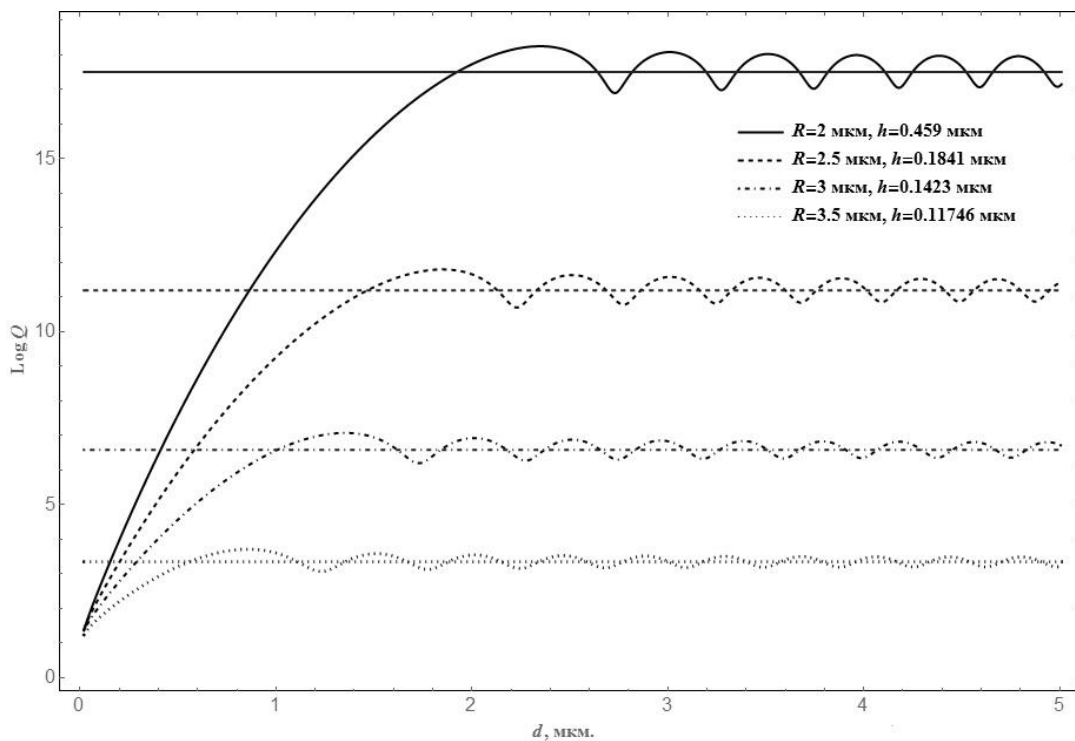


Рис. 2. Зависимость добротности  $Q$  микродиска от величины зазора  $d$ . Прямые линии – значения  $Q$  в отсутствии субстрата

### Литература

1. *Vahala K.J.* Optical microcavities // *Nature*. 2003. V. 424. P. 839.
2. *Schietinger S., Schroder T., Benson O.* One-by-one coupling of single defect centers in nanodiamonds to high-Q modes of an optical microresonator // *Nanoletters*. 2008. V. 8. P. 3911.
3. *Barclay P.E., Fu K.-M. C., Santori C., Beausoleil R.G.* Chip-based microcavities coupled to nitrogen-vacancy centers in single crystal diamond // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 95. P. 191115.
4. *Faraon A., Barclay P.E., Santori C., Fu K.-M.C., Beausoleil R.G.* Resonant enhancement of the zero-phonon emission from a color center in a diamond cavity // LANL E-print. 2010. ArXiv:1012.3815.

5. Цуканов А. В., Рогачев М. С., Катева И. Ю. Однофотонный отклик и спектроскопия фотонной молекулы на основе алмазных микроколец // Микроэлектроника. 2017. Т. 46. С. 411.
6. Fu K.-M.C., Santori C., Barclay P.E., Aharonovich I., Prawer S., Meyer N., Holm A.M., Beausoleil R.G. Coupling of nitrogen-vacancy centers in diamond to a GaP waveguide // Appl. Phys. Lett. 2008. V. 93. P. 234107.
7. Wolters J., Schell A.W., Kewes G., Nüsse N., Schoengen M., Döscher H., Hannappel T., Löchel B., Barth M., Benson O. Enhancement of the zero phonon line emission from a single nitrogen vacancy center in a nanodiamond via coupling to a photonic crystal cavity // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97. P. 141108.
8. Kanaliloo B., Mitchell M., Hryciw A.C., Barclay P.E. High Q/V monolithic diamond microdisks fabricated with quasiisotropic etching // Nanolett. 2015. V. 15. N 7. P. 5131.

УДК 541.182.2/3

## Исследование режимов аэрозольной печати функциональных микроструктур сфокусированными частицами

П.В. Арсенов, А.А. Ефимов, В.В. Иванов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Аэрозольная печать является перспективным методом изготовления изделий печатной электроники, таких как датчики, солнечные элементы и органические светодиоды [1]. В аэрозольной печати важной задачей является реализация процессов печати с использованием наночастиц, так как из-за высокой активности наночастиц сформированные микроструктуры могут быть спечены по сравнению с микрочастицами при значительно пониженных температурах [2], что позволяет поддерживать печать на более дешевых и гибких подложках.

Различают несколько методов аэрозольной печати, основанных на осаждении сфокусированных пучков частиц. Первый метод – это использование нано-чернил, который имеет проблемы с их хранением и удалением растворителя после осаждения. Второй метод – это использование источника сухих наночастиц. В этой работе мы использовали генератор искрового разряда [3], который является перспективным источником сухих наночастиц для аэрозольной печати. Однако использование генератора искрового разряда для аэрозольной печати недостаточно изучено из-за сложности конструкции генератора.

В данной работе исследовались характеристики печатных линий от параметров системы аэрозольной печати, а именно измерялись ширина, толщина (высота) и удельная электрическая проводимость сформированных линий. Используемый генератор наночастиц представляет собой три последовательные пары электродов, между которыми возникает искровой разряд. Аэрозольные наночастицы были синтезированы в результате электрической эрозии серебряных электродов на воздухе. Поток аэрозоля  $Q_a$  вводился в коаксиальное сопло через внутренний цилиндрический канал, сужающий поток  $Q_{sh}$  был введен через внешний конически-сходящийся канал (рис. 1). Затем сфокусированный аэрозольный пучок направляли на стеклянную подложку для осаждения через сопло с внутренним диаметром 100 мкм.

Характеристики линий изучались в зависимости от расхода сужающего потока воздуха (от 1 до 9 л/ч), высоты от сопла до подложки (от 0,5 до 3,5 мм), мощности искрового разряда (от 1 до 8 Вт) и скорости позиционирования подложки при аэрозольной печати (от 5 до 100 мм/мин).

С помощью оптического микроскопа была измерена ширина напечатанной линии. Было установлено, что с повышением скорости перемещения подложки с 5 до 100 мм/мин ширина линии уменьшается со 160 до 65 мкм (рис. 2а; б). Границы линий выбраны, опираясь на данные измерений ее профиля. По измерениям профиля установлено, что основное количество больше 90% материала, формирующего объем линии, сосредоточено в области, размер которой указан на рис. 2а:

$$W \sim k \cdot D_n \sqrt{\frac{Q_a}{Q_a + Q_{sh}}}$$



(1)

где  $W$  – ширина линии,  $k$  – функция увеличения ширины линии за счет диффузионного смещения наночастиц,  $D_n$  – диаметр выходного отверстия сопла.

Также установлено, что с повышением расхода сужающего потока воздуха с 1 до 9 л/ч, при неизменном расходе аэрозольного потока, ширина линии уменьшается со 160 до 110 мкм. Что подтверждает (1).

Обнаружено, что с увеличением расстояния от подложки до сопла происходит расфокусировка аэрозольного потока, проявляющаяся в увеличении ширины формируемой линии и уменьшении ее толщины. Более того, обнаружено, что расфокусировка приводит и к сокращению количества материала, осаждаемого на подложку.

Также исследовано влияние мощности искрового разряда на ширину линии. Установлено, что при увеличении мощности газоразрядного синтеза с 1 до 8 Вт ширина линии увеличивается с 80 до 140 мкм, что способствует увеличению производительности аэрозольной печати.

Таким образом, выполнены исследования нового метода сухой аэрозольной печати и установлены условия формирования узких микроструктур размером до 65 мкм из осажденных наночастиц. Исследуемый метод сухой аэрозольной печати может стать прекрасной альтернативой для традиционных методов формирования микроструктур, таких, как трафаретная, струйная и мокрая аэрозольная печать. Так как он позволяет уменьшить число технологических операций с шести (нанесение фоторезиста, изготовления фотошаблона, проявление, травление и др.) до двух (прямая печать и спекание), что сокращает на порядок время изготовления электронных схем.

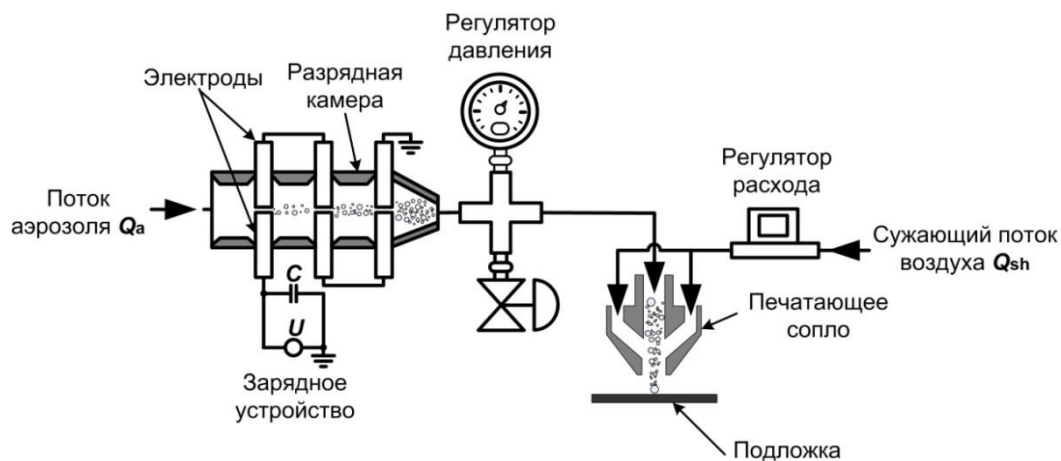


Рис. 1. Экспериментальная схема по осаждению аэрозольных наночастиц с помощью многогазорного газоразрядного генератора

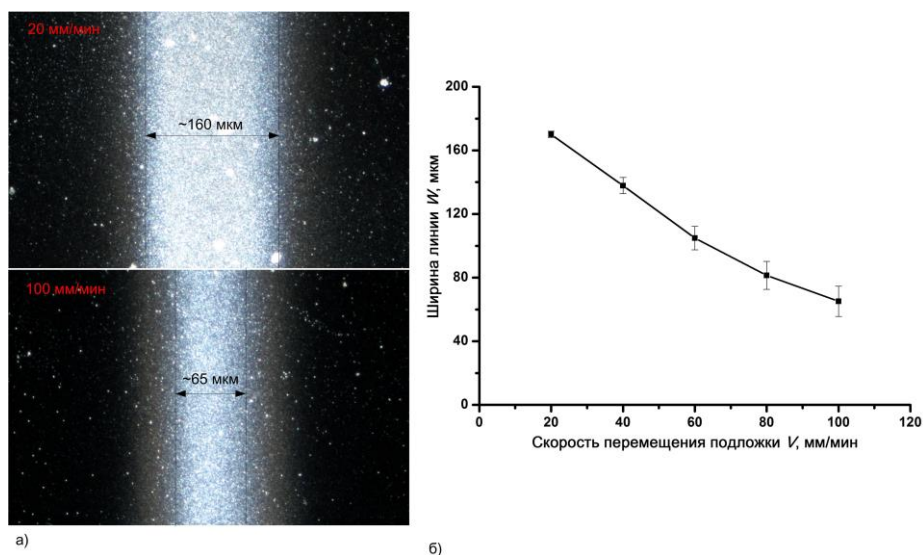


Рис. 2. Изображение печатной линии из наночастиц серебра на стеклянной подложке в зависимости от скорости перемещения подложки (а); экспериментальная зависимость ширины печатной линии от скорости перемещения подложки при аэрозольной печати (б)

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № RFMEFI57517X0160).

### Литература

1. Efimov A. [et al]. Application of the Spark Discharge Generator for Solvent-free Aerosol Jet Printing // Orient. J. Chem. 2017. V. 33, N 2. P. 1047–1050.
2. Peng P. [et al.]. Joining of Silver Nanomaterials at Low Temperatures: Processes, Properties, and Applications // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2015. V. 7, N 23. P. 12597–12618.
4. Efimov A. [et al.]. Synthesis and Characterization of TiO<sub>2</sub>, Cu<sub>2</sub>O and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Aerosol Nanoparticles Produced by the Multi-Spark Discharge Generator // Korean J. Mater. Res. 2016. V. 26, N 3. P. 123–129.
5. Efimov A.A. [et al.]. A new approach to the high-yield synthesis of nanoparticles by spark discharge // J. Phys. Conf. Ser. 2016. V. 741, N 1. P. 012035.

УДК 537.311.324

### Исследование эффекта обратимого резистивного переключения в структурах на основе оксида тантала

*М.Ю. Жук, Р.В. Киртаев, Ю.А. Матвеев, А.В. Зенкевич*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Количество данных, генерируемых человечеством, постоянно растет, и это приводит к непрерывно возрастающей потребности в устройствах с энергонезависимой памятью, которые обладали бы высокой плотностью записи, низкой стоимостью, большой скоростью, низким энергопотреблением и высокой надёжностью. При этом доминирующая технология «флэш» на основе кремния обладает рядом недостатков, в частности, сравнительно низкой скоростью и числом циклов перезаписи, а также высоким энергопотреблением. В связи с этим в последнее десятилетие в нанoeлектронике происходит взрывной рост интереса к разработке альтернативной технологии энергонезависимой памяти.

Среди множества рассматриваемых кандидатов особый интерес вызывает память на основе эффекта обратимого резистивного переключения – RRAM (resistive random access memory, резистивная память с произвольным доступом). Данные устройства представляют собой простейшую структуру металл–изолятор–металл (МИМ), в которой под действием внешнего электрического поля возникает обратимый и контролируемый электрический пробой [1]. Данная технология обладает низким энергопотреблением, очень высокой скоростью записи, а также возможностью хранить несколько бит информации (мультибитности). Однако, несмотря на то, что эффект обратимого резистивного переключения был продемонстрирован на множестве материалов, на сегодняшний день так и не найдена система, обладающая достаточной однородностью свойств отдельных структур, что позволило бы создать устройства памяти больших объемов. Одним из наиболее перспективных кандидатов являются структуры на основе оксида тантала [2], так как у тантала возможно несколько степеней окисления, что позволяет стабилизировать несколько фаз с разной проводимостью и сравнительно легко «переключаться» из одной фазы в другую.

В данной работе представлены результаты измерения электрофизических свойств структур металл–изолятор–металл на основе двух фаз оксида тантала –Ta/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TaO<sub>x</sub>/Pt (рис. 1). Структуры были выращены на подложке SiO<sub>2</sub>/Si(100). На подложку методом магнетронного осаждения был выращен слой Pt толщиной 35 нм. Поверх этого слоя методом PECVD (плазменно-химическое осаждение из газовой фазы) осаждался слой SiO<sub>2</sub> толщиной 200 нм. После этого методом оптической безмасковой литографии в слое SiO<sub>2</sub> формировались сквозные отверстия латеральными размерами от 1 мкм до 10 мкм. В данные отверстия последовательно осаждались слои TaO<sub>x</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и Ta. Слои Ta (70 нм) и TaO<sub>x</sub> (6 нм) были нанесены магнетронным распылением металлического тантала в атмосферах аргона при давлении p<sub>Ar</sub> = 1.5 мТорр и кислорода p<sub>O2</sub> = 7 мТорр. Слой Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (6 нм) был получен распылением керамической мишени Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> в атмосфере аргона при давлении p<sub>Ar</sub> = 1.5 мТорр. После этого с помощью оптической литографии были сформированы контакты для зондовой станции.

Измерения электрофизических характеристик осуществлялись на зондовой станции при комнатной температуре. Исходные структуры обладают сопротивлением  $R \sim 10^{12}$  Ом (при  $U = 0.2$  В). Для инициализации эффекта обратимого резистивного переключения структуры необходимо подвергнуть электроформовке при напряжении  $U = 1.8 \pm 0.3$  В с ограничением тока  $I = 10^{-4}$  А. После чего устройства начинают демонстрировать эффект обратимого резистивного переключения с рабочими напряжениями перехода из состояния с низкой проводимостью в состояние с высокой проводимостью  $U_{SET} = 0.8 \pm 0.08$  В и обратным переходом при  $U_{RESET} = -2.0 \pm 0.2$  В и отношением сопротивлений  $R_{HRS}/R_{LRS} \sim 10^4$ . Типичная ВАХ устройства размерами  $1 \times 1$  мкм продемонстрирована на рис. 2. В режиме переключения импульсами длительностью 1 мкс напряжения  $V_{SET} = 0.83 \pm 0.05$  В,  $V_{RESET} = -1.19 \pm 0.07$  В устройства демонстрируют более  $10^7$  циклов переключения с отношением  $R_{HRS}/R_{LRS} > 10$  (рис. 3).

Наблюдаемый эффект изменения сопротивления в созданных структурах можно описать образованием и разрушением проводящих нитей (филаментов) в объеме изолирующего слоя, к примеру, посредством дрейфа кислородных вакансий  $V_o$  в оксидах переходных металлов (рис. 4). В процессе «формовки» под действием сильного электрического поля часть вакансий  $V_o$  дрейфуют согласно их заряду, тем самым выстраиваясь в нить, которая обладает более высокой проводимостью за счет ряда механизмов возможного прохождения электронов через МИМ-структуру [3]. После приложения напряжения обратного знака нить частично разрушается, тем самым повышая сопротивление (RESET). В процессе включения (SET) нить восстанавливается обратно.

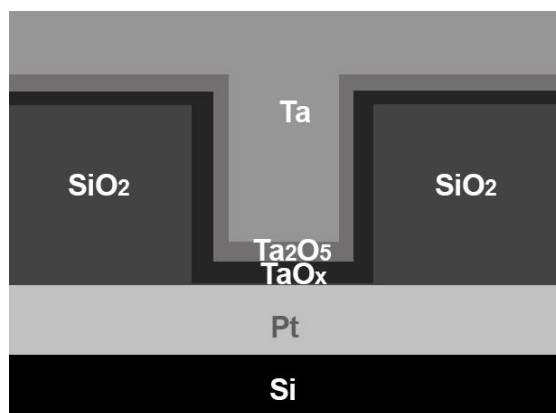


Рис. 1. Схематическое изображение поперечного сечения резистивного устройства

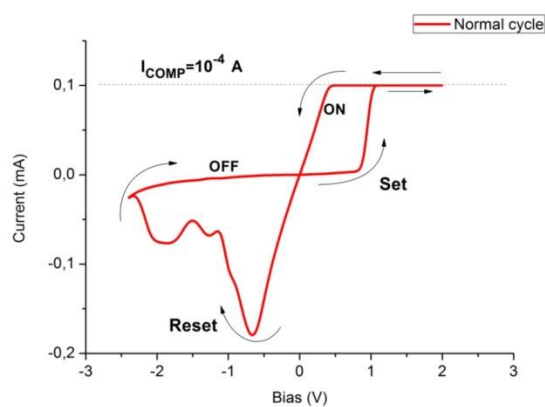


Рис. 2. Типичная ВАХ структуры Ta/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TaO<sub>x</sub>/Pt размерами 1 × 1 мкм

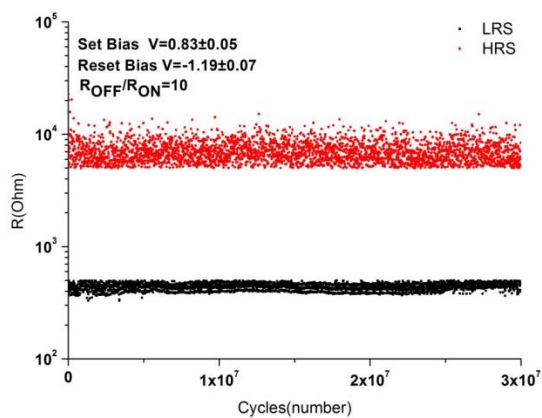


Рис. 3. Тест на количество циклов перезаписи структуры Ta/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TaO<sub>x</sub>/Pt размерами 1 × 1 мкм демонстрирует более  $3 \cdot 10^7$  переключений импульсами 1 мкс

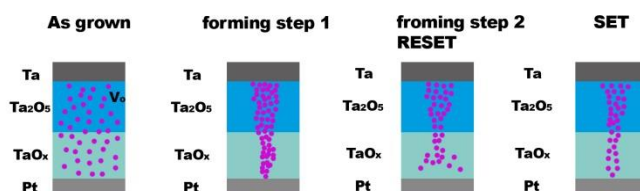


Рис. 4. Иллюстрация модели формирования и разрушения проводящего филамента из вакансий кислорода

## Литература

1. *Waser R., Aono M.* Nanoionics-based resistive switching memories // *Nature materials*. 2007. V. 6. N 11. P. 833–840.
2. *Prakash A. [et al.]*. Demonstration of low power 3-bit multilevel cell characteristics in a TaO x-based RRAM by stack engineering // *IEEE Electron Device Letters*. 2015. V. 36. N 1. P. 32–34.
3. *Wong H. S. P. [et al.]*. Metal–oxide RRAM // *Proceedings of the IEEE*. 2012. V. 100. N 6. P. 1951–1970.

УДК 621.3

### Создание мемристоров на основе функциональных слоев a-Si:Ag для приложений в нейроэлектронике

*Е.О. Савельева, Р.В. Куртаев, С.С. Зарубин, Ю.А. Матвеев, А.В. Зенкевич*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Развитие более совершенных интерфейсов нейрон-чипов позволило системам электрофизиологической записи нейронных сигналов одновременно обрабатывать информацию с большого числа электродов. Однако существуют особенности, затрудняющие обработку данных в режиме реального времени и двунаправленную связь между большими популяциями живых нейронов и электронными схемами в таких нейроэлектронных системах. Среди этих ограничений можно отметить возрастающее рассеивание мощности, низкое отношение сигнала к шуму и проблемы передачи сигнала, которые частично решаются с помощью сжатия большого объема информации путем обработки непосредственно на считывающем электроде. Необходимость дальнейшего уменьшения размеров записывающей электроники и сокращения энергопотребления в перспективных нейропротезных устройствах привела к идее использования биомиметических нейроморфных систем, которые должны обеспечить более эффективную обработку нейронных сигналов. Среди различных подходов, многообещающими являются плотные матрицы мемристормых устройств с синаптическими функциями, так как такие устройства дают возможность одновременного процессирования и хранения больших объемов информации при энергопотреблении, сравнимом или меньшем, чем у биологического мозга.

Среди функциональных материалов для переключающего резистивного слоя в мемристорах, соответствующих требованиям применения в нейроморфной электронике и интеграции с живой нервной тканью (нелинейность ВАХ, динамический диапазон, скорость срабатывания [1]), особое место занимают наноразмерные слои аморфного кремния, легированного серебром, (a-Si:Ag) [2]. В данной работе разработана архитектура мемристоров на основе функциональных структур Pt/a-Si:Ag/Ag, а также маршрут и режимы технологического процесса их изготовления. На рис. 1 представлен шаблон индивидуальной ячейки, устройство располагается на пересечении нижнего и верхнего электродов. Предлагаемая конфигурация устройства является удобной для дальнейшей интеграции мемристоров в матрицы по технологии кросс-бар.

По разработанному маршруту изготовлены опытные образцы мемристормых устройств. Слой нижнего электрода Pt толщиной 30 нм нанесен методом магнетронного осаждения. Функциональный слой a-Si толщиной 50 нм нанесен методом химического осаждения из газовой фазы (CVD). Слой верхнего электрода Ag толщиной 100 нм нанесен методом электронно-лучевого осаждения. На рис. 2 показано изображение поперечного сечения мемристора на основе a-Si:Ag, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Наблюдаемые кластеры серебра в слое аморфного кремния (рис. 3 а)) обеспечивают резистивное переключение устройства при приложении разности потенциалов. Механизм переключения схематично изображен на рис. 3б.

Полученные результаты в дальнейшем будут использованы для разработки матриц мемристоров и их интегрирования с нейронной тканью.

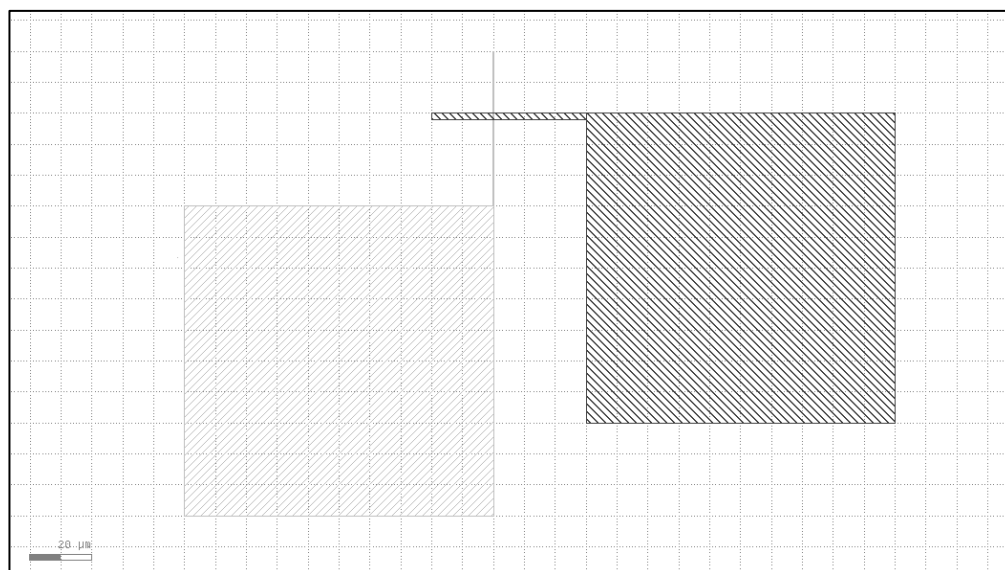


Рис. 1. Шаблон индивидуального мемристорного устройства

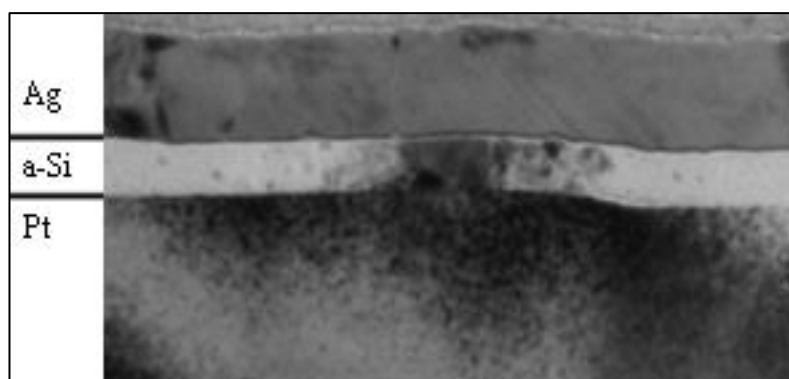


Рис. 2. ПЭМ-изображение поперечного сечения мемристора на основе a-Si:Ag

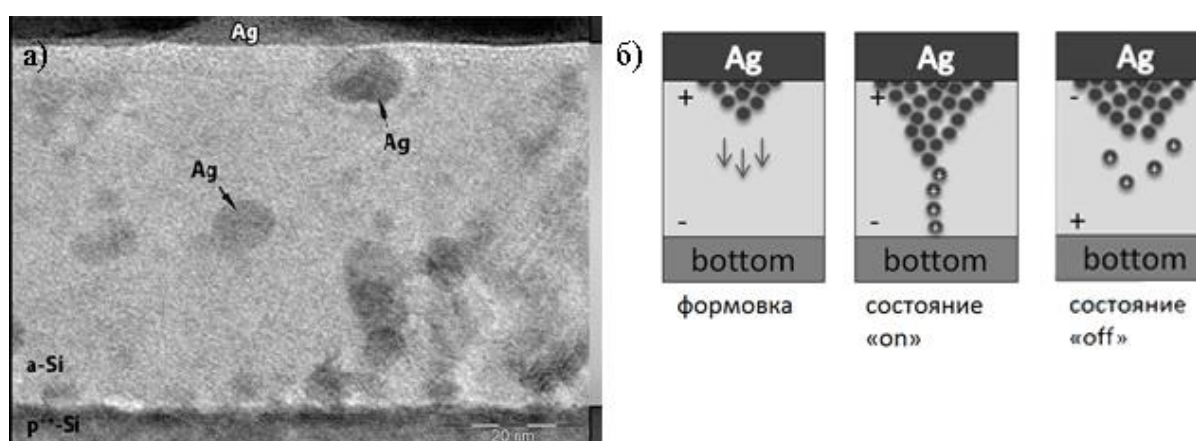


Рис. 3. Кластеры серебра в слое аморфного кремния, изображение в ПЭМ (а) и схема механизма переключения в слое a-Si:Ag (б)



## Литература

1. Kuzum D., Yu S., Wong H-S.P. Synaptic electronics: materials, devices and applications // *Nanotechnology* 2013. V. 24. N 38.
2. S.H. Jo [et al.]. Nanoscale Memristor Device as Synapse in Neuromorphic Systems // *Nano Lett.* 2010. V. 10. P. 1297–1301.

УДК 538.975

**Вариация температуры Кюри в тонкопленочных ферромагнитных слоях MnSi, выращенных на кремнии***А.Р. Ханас, А.В. Зенкевич*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Моносилицид марганца (MnSi) является одним из перспективных материалов для создания новых устройств спинтроники. Как материал на основе кремния, обладающий магнитным упорядочением, MnSi может решить проблему инжекции спин-поляризованного тока в полупроводник, возникающую из-за несоответствия сопротивлений 1. Также в MnSi были обнаружены экзотические спиновые структуры – скирмионы, свойства которых могут позволить создать более энергоэффективные и надежные ячейки памяти 2. Однако, трудностью на этом пути являются низкие температуры перехода в ферромагнитное состояние – около 30 К. Данные экспериментов на монокристаллах показывают 3, что при приложении внешнего давления порядка  $10^8$  Па температура магнитного перехода может уменьшаться до 20 К. Вместе с тем, при экспериментах на тонких пленках  $Mn_xSi_{1-x}$  ( $x \approx 0,51 - 0,55$ ) было обнаружено, что температура перехода повышается, а также наблюдается существенная намагниченность выше температуры перехода вплоть до комнатных температур 4. Предлагаемые причины подобных отклонений от монокристалльных характеристик включают: отклонения от стехиометрии, наличие точечных дефектов и внутренних механических напряжений.

В настоящей работе исследовались магнитные свойства стехиометричных тонкопленочных слоев MnSi, полученных в результате твердофазной реакции ( $T = 400$  °C, 30–60 минут) лазерно-осажденного Mn на подложку монокристаллического Si (100). Наличие единственной фазы MnSi со структурой B20 установлено методами рентгеновской дифракции (рис. 1) и просвечивающей электронной микроскопии (рис. 2). На кривой намагниченности, полученной измерениями на SQUID, обнаружено повышение температуры магнитного перехода до  $\sim 40$  К и наличие существенной намагниченности вплоть до комнатных температур (рис. 3). Для объяснения данного эффекта были измерены механические напряжения в структурах MnSi/Si как по изменениям изгиба подложки 5, так и по рентгеновской дифракции (рис. 3). Полученные значения растягивающих напряжений в плоскости слоя MnSi  $\sim 0,1$  ГПа. Согласно ранее опубликованным результатам 6, такие напряжения могут приводить к сдвигу  $T_c$  в сторону более высоких температур. В настоящее время готовятся эксперименты по исследованию влияния точечных дефектов (генерируемых в результате ионной имплантации, например, Ar, Si либо Mn) на  $T_c$  в MnSi.

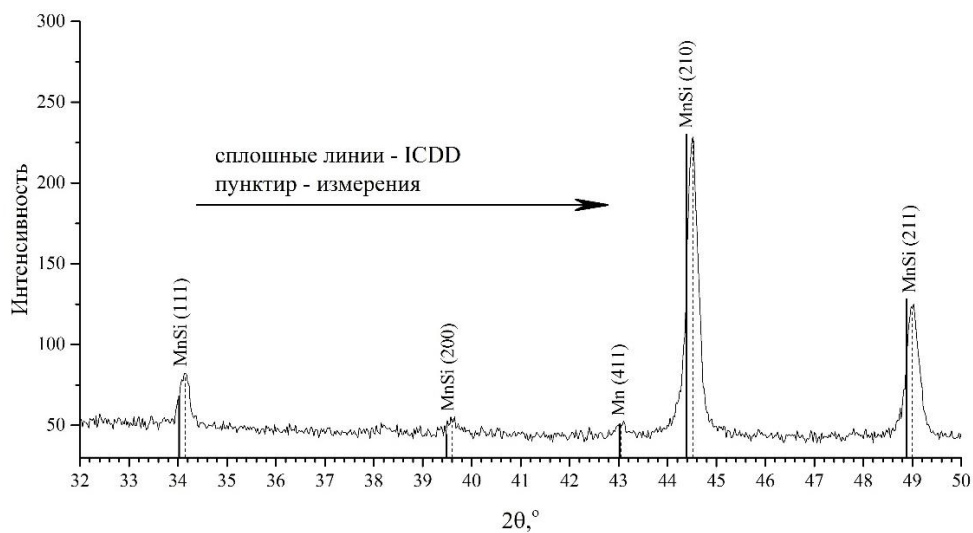


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма образца MnSi толщиной ~100 нм.  
Виден сдвиг всех линий вправо на 0,1–0,2 градуса

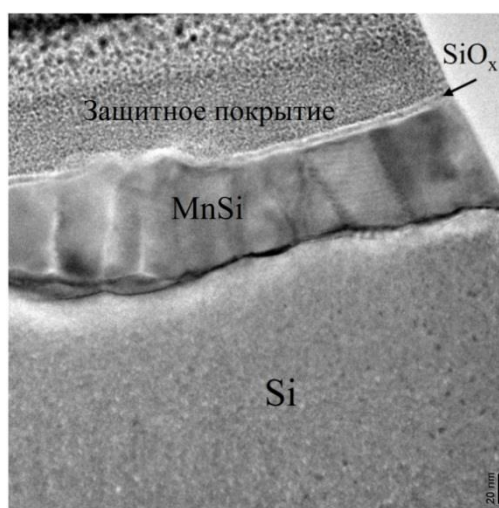


Рис. 2. Изображение образца MnSi/Si(100) в просвечивающем электронном микроскопе

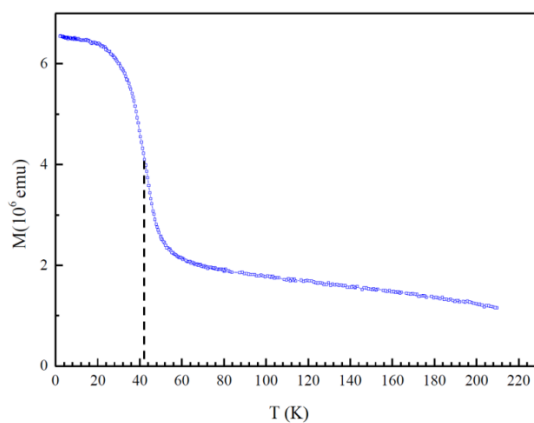


Рис. 3. Зависимость намагниченности от температуры для образца MnSi  
с толщиной ~50 нм

## Литература

1. Schmidt G. [et al.]. Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor // Physical Review B, 2000. V. 62. N 1. P. 4790–4793.
2. Mühlbauer S. [et al.]. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet // Science, 2009. V. 323. P. 915–919.
3. Petrova A.E. [et al.]. Tricritical behavior in MnSi at nearly hydrostatic pressure // Physical Review B, 2006. 73. 052409.
4. Rylkov V.V. [et al.]. High-temperature ferromagnetism of  $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$  ( $x \approx 0.52\text{--}0.55$ ) alloys // Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2015. V. 383. P. 39–43.
5. Janssen G.C.A.M. [et al.]. Celebrating the 100th anniversary of the Stoney equation for film stress: Developments from polycrystalline steel strips to single crystal silicon wafers // Thin Solid Films, 2009. V. 517. P. 1858–1867.
6. Karhu E. [et al.]. Structure and magnetic properties of MnSi epitaxial thin films // Physical Review B, 2010. V. 82. 184417.

УДК 53.097

### Исследование резистивно-переключающихся устройств на основе тонких слоев нестехиометрического оксида кремния

*А.В. Дмитриева, И.А. Мутаев, С.А. Зайцев, А.В. Зенкевич*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Тенденция роста объемов информации, вызванная глобальным развитием человечества, требует наличия универсального вида памяти, а именно, альтернативных энергонезависимых устройств памяти, обладающих высокой плотностью и большой скоростью записи, низкой стоимостью, низким энергопотреблением и высокой надёжностью [1].

Одна из возможных альтернативных концепций энергонезависимой памяти основана на эффекте обратимого резистивного переключения – RRAM (resistive random access memory, резистивная память с произвольным доступом). Под действием электрического поля RRAM-устройства меняют свое состояние из высокоомного или выключенное состояние (OFF-state) в низкоомное или включенное состояние (ON-state) и обратно. Такого рода устройства обладают рядом преимуществ, а именно, простая структура металл–изолятор–металл (МИМ), устойчивость к высокой температуре и наличию внешних магнитных полей, высокой радиационной стойкостью, низким энергопотреблением и очень высокой скоростью записи [2].

Несмотря на успехи в получении резистивно-переключаемых структур на основе оксидов металлов [3], особый интерес вызывают резистивные структуры, работающие на основе функциональных слоев SiO<sub>x</sub>, поскольку данный материал очень хорошо совместим с современной КМОП-технологией [4].

В данной работе представлены результаты исследований эффекта обратимого резистивного переключения в структурах TiN/SiO<sub>x</sub>/Pt и TiN/SiO<sub>x</sub>/W. Исследованные структуры формировались на пластинах Si (100) с предварительно осажденным стехиометрическим изолирующим слоем SiO<sub>2</sub>. На поверхность SiO<sub>2</sub> методом магнетронного напыления наносился нижний электрод TiN толщиной 100 нм, после чего методом плазмохимического осаждения (plasma-enhanced chemical vapor deposition – PECVD) наносился функциональный слой SiO<sub>x</sub> толщиной 30 нм с использованием SiH<sub>4</sub>/Ar (5%), N<sub>2</sub>O и N<sub>2</sub> при температуре  $T = 250$  °С. Затем осаждался верхний электрод, состоящий либо из слоя Pt (20 нм), нанесенной импульсным лазерным осаждением, и слоя W, нанесенного магнетронным осаждением, либо только из слоя W. Для создания функциональных МИМ-структур латеральными размерами 30×30, 50×50, 80×80 мкм<sup>2</sup> верхний электрод паттернировался с помощью оптической безмасковой лазерной литографии. Схематически поперечное сечение полученных структур представлено на рис 1а.

Исследование эффекта обратимого резистивного переключения проводилось на зондовой станции с помощью измерителя полупроводниковых устройств. Для инициализации эффекта обратимого резистивного переключения исходные структуры необходимо подвергнуть так называемой электроформовке – подаче большого напряжения с установленным ограничением тока. Типичные значения напряжений формовки для обоих типов структур приведены в табл. 1.

После формовки исследованные структуры демонстрировали устойчивый эффект обратимого резистивного переключения. В табл. 1 приведены типичные значения напряжений включения  $U_{set}$ , выключения  $U_{reset}$ , соотношение сопротивлений во включенном и выключенном состояниях  $R_{OFF}/R_{ON}$ , число циклов переключений и процент работающих устройств. Устройства с верхним электродом как из Pt, так и W, функционируют в режиме биполярного переключения (т.е. включение происходит при отрицательном напряжении и выключение – при положительном напряжении), при этом устройства с электродом W переключаются при больших значениях рабочих напряжений.

Необходимо отметить, что структуры с верхним электродом Pt обладают радикально лучшей воспроизводимостью от устройства к устройству и на порядки большим числом циклов переключений (перезаписи) по сравнению со структурами, содержащими W. Типичные вольт-амперные характеристики таких структур представлены на Рис. 1а, б.

Наблюдаемый эффект обратимого резистивного переключения может быть объяснен с помощью следующей модели, построенной на основе литературных данных. Так как основные параметры исследованных структур не зависят от размеров контактов, то следует предположить, что имеет место так называемое «филаментарное» переключение: проводимость осуществляется по каналу из дефектов, которые образуются в функциональном слое в процессе формовки. Выяснение природы этих дефектов в функциональном слое SiOx является предметом исследований в настоящее время.

Таким образом, в данной работе были продемонстрированы образцы устройств энергонезависимой памяти на основе SiO<sub>x</sub>, обладающие соотношением сопротивлений во включенном и выключенном состояниях не менее  $10^2$  и числом циклов более  $>10^5$ .

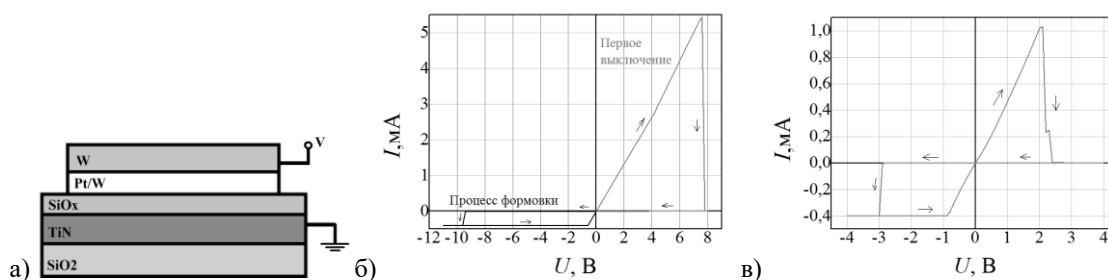


Рис. 1 а) Структура исследованных устройств; типичные вольт-амперные характеристики структур TiN/SiO<sub>x</sub>/Pt; б) процесс электроформовки и первого выключения; в) биполярное резистивное переключение

Таблица 1.

Параметры переключения	Биполярное переключение в TiN/SiOx(30)/W	Биполярное переключение в TiN/SiOx(30)/Pt
Среднее $U_{forming}$ , В	14	10
Среднее $U_{1reset}$ , В	9	7
Среднее $U_{reset}$ , В	2 ÷ 4	2 ÷ 5
Среднее $U_{set}$ , В	-3 ÷ -5	-1,5 ÷ -3,5
$R_{OFF}/R_{ON}$	$10^2 \div 10^5$	$10^2 \div 10^4$
Число переключений	~10	$> 10^5$
Процент работающих устройств, %	44	80

Сравнение параметров переключения структур TiN/SiOx(30нм)/W и TiN/SiOx(30нм)/Pt, где  $U_{forming}$  – напряжение формовки,  $U_{1reset}$  – напряжение первого выключения,  $U_{reset}$  – напряжение выключения,  $U_{set}$  – напряжение включения,  $R_{OFF}/R_{ON}$  – отношение сопротивлений в выключенном состоянии к включенному

### Литература

1. Govoreanu B., Kar G.S., Chen Y-Y., Paraschiv V., Kubicek S., Fantini A., Radu I.P., Goux L., Clima S., Degraeve R., Jossart N., Richard O., Vandeweyer T., Seo K., Hendrickx P., Pourtois G., Bender H., L.Altimime, D.J.Wouters, J.A.Kittl, M.Jurczak, 10x10nm<sup>2</sup> Hf/HfOx Crossbar Resistive RAM with Excellent Performance, Reliability and Low-Energy Operation // 978-1-4577-0505-2/11/\$26.00 ©2011 IEEE.
2. Burr G.W., Shenoy R.S., Virwani K., Narayanan P., Padilla A., Kurdi B., Hwang H.. Access devices for 3D cross point memory // Journal of Vacuum Science & Technology B 32, 040802 (2014); doi: 10.1116/1.4889999.
3. Burr G. W., Kurdi B. N., Scott J. C., Lam C. H., Gopalakrishnan K., Shenoy R. S.. Overview of candidate device technologies for storage-class memory // IBM Journal of Research and Development V. 52. 2008.
4. Yao J., Sun Z., Zhong L., Natelson D., Tour J.M., Resistive Switches and Memories from Silicon Oxide.// Nano Lett., 2010. V. 10. P. 4105–4110.

УДК 621.372.2

### Разработка приёмных структур 790-950 ГГц и 211-275 ГГц

**К.И. Рудаков<sup>1,2,3</sup>, А.М. Барышев<sup>3</sup>, П.Н. Дмитриев<sup>2</sup>, А.В. Худченко<sup>2,3</sup>, В.П. Кошелец<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

<sup>3</sup>Университет Гронингена (RuG)

Мы спроектировали, изготовили и измерили гетеродинный приёмный элемент, работающий в диапазоне частот 790-950 ГГц [1]. Критически важная часть – пара туннельных переходов – была изготовлена по Nb/AlN/NbN-технологии с плотностью критического тока 30 кА/см<sup>2</sup> при 0,5 мкм<sup>2</sup> площади каждой туннельной структуры. Высокое качество изготавливаемых слоёв структуры позволило достичь шумовой температуры 120 К на 710 ГГц и 180 К на 790 ГГц.

На основе успешного опыта проектирования высокочастотного приёмного элемента был произведен расчёт двух типов дизайнов гетеродинных сверхпроводниковых приёмников, работающих в диапазоне частот 211–275 ГГц. Для обоих дизайнов кварцевая подложка толщиной 125 мкм размещалась, как показано на рис. 1 в волноводе 500×1000 мкм. Туннельный переход сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник (СИС) размещён внутри микрополосковой линии, образованной 200 нм и 400 нм слоями ниобия Nb и 250 нм слоем диэлектрика SiO<sub>2</sub>.

Электромагнитные расчёты всей структуры приёмного элемента проводились в CST Microwave Studio с использованием [2] и [3]. Используемый 3D-симулятор позволяет вычислить S-матрицу и согласование по мощности для многопортовой системы. При построении численной модели структур, представленных на рис. 1, туннельный СИС-переход обычно представляют в виде параллельно включённых ёмкости и импеданса дискретного порта. Вычисление значений эквивалентной ёмкости, используемой в расчёте, производится на основе значений удельной ёмкости и площади туннельного СИС-перехода. Импеданс дискретного порта приравнивается к импедансу туннельного перехода, вычисленного на основе теории Такера–Фельдмана [4]. Для обеспечения покрытия достаточной ширины полосы частот, 211–275 ГГц, потребовалось использовать туннельный переход Nb/AlN/Nb с плотностью тока 8–10 кА/см<sup>2</sup>.

Оптимальное согласование волноводной пробы и СИС-перехода обеспечивается настроечной структурой, а заграждающие фильтры снижают потери мощности через волноводный канал, в котором размещён образец. Согласующая структура, состоящая из микрополосковых и копланарных линий, может быть представлена как трансформатор на сосредоточенных элементах. Использование копланарных линий снижает размеры настроечных емкостей и индуктивностей, что расширяет полосу согласования туннельного перехода и 50 Ом нагрузки в диапазоне промежуточных частот (ПЧ) 4–8 ГГц.

Использование дизайна, показанного на рис. 1а, позволяет сравнительно легко расположить плату с трансформатором выходного импеданса схемы рядом с образцом, но из-за особенностей используемых заграждающих фильтров снижает уровень согласования между выходным импедансом СИС перехода и 50 Ом нагрузкой в полосе ПЧ. Дизайн, представленный на рис. 1б, содержит упрощённые заграждающие фильтры высокой частоты. На рис. 2 представлено типичное теоретическое согласование между туннельным СИС-переходом и волноводной пробой.

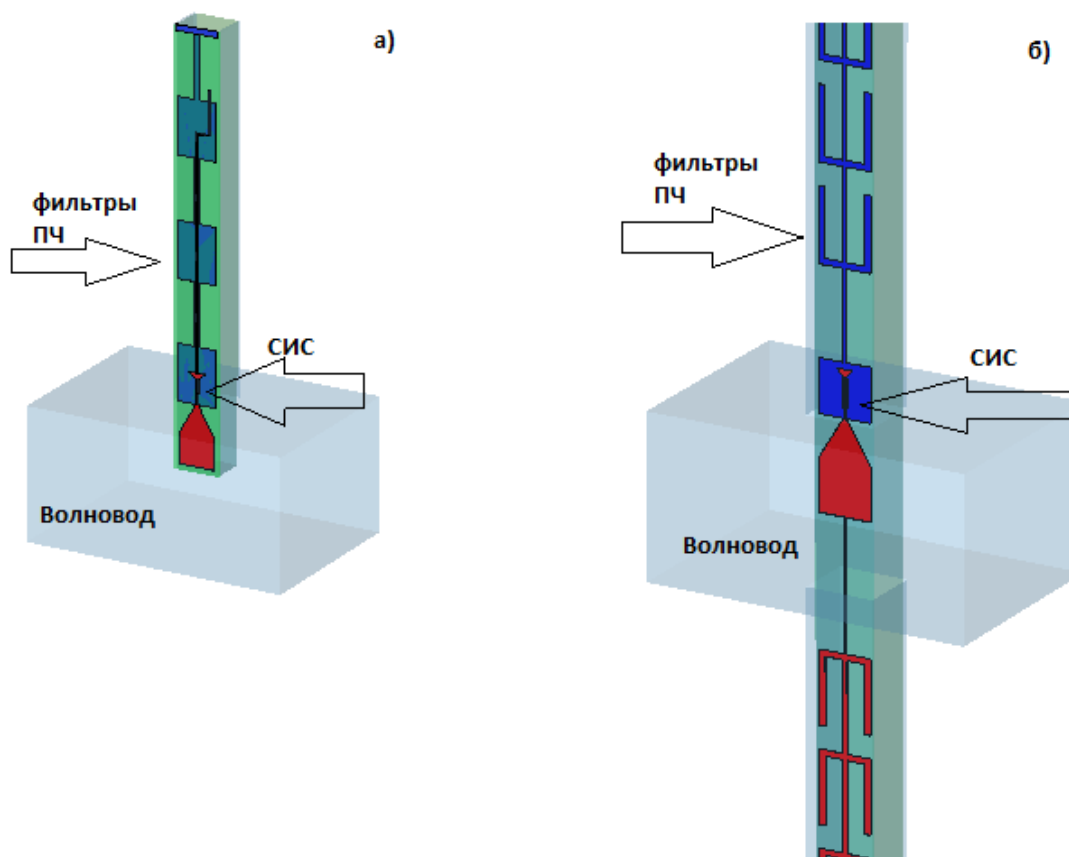


Рис. 1. Полная 3D CST MWS модель одностороннего а) и двухстороннего б) дизайнов



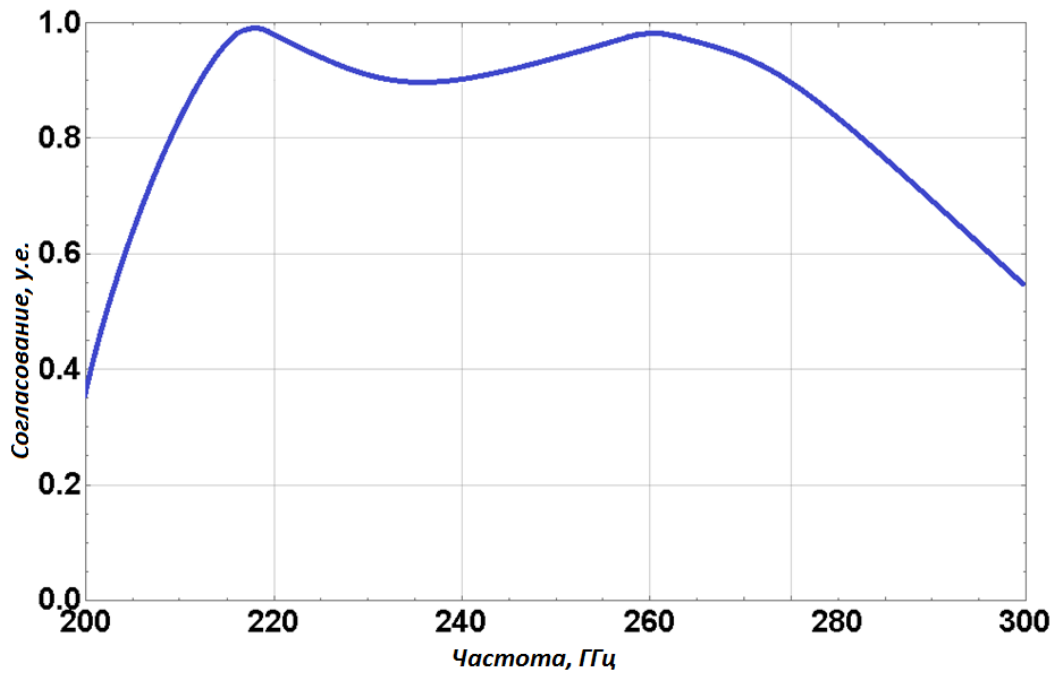


Рис. 2. Типичное теоретическое согласование волноводной пробы и туннельного СИС перехода.  
1 у.е. соответствует 100% согласованию по мощности

#### Литература

1. Rudakov K.I., Koshelets V.P., Baryshev A.M. [et al.]. Radiophys Quantum El // 2017, V. 59. P. 711.
2. Turneaure J.P., [et al.]. The Surface Impedance of superconductors and Normal Conductors: The Mattis-Bardeen Theory // Journal of Superconductivity. 1991, V. 4, N 5. P. 341–354.
3. Rudakov K.I., Paramonov M.E., Dmitriev P.N. [et al.]. Analysis of high-frequency parameters of superconducting planar structures // J. Commun. Technol. Electron., 2016, V. 61, P. 1395.
4. Tucker J.R., Feldman M.J Quantum detection at millimeter wavelengths // Reviews of Modern Physics, V. 57. I 4. P. 1055–1113.

---



---

Секция эмиссионной и молекулярной электроники

---



---

УДК 535.3

**Гибридная линия передач с интегрированной цепочкой термопар  
для генерации терагерцового излучения**
*Б. Бейранванд<sup>1</sup>, А.С. Соболев<sup>1,2</sup>*
<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН

Предложен новый метод генерации терагерцового излучения при помощи цепочки термопар с емкостной связью, нагреваемых фемтосекундными лазерными импульсами. Такой массив цепочек в совокупности с проводящей плоскостью земли образует гибридную линию передач, эквивалентная схема которой является гибридом эквивалентных схем для линий с нормальной и аномальной дисперсией [1, 2]. Для синфазного сложения фотонапряжения от всех термопар необходимо обеспечить на частоте генерации условие  $k = 0$ . Сгенерированную таким образом мощность фотоотклика можно направить в линию передач или подвести к излучающей антенне.

Поляризация каждой термопары определяется температурой электронного газа  $T_e$ , которая из-за малой теплоемкости электронов может превышать 1000 К. Скорость электронного разогрева определяется временем электрон-фотонного взаимодействия  $\tau_{e-\nu} = 1$  фс, а скорость релаксации неравновесных электронов в металле определяется в основном временем электрон-фононного взаимодействия  $\tau_{e-ph}$ , которое при комнатной температуре составляет 1 пс [3, 4]. Таким образом, массив термопар с электронным разогревом от фемтосекундного лазера генерирует пикосекундный импульс напряжения с широким спектром до частот, порядка 1 ТГц. Вклад каждой термопары по напряжению  $\Delta V = Te(\alpha_A - \alpha_B)$ , где  $\alpha_A$  и  $\alpha_B$  – постоянные Зеебека материалов термопары.

Мы разработали и численно смоделировали топологию гибридной линии, дисперсионная характеристика которой показана на рис. 2. Дисперсия гибридной линии с приведенной на рис. 1 эквивалентной схемой определяется выражением

$$ZY = (R + j\omega L_R + \frac{1}{j\omega C_L})(G + j\omega C_R + \frac{1}{j\omega L_L}). \quad (1)$$

Выделяя из выражения (1) действительную часть, получаем

$$RE[ZY] = RG - [(\omega^2 L_R C_R + \frac{1}{\omega^2 C_L L_L}) - (\frac{L_R}{L_L} + \frac{C_R}{C_L})]. \quad (2)$$

Откуда для частоты,  $\omega_0$  соответствующей  $Re(k) = 0$ , получаем уравнение

$$\omega_R = \frac{-\omega^4 - \omega_0^4 + 2\omega^2 \omega_0^2}{\omega^2 (RE[ZY] - RG)}, \quad (3)$$

Принимая во внимание

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{\omega_L \omega_R}} = \frac{1}{\sqrt[4]{L_L C_L L_R C_R}}, \quad \omega_L = \frac{1}{\sqrt{L_L C_L}}, \quad \omega_R = \frac{1}{\sqrt{L_R C_R}},$$

находим значения элементов эквивалентно схемы, приведенные в табл. 1.

Таблица 1.

$C_L$	$C_R$	$L_L$	$L_R$	$R$	$G$
11.0785 нФ	13.72 нФ	6.41075039e-7 нГн	0.002216 нГн	0.17389649159 $\Omega$	0.022803188 $\text{У}$

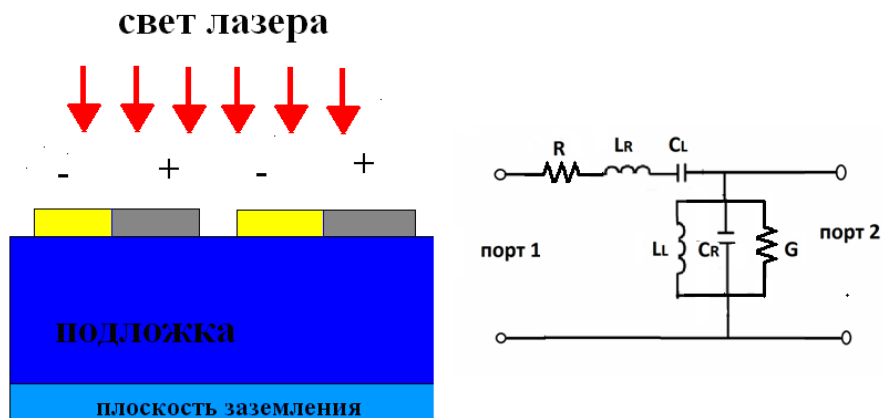


Рис. 1. Общий вид массива термопар, объединенных в гибридную линию передач и ее эквивалентная схема.  $L_R$ ,  $C_R$  и  $G$  – компоненты аномальной, а  $L_L$ ,  $C_L$  и  $R$  – компоненты нормальной линии передач

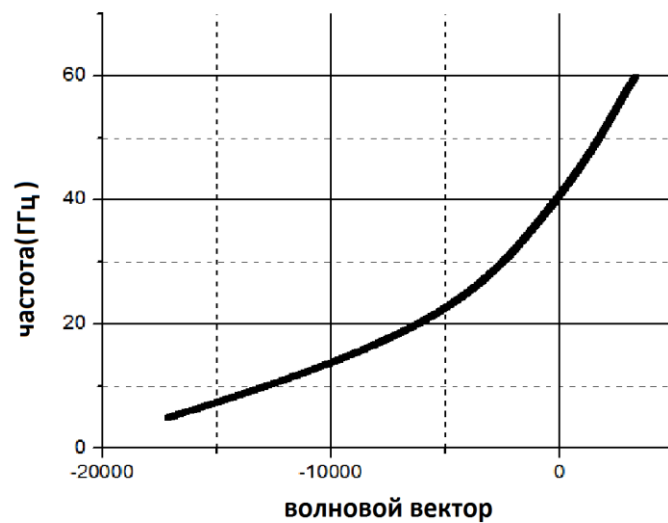


Рис. 2. Расчетная дисперсионная характеристика гибридной линии передач

### Литература

1. *Anthony L., Tatsuo I., Christophe C.* Composite Right/Left Handed Transmission Line Metamaterials // IEEE microwave magazine. 2004. V. 5, N 3. P. 34–50.

2. *Zhijun L., Philip W. C. Hon., Amir A. Tavallaee., Tatsuo Itoh., Benjamin S. Williams.* Terahertz composite right-left handed transmission-line metamaterial waveguides // *Applied Physics Letters*. 2012. V. 100, N 7. P. 071101.
3. *B. Rethfeld., A. Kaisr., M. Vicanek., G. Simon.* Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation // *American Physical Societ.* 2002. V. 65, N 21. P. 214303.
4. *Jae Bin Lee., Kwangu Kang., Seong Hyuk Lee.* Comparison of Theoretical Models of Electron-Phonon Coupling in Thin Gold Films Irradiated by Femtosecond Pulse Lasers // *Materials Transactions*. 2011. V. 52, N 3 . P. 547–553.

УДК 537.533.2

## Проблемы автоэмиссионных катодов

*Е.П. Шешин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Автоэлектронная эмиссия является наиболее экономичным видом эмиссии свободных электронов, что дает возможность создания новых поколений эффективных электронных приборов с повышенными техническими и потребительскими свойствами. Этому способствуют такие свойства автоэлектронной эмиссии, как отсутствие накала, высокая плотность тока, устойчивость к колебаниям температуры, безынерционность, экспоненциально высокая крутизна вольт-амперной характеристики, малая чувствительность к внешней радиации. Широкому применению автоэмиссии в электронных приборах препятствуют некоторые проблемы.

Главный вопрос практической применимости любого катода как источника свободных электронов – это вопрос стабильности эмиссионного тока во времени и пространстве и долговечность катода.

Поэтому работа по повышению стабильности автоэмиссионного тока является многоплановой и сейчас ведется по следующим основным девяти направлениям.

1. Создание в приборах с автокатадами сверхвысокого вакуума. В этих условиях резко снижаются эффекты, связанные с ионной бомбардировкой его поверхности (катодное распыление, поверхностная миграция и т.д.) Характерные размеры автокатада в этом случае, например радиус закругления вершины острия, меняются чрезвычайно медленно. Сложность реализации этого направления увеличения стабильности автоэмиссионного тока связана с чрезвычайными трудностями не только получения сверхвысокого вакуума, но главным образом его сохранения в течение длительного времени. Это является практически неразрешимой задачей в приборах со стеклянной оболочкой, сквозь которую сравнительно легко диффундирует гелий.

2. Подогрев автокатада с целью очистки его поверхности и восстановления ее формы. На практике такой режим работы автокатада чрезвычайно неудобен, поскольку он связан с усложнением конструкции автокатада и прибора в целом и лишает его ряда преимуществ перед термокатодами.

3. Применение ионных ловушек. Использование ионных ловушек и затворов на практике не всегда возможно даже при относительно больших межэлектродных расстояниях, так как это сильно усложняет конструкцию катодного узла. Такие конструкции пока не нашли использования в широкой практике.

4. Использование импульсных режимов работы. Многочисленные эксперименты свидетельствуют о том, что стабильность автоэмиссионного тока в импульсном режиме заметно выше, чем в непрерывном. Однако использование только импульсного режима работы автокатодов заранее сильно ограничивает возможную область их применения.

5. Поиск устойчивых к катодному распылению материалов. Это направление поисков увеличения стабильности тока является, по нашему мнению, перспективным и

следует расширить его содержание, включив сюда и поиск веществ со стабильной работой выхода электронов в «техническом» вакууме.

6. Создание искусственной атмосферы остаточных газов. Известно, что ионы «легких» газов малоэффективны с точки зрения катодного распыления. Создание такой атмосферы на практике сопряжено с очень большими трудностями.

7. Уменьшение межэлектродного расстояния. Уменьшение значения межэлектродного расстояния в электровакуумных приборах ведет к уменьшению числа ионов, образующихся в объеме межэлектродного пространства, и, как следствие, к снижению ионной бомбардировки эмиттера. Кроме того, оно приводит также к снижению рабочего напряжения на аноде. Это еще сильнее понижает интенсивность ионной бомбардировки вследствие уменьшения энергии ионов. Для электровакуумных приборов широкого практического применения, по-видимому, следует ограничиться значениями межэлектродного расстояния в несколько десятков микрон.

8. Использование специфической эмиссионной стабильности автоэмиссионного тока полупроводников. Эмиссионная характеристика имеет в некоторой области внешнего напряжения участок «насыщения». На этом участке автоэмиссионный ток очень слабо зависит от прозрачности потенциального барьера, т.е. от состояния поверхности автокатода. Однако на участке «насыщения» ток является слабоуправляемым, что существенно усложняет конструкцию катодного узла.

9. Создание статистически стабильной микроструктуры эмитирующих центров. На поверхности автокатодов из углеродных материалов можно создать максимальное количество равномерно распределенных по поверхности эмиссионных центров, дающих примерно одинаковый вклад в общий эмиссионный ток, т.е. создается развитая эмитирующая поверхность. При этом, благодаря внутренней структуре углеродных материалов, при разрушении вследствие ионной бомбардировки некоторых эмитирующих микровыступов на смену им из структуры материала возникают аналогичные по параметрам эмиссионные центры. За счет этого достигается большая долговременная стабильность автокатодов в условиях высокого технического вакуума, который имеется в отпаянных электронных приборах.

Таким образом, проведенный здесь краткий анализ известных направлений поисков увеличения стабильности тока автоэмиссии показывает, что даже успешное продвижение по некоторым из них либо не решает задачи создания автокатодов с устойчивой электронной эмиссией в «техническом» вакууме, либо лишает автокатод ряда его очевидных преимуществ перед термокатадами, что, естественно, сдерживает интерес ученых – разработчиков приборов к такого рода исследованиям. Поэтому, наряду с работами по указанным выше направлениям, целесообразно продолжить поиск новых научных направлений для решения проблемы стабильности тока автоэмиссии – центральной проблемы в этой области автоэмиссионной электроники.

$$\omega_R^2 = \frac{-\omega^4 - \omega_0^4 + 2\omega^2\omega_0^2}{\omega^2(RE[Z\bar{Y}] - RG)}$$

$$\omega_0 = \sqrt{\omega_L \omega_R} = \frac{1}{\sqrt[4]{L_L C_L L_R C_R}}$$

УДК 537.533

### **Возможности формирования и транспортировки непульсирующих электронных пучков в продольном магнитном поле, отличном от бриллюэновского**

*П.И. Акимов<sup>1</sup>, А.П. Никитин<sup>2</sup>, В.А. Сыровой<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НПП «Торий»

<sup>3</sup>Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е. И. Забабахина

Исследована возможность получения непульсирующих электронных пучков, включая релятивистские, при магнитном поле, отличном от бриллюэновского, за счет применения специальной системы формирующих электродов.

Рассмотрены проблемы инжекции в магнитное поле с заданным фронтом нарастания осесимметричного параксиального пучка, тонкого трубчатого (ленточного) пучка с криволинейной осью, пучка с прямой осью и эллиптическим сечением. Инжекция происходит параллельно оси  $z$  в плоскости  $z = 0$ , магнитное поле на катоде может быть ненулевым. Получены условия сохранения заданной на входе геометрии пучков.

Проведенное рассмотрение позволило сформулировать условия реализации непульсирующих сплошных и полых осесимметричных электронных пучков, включая релятивистские варианты, а также пучков с эллиптическим сечением, при сохранении их начальной геометрии в момент инжекции в магнитное поле, отличное от бриллюэновского.

УДК 537.533.9, 537.533.7, 537.58

### **Карбонатный автокатод**

*С.В. Лобанов, В.М. Лобанов, Н.Н. Чадаев, И.А. Федоров, Е.П. Шешин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Доклад посвящен исследованию эмиссионных свойств чистой поверхности карбонатного автокатаода [1] в условиях высокого вакуума  $2 \div 3 \cdot 10^{-8}$  Торр и малых токоотборов – до  $\sim 1$  мкА. Исследование проводилось в технологической камере УСУ-6, в которой был собран электронный проектор с возможностью подогрева автокатаода под высоким напряжением.

Для косвенного подогрева катода использовался тарированный серийный катодно-подогревной узел с вольфрамовым нагревателем, покрытым алундом. На эмиссионном торце узла дополнительно устанавливалась трубочка из нержавеющей стали  $\varnothing 1,5$  мм, в которую помещалась капелька аквадага, а затем устанавливался исследуемый катод размерами  $1,2 \times 1,2 \times 2,5$  мм.

Измерения градуировочной зависимости  $I_H - t_K$  (ток накала – температура катода) проводились на идентичном катоде с помощью хромель-копелевой термопары в условиях высокого вакуума. Чистота эмиссионной поверхности и стабильность эмиссии контролировались визуально по эмиссионной картине на экране проектора и характеру изменений автоэмиссионного тока при измерениях вольт-амперных характеристик (ВАХ) полного тока. На протяжении всего исследования эмиссионная картина поддерживалась неизменной, что достигалось дополнительными прогревами автокатаода в течение 5–10 минут при температуре  $660$  °С.

Измерения вольт-амперных характеристик полного тока (ВАХ) автокатаода проводились при различных температурах подогрева  $530, 560, 590, 610$  и  $660$  °С и токах эмиссии до  $\sim 1$  мкА, выше которых эмиссия становилась нестабильной. Полученные ВАХ в координатах Фаулера–Нордгейма наряду с наклонными обладали и вертикальными



участками самопроизвольного роста и падения тока эмиссии при постоянном напряжении, образующими петлю гистерезиса.

При температурах 530–590 °С вертикальные участки самопроизвольного роста тока ВАХ начинались при токах эмиссии 50–80 нА, при температуре 610 °С – при 200–250 нА, а при 660 °С – при 500 нА, т.е. с увеличением температуры автокатада величина тока начала его самопроизвольного роста так же увеличивалась, рост тока эмиссии на вертикальных участках ВАХ достигал пятикратных значений. Вертикальные участки падения тока ВАХ при всех температурах подогрева в диапазоне 530–660 °С всегда начинались при токах около 50 нА и менее. Чем ниже была температура катода, тем дольше по времени происходило самопроизвольное падение тока, и, наоборот, чем выше была температура подогрева, тем самопроизвольное падение тока происходило быстрее. По окончании самопроизвольного падения тока эмиссия катода возвращалась к исходным значениям.

По изменению наклона прямолинейных участков ВАХ вычислено уменьшение работы выхода чистой эмиссионной поверхности карбонатного автокатада после самопроизвольного роста тока эмиссии, которое достигало 17,5%.

Обнаруженный самопроизвольный рост тока эмиссии у карбонатного автокатада с чистой эмиссионной поверхностью регистрировался нами ранее в режиме сильноточной эмиссии без подогрева в условиях высокого технического вакуума [1]. Механизм самопроизвольного роста и падения тока эмиссии карбонатного автокатада обсуждается в рамках модели «пятнистого» катода [2].

### Литература

1. Лобанов С.В., Федоров И.А., Шешин Е.П., Григорьева И.Г., Антонов А.А. Разработка автоэмиссионных катодов методом прессования пирографита с тройным карбонатом // Нано- и микросистемная техника. 2017. № 1. С. 45–52.
2. Добрецов Л.Н., Гомоюнова М.В. Эмиссионная электроника. М.: Наука, 1966. 564 с.

УДК 621.52

### Микроволновый дефростер промышленного применения

С.В. Сурков, С.Е. Шарков

НИУ «МЭИ»

Пищевая промышленность России ежегодно перерабатывает миллионы тонн замороженного мяса и рыбы. Наиболее эффективными системами размораживания при этом являются так называемые СВЧ-дефростеры.

Многообразие геометрических размеров и форм обрабатываемых диэлектриков, различие их электрофизических свойств затрудняет создание универсальных СВЧ-камер. В каждом конкретном случае приходится рассчитывать параметры конструкции камеры СВЧ-нагрева [1]. Наиболее эффективно проводить такие расчёты с использованием программ 3D-моделирования процесса микроволнового нагрева, например, *CSTMWS*.

Размеры оптимизируемой камеры дефростера (рис. 1) выбраны так, чтобы по каждой из координат укладывалось чётное число полуволн. Окна ввода энергии от СВЧ источников (магнетронов) в камеру расположены на верхней стенке камеры под углом 90 градусов относительно друг друга. Конструкция диссектора (рис. 2) выполнена в виде уголкового отражателя для исключения отражения СВЧ-мощности в сторону генераторов и снижения, таким образом, нагрузки на магнетроны.

Коэффициент отражения от диссектора (рассеивания) зависит как от формы диссектора, так и от его положения относительно облучателя. В рамках проводимых исследований и моделирования необходимо было подобрать не только габариты камеры, но и размеры лопастей диссектора, положения блоков так, чтобы уменьшить пятна локального перегрева мясного и рыбного блоков в камере дефростера, сохраняя при этом относительно небольшой коэффициент отражения на входах в волноводы.

Работа над улучшением процесса дефростации показала, что для размораживания заданных блоков лучше всего подходит диссектор, имеющий следующие параметры: длина 310 мм, ширина 80 мм, толщина 2 мм, расстояние от верхней стенки камеры дефростера 80 мм. Оптимальные габариты камеры при этом 1000×1000×1000 мм, причем в ходе расчетов выяснилось, что рыбный блок при размораживании необходимо располагать перпендикулярно задней стенке камеры, а мясной – параллельно.

Для количественной оценки равномерности распределения тепловыделения в мясном и рыбном блоках (рис. 3) по результатам моделирования рассчитывался коэффициент равномерности [2] согласно соотношению

$$K_p = \frac{\sum_{i=1}^n P_i - \sum_{i=1}^n \left| \frac{\sum_{i=1}^n P_i}{n} - P_i \right|}{\sum_{i=1}^n P_i}, \quad (1)$$

где  $n$  – количество точек на поверхности, где определялась выделяемая мощность;  $i$  – номер точки на поверхности диэлектрика;  $P_i$  – выделившаяся мощность, определяемая в  $i$ -й точке по результатам расчётов.

Коэффициент равномерности прогрева в подобранной конструкции камеры, согласно [1], лежит в пределах 0,9–0,95. Таким образом, можно сделать вывод, что СВЧ-камера и конструкция дефростера универсальны, то есть подходят как для размораживания мясных, так и для размораживания рыбных блоков, несмотря на существенные различия в диэлектрических свойствах и габаритах.

Во всех приведенных расчётах КСВ не превышал допустимый уровень [2], что гарантирует стабильную работу магнетронов и долговечность конструкции.

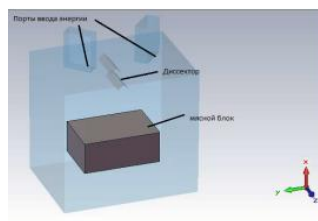


Рис. 1. Трехмерная модель камеры дефростера

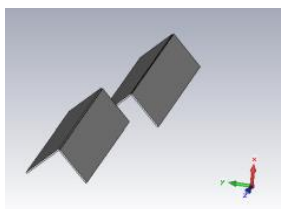


Рис. 2. Трехмерная модель диссектора



Рис. 3. Тепловыделение в исследуемой продукции; а – в мясном блоке, б – в рыбном блоке

### Литература

1. Окресс Э. СВЧ-энергетика. Применение энергии сверхвысоких частот в промышленности. М.: Мир, 1971. 272 с.

2. ГОСТ Р МЭК 335-2-25-97 «Безопасность бытовых и аналогичных электрических приборов. Дополнительные требования к микроволновым печам и методы испытаний».

УДК 621.52

## Повышение однородности ВЧ-поля выходного резонатора МЛК

*С.Е. Шарков, С.В Сурков*

Национальный исследовательский университет «МЭИ»

В последние годы происходит бурное развитие линейных ускорителей электронов (ЛЭУ) промышленного и медицинского назначений, а также разработка мощных электровакуумных усилительных приборов сверхвысокочастотного диапазона (ЭВП СВЧ), в частности, многолучевых клистронов (МЛК) с высокими значениями выходной мощности и оптимальными массогабаритными параметрами.

Рабочая частота разрабатываемой в настоящее время конструкции 30-лучевого МЛК, предназначенного для применения в качестве источника СВЧ-питания ЛУЭ, соответствует второй гармонике «Станфордской» частоты. В электродинамической системе (ЭДС) используются кольцевые резонаторы, работающие на основном виде колебаний  $E_{010}$ . Серьёзной проблемой, возникающей при использовании кольцевых резонаторов, является нарушение азимутальной равномерности СВЧ-поля в выходном и входном резонаторах, связанных с внешней нагрузкой аксиально-несимметричным элементом связи, например, щелью связи. Подвод питания входного резонатора осуществляется через волновод. Входной и выходной волноводные тракты подключены к входному и выходному резонаторам через ввод/вывод энергии и четвертьволновой трансформатор. Щель связи располагается на боковой стенке резонатора, вследствие чего электромагнитное поле искажается из-за внесённой щелью связи асимметрии [1].

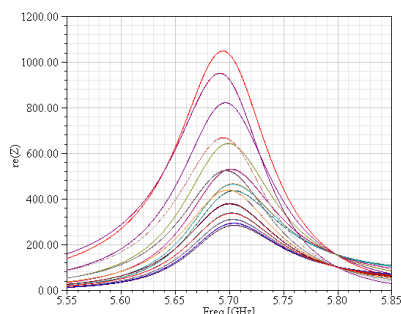
В качестве обобщённого параметра АЧХ применяется реальная часть импеданса взаимодействия зазора выходного резонатора (далее — импеданс взаимодействия).

Одной из характерных особенностей входного/выходного резонатора МЛК является неравномерность импеданса взаимодействия в разных пролётных каналах. «Идеальную» характеристику удаётся получить только в одном канале (нескольких каналах) активного резонатора, в то время как в остальных каналах импеданс взаимодействия претерпевает существенные искажения, что существенно влияет на электронный КПД и коэффициент усиления прибора.

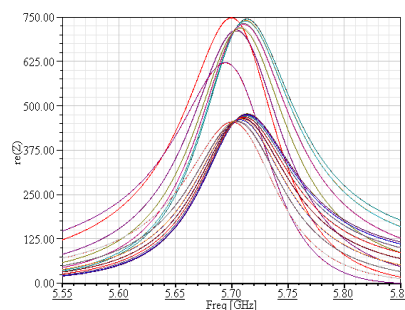
Для компенсации нежелательного влияния щели связи на электромагнитное поле в выходном резонаторе проведены расчёты с изменением величин зазоров взаимодействия в пролётных каналах, расположенных в непосредственной близости к щели связи выходного резонатора с волноводом. По полученным данным определено, что оптимальное количество каналов 6. На рис. 1 представлено изменение АЧХ при оптимизации конструкции резонатора.

Изменение зазора взаимодействия в конструкции резонатора позволило снизить перепад  $\Delta_z$  с 3,66 до 1,65 и добиться однородности ВЧ-поля как на внутреннем, так и на внешнем пролётных рядах резонатора по сравнению с исходной конструкцией без сектора.

Подтверждением правильного выбора новой конструкции резонатора может служить повышение уровня выходного сигнала, а следовательно, и КПД прибора (рис. 2). Из результатов, представленных на рис. 2, следует, что введение сектора в конструкцию выходного резонатора МЛК позволило повысить амплитуду выходного сигнала на 19,2%.

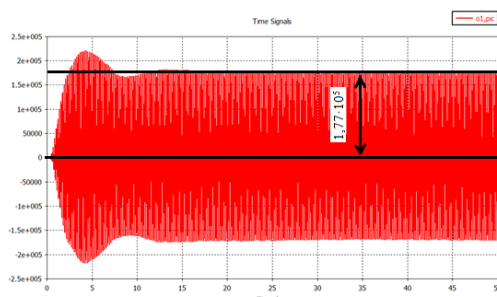


АЧХ при исходном зазоре взаимодействия

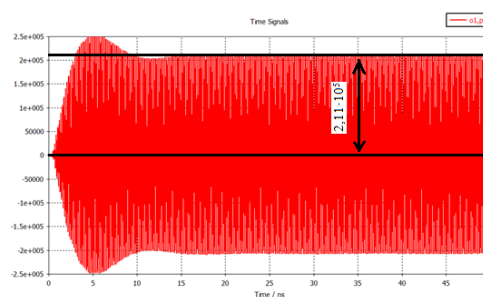


АЧХ при оптимальном зазоре взаимодействия

Рис. 1. АЧХ до и после оптимизации конструкции резонатора



Сигнал до оптимизации



Сигнал после оптимизации

Рис. 2. Уровень сигнала до и после оптимизации конструкции резонатора

## Литература

1. Карлинер М.М. Электродинамика СВЧ. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2006. 258 с.

УДК 537.533.2

## Световые характеристики УФ-люминофоров для нового поколения энергоэффективных ламп

*А.В. Павленко, М.М. Мье, Е.П. Шешин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Ультрафиолетовые источники излучения волнового диапазона 230–360 нм широко используются в промышленности, медицине и в быту для стерилизации воды, воздуха, разнообразных поверхностей, а также для других целей (активация фоточувствительных полимеров и т.д.), причём сфера их применения быстро расширяется. Наиболее перспективным методом получения ультрафиолетового излучения является использование ультрафиолетового люминофора.

Основными источниками УФ-излучения являются газоразрядные ртутные лампы. Согласно Минаматской конвенции о ртути, светоизлучающие устройства на основе ртути должны быть ликвидированы к 2020 году [1]. Поэтому создание не содержащих ртуть ультрафиолетовых ламп нового поколения, основанных на прямой катодолюминесценции, является одной из самых актуальных задач современной вакуумной электроники. Автоэлектронный источник ультрафиолета, предлагаемый коллективом авторов, представляет собой вакуумную лампу диодной или триодной схемы с электронной пушкой и экраном-анодом, на который нанесен катодолюминофор, светящийся под действием быстрых электронов. Люминофор представляет собой порошок с размером частиц 15–50 мкм. Примеры конструкций таких же конструктивно ламп, но работающих в диапазоне видимого света, описаны в [2, 3]. Так как спектр излучения лампы зависит только от химического состава люминофора, на основе тех же конструкций могут быть созданы УФ-лампы путём замены люминофора.

Целью данной работы является изучение зависимости интенсивности ультрафиолетового излучения набора образцов катодлюминофора различного состава от напряжения катод–анод. В работе [4] указано, что УФ-люминофоры излучают свет при воздействии электрона с более высокой энергией, чем это необходимо для люминофоров видимого спектра. Обычно она составляет 2 кэВ, для люминофоров с более короткой длиной волны диапазона ультрафиолета от 5 кэВ до 20 кэВ. Соответствующим образом выбран и диапазон измерений. Повышенные напряжения катод–анод обуславливают повышенные требования к электропрочности конструкции предполагаемых устройств.

Для исследования электрооптических параметров катодлюминесценции разработана схема стенда для получения энергетических и спектральных характеристик ультрафиолетовых катодлюминофоров, с помощью которого можно будет снять спектральные характеристики предполагаемых ламп, получить и исследовать вольт-амперные характеристики таких ламп и регистрировать интенсивность УФ-излучения. Также с помощью видеокамеры можно (в перспективе) исследовать распределения интенсивности излучения по поверхности источника света и оценивать площадь светящейся поверхности источника.

Исследуя световые характеристики ультрафиолетовых люминофоров, можно определить эффективность приборов с ультрафиолетовыми люминофорами и пути их совершенствования.

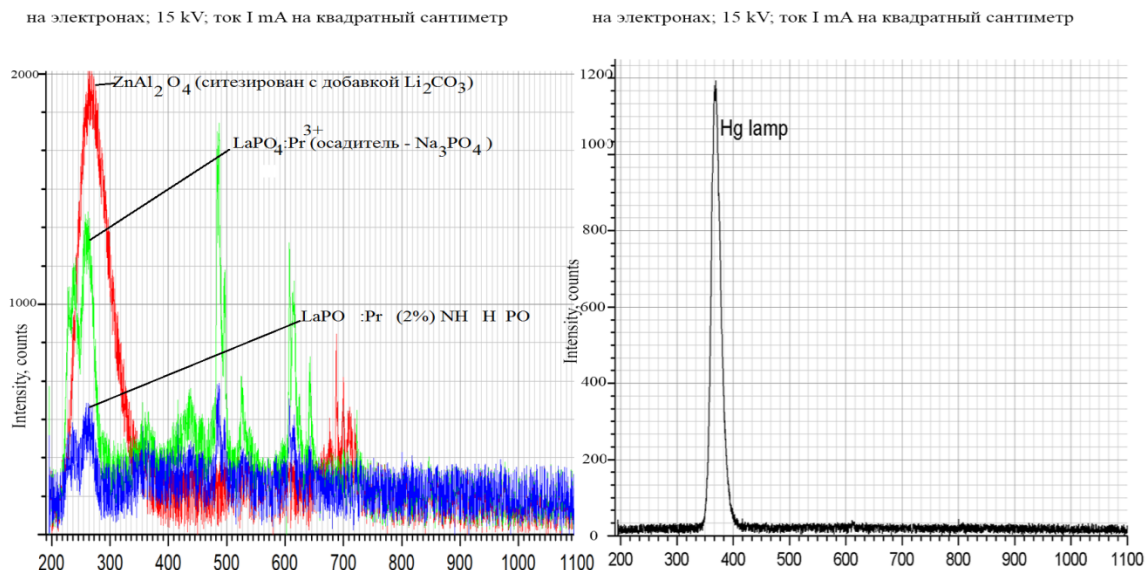


Рис. 1. Сравнение интенсивности в условных единицах и спектров излучения ртутной лампы излучения ртутной лампы и УФ-люминофоров

### Литература

1. Минаматска конвенция о ртути. Текст и приложения // ЮНЕП, ООН, 2013.
2. Бугаев А.С., Киреев В.Б., Шешин Е.П. Катодлюминесцентные источники света (современное состояние и перспективы) // Успехи физических наук. 2015. С. 28.
3. Лейченко А., Шешин Е., Щука А. Наноструктурные углеродные материалы в катодлюминесцентных источниках света // Электроника: Средства отображения информации 6/2007, 97.
4. Mark F. E., UV PIPE // United States Patent. 2016. V. 12, N 54. P. 3.

УДК 537.533.2

## Основные свойства углеродных волокон на основе полиакрилонитрила (ПАН)

*Хмет Вин Аунг, Е.П. Шеншин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Углеродные волокна (УВ) относятся к материалам третьего поколения. В данной работе рассмотрены основные типы углеродных волокон, применяемых для изготовления автоэлектронных катодов. В соответствии с исходным сырьевым материалом можно разделять УВ на три типа: углеродные волокна на основе ПАН, углеродные волокна на основе пеков и пироуглеродные волокна. Волокна первых двух типов выпускаются в промышленных масштабах и их механические свойства перекрывают широкий диапазон значений модуля упругости (20–70 ГПа) и прочности (2000–4000 МПа).

До сих пор пироуглеродные волокна широко не распространяются в промышленности из-за того, что очень мало рассмотрены точные данные о их свойствах. По своим механическим характеристикам семейство углеродных волокон на основе ПАН делится на высокопрочные (НТ) и высокомодульные (НМ). Высокопрочные углеродные волокна получают при температурах ниже 1400 °С, а высокомодульные – при высокой температуре 1800–3200 °С. На рис. 1 представлены диапазоны значений прочности и модуля упругости углеродных волокон на основе ПАН и пеков [1].

Углеродные волокна на основе ПАН – это продукты пиролиза полимерных полиакрилонитрильных волокон и их последующей высокотемпературной обработки. Углеродные волокна имеют диаметр филамента 6–10 мкм и представляют собой химически чистое вещество (99.9% углерода).

Технология получения углеродного волокна из синтетического ПАН-волокна состоит из следующих операций [2, 5]:

1. Окисление ПАН-волокна кислородом воздуха в течение нескольких часов в интервале температур 200–300 °С в натянутом состоянии для предотвращения усадки и вытяжки волокна. При этом полимерные молекулы преобразуются в ориентированные вдоль оси волокон шестизвенные циклы, содержащие углерод и азот. Такая операция повышает модуль упругости и прочность волокна.

2. Карбонизация окисленного волокна без натяжения при температуре до 1000 °С в инертной атмосфере.

3. Графитация в инертной среде при температурах до 3200 °С.

Волокно промежуточного типа (карбонизованное) получают при окислении ПАН-волокон с температурой до 1000–1700 °С. Для автоэмиссии наиболее интересен тип волокна с температурой обработки до 3200 °С (графитированное волокно). Современная модель ПАН-волокна представлена на рис. 2. Наиболее ориентированной частью является поверхность волокна. Она состоит из краев кристаллитов и бездефектных атомных плоскостей. Автокатоды из ПАН – волокон являются весьма перспективными.

Для получения высококачественного углеродного волокна необходимо выполнение трех условий:

1. Уменьшение диаметра волокна для снижения вероятности возникновения крупных структурных дефектов.

2. Применение высококачественного, химически чистого полимерного сырья.

3. Высокая стабильность технологических режимов, особенно на стадии окисления.

На сегодняшний день с точки зрения автоэмиссионных свойств углеродные волокна на основе ПАН наиболее изучены. Автокатоды из таких волокон являются перспективными для некоторых практических применений.



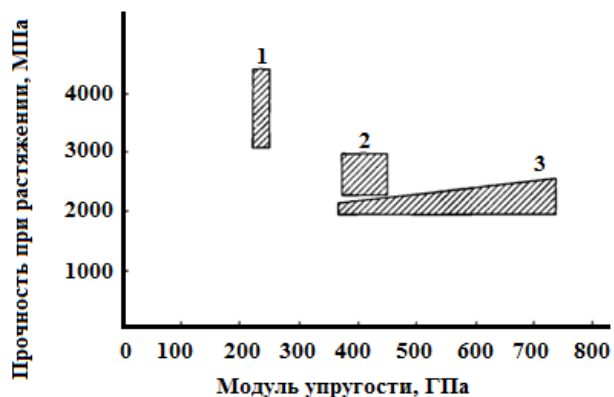


Рис. 1. Примерные диапазоны прочности и модули упругости волокна различного типа: 1) высокопрочные (НТ) полиакрилонитрильные углеродные волокна; 2) высокомодульные (НМ) полиакрилонитрильные углеродные волокна; 3) мезофазные пековые углеродные волокна

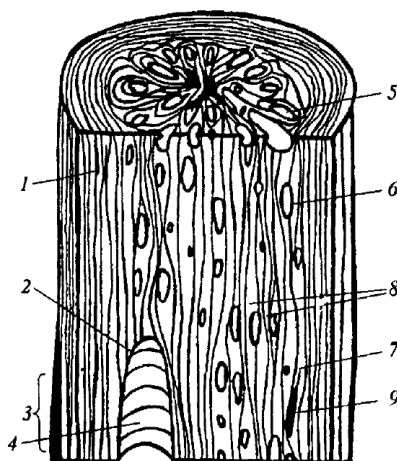


Рис. 2. Структура углеродного полиакрилонитрильного волокна: 1) микротрещины; 2) оболочка трещин и пор; 3) выпуклости на волокне; 4) крупная пора; 5) мелкая пора; 6) микровключения кристаллического графита; 7) крупный кристалл графита; 8) межфибрильные прослойки в средней части волокна; 9) микротрещина

### Литература

1. Углеродные волокна и композиты // Под ред. Э. Фитцера. М.: Мир, 1988.
2. Vohler O., Sperk E. Kohlenstoff – Fasermaterial // Berichte der deutschen Keramischen Gesellschaft. 1966. V. 43. P. 199–285.
3. Watt W. Production and properties of high modulus carbon fibers // Proc. Roy. Soc. 1970. V. A319. N 1536. С. 5–15.
4. Конкин А.А. Углеродные и другие жаростойкие волокнистые материалы. М.: Химия, 1974.
5. Шешин Е.П. Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов. М.: МФТИ. 2001. С. 13–20.

УДК 537.533.9

## О модифицированном калориметрическом методе измерения энергетической эффективности катодолуминофоров

*Д.И. Озол*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Измерение энергетической эффективности катодолуминофоров с высокой точностью представляет собой сложную задачу. В общепринятых методах [1] трудно добиться малой погрешности, т.к. требуется измерять с высокой точностью величины разной природы – подводимую энергию электронного пучка, с одной стороны, и световую энергию люминесценции – с другой. Последняя часто распределена в пространстве не вполне равномерно, что является основным источником погрешностей (напр., «на отражение» может идти больше света, чем «на просвет»). Тимофеевым Ю.П. и Вороновым Ю.В. в [2] на основе идеи М.Н. Аленцева (1951) предложен калориметрический метод измерения энергоэффективности (КПД) катодолуминесценции. Главное его преимущество в том, что данный метод не требует никаких прямых оптических измерений. Это существенно упрощает установку и повышает точность определения КПД. Этим методом можно измерять КПД люминофоров любого спектра свечения, в т.ч. ультрафиолетового, причём с любой длиной волны.

При измерении КПД калориметрическим методом количественно необходимо измерять лишь одну величину – ток электронного пучка. В эксперименте используется собственно катодолуминофор и в качестве «точки отсчёта» – несветящееся вещество того же состава, напр., основа люминофора, не содержащая активатора. Идея эксперимента основана на том, что светящийся катодолуминофор нагревается меньше, т.к. часть подводимой к нему энергии уходит в виде света. Токи, при которых достигается одинаковая температура излучающего люминофора и неизлучающего (без активаторов) образца того же состава, дают значение КПД:

$$\eta = \left( \frac{I_2}{I_1} - 1 \right) \cdot 100\%, \quad (1)$$

где  $I_2$  – ток возбуждения катодолуминофора,  $I_1$  – ток, нагревающий несветящуюся основу.

В данном эксперименте также необходимо измерять температуру, но не обязательно количественно – пригоден любой метод, позволяющий определить, при каких условиях температуры двух образцов оказываются равными. Тимофеевым и Вороновым была предложена схема эксперимента, в котором для определения температуры применялся возбуждаемый УФ-излучением фотолуминофор, испытывающий сильное температурное тушение при не слишком высоких (~50–150 °С) температурах. Таким образом, снижение вдвое фотолуминесценции контрольного люминофора позволяло установить, что исследуемые образцы имеют одинаковую температуру. Некоторая сложность данной схемы эксперимента в том, что всё же необходимо – пусть и достаточно грубо, с невысокой точностью – замерять яркость свечения контрольного фотолуминофора. Кроме того, при такой методике мы привязаны к одной температуре, что несколько снижает точность – измерение КПД одного и того же катодолуминофора при разных  $I_2$  и соответственно разных температурах дало бы более надёжные результаты. В экспериментах Тимофеева и Воронова светящийся и несветящийся образцы испытывались в камере поочерёдно, но, вообще говоря, можно размещать их и одновременно, если габариты камеры это позволяют и если в наличии имеются две электронных пушки.

Т. к. в настоящее время доступен ряд методов измерения температуры с высокой точностью, пригодных в том числе для применения в вакууме, можно предложить модифицированный метод, избавляющий от необходимости как бы то ни было измерять

оптические параметры – назовём его «методом температурных весов» (рис. 1). При этом люминофор и эталон размещаются в камере одновременно, а датчики температуры позволяют уравнивать температуры образцов, варьируя токи электронных пушек. Для измерения температур можно использовать различные способы: термпары, терморезисторы или бесконтактные ИК-термометры. ИК-термометры обеспечили бы наиболее точные результаты, но, к сожалению, через стекло камеры проводить измерения невозможно, а их использование непосредственно в вакуумной камере вызывает некоторые затруднения. Удобнее всего использовать терморезисторы – они легко позволяют фиксировать разности температур в доли градуса. В качестве анода оптимальнее всего использовать тонкую алюминиевую фольгу с высокой теплопроводностью (она же служит зеркалом, таким образом, измерение проводится «на отражение») - аноду не нужно быть прозрачным, в этих экспериментах нет необходимости регистрировать и измерять излучаемый люминофором свет. Достаточно убедиться, что он вообще светится. Сборку целесообразно скомпоновать вертикально – это позволяет не использовать связующее (не вносить таким образом лишних искажений).

Данная схема особенно удобна для работы с УФ-люминофорами, т.к. снимает все сложности, связанные с (не)прозрачностью для ультрафиолета стёкол, проводящих покрытий, сложностью измерения плотности мощности («яркости») УФ-излучения и т.п. Замерив КПД и зная величину тока и площадь пятна, мы сразу же определяем и плотность мощности ультрафиолетового излучения.

Если электронные пушки заменить на источник видимого света или УФ, то по той же схеме можно измерять КПД фотолюминесценции, и – опосредованно, в пересчёте – её квантовый выход. КПД фотолюминесценции можно измерять и на воздухе, но лучше всё же в вакууме – при отсутствии конвективного теплоотвода температурные измерения проще и надёжнее. Мощностью излучения источника света достаточно легко управлять, нетрудно и откалиброваться при помощи яркометров. Задача эта в принципе актуальна, т.к. измерение квантового выхода на сегодняшний день – процедура достаточно сложная, для получения точных результатов требует использования интегрирующей сферы, поэтому, как правило, квантовый выход измеряют более простыми (но и менее точными) способами, например, сравнением с эталоном.

Измерение квантового выхода может позволить оценить перспективность конкретного люминофора в качестве катодлюминофора – напр., если он имеет достаточно интенсивную катодлюминоесценцию при низком квантовом выходе фотолюминесценции, то его КПД может быть увеличен за счёт совершенствования процесса синтеза, а если, наоборот, катодлюминоесценция слаба при высоком квантовом выходе, то катодлюминофором это вещество служить не может. Таким образом, можно получить установку, позволяющую путём смены источников возбуждения измерять КПД катодо- и фотолюминесценции и квантовый выход, причём за счёт смены светодиодов – измерять квантовый выход для разных длин волн возбуждающего излучения (напр., для межзонного и внутризонного поглощения).

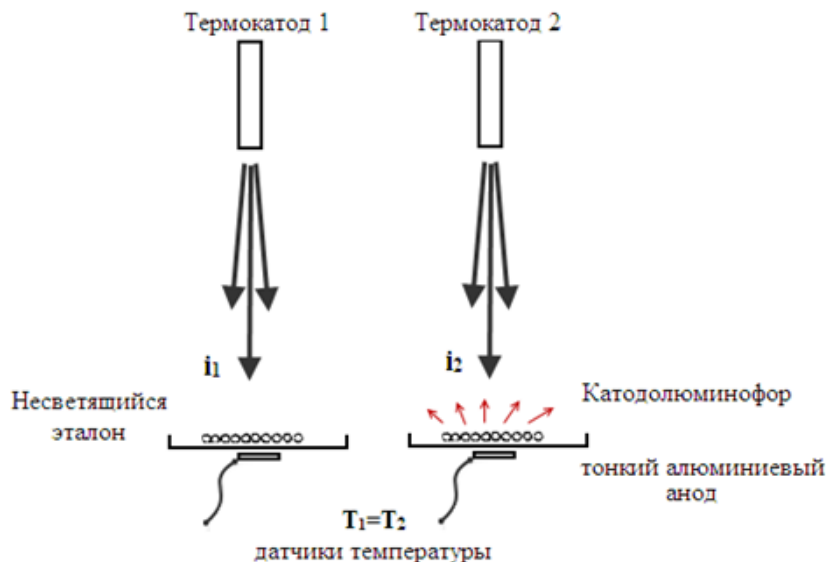


Рис. 1. Метод температурных весов. Схема

### Литература

1. Казанкин О.Н. [и др.]. Неорганические люминофоры. Л: Химия, 1975. 192 с.
2. Тимофеев Ю.П., Воронов Ю.В. Калориметрическое измерение выхода катодолуминесценции // Журн. прикл. спектроскопии. 1976. Т. 25. № 4. С. 729–731.

УДК 621.321; 621.38;535.31

### Перспективы использования различных источников света для теплиц

*В.Б. Киреев, Е.П. Шешин*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Одной из приоритетных задач является разработка и широкое применение эффективных энергосберегающих и экологически чистых источников света. В работе [1] нами был успешно использован адекватный критерий оценки эффективности источников света различного типа, основанный на применении физического ресурсно-энергетического подхода (концепция биосферной цены) для анализа вопросов безопасного устойчивого социально-экономического развития, и определения перспектив и приоритетов в инновационной деятельности и фундаментальных исследованиях [2, 4].

В работе с использованием данного метода обсуждаются перспективы применения источников света различного типа в теплицах для выращивания растений.

При анализе эффективности использования источников света в теплицах должны быть учтены следующие особенности:

1) На различных этапах вегетации и для различных растений оптимальным является использование освещения светом различного спектрального диапазона.

2) Для источников света, используемых в теплицах, не столь критичны требования к энергетической эффективности (световой отдаче), так как источники света в теплице могут и реально используются не только как источники излучения, обеспечивающие фотосинтетическую активность растений, но и как дополнительные источники тепла;

3) В теплицах остро стоит проблема борьбы с биологическим загрязнением (плесень, вредные микроорганизмы, насекомые – вредители и т.п.), а одним из способов борьбы с ними является использование очистки воздуха и поверхности растений с использованием как непосредственно УФ-излучения, так и генерации в очищаемой среде и вблизи очищаемых поверхностей активных химических частиц, например, перекисей,

активных форм кислорода и их производных, которые могут генерироваться также с использованием УФ-излучения [5, 6].

4) Источники света в теплицах должны быть устойчиво работать в условиях достаточно агрессивной среды (высокая влажность и др.).

В этой связи при проектировании современных теплиц необходимо использование набора источников света с различными спектральными характеристиками или источников, обладающих возможностями простой перестройки спектров излучения.

В работе рассмотрены возможности использования источников различного типа с учётом указанных особенностей.

Приведены данные сравнительного анализа существующих и перспективных источников света в видимом диапазоне излучения и отмечается, что в настоящее время вполне конкурентоспособными с существующими являются источники света видимого диапазона с величиной эффективности в диапазоне 20–30 клм час/руб. или 1200–1800 клм час/\$.

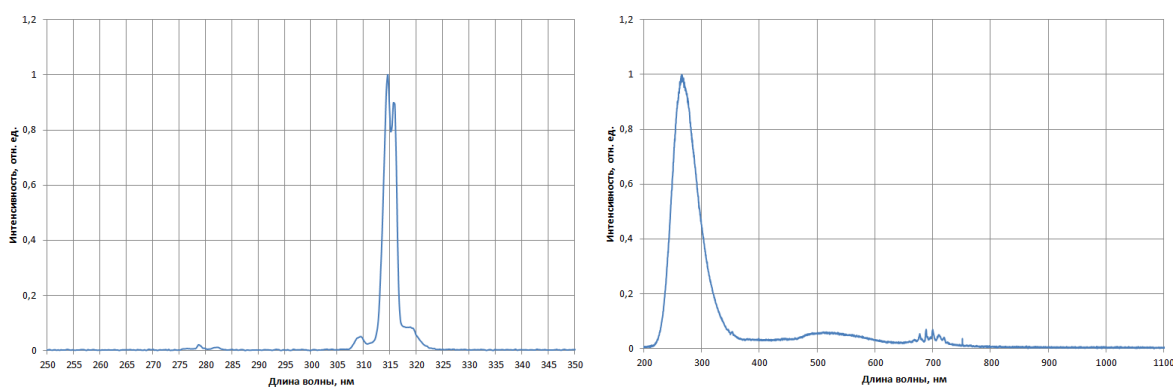
Рассмотрены возможности создания источников света с перестраиваемым спектром излучения или комбинации источников света с различными спектрами излучения в видимом диапазоне.

В работе также проанализированы сравнительные характеристик УФ-источников света различного типа. Так, например, в спектральном диапазоне 300–380 нм для светодиодных (LED) источников света эффективность составляет величину до  $6 \cdot 10^{-3}$  кВт час/руб., для ртутьсодержащих газоразрядных ламп эффективность составляет величину до  $5 \cdot 10^{-2}$  кВт час/руб. Предварительные данные для опытных образцов автокатодных люминесцентных ламп (АКЛЛ), разработанных в лаборатории кафедры вакуумной электроники МФТИ, представлены на рис. 1.

Как видно из представленных данных, при достижении КПД около 10% для АКЛЛ мощностью 1 Вт при их стоимости порядка 50 руб. вполне достижимы значения эффективности свыше  $10^{-2}$  кВт час/руб.

Обсуждаются перспективные направления улучшения физико-технических характеристик автокатодных люминесцентных источников света для различных спектральных диапазонов.

Показано, что исходя из приведённых данных, с учётом возможности унификации многих узлов для ламп, работающих в различных спектральных диапазонах, разработка линейки автокатодных люминесцентных источников света для использования их в теплицах представляется достаточно перспективной.



а)

б)

Рис. 1. Спектральные характеристики экспериментальных ультрафиолетовых автокатодных люминесцентных ламп (АКЛЛ), разработанных в МФТИ: а) АКЛЛ на основелюминофора ПЛАТАН КЛ-УФ 752 с катодом из наноструктурированного углеродного волокна. Полный поток излучения в диапазоне 10–22 мВт. (КПД преобразования энергии до 5%, эффективность преобразования до  $8 \cdot 10^{-3}$  кВт час/руб.); б) АКЛЛ на основе люминофора  $ZnAl_2O_4$  с катодом из

---

наноструктурированного углеродного волокна. Полный поток излучения в диапазоне 0,1–1,5 мВт. (КПД преобразования энергии до 0,25%, эффективность преобразования до  $1,5 \cdot 10^{-4}$  кВт час/руб.)

### Литература

1. *Bugaev A.S., Kireev V.B., Sheshin E.P., Kolodyazhnyj A.Yu.* Cathodoluminescent light sources: status and prospects // *Physics Uspekhi* 2015 V. 58 (8). P. 792–818.
2. *Kireev V.B.* Canecological safety and sustainable development be treated as a physical concept // *CEES Working paper* (The Center for Energy and Environmental Studies, PrincetonUniversity). 1996. V. 134. 11 p.
3. *Киреев В.Б.* Устойчивое развитие, приоритеты в инновационной деятельности и фундаментальные исследования // Вторая международная научная школа для молодёжи «Прикладные математики и физика: от фундаментальных исследований к инновациям. Сборник трудов. 2011. С. 99–102.
4. *Киреев В.Б.* Физика живых систем, технологии и социально-экономическое развитие // II Международная конференция «Phystech MED». Сборник тезисов «Физика живых систем: прошлое настоящее будущее» 2015. С. 1.
5. *Пилипенко П.Н., Попов Л.Л.* Устройство для обработки жидкости в тонком слое ультрафиолетовым излучением // Патент РФ № 150197, 2015 .
6. *Пилипенко П.Н., Попов Л.Л., Шинов А.А.* Устройство для экспрессного определения концентрации активных форм кислорода в водных растворах // Патент РФ № 162866, 2016.



УДК 621.391.63

### Проект фотонного АЦП

*П.О. Якушенко*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Наибольшая частота электронных АЦП, изготавливаемых в России, близка к 500 МГц. Процесс повышения производительности АЦП в настоящее время замедлился, поскольку не удалось снизить флуктуации электронного генератора импульсов, используемого для дискретизации аналогового сигнала и улучшить быстродействие АЦП. В то же время экспериментально обосновано, что фотонные АЦП (ФАЦП) позволяют на оптической несущей получить значительно более высокую частоту выборки аналогового сигнала, чем это может обеспечить транзисторная электроника. Создание из электрооптических модуляторов фотонного АЦП может обеспечить аналого-цифровое преобразование с частотой порядка 10 ГГц.

Для реализации топологии сверхбыстродействующего ФАЦП не обязательно обладать самыми современными в мире технологическими нормами, как Intel (13 нм). Необходимые технологические операции можно выполнить и на имеющемся в России оборудовании (например, Corial); ведь Intel нужна такая норма для реализации быстродействующих переключателей – чем меньше длина, тем быстрее переключается транзистор, однако электрооптический модулятор типа Маха–Цендера даже размером до нескольких мм может переключаться со скоростями порядка 10 ГГц.

Предлагаемый ФАЦП может иметь быстродействие около 10 ГГц. Реализовать топологию ФАЦП на материалах  $A_3B_5$  (вырастить для этого гетероструктуру и провести с ней необходимые технологические операции) можно полностью в России. Имея фотонный АЦП, можно будет разрабатывать цифровые фотонные схемы, включая цифровые оптические процессоры.

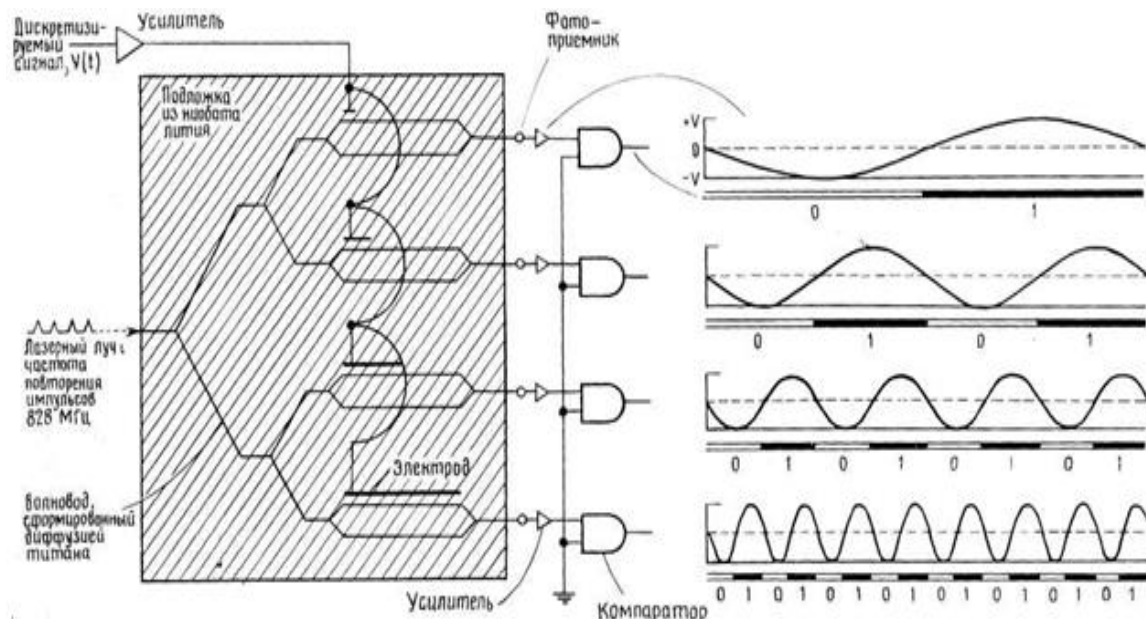


Рис. 1. ФАЦП с модуляторами с различными длинами электродов и их выходные сигналы [3].

Основными элементами чипа являются – импульсный лазер, электрооптический модулятор и фотоприемник, изготовленные на единой схеме в интегральном исполнении (как рис. 1, но с лазером и приемником на той же интегральной схеме)

### Литература

1. Стариков Р. С. Фотонные АЦП – ЗАО «Издательство «Радиотехника», 2015.
2. 'InP-Based Photonic Integrated Circuits', Goldren, 2008.
3. Якушенко П.О., Балаклецкий Н.С. Фотонные интегральные схемы // Сб. докладов 6-й Международной конференции по фотонике и информационной оптике. 2017. С. 146–148.

УДК 629.13.054.6.001.12.001

### Влияние соотношения изотопов $Ne^{20}$ и $Ne^{22}$ в активной смеси на чувствительность зеemanовских лазерных гироскопов к внешним механическим воздействиям

*В.Н. Горшков, Е.Г. Ларионцев, А.А. Медведев, М.Е. Грушин, И.И. Савельев*

ОАО «НИИ «Полус» им. М.Ф. Стельмаха»

Важным преимуществом лазерных гироскопов с частотной подставкой на эффекте Зеemана является их высокая устойчивость к внешним вибрационным и ударным воздействиям. При внешних механических воздействиях (ВМВ) лазерный периметр расстраивается, что вызывает изменение частоты зеемановских биений и, как следствие, дополнительную ошибку в смещении нуля гироскопа. Известно, что одним из способов уменьшения чувствительности к расстройке периметра является использование смеси изотопов неона  $Ne^{20}$  и  $Ne^{22}$  в рабочей смеси накачки. Снижение изменения частоты зеемановских биений при ВМВ достигается за счёт более пологой формы контура усиления.

При использовании смеси изотопов неона  $Ne^{20}$  и  $Ne^{22}$  в рабочей смеси накачки зависимость частоты зеемановских биений от расстройки существенно зависит от соотношения этих компонент. Симметричная форма зависимости частоты зеемановских биений от расстройки периметра обеспечивает минимальный уровень чувствительности смещения нуля к ВМВ.

Данная работа посвящена выбору оптимальных соотношений изотопов неона в газовой смеси для уменьшения ошибки гироскопа при внешних механических воздействиях.

В работе представлены экспериментальные данные измерений частоты подставки, расчётные кривые для ЗЛГ с разными соотношениями  $Ne^{20}$  и  $Ne^{22}$  в активной смеси, а также результаты измерений накопленной ошибки при синусоидальной вибрации лазерных гироскопов.

УДК 53.096

### Измерение разогрева активного световода кольцевым кварцевым резонатором

*Д.Р. Харасов<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО «НТО "ИРЭ-Полус"»

Мощность непрерывного излучения современных волоконных лазеров достигает 100 кВт. При этом в процессах генерации и усиления излучения часть мощности накачки неизбежно переходит в тепло, что ведёт к нагреву волокна, который приводит к изменению характеристик лазера, таких как эффективность, выходная мощность, качество пучка,

длина волны излучения в режиме свободной генерации. Важную роль при разогреве волокна играет полимерная оболочка. Тепловое разрушение полимерной оболочки является одним из главных ограничивающих факторов дальнейшего роста мощности волоконных лазеров [1]. Поэтому крайне важно уметь измерять температуру волокна в процессах генерации и усиления излучения.

В данной работе для измерения температуры волокна в условиях генерации лазерного излучения применяется метод пьезорезонансной радиочастотной спектроскопии [2]. Метод основан на измерении смещения частоты возбуждаемого пьезоэлектрического резонанса кристалла кварца, откалиброванного по температуре (рис. 1).

Для калибровочных измерений вместо волокна внутрь кристалла вставлялась медная проволока, покрытая полимером. Через медную проволоку пропускался постоянный электрический ток, в результате чего происходил нагрев самой проволоки и кристалла. Температура проволоки определялась по изменению сопротивления. Для экспериментов с волокном был собран иттербиевый волоконный лазер с длиной волны излучения 1,06 мкм. Накачка осуществлялась семью лазерными диодами с суммарной мощностью до 155 Вт на длине волны 0,98 мкм. При каждом уровне накачки измерялся разогрев кристалла кварца с вставленным внутрь него волокном. Температура в волокне определялась из решения уравнения теплопроводности. Тепловая мощность определялась разностью квантов накачки и выходного излучения. Измеренный коэффициент пропорциональности между температурами разогрева медной проволоки и кристалла и этот же коэффициент пропорциональности для волокна и кристалла отличаются на 20%. Это говорит о возможности использования медной проволоки, покрытой полимером, для исследования моделей разогрева волокна и полимерной оболочки.

В работе с помощью численного моделирования методом конечных элементов решается уравнение теплопроводности для случая конвективного охлаждения для медной проволоки, покрытой полимером, волокна с двойной оболочкой (DCF) и волокна с многоэлементной первой оболочкой (GTWave):

$$\Delta T(\vec{r}) = \begin{cases} -\frac{Q}{k_F}, \vec{r} \in V_{core} \\ 0, \vec{r} \in V_{clad} \cup V_{pol} \end{cases}, \quad (1)$$

$$k_{pol} \frac{\partial T(\vec{r})}{\partial \vec{n}} = h(T(\vec{r}) - T_c), \vec{r} \in \Gamma_{pol-air}, \quad (2)$$

где  $Q$  – тепловая мощность на единицу объема,  $V_{core}$ ,  $V_{clad}$ ,  $V_{pol}$  – сердцевина, кварцевая и полимерная оболочки волокна соответственно,  $\Gamma_{pol-air}$  – граница полимер–воздух,  $T_c$  – температура воздуха при конвективном охлаждении,  $k_F$  и  $k_{pol}$  – коэффициенты теплопроводности кварца и полимера соответственно,  $h$  – коэффициент теплоотдачи при конвективном охлаждении. Результаты моделирования при тепловой нагрузке 11 Вт/м и  $h = 117$  Вт/К/м<sup>2</sup> представлены на рис. 2.

Температура в сердцевинах DCF- и GTWave-волокон составила 109 и 107,5 °С, а температура меди –100 °С. Отсюда можно утверждать, что для определения температуры в сердцевине GTWave-волокна с хорошей точностью можно пользоваться аналитическим решением уравнения теплопроводности для DCF-волокна:

$$T_o = T_c + \frac{Qr_{core}^2}{4k_F} \left( 1 + 2 \ln\left(\frac{r_{clad}}{r_{core}}\right) + 2 \frac{k_F}{k_{pol}} \ln\left(\frac{r_{pol}}{r_{clad}}\right) + 2 \frac{k_F}{hr_{pol}} \right), \quad (3)$$

где  $T_o$  – температура в центре сердцевины волокна,  $r_{core}$ ,  $r_{clad}$  и  $r_{pol}$  – радиусы сердцевины, оболочки и полимера соответственно

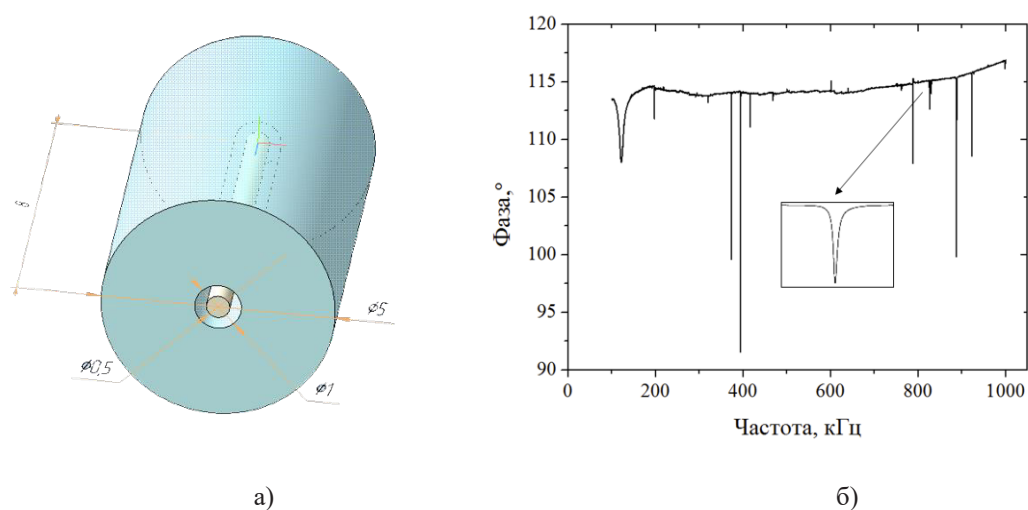


Рис. 1. а) Трёхмерная модель цилиндрического резонатора с волокном в отверстии.  
 б) Пьезоэлектрические резонансы на графике фазочастотной характеристики сигнала, измеряемого с нагрузочного сопротивления в электрической цепи с конденсатором, между обкладками которого помещен кристалл кварца

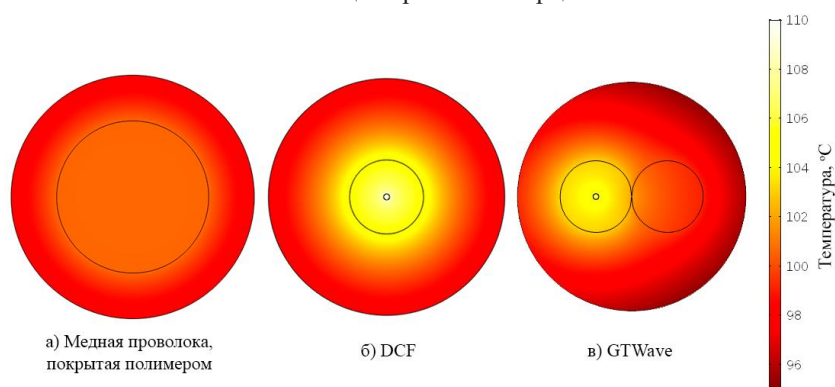


Рис. 2. Распределение температуры в а) медной проволоке, покрытой полимером, DCF-волокне  
 в) GTWave-волокне

### Литература

1. *Lapointe, M.A.* Thermal effects in high-power CW fiber lasers / M.A. Lapointe // Proceedings of SPIE 7195, Fiber Lasers VI: Technology, Systems, and Applications. 2009. P. 71951U.
2. *Pigarev A.V., Konyashkin A.V., Ryabushkin O.A.* Impedance spectroscopy for measuring low optical absorption coefficients of nonlinear optical crystals // SPIE Photonics Europe. International Society for Optics and Photonics, 2016. P. 98941T-98941T-7.

## Вычислительные методы обработки сигнала четырехчастотного лазерного гироскопа

*А.Г. Лапушкин, Э.А. Миликов, Ю.Ю. Брославец, А.А. Фомичев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
ЗАО «ЛАЗЕКС»

Повышение точности лазерного гироскопа возможно путем перехода к четырехчастотному режиму работы [1]. Считывание сигнала вращения от двух пар лучей, имеющих разные круговые поляризации, требует разработки как специальных оптических элементов [2], так и адаптированного программно-математического обеспечения.

Использование зеймановской частотной подставки позволяет компенсировать различия магнитных чувствительностей мод разных поляризаций, но приводит к системе уравнений четвертого порядка:

$$\begin{aligned} N_{\text{п}+} &= -(k_1 * \Omega + \beta_1 * (H + H_3)) * T, \\ N_{\text{п}-} &= -(k_1 * \Omega + \beta_1 * (H - H_3)) * T, \\ N_{\text{л}+} &= -(k_2 * \Omega - \beta_2 * (H + H_3)) * T, \\ N_{\text{л}-} &= -(k_2 * \Omega - \beta_2 * (H - H_3)) * T, \end{aligned} \quad (1)$$

где неизвестна итоговая угловая скорость вращения  $\Omega$ , внешнее магнитное поле  $H$ , коэффициенты магнитной чувствительности  $\beta_1$  и  $\beta_2$ .

В первом приближении предполагается взять:

$$\begin{aligned} \Omega_{k_1=k_2=k; \beta_1=\beta_2=\beta} &= \frac{N_{\text{п}+} + N_{\text{п}-} + N_{\text{л}+} + N_{\text{л}-}}{-4kT}, \\ H_{k_1=k_2=k; \beta_1=\beta_2=\beta} &= \frac{N_{\text{п}+} + N_{\text{п}-} + N_{\text{л}+} + N_{\text{л}-}}{-4T\beta}, \end{aligned}$$

Данное уравнение решено численно с помощью двух методов для последующего сравнения точности и скорости вычисления.

В качестве первого метода выбран метод Ньютона. Метод подразумевает нахождение корней, с помощью первого приближения и последующим вычитанием из него производных. Решение считается найденным, когда разница между итерациями будет меньше заданной дельты.

Пример для системы с двумя неизвестными:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= 0, \\ g(x, y) &= 0, \end{aligned}$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{d_x^{(k)}}{d^{(k)}}, \quad y_{k+1} = y_k - \frac{d_y^{(k)}}{d^{(k)}},$$

$$\begin{aligned} d^{(k)} &= \begin{vmatrix} f'_x(x_k, y_k) & f'_y(x_k, y_k) \\ g'_x(x_k, y_k) & g'_y(x_k, y_k) \end{vmatrix}, \quad d_x^{(k)} = \begin{vmatrix} f_x(x_k, y_k) & f'_y(x_k, y_k) \\ g_x(x_k, y_k) & g'_y(x_k, y_k) \end{vmatrix}, \quad d_y^{(k)} = \\ &= \begin{vmatrix} f'_x(x_k, y_k) & f_y(x_k, y_k) \\ g'_x(x_k, y_k) & g_y(x_k, y_k) \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

В качестве второго метода выбран метод простых итераций. Прежде всего выбирается начальное приближение:

$$\begin{aligned} F(x, y) &= 0, \\ G(x, y) &= 0. \end{aligned}$$

Исходная система уравнений преобразуется к эквивалентной системе вида:

$$\begin{cases} x_1^{(1)} = \varphi_1(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \\ x_n^{(1)} = \varphi_n(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \end{cases},$$

и по ней осуществляется итерационный цикл. Если итерации сходятся, то они сходятся к решению уравнения. Обозначим  $M_{kj} = \max \left| \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} \right|$ . Достаточным условием сходимости является  $\|M\| < 1$ . Решение данного уравнения вышеперечисленными способами помогло определить, что метод Ньютона сходится с заданной точностью на седьмой итерации, а метод простых итераций на девятой. Данный результат подтверждает необходимость использования метода Ньютона для получения точных значений угловых скоростей четырехчастотных лазерных гироскопов.

### Литература

1. Миликов Э.А., Брославец Ю.Ю., Фомичев А.А. Влияние магнитного поля на дрейф зеемановского лазерного гироскопа // Труды 58-й научной конференции МФТИ.
2. Миликов Э.А., Брославец Ю.Ю., Фомичев А.А. Система формирования сигнала четырёхчастотного зеемановского лазерного гироскопа // Труды 59-й научной конференции МФТИ. <http://conf59.mipt.ru/static/prog.html>

УДК 535

### Связь встречных волн в лазерном гироскопе при работе с частотной подставкой

*Д.М. Амбарцумян, Ю.Ю. Брославец, Н.С. Калмыкова, А.А. Фомичев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Захват частоты в лазерном гироскопе связан в основном с рассеянием излучения на зеркалах каждой из встречных волн в направлении противоположно направленной волны [1, 4]. Это явление приводит к нелинейности выходной характеристики гироскопа. Поэтому при измерении малых угловых скоростей, обычно измеряемых в навигационных системах лазерными гироскопами, используют частотную подставку, смещающую рабочую характеристику гироскопа в линейную область, а также стараются создать зеркала с минимальным рассеянием, обусловленным чаще всего шероховатостями подложки и соответственно в результате дефектами на поверхности зеркала. Наиболее часто используется знакопеременная частотная подставка, создаваемая либо крутильными колебаниями гироскопа с плоским оптическим контуром, либо магнитооптическими методами, используя непланарный резонатор и эффект Зеемана или Фарадея. В этом случае рассеяние излучения остается и в результате взаимовлияния встречных волн через это рассеяние рабочая выходная характеристика гироскопа имеет искажения и шум. Поэтому важно для получения высокой точности гироскопа учесть влияние взаимодействия встречных волн через рассеяние в процессе работы гироскопа, измеряя величину этого рассеяния и затем используя полученные значения как в физико-математической модели



ошибок гироскопа для компенсации погрешности, так и для активного управления зеркалами для минимизации этого взаимовлияния через рассеяние, поскольку вклад от разных зеркал может происходить с разной фазой. Измерение взаимовлияния встречных волн может быть определено различными методами [3, 4], но в рабочем режиме гироскопа один из наиболее подходящих способов основывается на детектировании величины сигнала амплитудной модуляции одной из волн [1, 2].

Уравнение, описывающее процесс генерации в отдельной моде резонатора лазера с учетом насыщения усиления, может быть представлено в виде уравнения Ван-дер-Поля [5]. Поэтому для лазерного гироскопа в двунаправленном режиме генерации можно рассмотреть систему уравнений двух осцилляторов, описываемых уравнениями Ван-дер-Поля, с линейной связью между ними:

$$\begin{cases} \frac{d^2 E_1}{dt^2} + \omega_{01}^2 \cdot E_1 = \alpha_1 \cdot (1 - E_1^2) \cdot \frac{dE_1}{dt} + \Theta_1 \cdot \frac{d^2 E_2}{dt^2} \\ \frac{d^2 E_2}{dt^2} + \omega_{02}^2 \cdot E_2 = \alpha_2 \cdot (1 - E_2^2) \cdot \frac{dE_2}{dt} + \Theta_2 \cdot \frac{d^2 E_1}{dt^2} \end{cases}, \quad (1)$$

где  $E_1, E_2$  – амплитуды колебаний,  $\omega_{01}, \omega_{02}$  – собственные частоты автоколебательных систем,  $\alpha_1, \alpha_2$  – параметры, описывающие усиление для каждой автоколебательной системы,  $\Theta_1, \Theta_2$  – коэффициенты связи между автоколебательными системами, приводящие к захвату частоты. Численное моделирование показало наличие амплитудной модуляции (рис. 1), пропорциональной величинам связи встречных волн  $\Theta_1, \Theta_2$ , а также наличие модуляции частоты каждой из встречных волн (рис. 2).

В работе были проведены экспериментальные исследования величины связи встречных волн в рабочем режиме гироскопа с зеемановской подставкой [4]. Измерения проводились на различных гироскопах с непланарным резонатором с использованием нескольких методов измерения величины связи, в том числе и указанный выше. Зависимости, снятые на рис. 3, показали корреляцию кривой величины связи встречных волн с кривой дрейфа гироскопа и величиной частотной подставки.

В целом, измерение величины связи встречных волн может улучшить точность гироскопа при использовании этих данных для коррекции в гироскопе, как при обработке данных, так и физически, изменяя положение зеркал.

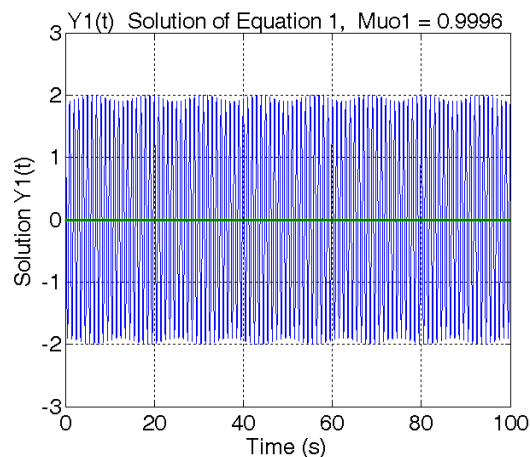


Рис. 1. Изменение амплитуды колебаний осциллятора во времени при наличии связи встречных волн

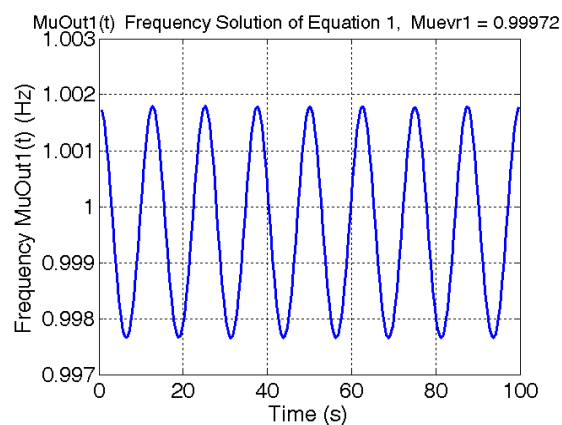
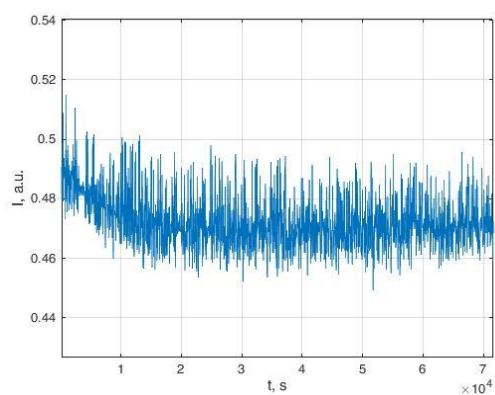


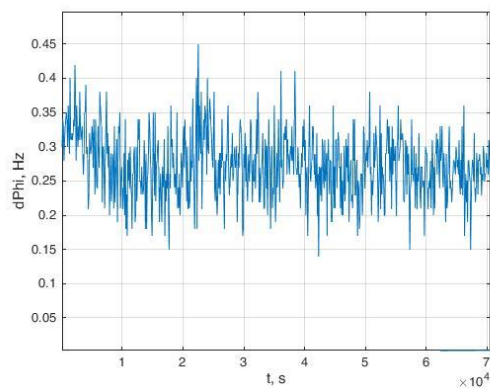
Рис. 2. Зависимость частоты одной из волн от времени

а)

б)



в)



г)

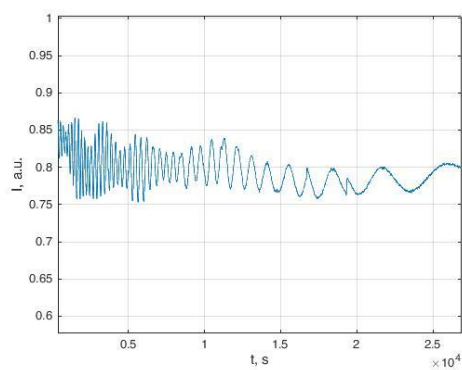
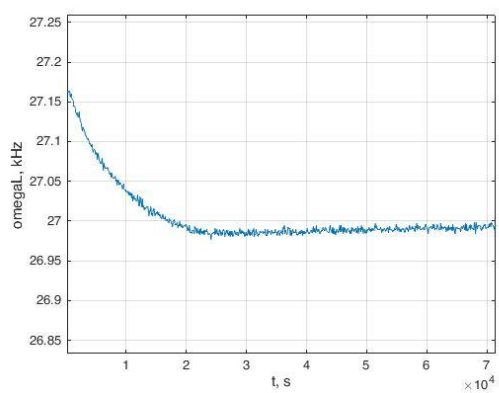


Рис. 3. Зависимости от времени следующих величин: а) связи встречных волн, б) дрейфа гироскопа, в) частотной подставки, г) связи встречных волн на другом гироскопе

### Литература

1. Зейгер С.Г., Климонтович Ю.Л., Ланда П.С. Волновые и флуктуационные процессы в лазерах. М.: Наука. 1974.

2. *Aronovitz F.* Fundamentals of the ring laser gyro // *Optical Gyros and their Application*. 1999. P. 3–1.
3. *Азарова В.В., Горшков В.А., Петрухин Е.А.* Влияние внешних источников рассеяния на полосу захвата кольцевого He-Ne лазера.
4. *Амбарцумян Д.М., Брославец Ю.Ю., Фомичев А.А.* Связь встречных волн в лазерном гироскопе. 59-я научная конференция МФТИ. 2016. <http://conf59.mipt.ru/static/prog.html>
5. *Ярив А.* Квантовая электроника / Под ред. *Я.И. Ханина*. М.: Сов. радио, 1980.

УДК 535

## **Особенности оптического смесителя излучения кольцевого лазера с непланарным резонатором**

*В.Г. Семенов, Э.А. Миликов, Ю.Ю. Брославец, А.А. Фомичев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
ЗАО «ЛАЗЕКС»

Собственными модами кольцевого непланарного резонатора являются моды с левой и правой круговой поляризацией [1]. В случае применения в составе лазерного гироскопа данного типа резонатора имеет место расщепление мод обеих поляризаций, вызванное вращением гироскопа (эффект Саньяка).

С практической точки зрения одновременная работа лазерного гироскопа на двух парах мод различной круговой поляризации интересна в целях повышения точности [2]. Однако разработка оптической схемы смесителя такого гироскопа представляет собой сложную задачу и заслуживает отдельного внимания.

Для гироскопа с непланарным резонатором был выполнен расчет интерференционного зеркала для вывода излучения различных круговых поляризаций [3]. В данной работе проведено исследование оптического смесителя, способного развести излучение разных поляризаций, а затем свести излучение одинаковых поляризаций на фотоприемном устройстве.

В рамках данной задачи средствами матричного метода Джонса проделан расчет поляризационных характеристик излучения в составе оптического смесителя и влияния на них элементов смесителя, предложена конфигурация оптических элементов смесителя, проведен расчет делительного зеркала, а также предложен метод унификации смесителя под различные углы вывода излучения из резонатора, основанный на применении интерференционного зеркала, компенсирующего нарушение круговой поляризации выходным зеркалом гироскопа.

### **Литература**

1. *Азарова В.В., Голяев Ю.Д., Дмитриев В.Г.* Кольцевые газовые лазеры с магнитооптическим управлением в лазерной гироскопии // *Квантовая электроника*. 2000. Т. 30. № 2. С. 96–104.
2. *Миликов Э.А., Брославец Ю.Ю., Фомичев А.А.* Влияние магнитного поля на дрейф зеемановского лазерного гироскопа // *Труды 58-й научной конференции МФТИ*.
3. *Миликов Э.А., Брославец Ю.Ю., Фомичев А.А.* Система формирования сигнала четырёхчастотного зеемановского лазерного гироскопа // *Труды 59-й научной конференции МФТИ*. (<http://conf59.mipt.ru/static/prog.html>)

УДК: 621.373.826

## Особенности использования лазерного отжига в процессах дегазации и активации геттеров

*М.Н. Мешков<sup>1</sup>, П.Ю. Лобанов<sup>2</sup>, О.Е. Сидорюк<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИ «Полус» им. М.Ф. Стельмаха»

Газопоглотители в виде спрессованного металлического порошка оказываются эффективны для снижения парциального давления остаточных газов и стабилизации во времени параметров рабочих смесей газонаполненных приборов, в том числе датчиков лазерных гироскопов (ЛГ).

В настоящей работе представлены результаты разработки технологии лазерного отжига геттеров для их дегазации и активации на этапе производства приборов. Рассмотрены вопросы оптимизации параметров лазерного воздействия на нагреваемый объект: длины волны, мощности и распределения интенсивности излучения по поверхности образца.

В качестве источников использовались непрерывные лазеры на АИГ:Nd с длиной волны 1064 нм и полупроводниковые излучатели на 808 и 915 нм. Максимальная выходная мощность – до 90 Вт. Все модели имели волоконный вывод излучения, интенсивность которого регулировалась по итогам контроля температуры образцов в диапазоне от 400 до 850 К. Оптимизация оптических схем обеспечивала равномерный нагрев образцов диаметром 15 мм при соответствующем выборе параметров распределения интенсивности излучения (рис.1а). В ряде случаев для конструкций геттеров с отверстием использовалось пространственное распределение интенсивности с центральным провалом (рис.1б), формируемым на выходе из оптоволокна при наклонном вводе излучения.

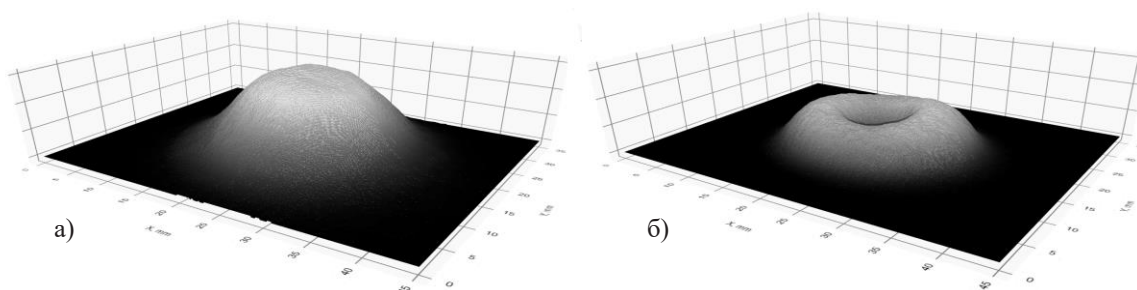


Рис. 1. Пространственные распределения интенсивности лазерного излучения на поверхности образца

Особое внимание уделено вопросам измерения и контроля температуры геттера посредством пирометрии, осложненной в данном случае как условиями замкнутого объема резонатора датчика ЛГ, так и наличием интенсивной фоновой ИК-засветки. Решение пирометрической задачи включало конкретизацию спектрального диапазона той части теплового излучения, которая может быть доступна для анализа. При нагреве образца внутри ситаллового корпуса датчика ЛГ длинноволновая граница спектра ограничена краем поглощения материала около 2,8 мкм, а нижняя определяется защитным фильтром от рассеянного лазерного излучения.

Спектральная плотность мощности теплового излучения выражается формулой Планка:

$$U(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \left( \exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1 \right)^{-1}.$$

Здесь  $c$  – скорость света,  $h$  – постоянная Планка,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура.

Расчетные зависимости  $U(\lambda, T)$  в диапазоне длин от 1 до 3 мкм представлены на рис. 2.

Интегральные значения энергетической светимости в диапазоне длин волн от  $\lambda_1$  до  $\lambda_2$  могут быть найдены по формуле:

$$U(T) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} U(\lambda, T) d\lambda,$$

а соответствующие величины интегрального теплового излучения  $W(T)$  с поверхности площади  $S$  в телесный угол  $\Omega$  вычисляются как

$$W(T) = U(T)S\Omega.$$

На рис. 3 представлена расчетная температурная зависимость интегрального теплового излучения  $W(T)$  образца с площадью 1 мм<sup>2</sup> в телесный угол 1 ср в спектральном диапазоне от 1,6 до 2,8 мкм (при излучательной способности  $\varepsilon = 0.6$ , характерной для поверхности титан-ванадиевых геттеров).

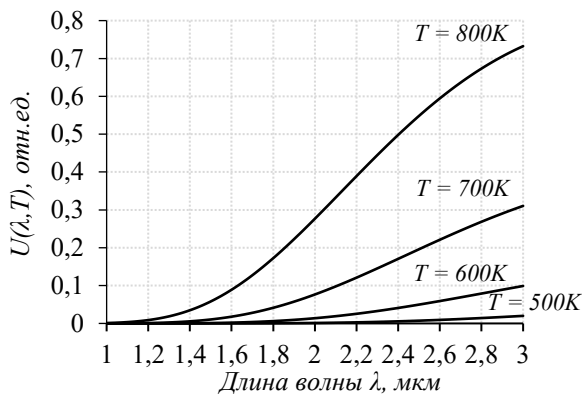


Рис. 2. Расчетные зависимости  $U(\lambda, T)$

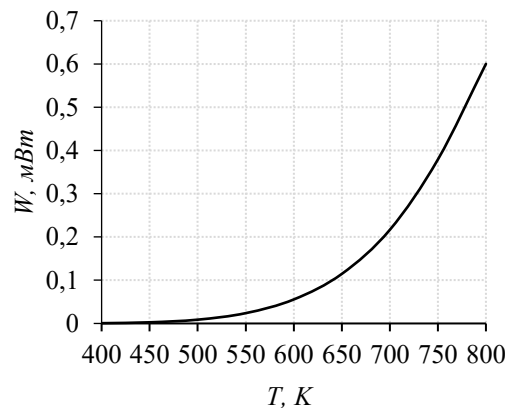


Рис. 3. Расчетные зависимости  $W(T)$

Сравнение этих данных с уровнем отраженного и рассеянного лазерного излучения при нагреве геттеров позволяет установить, что эффективная фильтрация полезного сигнала может быть достигнута с применением германиевой пластины толщиной от 0,1 мм (расчетный коэффициент ослабления  $\sim 440$  дБ [1]).

Существенно, для достижения необходимой точности пирометрического анализа необходим адекватный учет значения излучательной способности  $\varepsilon$ , которая, вообще говоря, может меняться в ходе технологического процесса вместе с изменением состояния поверхности. Например, известно [2], что в области 1,6 мкм  $\varepsilon = 0,3 \dots 0,5$  и  $\varepsilon = 0,6 \dots 0,8$  соответственно для чистой и окисленной поверхностей титана. На рис.4 представлены расчетные зависимости ошибок  $\Delta T$  в измерениях температуры  $T$  при изменении излучательной способности на 20%. Особенно существенной эта зависимость оказывается в широком спектральном диапазоне от 1 до 15 мкм (кривая 1), оставаясь значимой в диапазоне 1,6... 2,8 мкм (кривая 2).

Это может приводить к ошибкам оценки температуры образца, поверхность которого претерпевает изменения в ходе вакуумного отжига.

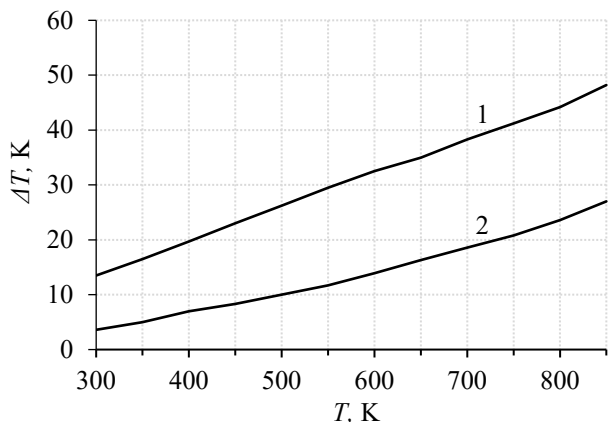
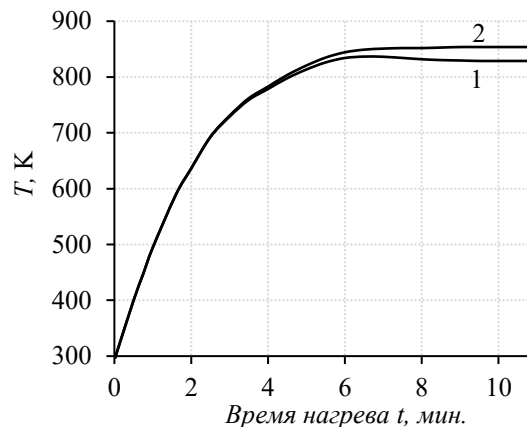
Рис. 4. Расчетные зависимости  $\Delta T(T)$  при изменении  $\varepsilon$ 

Рис. 5. Мониторинг температуры отжига геттера

В настоящей работе коррекция излучательной способности производилась с использованием анализа доли  $R$  отраженного от образца основного лазерного излучения по методике [3]:  $\varepsilon \approx 1 - R$ . Это допустимо в силу близости спектральных диапазонов лазерного и исследуемого теплового излучений.

На рис. 5 представлена иллюстрация одного процесса отжига геттера с измерениями температуры без коррекции  $\varepsilon$  (кривая 1) и с учетом ее изменений при модификации поверхности (кривая 2).

В настоящей работе продемонстрировано решение описанных задач лазерной технологии вакуумной дегазации и активации геттеров в условиях массового производства датчиков ЛГ, по результатам отмечено преимущество этой технологии в сравнении с аналогичной на основе индукционного нагрева.

### Литература

1. Dash W.C., Newman R. Intrinsic Optical Absorption in Single-Crystal Germanium and Silicon at 77 K and 300 K // Physical review 1955. V. 99, N 4. P. 1151–1155.
2. Table of Emissivities in Three Popular Spectral Regions. <http://spectralemissivity.com/>.
3. Barr J.K. Spectral Emissivity By Interferometric Spectroscopy // Infrared Physics 1969. V. 9, N 3, P. 97–108.

УДК 535

## Процедуры паспортизации бесплатформенной инерциальной навигационной системы НСИ2010

*А.Б. Тарасенко, В.Б. Успенский, А.А. Фомичёв*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Цель паспортизации блока – определение параметров аналитических моделей для компенсации инструментальных погрешностей блока в ходе дальнейшей эксплуатации.

К инструментальным погрешностям блока относятся:

- 1) смещение нулей (СН) акселерометров;
- 2) погрешность масштабного коэффициента (МК) акселерометров;
- 3) параметры неортогональности акселерометров;
- 4) дрейф лазерных гироскопов (ЛГ);
- 5) погрешность масштабного коэффициента ЛГ;
- 6) параметры неортогональности ЛГ.

В качестве компенсирующих моделей введены полиномиальные зависимости каждого параметра инструментальной погрешности от температурных параметров – обновляемых измерений встроенных термодатчиков.

Методы паспортизации:



- 1) по прямым измерениям вектора эталонной угловой скорости и вектора ускорения свободного падения, проводимым в различных температурных условиях;
- 2) по результатам работы алгоритма БИНС.

Оборудование для проведения паспортизации:

- 1) НСИ-2010 - объект паспортизации;
- 2) поворотный стол Actidyn 1144С;
- 3) камера тепла и холода Climats 750 Т 30/4.

Паспортизация осуществляется в два этапа.

На первом этапе по прямым измерениям в различных температурных условиях определяются параметры первичных компенсирующих моделей, включающих соответствующие температурные зависимости.

На втором этапе по результатам прямых измерений с учетом первичной компенсации погрешности, а также по результатам работы БИНС определяются поправки параметров первичной модели или параметры вторичных моделей более простой структуры.

Второй этап паспортизации возможен только при эффективном выполнении первого этапа. Достижение высокой точности функционирования системы обеспечивается вторым этапом паспортизации.

Результаты моделирования на данных калибровочного эксперимента

С учетом паспорта, полученного в ходе двух этапов паспортизации, получены результаты функционирования БИНС на калибровочных данных с двумя разворотами блока (рис. 2 и 3) и на данных независимого эксперимента (рис. 4 и 5). Результаты приведены в виде соответствующих графиков.

Реализованная методика двухэтапной паспортизации является целесообразной. Такая паспортизация приводит к удовлетворительным результатам работы алгоритма БИНС, полученным на располагаемых данных:

- 1) максимальная погрешность вычисления скорости в двух экспериментах 2,1 м/с;
- 2) погрешность вычисления координат за 1 час 40 минут (с двумя разворотами по курсу) не превышает 3 км в первом эксперименте и не превышает 4 км во втором эксперименте;
- 3) погрешность за первый час (до разворота) в двух экспериментах не превышает 1 км.

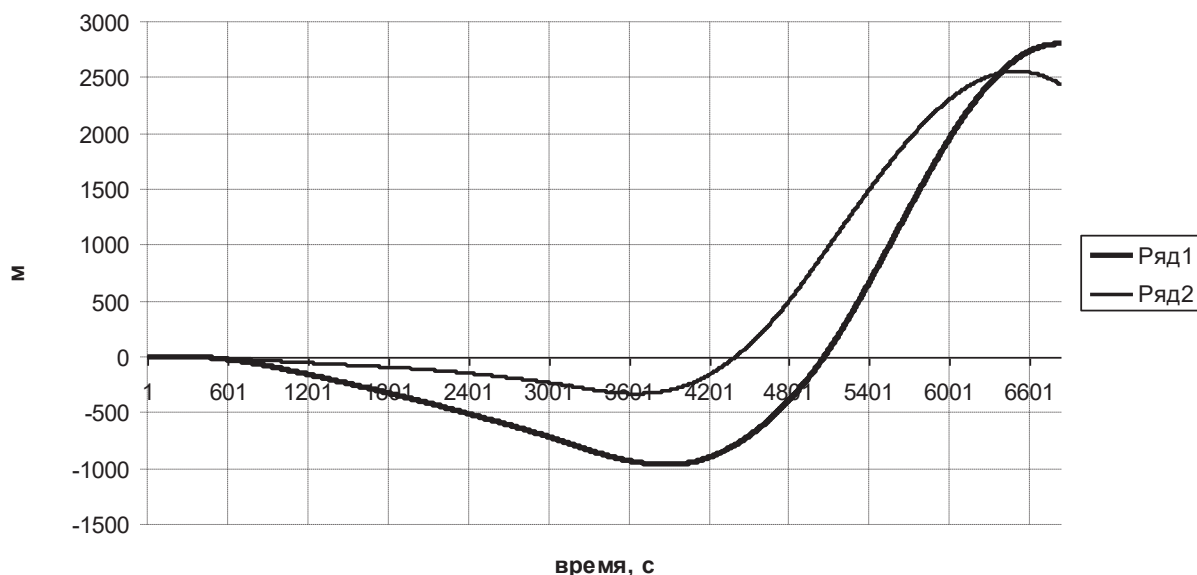


Рис. 3. Погрешность вычисления широты (ряд 1) и долготы (ряд 2) (результаты моделирования на калибровочном эксперименте)

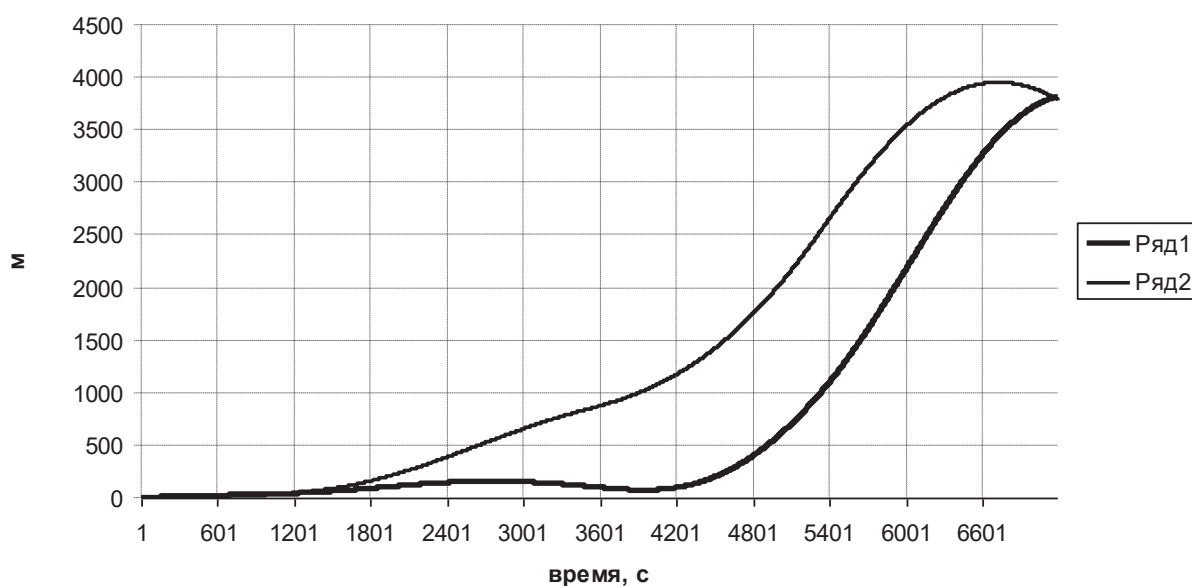


Рис. 5. Погрешность вычисления широты (ряд 1) и долготы (ряд 2) (результаты моделирования на независимом эксперименте)

### Литература

1. Матвеев В.В., Распопов В.Я. Основы построения бесплатформенных инерциальных навигационных систем. СПб.: Электроприбор, 2009. 280 с. ISBN 978-5-900180-73-3.
2. Фомичев А.А., Ларионов П.В., Брославец Ю.Ю., Морозов А.Д. Результаты разработки, испытаний и эксплуатации интегрированных инерциально-спутниковых систем серии НСИ АО «ЛАЗЕКС» // XXIII Санкт-Петербургская международная конференция по интегрированным навигационным системам, 2016. С. 224–233.

УДК 535

### Устойчивость положения моды к разбюстировкам непланарного резонатора лазерного гироскопа

*Ю.Ю. Брославец, Е.А. Полукеев, А.А Фомичев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
ЗАО «ЛАЗЕКС»

В работе рассматривается влияние отклонений зеркал от их идеального положения на положение оптического контура в кольцевом резонаторе лазерного гироскопа. Кольцевые резонаторы используются в лазерных гироскопах с различными типами частотных подставок, поэтому среди резонаторов можно выделить планарные и непланарные. Смещения контура в планарном резонаторе, вызванные неточным позиционированием зеркал, описано в книге [1].

Мы рассматриваем симметричные резонаторы. Описать контур с помощью матриц, как в [1], не получается, так как получается поворот пучка на каждом зеркале, а смещение по второй оси влияет также и на первую. Описать с помощью векторов также не получится, так как плоскость задается точкой и двумя векторами. Выходом является численное моделирование с использованием координат, как показано в [2]. С помощью численного моделирования можно просчитать положение контура при произвольной конфигурации зеркал и рассчитать максимальное отклонение от идеального контура, на основании

которого просверлены каналы. Наш резонатор состоит из трех плоских зеркал и одного сферического. Угол излома резонатора в нашем исследовании мы также будем менять.

При расчетах определяется оптический контур, исходя из того, что начальная и конечная точки при обходе луча должны совпадать. После чего производится сравнение с идеальным контуром в отсутствие отклонений зеркал. Ниже представлены результаты расчета при отклонении одного из плоских зеркал. Рассмотрим резонатор с углом излома 32 градуса [3].

Интересен также вопрос о том, как меняются отклонения в случае различных углов излома. Рассмотрим этот вопрос при неизменном отклонении одного из зеркал.

В результате можно сделать вывод о том, что смещение контура линейно связано с отклонением зеркала, однако в реальном случае при отклонении всех зеркал картина будет несколько сложнее. В случае с углом излома можно сказать, что при его увеличении резонатор становится более устойчивым к разбюстировкам.

### Литература

1. *Ищенко Е.Ф.* Открытые оптические резонаторы. М.: Советское радио. 1980. С. 208.
2. *Брославец Ю.Ю., Полукеев Е.А., Фомичев А.А.* Влияние деформации оптического контура непланарного резонатора лазерного гироскопа на дрейф нуля // XXII Санкт-Петербургская международная конференция по интегрированным навигационным системам. Санкт-Петербург, Россия, 2015. С. 314–317.
3. *Азарова В.В., Голяев Ю.Д., Дмитриев В.Г.* Кольцевые газовые лазеры с магнитооптическим управлением в лазерной гироскопии // Квантовая электроника. 2000. № 30. С. 96–104.

УДК 620.179.118.4

### Особенности контроля параметров прецизионных лазерных зеркал

*В.В. Азарова<sup>1,2</sup>, Ю.Д. Голяев<sup>1,2</sup>, П.И. Ищенко<sup>1</sup>, А.В. Кулагин<sup>1</sup>, В.В. Фокин<sup>1</sup>,  
И.В. Чертович<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ОАО «НИИ "Полюс" им. М.Ф. Стельмаха»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

В работе анализируются результаты измерений параметров высокоотражающих зеркал, используемых в лазерной гироскопии. Особенности таких зеркал являются в первую очередь высокие требования к материалу и поверхностям подложек. Подложки изготавливаются из материалов с ультранизким коэффициентом теплового расширения (ТКЛР). Этому требованию удовлетворяют оптически прозрачные стеклокерамические материалы типа зеродур, ситалл, клеакерам. Эти композитные материалы имеют аморфно-кристаллическую структуру, и получение необходимых сверхгладких поверхностей, пригодных для нанесения многослойных интерференционных покрытий (МИП) с высоким коэффициентом отражения ( $R > 0,99999$ ), требует применения химико-механических методов финишной полировки и современных методов подготовки поверхностей к нанесению покрытий. Чередующиеся слои МИП  $Ta_2O_5/SiO_2$  наносятся методом ионно-лучевого напыления (IBS) в вакуумных камерах [1]. Этот метод нанесения МИП характеризуется высокой плотностью практически не рассеивающих тонкопленочных четвертьволновых слоев.

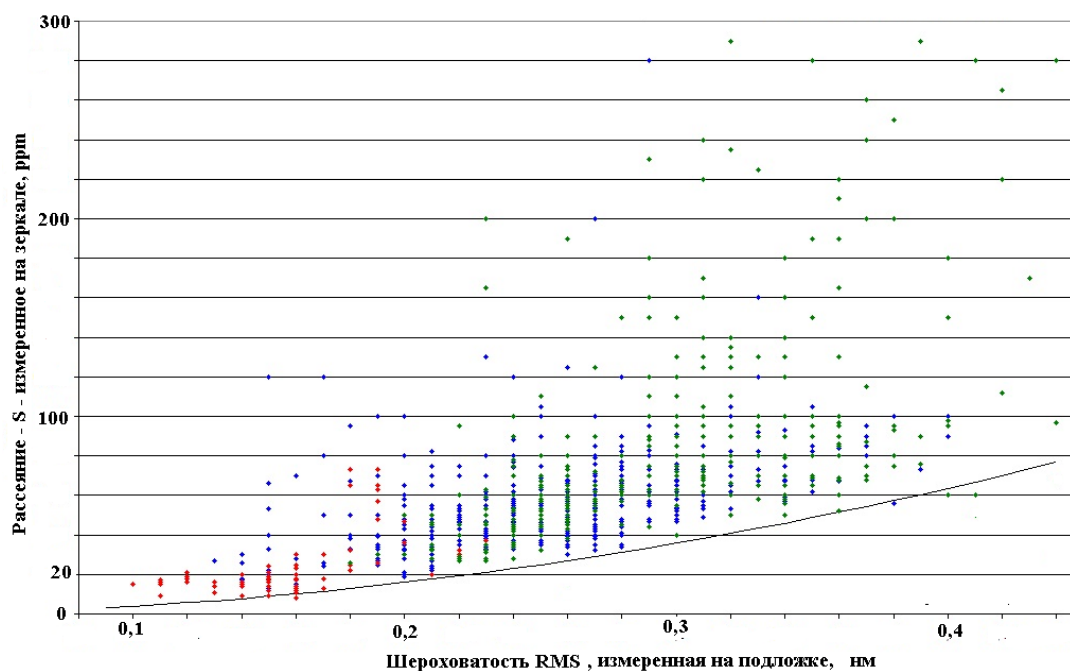


Рис. 1. Статистический анализ качества лазерных гироскопических зеркал по параметру интегральное рассеяние. Расчетная кривая получена по формуле [2]:  $TIS_{smooth} = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \cos\theta_i \sigma\right)^2$ . Измерения параметра  $S$  проведены при  $\theta_i = 0$

Методы измерения параметров таких малорассеивающих, высокоотражающих покрытий требуют специально разработанных прецизионных измерительных устройств. На рис. 1 показана зависимость экспериментально измеренной величины рассеяния на зеркалах от шероховатости подложек, измеренной методом оптической некогерентной интерферометрии [3]. Из приведенных результатов измерений видно, что рассеяние коррелирует с шероховатостью подложек, но определяется не только ее величиной. МИП зеркал характеризуются следующими основными параметрами – суммарные потери  $L$ , потери на рассеяние  $S$ , потери на поглощение  $A$  и потери на пропускание  $T$ . Непосредственно измеряются  $L$ ,  $S$  и  $T$ , поглощение же вычисляется путём составления баланса потерь в соответствии с законом сохранения энергии:  $L = S + A + T$ , или  $A = L - (S + T)$ . Суммарные потери измеряются на прецизионной метрологической установке, принцип действия которой описан в работе [4]. Точность измерений достигает единиц ррп. Рассеяние и потери на пропускание измеряются с помощью светомерного шара [5]. Точность измерения также достигает долей и единиц ррп. Однако непосредственно измеряемая фотометрическая величина не соответствует величинам  $S$  и  $T$ , стоящим в вышеприведенных уравнениях, и необходимо делать соответствующую поправку. В качестве одного из примеров на рис. 2 показаны результаты измерений зеркальных покрытий, нанесенных в одном процессе. Рассеяние и суммарные потери измерялись для s-поляризации под углом  $45^\circ$ . Все измеренные зеркала взяты из одного процесса напыления. Структура покрытия 2L(HL)19H. Потери на пропускание покрытия менее 0.5 ррп, что позволяет пренебречь этой величиной.



Рис. 2. Зависимость величины суммарных потерь от величины измеренного рассеяния

К какому виду потерь отнести недостающую часть баланса – к рассеянию или к поглощению? Важным с точки зрения ответа на данный вопрос является определение типа рассеяния. Можно записать потери на рассеяние в следующем виде:  $S = S_{\text{объем}} + S_{\text{шерохов}} + S_{\text{точ.деф}}$ , где  $S_{\text{объем}}$  – объемное рассеяние плёнкообразующих материалов,  $S_{\text{шерохов}}$  – рассеяние на неровностях границ раздела, а  $S_{\text{точ.деф}}$  – рассеяние на дефектах, соизмеримых с длиной волны. Величина объемного рассеяния не превышает значения 1–2 ррт. Рассеяние на неровностях границ раздела многослойных тонких пленок рассмотрено в целом ряде теоретических и экспериментальных работ (напр., [6]), из которых следует, что рассеяние на многослойных структурах характеризуется индикатрисами рассеяния как в направлении отраженного луча, так и в направлении прошедшего. Рассеяние на точечных дефектах относится к рассеянию Ми, индикатриса рассеяния может в данном случае иметь сложный вид с преимущественными направлениями рассеяния. Рассеяние на зеркалах определяется не только шероховатостью подложек, но и подготовкой поверхностей к нанесению МИП. Потери излучения на рассеяние определяются не полностью методом светомерного шара.

### Литература

1. Колодный Г.Я., Азарова В.В., Расев М.М. [и др.]. // The 2nd Petersburg international conference on gyroscopic technology and navigation. 1995. P. 47–50.
2. Harvey J.E., Deriving Optical Fabrication Tolerances to Satisfy Specific Optical Performance Requirements: Beyond the Smooth-surface Limit // CREOL, NASA Goddard Space Flight Center Optics Branch TN Symposium Greenbelt, MD 20771. 2010.
3. Азарова В.В., Цветкова Т.В. Анализ шероховатости прецизионных оптических поверхностей // Изв. вузов. Приборостроение. 2014. Т. 57. № 6.
4. Петрухин Е.А., Бессонов А.С., Макеев А.П., Бондарев А.Л. [и др.]. Двухканальный способ измерения потерь в кольцевом оптическом резонаторе на длине волны 632,8 нм // Квантовая электроника. 2016. Т. 46. № 7. С. 650–654.
5. Сидорюк О.Е., Лобанов П.Ю., Мануйлович И.С. [и др.]. // Датчики и системы, 2017. № 1, С. 42–49.
6. Bousquet P., Flory F., Roche P.. Scattering from multilayer thin films // J.Opt. Soc. Am, 1981. V. 71. N 9. P. 1115.

---

---

## Секция фотоники

---

---

УДК 53.083.2

### Определение температуры поверхности диэлектриков методом радиочастотной импедансной спектроскопии

*Н.В. Коваленко<sup>1</sup>, Г.А. Алоян<sup>1</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полус»

<sup>3</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Воздействие мощного лазерного излучения на оптические элементы сопровождается их неоднородным разогревом, что в свою очередь может приводить не только к изменению их оптических свойств, но и к необратимой деградации или разрушению. Неоднородный разогрев часто сопровождается градиентом температуры поверхности. Это обуславливает важность контроля и измерения распределения температуры поверхности оптических элементов при лазерном воздействии.

Чаще всего температура поверхности измеряется с помощью тепловизоров и контактных датчиков (терморезисторов, термопар и др.). В случае использования тепловизоров коэффициент серости спектра теплового излучения может зависеть от длины волны. Также тепловое излучение в основном сосредоточено в среднем инфракрасном диапазоне, что затрудняет измерение температуры оптических элементов при прохождении через них излучения того же диапазона. Терморезисторы требуют хорошего теплового контакта, а также могут существенно нагреваться за счёт поглощения рассеянного излучения. В работе [1] был предложен альтернативный метод измерения температуры поверхности образцов на основе концепции эквивалентной температуры.

Для измерения температуры поверхности на исследуемый образец помещается нелинейно-оптический кристалл малых размеров. Нелинейно-оптические кристаллы являются пьезоэлектриками и при воздействии внешнего радиочастотного поля в них могут возбуждаться пьезоэлектрические резонансы. Частоты резонансов зависят от температуры. Для установления взаимного соответствия производится калибровка терморезонатора при его однородном разогреве [2]. При неоднородном разогреве сдвигу резонансной частоты ставится в соответствие изменение эквивалентной температуры, которая близка к средней термодинамической температуре терморезонатора.

Для оценки точности измерения температуры поверхности данным методом необходимо разработать теоретическую модель, а также провести ряд дополнительных экспериментов, позволяющих оценить погрешность измерений и описать процессы теплообмена. Для анализа точности проводился следующий модельный эксперимент: на кристалл кварца помещён терморезонатор из ниобата лития. Кристалл кварца разогревается снизу постоянным тепловым потоком. Сверху кристалл с терморезонатором охлаждаются конвективно воздухом, что описывается уравнениями Навье–Стокса. На рис. 1а изображены распределения температуры кристаллов и воздуха через некоторое время после начала разогрева кварца.

Для оценки ошибки измерений в модели было введено три вида погрешностей, связанных с неоднородностью температуры терморезонатора, погрешностью теплового контакта (разница температур поверхностей образца и терморезонатора), искажением температурного поля вблизи поверхности образца терморезонатором (температура поверхности кварца под терморезонатором и на большом расстоянии от него). Также в модельном эксперименте было исследовано влияние размеров терморезонатора на погрешность определения температуры поверхности. Уменьшение ширины и длины



терморезонатора приводило к небольшому изменению величины погрешности, в то время как уменьшение его высоты существенно снижает погрешность, что показано на рис. 1б.

Измерение температуры поверхности предложенным методом может быть использовано для решения обратной задачи теплопроводности и нахождения коэффициентов оптического поглощения, теплообмена, теплопроводности оптических элементов.

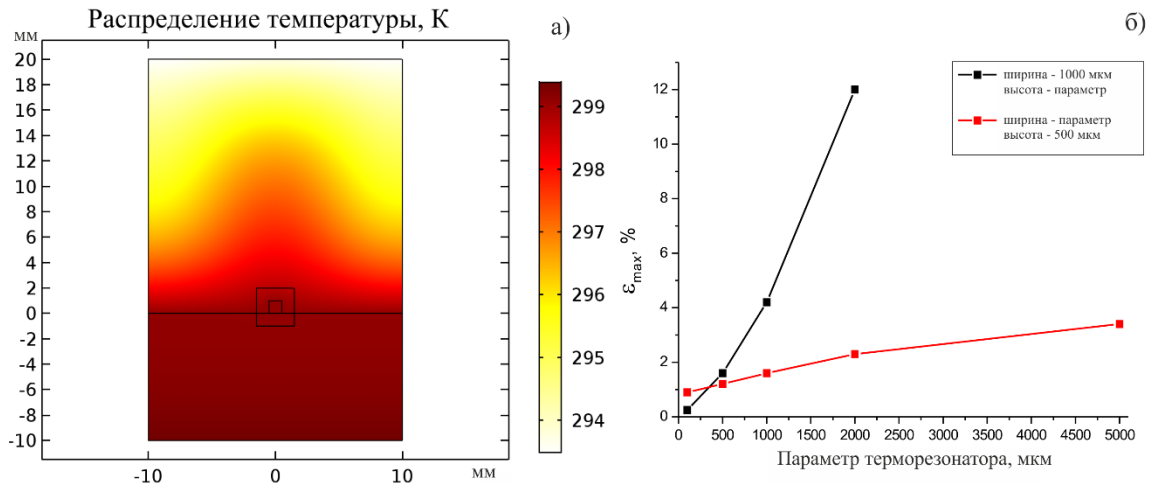


Рис. 1а) Распределение температуры в системе через 200 секунд после начала нагрева. 1б) Влияние размеров терморезонатора на общую погрешность измерений.

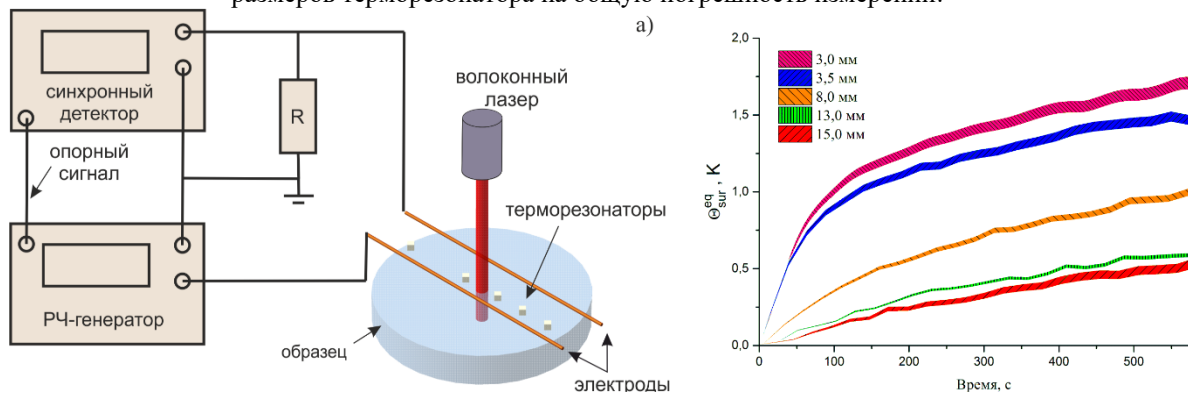


Рис. 2а) Блок-схема экспериментальной установки, 2б) Кинетики температур поверхности линзы.

### Литература

1. Aloyan G.A., Kovalenko N.V. and Ryabushkin O.A. Determination of surface equivalent temperature of active elements for microelectronics and photonics // Proceedings of the 2016 International Conference on Mechanics and Materials Science (MMS2016). 2016. P. 1177-1182.
2. Ryabushkin O.A. [et al.]. Equivalent temperature of nonlinear-optical crystals interacting with laser radiation // Journal of the European Optical Society. 2011. V. 6. P. 11032.

УДК 53.082.73

## Ионная проводимость нелинейно-оптических кристаллов трибората лития (LBO)

*Д.Г. Никитин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полус»

Преобразование лазерного излучения высокой мощности из ближнего ИК- в видимый и УФ- диапазон спектра наиболее эффективно осуществляется в нелинейно-оптическом кристалле трибората лития  $\text{LiB}_3\text{O}_5$  (LBO) [1]. Однако под действием лазерного излучения в спектральном диапазоне 250–355 нм наблюдается деградация в объеме кристалла LBO [2], что ограничивает дальнейшее повышение оптической мощности лазерных источников. Также известно, что при температурах фазовых синхронизмов кристалла LBO ярко проявляется его ионная проводимость (ИП) [3], которая может быть напрямую связана с оптическими свойствами кристалла, такими как поглощение и стойкость к воздействию лазерным излучением. Поэтому поиск причин деградации и разработка неразрушающих методик контроля качества кристаллов являются важными задачами.

В данной работе исследуются пьезоэлектрические и оптические свойства кристаллов LBO, выращенных в разных технологических условиях. Основное внимание уделяется форме линии пьезоэлектрического резонанса (ПР), которая чрезвычайно чувствительна к изменению температуры. Нами установлено, что изменение добротности (ширины) линии ПР обусловлено ионной проводимостью кристаллов LBO. Для создания математической модели, описывающей изменения формы линии ПР, мы использовали температурную зависимость ИП  $\sigma(T)$  для ионных и суперионных проводников (формула Аррениуса):

$$\sigma(T) = \frac{A}{T} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (1)$$

где  $T$  – температура,  $A$  – множитель, не зависящий от температуры,  $E_a$  – энергия активации ионов, отвечающих за проводимость,  $k$  – постоянная Больцмана.

На рис.1а показана схема экспериментальной установки. Отклик кристалла на приложенное электрическое поле от радиочастотного генератора при различной частоте анализируется по измерению амплитуды и фазы сигнала на нагрузочном сопротивлении ( $R_l$ ) синхронным детектором. В термостате осуществляется однородный разогрев кристалла и контроль его температуры. Следует отметить, что кристаллы являются одинаковыми по форме, размеру, направлению выреза и ориентации относительно электрического поля. К тому же было экспериментально проверено, что они позволяют осуществлять преобразование излучения иттербиевого лазера в 4-ю гармонику ( $1064 + 355 \rightarrow 266$ ) с одинаковой эффективностью.

На рис. 2а и рис. 2б представлены изменения формы линии ПР с ростом температуры для наиболее различающихся кристаллов LBO. Было зафиксировано, что амплитуда ПР при комнатной температуре у разных кристаллов может отличаться до 50 раз, и данное отличие увеличивается с ростом температуры кристаллов. Уширение линии ПР для LBO\_1 и LBO\_2 представлено на рис. 1б. Для LBO\_1 оно описывается формулой [3]:

$$W(T) = W_0 + B \cdot \sigma(T), \quad (2)$$

где  $W_0$  – ширина линии пьезоэлектрического резонанса при температуре 77 К,  $B$  – константа. Такое поведение свойственно большинству исследованных нами кристаллов LBO. Однако были обнаружены образцы (LBO\_2), у которых ширина линии пьезоэлектрического резонанса в диапазоне температур 300–400 К практически не изменяется и соответствует типичным значениям ширины линии при температуре 77 К.

Аналогично работе [2] нами были произведены оценки стойкости объема исследуемых кристаллов LBO к воздействию УФ-излучения 266 нм. Обнаружено, что

кристаллы с большей ионной проводимостью обладают меньшей стойкостью к воздействию лазерным излучением.

С помощью прецизионного метода измерения оптического поглощения в кристаллах – метода пьезорезонансной лазерной калориметрии, в основе которого лежит концепция эквивалентной температуры кристалла, разогреваемого лазерным излучением [3], были измерены коэффициенты оптического поглощения на длине волны 1064 нм. Для кристаллов LBO\_1 и LBO\_2 они составили:  $\alpha_{LBO\_1} = 3.6 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$  и  $\alpha_{LBO\_2} = 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ .

В данной работе нами был предложен комплексный неразрушающий подход исследования кристаллов LBO методом пьезоэлектрической резонансной спектроскопии. Он позволяет получить информацию об оптических (коэффициент поглощения) и электрических (ионной проводимости) свойствах LBO, которые напрямую связаны со стойкостью кристаллов к воздействию лазерным излучением.

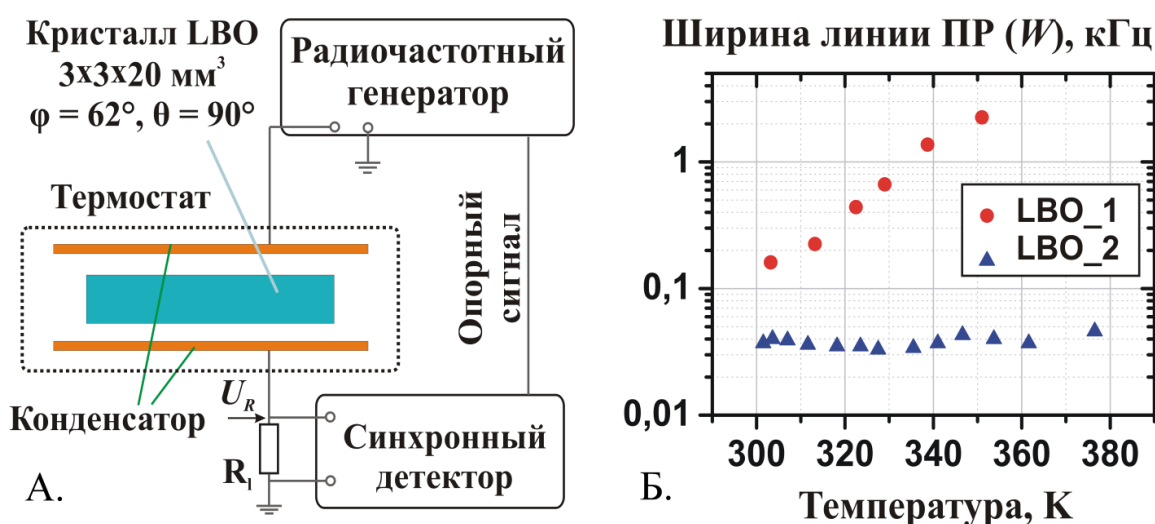


Рис. 1. а – Блок-схема экспериментальной установки; б – температурная зависимость ширины линии ПР для кристаллов LBO\_1 и LBO\_2

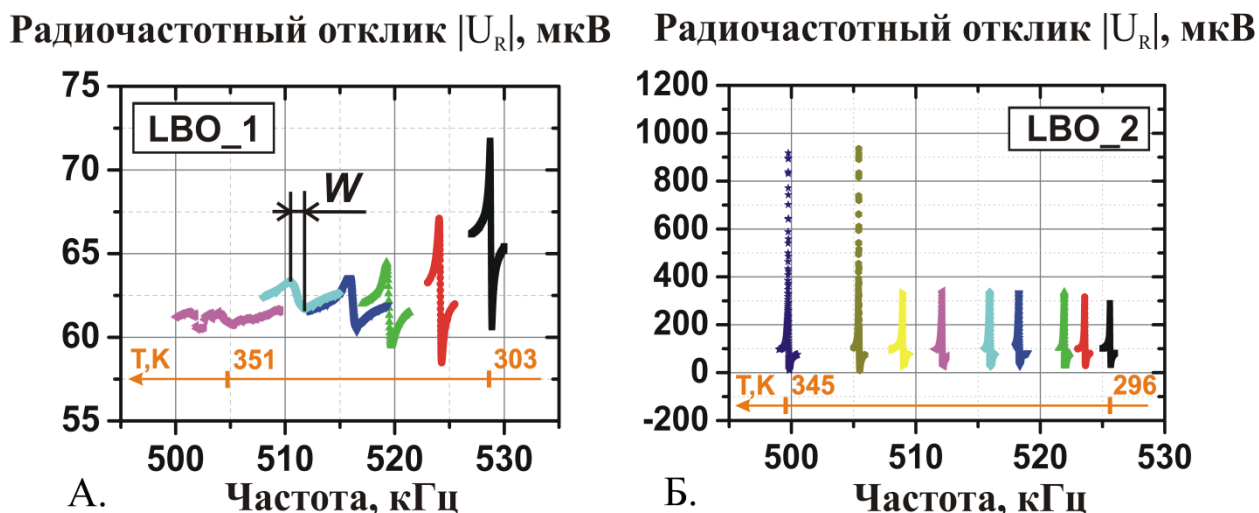


Рис. 2. Частотная зависимость амплитуды напряжения на нагрузочном сопротивлении  $|U_R|$  для LBO\_1 (А) и LBO\_2 (Б) при различных температурах n-о кристалла

1. *Avdokhin A.C. [et al.]*. High average power quasi-CW single-mode green and UV fiber lasers // Proceedings of SPIELASE. 2015. P. 934704–934704.
2. *Nikitin D.A. [et al.]*. Anisotropy of Bulk Degradation of LBO Crystal Induced by DUV Laser Radiation at 266 nm // Proceedings of Advanced Solid State Lasers. 2015. P. AM5A-8.
3. *Ryabushkin O.A. [et al.]*. Impedance spectroscopy in laser calorimetry of nonlinear-optical crystals // Proceedings of IEEE International Ultra sonics Symposium (IUS). 2013. P. 496–499.

УДК 535.92

## Методика изготовления и характеристика халькогенидных волоконно-оптических разветвителей

*Т.С. Тебенева<sup>1</sup>, О.В. Бендеров<sup>1</sup>, Б.С. Степанов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН

Отсутствие источников оптического излучения среднего ИК-диапазона, а также коммерчески доступных устройств на основе оптических волокон, таких как разветвители, волновые мультиплексоры, кольцевые резонаторы и др. ограничивало развитие волоконно-оптических приборов в среднем ИК-диапазоне. Однако после изобретения квантово-каскадных лазеров, работающих при комнатной температуре [1], и лазеров на межзонных переходах [2], работающих в диапазоне 3–12 мкм, а также после появления первых волоконно-оптических устройств на основе халькогенидных и фторидных волокон [3, 4], в фундаментальной и прикладной науке появилась возможность для развития волоконно-оптических приборов в среднем ИК-диапазоне. Халькогенидные стекла, благодаря их широкополосной прозрачности в диапазоне от 1.5 мкм до 12.0 мкм, особенно интересны для создания на их основе волоконно-оптических устройств среднего ИК-диапазона.

В работе сравниваются два возможных подхода для изготовления сплавного волоконно-оптического разветвителя на основе халькогенидного оптического волокна с точки зрения минимальных потерь и достижения требуемого коэффициента перекачки энергии. Первый подход предполагает интенсивную сплавку волокон с минимальной вытяжкой. Второй подход предполагает сильную вытяжку. Два подхода между собой отличаются по начальной геометрии оптического разветвителя, а именно разными значениями угла  $\alpha$  между закрепленными волокнами.

В работе использовались одномодовые оптоволокна, изготовленные из стекла  $As_2S_3$  с диаметром сердцевины/оболочки 6.3/123 мкм, числовой апертурой, равной 0.17, и оптическими потерями  $\sim 200$  дБ/км на длинах волн 2.1–2.2 мкм, изготовленные в ИХВВ РАН. Торцы волокон были предварительно отполированы с использованием стандартных соединителей FC/APC.

Два участка волокна были четыре раза скручены между собой и зафиксированы, при этом угол  $\alpha$  образовывался между закрепленными волокнами. К концам волокон были прикреплены калиброванные 1.5-граммовые грузы для поддержания постоянного натяжения. Сплавка волокон производилась потоком аргона (скорость потока 1 л/минуту) при температуре  $\approx 200$  °С при постоянном натяжении волокон. В экспериментальной установке в качестве источника сигнала использовался одномодовый диодный лазер с волоконными выводами с длиной волны излучения 1.5 мкм с драйвером тока накачки, изготовленным в ИОФ РАН. Для мониторинга мощности на выходных портах разветвителя использовались два фотодетектора InGaAs от Hamamatsu. Коэффициент перекачки был измерен на длинах волн 1.5 и 2.64 мкм с использованием одномодового диодного лазера от Nanoplus и фотодиода InAs от Hamamatsu.

В результате исследования двух конфигураций разветвителя с углами  $\alpha_1 = 70^\circ$  и  $\alpha_2 = 40^\circ$  между волокнами была изучена природа избыточных потерь в разветвителе, которые вычислялись по формуле

$$\text{Потери(дБ)} = 10 \lg \left( \frac{P_{in}}{P_{out_1} + P_{out_2}} \right),$$

где  $P_{in}$  – входная мощность оптического излучения,  $P_{out_1}$  и  $P_{out_2}$  – мощности оптического излучения, измеренные в каждом из выходных портов.

Первая конфигурация представляет собой сплавку с минимальной вытяжкой волокон из-за большой поперечной составляющей силы натяжения по сравнению с продольной компонентой. Эта конфигурация характеризуется интенсивными потерями, увеличивающимися во время нагрева и незначительными дополнительными потерями из-за вытяжки. Полученные потери определяются преимущественно увеличением кривизны волокон. Вторая конфигурация главным образом имеет большее значение продольной компоненты силы натяжения по сравнению с поперечной. Полученные потери определяются вытяжкой волокна, а не увеличением кривизны волокон. Численно потери для двух конфигураций составили 7 и 5 дБ соответственно. На рис. 1 представлен график зависимости потерь от времени нагрева и радиусы кривизны волокон до нагрева ( $r_{\alpha_1}^{in}$  и  $r_{\alpha_2}^{in}$ ) и после ( $r_{\alpha_1}^{fin}$  и  $r_{\alpha_2}^{fin}$ ) для двух конфигураций. Потери, вызванные изгибом волокна, составили 6.8 дБ для  $\alpha_1$  с радиусом кривизны  $\langle r_{\alpha_1}^{fin} \rangle = (0.21 \pm 0.04)$  мм и 3.5 дБ для  $\alpha_2$  с кривизной  $\langle r_{\alpha_2}^{fin} \rangle = 0.93 \pm 0.08$  мм.

Потери, связанные с вытяжкой волокна, составили 0.2 и 1.5 дБ для  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  с коэффициентами 1.66 и 2.50 соответственно. На рис. 2 представлены временные зависимости отношения перекачки для двух конфигураций, которые составили 70:30 для  $\alpha_1$  и 55:45 для  $\alpha_2$ .

Конфигурация  $\alpha_1$  обеспечивает гладкий подъем значения коэффициента перекачки до 95:5 и затем переход к интенсивной перекачке вследствие медленного сближения сердцевин волокон друг с другом, в то время как конфигурация  $\alpha_2$  приводит к резкому подъему значения коэффициента перекачки из-за взаимодействия мод во время вытяжки. На длине волны 2.64 мкм коэффициент перекачки для  $\alpha_2$  составил 63:37.

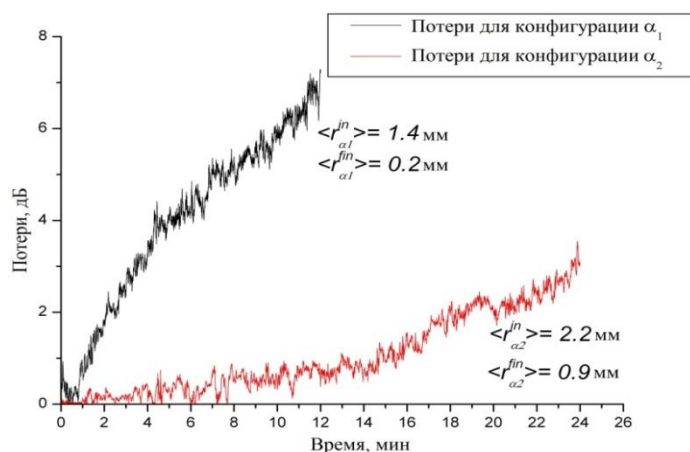


Рис. 2. Зависимости избыточных потерь от времени нагрева

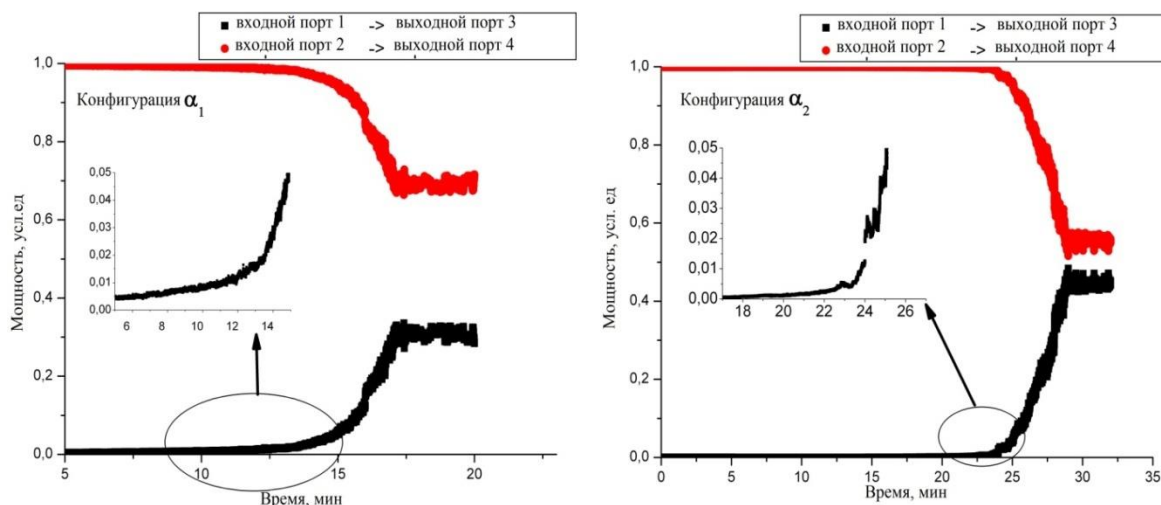


Рис. 3. Зависимость коэффициента перекачки по времени для конфигурации  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$

### Литература

1. Faist J., [et al.] Quantum cascade laser // Science. 1994., V. 264, P. 523-526
2. Yang R.Q. Infrared laser based on intersubband transitions in quantum wells // Superlattice. Microst. 1995., V. 17, P. 77-83
3. Stevens G., Woodbridge T. Mid-IR fused fiber coupler // Proc. SPIE. 2016., V. 9730, P. 973007
4. Tavakoli F., [et al.] Broadband and wavelength-dependent chalcogenide optical fiber couplers // Photon. Technol. Lett. 2017., V. 29 (9) P. 735-738

УДК 535.341.08

### Измерение малых коэффициентов оптического поглощения объемных кристаллов

Г.А. Алоян<sup>1</sup>, Н.В. Коваленко<sup>1</sup>, Э.М. Хабушев<sup>1</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Для некоторых современных задач лазерной физики необходимо использовать нелинейно-оптические кристаллы больших размеров. Технологии роста кристаллов постоянно совершенствуются. Одним из основных показателей качества кристалла является уровень поглощения в окне прозрачности. Мы предлагаем развить метод пьезорезонансной лазерной калориметрии [1] для измерения малых коэффициентов оптического поглощения буль-объемных нелинейно-оптических кристаллов многогранной формы. Это позволит проводить диагностику качества выращенных кристаллов до начала их обработки.

Стандартизированным методом измерения малых коэффициентов оптического поглощения является метод лазерной калориметрии [2], где измеряется кинетика разогрева кристалла под действием проходящего лазерного излучения, и из решения нестационарного уравнения теплопроводности определяются коэффициенты поглощения и теплообмена кристалла с окружающей средой. Часто для упрощенного модельного описания теплообмена используются граничные условия Ньютона–Рихмана и предположение о бесконечной теплопроводности кристалла. Для измерения температуры кристалла, как правило, используется внешний датчик температуры, который должен находиться в хорошем тепловом контакте с исследуемым образцом. Однако при прохождении мощного лазерного излучения, рассеянное излучение может приводить к дополнительному разогреву датчика, при этом точность измерения температуры образца неизбежно ухудшается.



Для того, чтобы обойти это ограничение, был разработан метод пьезорезонансной лазерной калориметрии, позволяющий бесконтактно измерять непосредственно температуру самого кристалла. В основе метода лежит использование зависимости частот собственных акустических мод образца от температуры. Все нелинейно-оптические кристаллы являются пьезоэлектриками и обладают набором собственных акустических мод, которые могут возбуждаться внешним радиочастотным полем. Проведя предварительную температурную калибровку резонансных частот при однородном разогреве образца, можно в условиях неоднородного разогрева кристалла ставить в соответствие частоте моды определённую эквивалентную температуру.

При применении этого метода для кристаллов больших размеров необходимо учитывать наличие существенного градиента температуры внутри образца. Для определения оптического коэффициента поглощения может быть недостаточно эквивалентной температуры, определённой измеряемой какой-либо моды, и необходима дополнительная информация, например, температура поверхности [3]. Для этого на поверхность исследуемого образца помещается откалиброванный по температуре нелинейно-оптический кристалл малых размеров с большой добротностью пьезоэлектрических резонансов – терморезонатор. Терморезонатор является прозрачным для рассеянного излучения, а его эквивалентная температура сопоставляется с температурой той области поверхности, на которой он находится.

В данной работе буля трибората лития массой 260 г с характерным размером 7 см, облучалась непрерывным лазерным излучением на длине волны 1064 нм и мощностью 11 ватт. Блок-схема экспериментальной установки приведена на рис. 1а. Терморезонатор из ниобата лития размерами  $1 \cdot 1 \cdot 1$  мм<sup>3</sup> находился на расстоянии 2 см от центра пучка. На рис. 1б представлены зависимости резонансного отклика були для двух различных температур.

Для более точной трактовки экспериментально измеренной кинетики эквивалентной температуры была создана модель и проведены эксперименты с кристаллом кварца размерами 20/20/40 мм<sup>3</sup>. Сначала решалось нестационарное уравнение теплопроводности с граничными условиями Ньютона–Рихмана, затем вычислялись собственные частоты кварца с учётом неоднородного распределения температуры. На рис. 2 показаны зависимости эквивалентных температур, определяемых по сдвигу частот различных резонансов, а также минимальная, средняя и максимальная температуры кварца. Видно, что эквивалентные температуры кристалла находятся между минимальной и максимальной. Однако эквивалентная температура, определяемая по разным модам, отличается от средней и зависит от используемого резонанса. Отклонения коэффициента оптического поглощения, вычисленного при аппроксимации расчётных кинетик эквивалентных температур в соответствии с [2], от заданного в модели не превышали 15%.

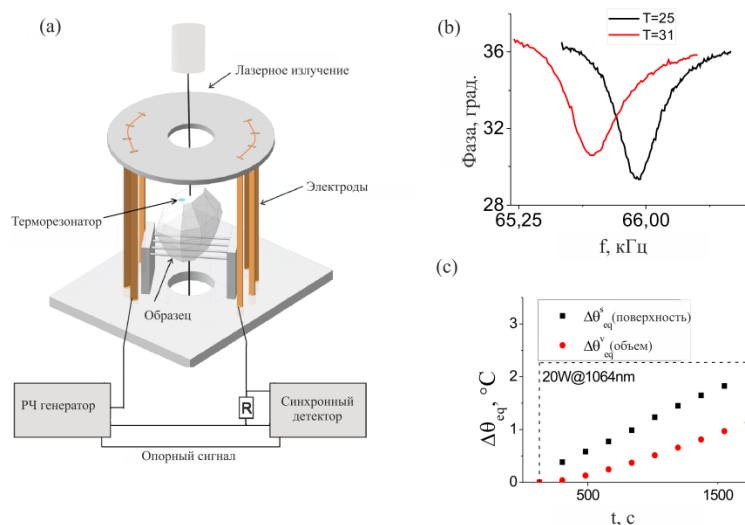


Рис. 1. а) Блок-схема экспериментальной установки, б) Зависимость резонансного отклика кристалла на воздействие внешнего поля от радиочастотного генератора, измеренного синхронным детектором на нагрузочном сопротивлении, с) Кинетики эквивалентных температур були LBO и терморезонатора

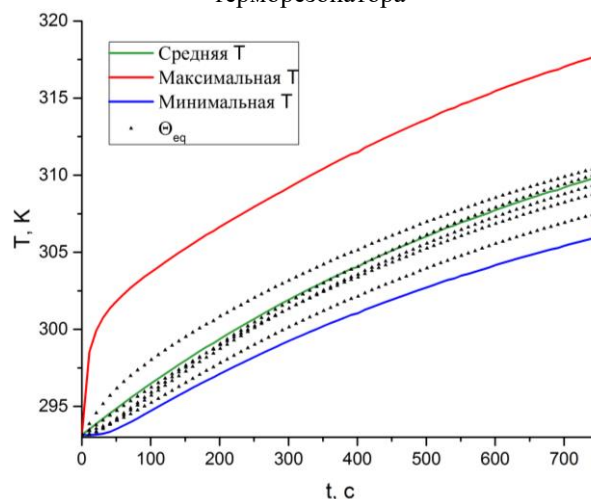


Рис. 2 Расчётные кинетики эквивалентных температур, вычисленных по различным собственным модам кристалла кварца, минимальной, средней и максимальной температур

### Литература

1. Ryabushkin O.A. [et al.]. Equivalent temperature of nonlinear-optical crystals interacting with laser radiation // Journal of the European Optical Society. 2011. V. 6. P. 11032.
2. ISO 11551: Test method for absorptance of optical laser components // Geneva Switzerland: Int. Org. for Standardization. 2003.
3. Aloyan G.A., Kovalenko N.V. and Ryabushkin O.A. Determination of surface equivalent temperature of active elements for microelectronics and photonics // Proceedings of the 2016 International Conference on Mechanics and Materials Science (MMS2016). 2016. P 1177-1182.

## Однопролетные наземные сверхдлинные волоконно-оптические линии связи на основе технологий вынужденного комбинационного рассеяния

*Е.С. Голубятников<sup>1,2</sup>, Я.А. Тезадов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им В. А. Котельникова РАН

<sup>2</sup>НТО «ИРЭ-Полюс»

В данной работе представлены методы повышения дальности передачи оптической информации в однопролетных наземных сверхдлинных волоконно-оптических линиях связи (ВОЛС) на основе технологий вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) и исследованы зависимости эффективности преобразования излучения оптической накачки, основанной на эффекте ВКР, от характеристик усилителя с удаленной оптической накачкой (ROPA – Remote Optically Pumped Amplifier).

Основным ограничением по дальности передачи информационного оптического сигнала в однопролетных ВОЛС является снижение величины оптического соотношения сигнал-шум (OSNR – Optical Signal Noise Ratio) ниже минимально необходимого для работы линии уровня, называемого критическим OSNR ( $OSNR_{crit}$ ), вследствие, например, затухания оптического сигнала. Для уменьшения данного ограничения в сверхдлинных (>500 км) однопролетных волоконно-оптических линиях связи помимо использования традиционных эрбиевых (EDFA – Erbium Doped Fiber Amplifier) усилителей, применяется ряд дополнительных способов усиления сигнала:

- эрбиевые усилители с удаленной оптической накачкой ROPA;
- применение многоволновой накачки, основанной на ВКР-эффекте (дискретное);
- распределенное ВКР (рамановское) усиление в транспортном волокне;
- оптическая накачка ROPA в направлении распространения сигнала и встречном направлениях.

На данный момент в мировой литературе представлены различные вариации усовершенствования однопролетных ВОЛС [1, 2, 3, 4]. Однако все работы, направленные на увеличение дальности передачи оптической информации, связаны с применением ВКР-источников для оптической накачки. При вынужденном комбинационном рассеянии в оптическом волокне падающая электромагнитная волна достаточно большой мощности (волна накачки), взаимодействуя с сигнальной волной, когерентно возбуждает колебательную моду молекулы кварца ( $SiO_2$ ). В процессе распространения по волокну энергия излучения накачки преобразуется в энергию упругих колебаний молекул среды и в энергию сигнальной волны.

На рис. 1 представлена блок-схема однопролетной ВОЛС дальностью 571 км, основанная на ВКР-технологиях. В качестве оптического передатчика применялся лазер с распределенной обратной связью (DFB – Distributed Feed Back Laser) с длиной волны 1550,92 нм и мощностью 0 дБм с интегрированной системой оптических модуляторов Маха–Цендера, применяемой для генерации 100 Гбит/с сигнала в четырехуровневом фазовом формате модуляции с поляризационным мультиплексированием (формат DP-QPSK). Для создания оптимальной предкомпенсации дисперсии (-2000 пс/нм/км) используется перестраиваемый компенсатор (TDCM – Tunable Dispersion Compensating Module). Далее сигнал усиливается до наиболее оптимального (исходя из запаса OSNR) уровня  $P_{in} = 8$  дБм эрбиевым усилителем и с помощью двух усилителей с удаленной оптической накачкой позволяет безошибочно передавать информацию на расстояние 571 км.

Наибольший интерес в данной работе представляет оптимизация характеристик усилителей с удаленной накачкой (ROPA) и ВКР-источников накачки и последующий подбор конфигурации линии для наибольшей эффективности их совместной работы. То есть задача сводится к поиску оптимального положения ROPA для обеспечения максимального запаса по OSNR. Для удаленного усилителя ROPA с передающей стороны

(ROPA\_Tx) режим работы определяется в первую очередь мощностью насыщения активного световода (типичный диапазон составляет от  $-12$  дБм до  $-7$  дБм). В большинстве случаев удаленный усилитель с передающей стороны будет работать в режиме, когда выходная мощность слабо зависит от входной и определяется подводимой мощностью накачки. В результате многочисленных экспериментальных исследований были применены для ВКР-накачки ROPA с передающей стороны двухволновые источники мощностью 32,5 дБм (для длины волны 1425 нм) и 17,5 дБм (для 1487 нм). Данная схема позволяет получить коэффициент усиления (Gain) сигнала для ROPA\_Tx более 22 дБ и уровень выходного сигнала  $P_{out} = 12$  дБм, который лежит в оптимальной области с точки зрения баланса мощности и запаса по OSNR. В качестве накачки усилителя с приемной стороны (ROPA\_Rx) был выбран двухволновой ВКР-источник с длинами волн 1425 и 1490 нм. Мощности излучения каждой длины волны составляли более 33 и 17 дБм соответственно. Данные характеристики накачки в совокупности с оптимизированными характеристиками легированного редкоземельными ионами  $Er^{3+}$  активного волокна ROPA\_Rx позволили усилить слабый сигнал ( $<-35$  дБм), приходящий после 304 км транспортного волокна на вход ROPA\_Rx.

В результате экспериментальных исследований была получена однопролетная наземная ВОЛС протяженностью 571 км для одноканальной передачи оптического сигнала с битовой скоростью 100 Гбит/с применением двухволновых ВКР-источников накачки.

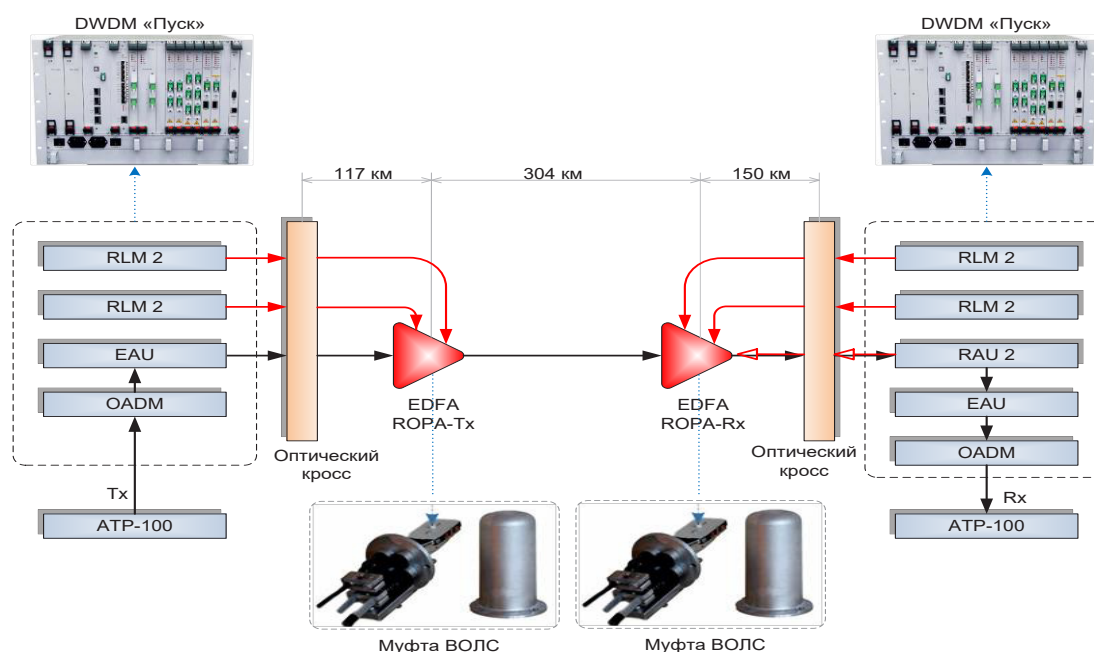


Рис. 1. Блок-схема однопролетной ВОЛС для передачи оптического информационного сигнала 100G на 571 км

### Литература

1. Chang D. [et al.]. Unrepeated 100G transmission over 520.6 km of G. 652 fiber and 556.7 km of G. 654 fiber with commercial Raman DWDM system and enhanced ROPA // Journal of Lightwave Technology. 2015. V. 33. N. 3. P. 631-638.
2. Gainov V. V. [et al.]. Record 500 km unrepeated transmission // Laser Physics Letters. 2013. V. 10. N. 7. P. 075107.
3. Bissessur H. [et al.]. Ultra-long 10 Gb/s Unrepeated WDM Transmission up to 601 km // Optical Fiber Communication Conference. – Optical Society of America, 2010. P. 6.

4. Xia T. J. [et al.]. 557-km unrepeated 100G transmission with commercial raman DWDM system, enhanced ROPA, and cabled large A eff ultra-low loss fiber in OSP environment // Optical Fiber Communications Conference and Exhibition (OFC), 2014. IEEE, 2014. P. 1-3.

УДК 535.231.1

### Исследование термооптических свойств кварцевых световодов с медной оболочкой

*И.О. Храмов<sup>1</sup>, Н.Н. Ишмаметьев<sup>1</sup>, Р.И. Шайдуллин<sup>1,2,3</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>НТО «ИРЭ-Полус»

<sup>3</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова

В данной работе представлена методика определения мощности лазерного излучения высокой интенсивности, основанного на измерении упругого рассеяния фотонов в кварцевом волоконном световоде с медным покрытием. В настоящее время для измерения мощности лазерного излучения широко используются тепловой, фотоэлектрический и пьезомоторный методы [1]. Все вышеперечисленные методы отличаются невозможностью параллельно использовать исследуемое излучение в рамках технологического процесса.

Основным механизмом упругого рассеяния в стекле является рэлеевское рассеяние излучения на молекулах вещества среды либо на неоднородностях, размер которых мал по сравнению с длиной волны излучения. В [2] получена формула, связывающая коэффициент оптических потерь, обусловленный рэлеевским рассеянием, с длиной волны излучения и характеристиками среды:

$$\alpha_R = \frac{8 \pi^3}{3 \lambda^4} (n^8 p^2) (kT) \beta_T . \quad (1)$$

Здесь  $\lambda$  – длина волны излучения,  $n$  – показатель преломления,  $p$  – фотоупругая константа,  $T$  – температура среды,  $\beta_T$  – изотермическая сжимаемость вещества среды.

Для исследования рассеяния использовалось оптическое волокно с Cu/C оболочкой, часто применяемое при специфических условиях внешней среды, например, при высоких температурах. В нем кварцевое волокно диаметром 125 мкм и толщиной световедущей жилы 9 мкм покрыто тонким слоем углерода и слоем меди толщиной около 15 мкм.

Принцип измерения мощности лазерного излучения заключается в том, что при прохождении мощного излучения через участок волокна с Cu/C оболочкой некоторая его часть рассеивается и поглощается в углеродном слое и медном покрытии, что вызывает их разогрев. В результате этого изменяется сопротивление медной оболочки, которое измеряется миллиометром. Калибровка проводится по показаниям теплового измерителя мощности. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Были собраны два непрерывных лазера с различными длинами волн излучения: иттербиевый волоконный лазер мощностью до 28,6 Вт с центральной длиной волны 1,06 мкм, и иттербий-эрбиевый волоконный лазер мощностью до 13 Вт с центральной длиной волны 1,55 мкм. График полученной зависимости разогрева медной оболочки волокна от мощности излучения в обоих случаях представлен на рис. 2.

В обоих случаях была определена линейная зависимость нагрева волокна от мощности проходящего излучения, причем коэффициенты составили соответственно  $k_{1,06} = 0,109 \pm 0,002 \text{ K / Вт}$  и  $k_{1,55} = 0,042 \pm 0,006 \text{ K / Вт}$ . Экстраполяция полученной линейной зависимости для излучения на длине волны 1,06 мкм показала, что нагрев волокна до температуры 600 °С, при которой происходит значительный рост оптических потерь в медном волокне, произойдет при мощности излучения 6 кВт, которая может считаться технологическим пределом измерений.

Для расчета поглощаемой в оболочке рассеянной оптической мощности проведено численное моделирование разогрева волокна в условиях полного поглощения рассеянного света. Решалось стационарное уравнение теплопроводности с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\vec{q}) &= Q \\ \vec{q} &= -k\nabla T \\ q(R) &= h(T_{\text{ext}} - T) \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $Q$  – объемная плотность выделяемой тепловой мощности,  $q$  – тепловой поток,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $h$  – коэффициент теплообмена,  $T_{\text{ext}} = 293,15\text{K}$  – температура окружающей среды,  $R$  – радиус волокна.

Результаты моделирования показали, что приэкспериментально обнаруженном разогреве при учете только рэлеевского рассеяния коэффициент поглощения составил  $8,43\text{дБ/км}$  вместо  $1,08\text{дБ/км}$ , характерных для кварцевых волокон с полимерной оболочкой согласно (1). Это связано с тем, что коэффициенты теплового расширения кварца и меди сильно различаются, и в процессе высокотемпературной вытяжки таких волокон и последующего охлаждения это способствует появлению механических напряжений дефектов и неоднородностей в волокне, что показано в [3].

Таким образом, в работе экспериментально продемонстрирована возможность использования метода, основанного на измерении электрического сопротивления металлического покрытия кварцевых волокон, для измерения интенсивности оптического излучения мощных волоконных лазеров.

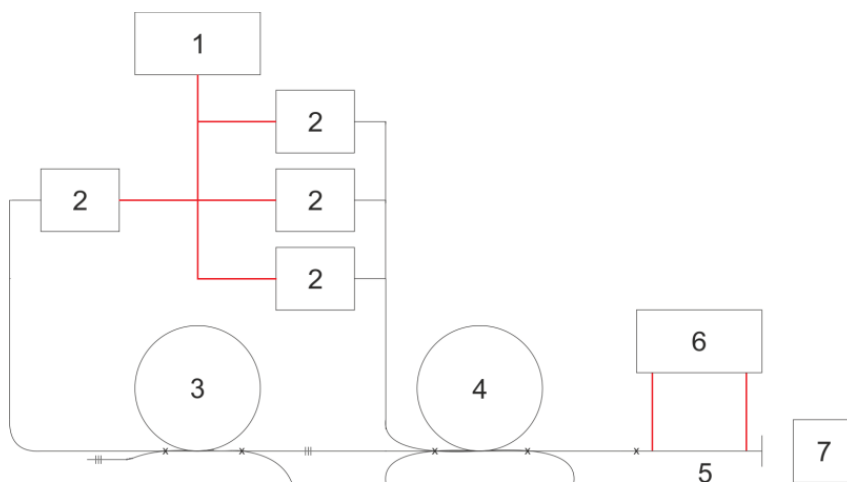


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки по измерению мощности лазерного излучения: 1 – источник тока, питающий полупроводниковые лазерные диоды 2, использующийся для накачки лазера 3 и усилителя 4, 5 – участок исследуемого волокна с Cu/C оболочкой длиной 35 см, 6 – миллиомметр, 7 – измеритель мощности MolectronFieldMaxII



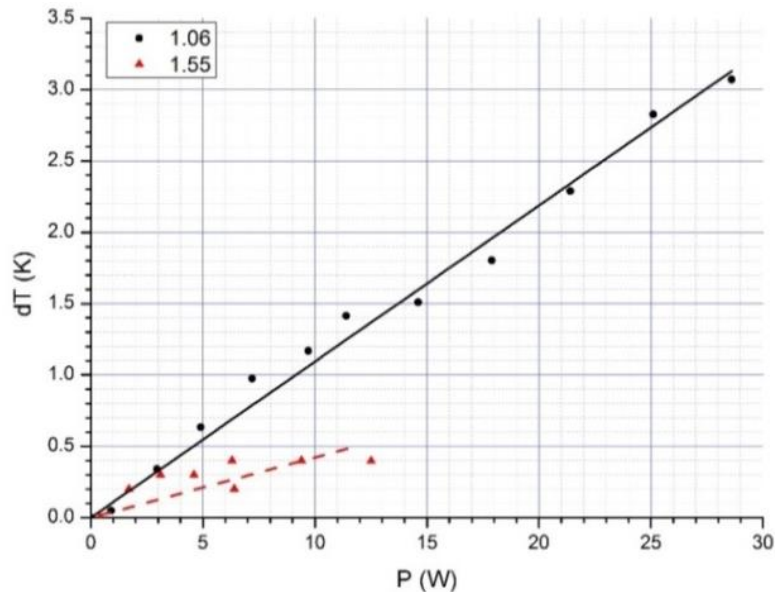


Рис. 2. Зависимость изменения температуры волокна от мощности лазерного излучения длин волн 1,06 мкм и 1,55 мкм

### Литература

1. *Ready J.* Effects of high-power laser radiation. New York, London: Academic Press, 1971. С. 433.
2. *Pinnow D.A., Rich T.C., Ostermayer F.W., DiDomenico Jr., and M.* Fundamental optical attenuation limits in the liquid and glassy state with application to fiber optical waveguide materials // *Appl. Phys. Lett.* 2013. V. 22, P. 527–529.
3. *Shiue S.T., Lin Y.S.* Thermal stresses in metal-coated optical fibers // *Journal of applied physics.* 1998. V. 83, N 11. P. 5719–5723.

УДК537.872.32

### Измерение пространственного распределения интенсивности лазерного излучения на основе интерферометра Фабри–Перо

*И.О. Храмов<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>1,2,3</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>НТО «ИРЭ-Полюс»

<sup>3</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова

В данной работе предложен метод измерения распределения интенсивности лазерного излучения в поперечном сечении пучка в широком спектральном и динамическом диапазоне. Принцип измерения основан на использовании волоконного интерферометра Фабри–Перо (ИФП). Блок схема экспериментально установки представлена на рис. 1а.

Излучение от источника 1 через волоконный объединитель 3 направляется на зеркало 5. Отражательный ИФП образован торцом волокна 4 и зеркалом 5. Интерференционный сигнал регистрируется фотоприемником 6. Представленная на рис. 1б. характерная зависимость сигнала на фотодетекторе от расстояний между торцом волокна 4 и зеркалом 5 может быть описана выражением,

$$I(x) = \sqrt{\frac{\sin^2\left[\frac{4\pi x}{\lambda}\right]a_0^4}{\left(\frac{x^2\lambda^2}{\pi^2 a_0^2} + a_0^2\right)^2} + \left(R + \frac{\cos\left[\frac{4\pi x}{\lambda}\right]a_0^2}{\frac{x^2\lambda^2}{\pi^2 a_0^2} + a_0^2}\right)^2}. \quad (1.1)$$

Здесь  $a_0$  – диаметр жилы волокна,  $\lambda$  – длина волны излучения,  $R$  – коэффициент френелевского отражения, равный 0,04 для границы «стекло–воздух».

В работе измерялось распределение в поперечном сечении интенсивности излучения от лазерного полупроводникового диода накачки (центральная длина волны 975 нм). Вместо зеркала использовался чувствительный элемент – медный стержень длиной 1 см и диаметром 300 мкм. Нагрев стержня за счёт поглощения лазерного излучения приводит к изменению его размеров и, следовательно, изменению расстояния между торцом измерительного волокна и передней гранью чувствительного элемента (рис. 2). Источником зондирующего излучения в ИФП являлся полупроводниковый лазер с распределенной обратной связью (DFB), излучающий на длине волны 1552 нм, с максимальной мощностью 10 мВт. Таким образом, измеряя кинетику интерференционного сигнала на фотодетекторе, можно определить изменение длины чувствительного элемента, которое пропорционально плотности мощности воздействующего на него излучения от диода накачки. Измерение распределения интенсивности в поперечном сечении пучка производится перемещением чувствительного элемента в плоскости, ортогональной к направлению распространения излучения.

При фиксированной мощности излучения лазерного диода 230 мВт были проведены измерения распределения интенсивности пучка в двух плоскостях на расстоянии 2 мм и 7 мм от торца выходного волокна диода.

Для нормировки измеренные распределения были аппроксимированы функцией Гаусса. Из известной оптической мощности на выходе волокна лазерного диода была определена величина плотности мощности  $32,7 \text{ кВт/м}^2$ , которая приводит к увеличению длины измерительного сенсора на 1 мкм, что соответствует его разогреву на  $6 \text{ }^\circ\text{C}$ . Полученные на основе измерения удлинения сенсорного элемента распределения интенсивности в поперечном сечении пучка в двух плоскостях представлены на рис. 3.

Таким образом, продемонстрирована возможность применения волоконного интерферометра Фабри–Перо для измерения распределения интенсивности оптического излучения в поперечном сечении пучка.

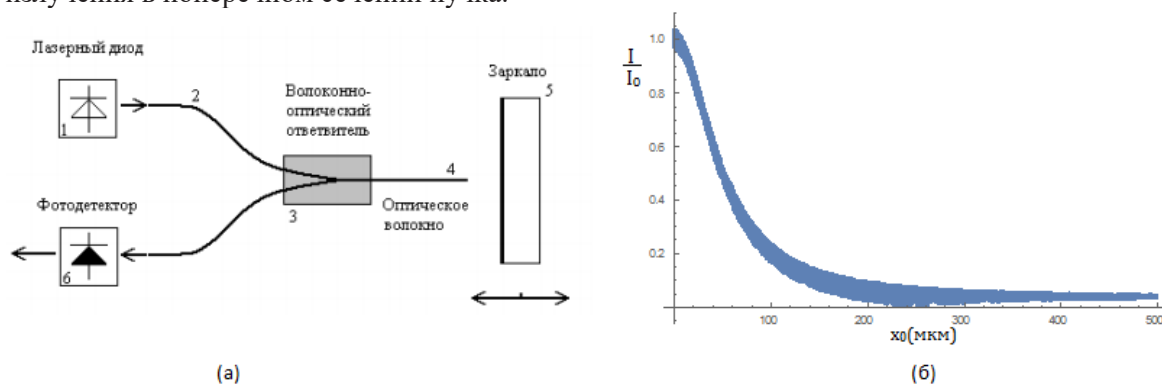


Рис. 1. а) Схема волоконного ИФП; б) зависимость относительной величины сигнала от расстояния  $x_0$  между торцом волокна и зеркалом волоконного ИФП

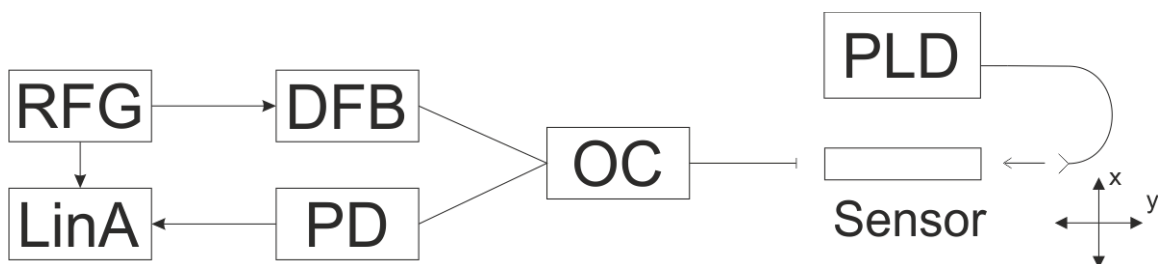


Рис. 2. Блок-схема экспериментальной установки по измерению пространственного распределения интенсивности лазерного излучения. RFG – радиочастотный генератор, использовавшийся для прямой модуляции зондирующего излучения, LinA – синхронный детектор, PD – фотодетектор, OC – волоконный ответвитель, PLD – лазерный диод накачки с волоконным выходом с  $NA = 0,13$ , Sensor – чувствительный элемент

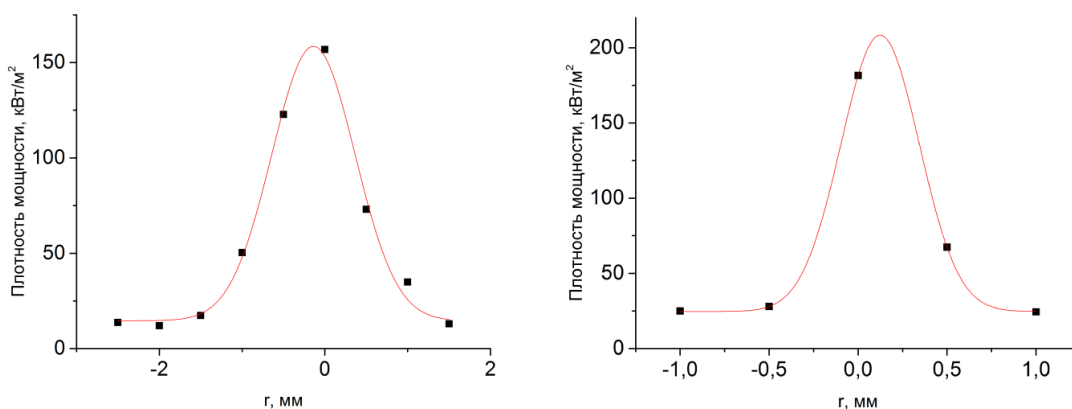


Рис. 3. Распределение интенсивности излучения полупроводникового диода на расстоянии 7 мм (слева) и 2 мм (справа) от торца выходного волокна

### Литература

1. Василевская Е.С., Казаков В.Ю. Разработка оптоволоконного датчика перемещения // Молодежь и современные информационные технологии: XII Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых. 2014. Т. 1. С. 204-205.
2. Kulkarni V. K. [et al.]. Fiber optic micro-displacement sensor using coupler // Journal of optoelectronics and advanced materials. 2006. V. 8, N 4. P. 1610–1612.

УДК 535.341.08

### Спектральное исследование термооптических свойств полисилоксановых полимеров, используемых в волоконных лазерах

*Р.И. Исмагилова<sup>1</sup>, Р.И. Шайдуллин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полус»

В настоящее время выходная мощность промышленных иттербиевых волоконных лазеров достигает несколько десятков киловатт [1]. Часть мощности оптической накачки лазеров неизбежно переходит в тепло за счет механизма размена квантов накачки и генерации в активной сердцевине. Разогрев волокна приводит к ухудшению характеристик излучения лазера, а также к разрушению волокна. Одним из основных лимитирующим фактором роста выходной мощности волоконных лазеров является термическая деградация защитного полимерного покрытия кварцевых световодов. В стандартных промышленных волоконных лазерах свернутое в кольцо оптоволокно помещается в специальный защитный блок, который заливается полимером. Ранее было показано, что полидиметилсилоксановые (PDMS) полимеры, используемые в волоконных световодах, имеют пики поглощения в рабочем диапазоне иттербиевых лазеров, связанных с обертонами колебательных уровней метильной группы  $\text{CH}_3$  [2, 3], что приводит к дополнительному разогреву полимера. В промышленных волоконных блоках киловаттного диапазона температура полимера может достигать 120–150 °С, а такие температуры находятся вблизи предела термостойкости PDMS-полимеров. Поэтому изучение оптических свойств полимеров, используемых в волоконной оптике, является актуальной задачей. В данной работе исследуются температурные зависимости спектральных характеристик и коэффициента поглощения оптического излучения PDMS-полимера, который используется в стандартных волоконных блоках.

Для исследования оптических спектральных характеристик полимера, используемого в волоконных блоках, данный полимер помещался в кварцевую кювету  $20 \times 20 \times 25 \text{ мм}^3$ . После этого через кювету пропускался параллельный пучок света от

широкополосного источника излучения, а спектр пропускания кюветы измерялся спектроанализатором Newport. Таким образом, был измерен оптический спектр пропускания полимера при комнатной температуре (рис. 1а). Были обнаружены пики поглощения полимера в рабочем диапазоне длин волн накачки, люминесценции и генерации иттербиевых волоконных лазеров (950–1100 нм).

Для определения коэффициента поглощения излучения в полимере предложено использовать метод калориметрии: измерение величины разогрева полимера при прохождении через него параллельного пучка лазерного излучения в зависимости от его оптической мощности. В качестве источника излучения использовался иттербиевый волоконный лазер ( $\lambda = 1060$  нм). Температура в полимере измерялась термопарой и рассчитывалась во всем объеме с помощью математической модели разогрева кюветы на основе стационарного  $\nabla \cdot (k\nabla T) = -Q$  уравнения теплопроводности:

$$\nabla \cdot (k\nabla T) = -Q, \quad (1)$$

$$-\vec{n} \cdot (k\nabla T) = h^T (T_{ext} - T), \quad (2)$$

где  $T$  – температура,  $T_{ext}$  – температура окружающей среды,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $h^T$  – конвективный коэффициент теплообмена,  $\vec{n}$  – вектор нормали к поверхности.

Таким образом, была рассчитана температурная зависимость коэффициента поглощения исследуемого PDMS-полимера на длинах волн генерации лазерного излучения (рис. 1б). Значения коэффициента поглощения нелинейно увеличивались с 0,04 до 0,08 Дб/см при повышении температуры полимера на 125 К относительно комнаты, дополнительно увеличивая разогрев. Примечательно то, что при значении мощности излучения около 50 Вт (интенсивность в пучке 180 Вт/см<sup>2</sup>) полимер в центре проходящего пучка деградировал, образовав ярко выраженную неоднородность. По расчетам, температура полимера в этой точке в момент разрушения составила около 160 °С.

Во второй части эксперимента исследовалось распределение температуры полимерной (PDMS) заливки в стандартном промышленном волоконном блоке. Для этого было предложено использовать витки медной проволоки в качестве датчиков температуры. Четыре витка тонкой медной проволоки разного диаметра были уложены на поверхности полимера. Витки были подключены к миллиомметру через галетный переключатель, позволяющий последовательно измерять сопротивление всех витков (рис. 2а). По изменению сопротивления проволоки от времени определялась температура разогрева проволоки и контактирующего с ней полимера. В ходе эксперимента измерялось сопротивление всех четырех проволок в зависимости от выходной мощности лазерного излучения. После этого значения сопротивления проволок были пересчитаны в температуру (рис. 2б). Максимальный разогрев (примерно 0,1 К/Вт) наблюдался для витков 2 и 3, проходящих над смотанным кольцом активного волокна.

Таким образом, было показано, что PDMS-полимеры, используемые в качестве защитной оболочки волокон и для заливки волоконных блоков, поглощают излучение в рабочем диапазоне длин волн иттербиевого волоконного лазера, при этом коэффициент оптического поглощения нелинейно увеличивается при разогреве полимера. Также была измерена зависимость разогрева полимера в стандартном волоконном блоке от выходной оптической мощности, составивший ~0,1 К/Вт на поверхности полимера в самой разогретой области.

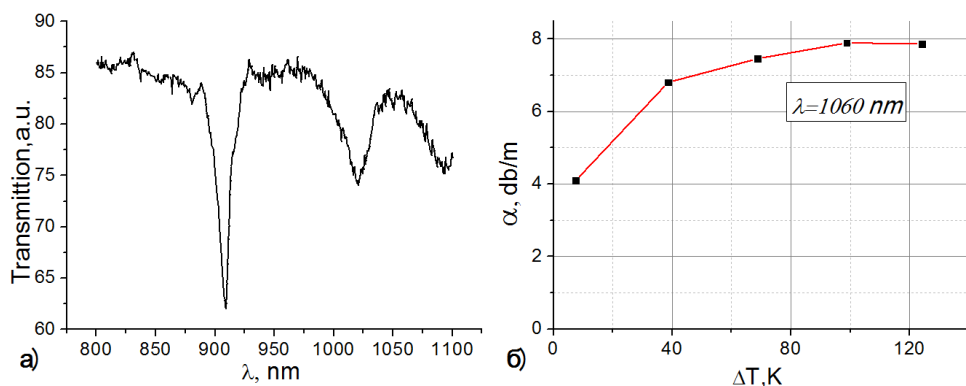


Рис. 1 а) Спектр оптического пропускания PDMS-полимера при комнатной температуре; б) Температурная зависимость коэффициента поглощения полимера на  $\lambda = 1060$  нм

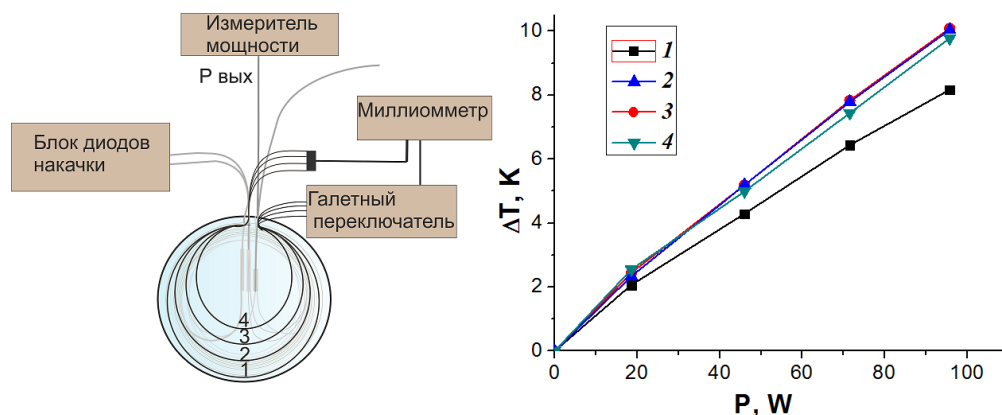


Рис. 2 а) Схема экспериментальной установки по измерению температуры поверхности полимера в волоконном блоке. Черным линиями показаны металлические провода, серыми – оптическое волокно; б) зависимость температуры разогрева четырех витков проволоки от выходной оптической мощности

### Литература

1. Сайт компании IPG Photonics [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://www.ipgphotonics.com/Collateral/Documents/English-US/HP\\_Brochure.pdf](http://www.ipgphotonics.com/Collateral/Documents/English-US/HP_Brochure.pdf)
2. Гайнов В.В. [и др.] Измерение температуры в сердцевине активных волоконных световодов в условиях лазерной генерации // Приборы и техника эксперимента. 2010. Т. 6. С. 86–93.
3. Cai D.K. [et al]. Optical absorption in transparent PDMS materials applied for multimode waveguides fabrication // Elsevier. 2008. P. 1157–1161.

УДК 681.7.063

### Метод управления фазовой характеристикой волоконных компенсаторов дисперсии, применяемых в СРА пикосекундных волоконных лазерах

И.С. Ульянов<sup>1,2</sup>, А.И. Баранов<sup>1,2</sup>, И.Н. Бычков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полус»

Концепция chirped pulse amplification (CPA) активно используется для построения фемтосекундных лазеров. В таком лазере принципиально используется четыре элемента: задающий генератор, стретчер, усилитель, компрессор. Стретчер – элемент, который растягивает импульс во времени (то есть изменяет фазы спектральных компонент излучения, например, вносит дисперсию групповых скоростей), снижая его пиковую мощность, что позволяет избавиться от нелинейных эффектов в усилителе. Тогда для

обратного восстановления импульса компрессор, элемент, осуществляющий сжатие во временной области, должен в идеальном случае обладать такой же фазовой характеристикой, как и стретчер, но только с другим знаком.

На практике для волоконных лазеров такой антисимметрии между стретчером и компрессором трудно достичь, так как эти элементы могут существенно различаться по конструкции и технологии изготовления. Например, в качестве стретчера обычно используется chirпированная волоконная брэгговская решетка (ЧВБР), а в качестве компрессора пара дифракционных решеток.

В данной работе предлагается метод приведения в соответствие фазовых характеристик стретчера в виде ЧВБР, записанной в одномодовом волокне, и компрессора за счет неравномерного экспонирования УФ-излучением записанной ЧВБР [1]. В основе этого метода лежит зависимость длины волны Брэгга  $\lambda_{Bragg}$  от  $n_{eff}$  – эффективного показателя преломления для фундаментальной моды:

$$\lambda_{Bragg} = 2n_{eff}\Lambda, \quad (1)$$

где  $\Lambda$  – период записанных штрихов брэгговской решетки. При экспонировании УФ-излучением  $n_{eff}$  для германо-силикатных световодов повышается. При неравномерном экспонировании вдоль продольной координаты  $z$  световода длина волны Брэгга также начинает зависеть от  $z$ , что приводит к разному оптическому пути спектральных компонент излучения – изменению фазовой характеристики решетки.

Предлагаемый метод итерационный, каждая итерация состоит из четырех действий: измерение фазовой характеристики ЧВБР, сравнение текущей фазовой характеристики с желаемой (характеристикой компрессора), получение функции  $\Delta n_{eff}(z)$  – необходимой добавки к эффективному показателю преломления – из математического моделирования методом WKВ [2], экспонирование решетки. За 3–5 итерации данный метод позволяет привести в соответствие характеристики стретчера и компрессора так, что в АКФ измеряемого излучения отличие АКФ от функции гаусса составляет не более 10% для гауссовых импульсов (рис. 1).

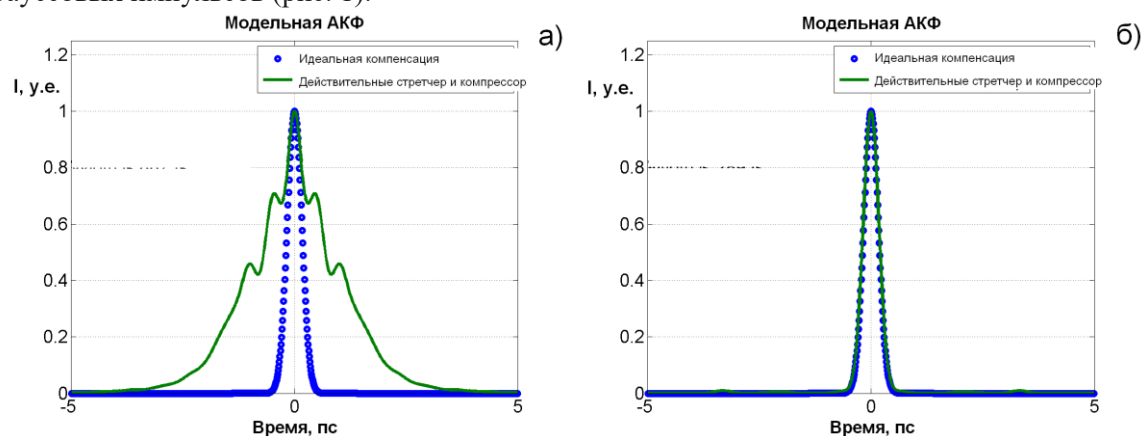


Рис. 1. Рассчитанная АКФ импульса пикосекундного лазера. Точки – теоретически предельно достижимая АКФ при идеальном согласовании стретчера и компрессора а) до приведения в соответствие; б) после приведения в соответствие фазовой характеристики

## Литература

1. Sumetsky M.A., Eggleton B.J. Fiber Bragg gratings for dispersion compensation in opticalcommunication systems // J. Opt. Fiber. Commun. 2005. Rep. 2. P. 256.
2. Poladian L.H. Graphical and WKB analysis of nonuniform Bragg gratings // Phys. Rev. E. 1993. V. 48. N 6. P. 4758.



## Прекомпенсация нелинейного набега фазы в волоконном усилителе ультракоротких импульсов с помощью дисперсии высших порядков волоконной брегговской решётки

*А.И. Баранов<sup>1,2</sup>, И.С. Ульянов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полюс»

Лазеры ультракоротких импульсов (УКИ) в последнее время набирают все большую популярность. За последние несколько десятков лет такие лазеры проделали путь от лабораторных макетов и экспериментов до серийно выпускаемой продукции. Рынок лазеров УКИ продолжает расширяться, появляются успешные коммерческие фирмы, специализирующиеся именно на таких лазерах [1]. Можно отметить, что задача конструирования лазерной системы УКИ эффективно разбивается на две: разработку задающего генератора и усилителя, каждая из которых актуальна и по сей день.

Одним из самых популярных способов усиления УКИ на сегодняшний день является схема усиления chirpированных импульсов. Для такой схемы необходимы соответственно стретчер импульсов, растягивающий их по времени и уменьшающий их пиковую мощность, и компрессор, обращающий эту операцию. Помимо того, что дисперсионные характеристики стретчера и компрессора должны очень точно соответствовать друг другу, необходимо также контролировать отсутствие нелинейного набега фазы при усилении импульса, поскольку большой нелинейный набег фазы может привести к тому, что импульс потеряет свою форму и резко ухудшится его качество [2].

В данной работе теоретически и экспериментально показана возможность компенсировать нелинейный набег фазы в волоконном усилителе с помощью регулирования дисперсионных характеристик стретчера, представляющего собой волоконную брегговскую решётку. Были измерены с высокой точностью дисперсионные характеристики волоконной брегговской решётки, объёмной брегговской решётки, которая используется в качестве компрессора, и спектр усиленного излучения, поскольку он играет большую роль в процессе нелинейного набега фазы. После этого было произведено компьютерное моделирование процесса и вычислена функция компенсации, позволившая осуществить усиление УКИ без потери качества импульса.

### Литература

1. *Pouysegur J. [et al.]*. Simple Yb:YAG femtosecond booster amplifier using divided-pulse amplification // *Opt. Exp.* 2016. V. 24. P. 9896–9904.
2. *Schreiber T. [et al.]*. Influence of pulse shape in self-phase-modulation-limited chirped pulse fiber amplifier systems // *J. Opt. Soc. of America.* 2007. V. 24. P. 1809–1814.

## Усилитель УКИ на кристалле Yb:YAG с одномодовой накачкой

*И.В. Обронов<sup>1,2</sup>, А.С. Демкин<sup>1,3</sup>, Д.В. Мясников<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полюс»

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

<sup>3</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

В данной работе впервые представлено теоретическое моделирование усиления ультракоротких импульсов (УКИ) в кристалле иттрий-алюминиевого граната, легированного ионами иттербия (Yb<sup>3+</sup>:YAG) с одномодоволазерной накачкой на длине

волны 920 нм. В рамках предлагаемой модели для теоретического расчета распространения лазерного излучения используется метод конечных разностей (Finite Difference Beam Propagating Method FD-BPM) [1]. При вычислениях учитываются следующие эффекты:

- 1) разогрев кристалла за счет квантового дефекта;
- 2) термооптический эффект [2];
- 3) зависимость времени жизни верхнего лазерного уровня  $^2F_{5/2}$  от температуры [3];
- 4) зависимость сечений поглощения и испускания от температуры [4];
- 5) керровская нелинейность;
- 6) электронная линза [5].

Теоретические расчеты показывают, что, используя существующий лазер с выходной оптической мощностью 35 Вт и высоким качеством лазерного пучка на длине волны 920 нм в качестве накачки для кристалла  $Yb^{3+}:YAG$ , может быть получено до 20 Вт оптического сигнала на длине волны 1030 нм и коэффициент усиления до 25 дБ при сохранении качества пучка лазерного излучения.

На рис. 1 представлено температурное распределение в кристалле  $Yb^{3+}:YAG$  при выходной оптической мощности 20 Вт на длине волны 1030 нм. В силу слабого разогрева активной среды  $Yb^{3+}:YAG$  (рис. 1) эластооптический эффект и эффект искривления торцов не учитываются в теоретической модели (<20% от термооптических эффектов в целом [6]). Кроме того, существующие зависимости коэффициентов теплопроводности и теплоемкости от температуры [7] также не учитываются из-за сравнительно малого изменения температуры кристалла.

В качестве подтверждения полученным теоретическим результатам были проведены экспериментальные исследования по усилению лазерного излучения УКИ на длине волны 1030 нм в объемном кристаллическом усилителе  $Yb^{3+}:YAG$ , где в качестве источника накачки использовался волоконный лазер на неодимовом волокне с длиной волны 920 нм. Экспериментальные данные хорошо согласуются с теоретическими.

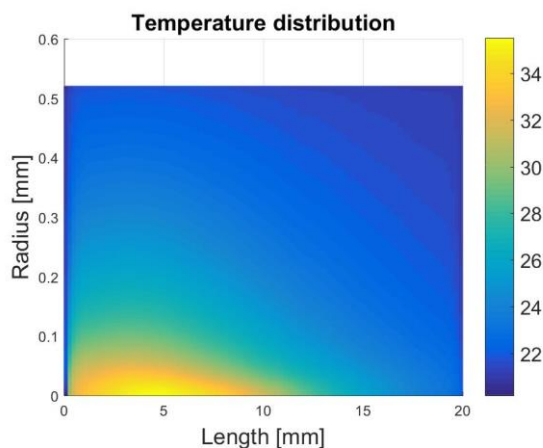


Рис. 1. Температурное распределение в кристаллическом усилителе  $Yb:YAG$  при выходной мощности 20 Вт на длине волны 1030 нм

### Литература

1. Kawano K., Kitoh T. Introduction to optical waveguide analysis // John Wiley & Sons, inc. 2001. P. 180.
2. Fursue H., Yasuhara, R., Hiraga, K. Thermo-optic properties of ceramic YAG at high temperatures // Optical materials express. 2004. V. 4. P. 1794.
3. Koerner J., Vorholt C. Measurement of temperature-dependent absorption and emission spectra of Yb:YAG, Yb:LuAG, and Yb:CaF2 between 20 °C and 200 °C and predictions on their influence on laser performance // J. Opt. Soc. Am. B. 2012. V. 29. P. 2493.
4. Dong J., Bass M. Dependence of the Yb31 emission cross section and lifetime on temperature and concentration in yttrium aluminum garnet // J. Opt. Soc. Am. B. V. 20. P. 1975.

5. *Moncorge R., Eremeykin O.N.* Origin of athermal refractive index changes observed in Yb<sup>3+</sup> doped YAG and KGW // *Optics Communications* 2008. V. 281. P. 2526.
6. *Koechner W.* *Solid-State Laser Engineering* // Springer. 2006. P. 444.
7. *Aggarwal R.L.* Measurement of thermo-optic properties of Y<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, Lu<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>, YAlO<sub>3</sub>, LiYF<sub>4</sub>, LiLuF<sub>4</sub>, BaY<sub>2</sub>F<sub>8</sub>, KGd (WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, and KY (WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser crystals in the 80–300 K temperature range // *Journal of Applied Physics* 2005. V. 98. P. 103514.

УДК 681.7.068

## **Измерение дисперсии групповых скоростей чирпированных волоконных брэгговских решёток**

*В.Т. Ахтямов, И.Н. Бычков, А.И. Баранов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

ООО НТО «ИРЭ-Полус»

Чирпированные волоконные брэгговские решётки (ЧВБР) широко используются в волоконно-оптических линиях связи для компенсации хроматической дисперсии волокна [1], а также в схеме усиления чирпированных импульсов (chirped pulse amplification), которая позволяет получить оптические импульсы с высокой пиковой мощностью на выходе волоконного лазера [2]. Основными параметрами ЧВБР являются коэффициенты дисперсии второго порядка ( $\beta_2$ ), а также дисперсии более высоких порядков. Существует несколько способов измерения этих параметров, но они довольно сложны в исполнении [3]. В данной работе предложен простой метод измерения дисперсии ЧВБР, обладающий высокой точностью измерения.

Блок-схема экспериментальной установки представлена на рис. 1а. Главным элементом экспериментальной установки является волоконный интерферометр Майкельсона. В основе измерения лежит известный метод интерферометрии белого света [4]. Применение данного метода позволяет на порядок увеличить точность измерений по сравнению с другими методами измерения дисперсии [5]. При отражении оптического излучения от ЧВБР различные спектральные составляющие проходят различный путь внутри решётки. Это приводит к тому, что фазовая задержка излучения после отражения зависит от длины волны. С помощью оптического анализатора спектра (OSA) измеряется интерференционная картина, возникающая при взаимодействии излучения, отраженного от ЧВБР, и опорного излучения (рис. 1б). Из полученной интерференционной картины восстанавливается зависимость фазовой задержки излучения, отраженного от ЧВБР, от его частоты (рис. 1в).

Из-за ряда факторов (ограниченная спектральная разрешающая способность OSA и небольшое время когерентности источника оптического излучения) невозможно измерить интерференционную картину во всей области отражения ЧВБР. Для преодоления этого ограничения изменяется оптический путь плеч интерферометра путём изменения температуры волокна. Таким образом, можно смещать интерференционную картину вдоль спектра отражения ЧВБР и измерять зависимость фазовой задержки от длины волны для различных частей решётки. Затем полученные зависимости склеиваются друг с другом, и получается общая зависимость фазы отраженного излучения для всей ЧВБР. Далее из этой зависимости можно вычислить коэффициент дисперсии 2-го и более высоких порядков.

Использование термостатов для изменения оптической длины плеч интерферометра позволяет собрать оптическую часть измерительной установки в полностью волоконном исполнении. Это позволяет уменьшить чувствительность установки к внешним механическим колебаниям, а также позволяет полностью автоматизировать измерения.

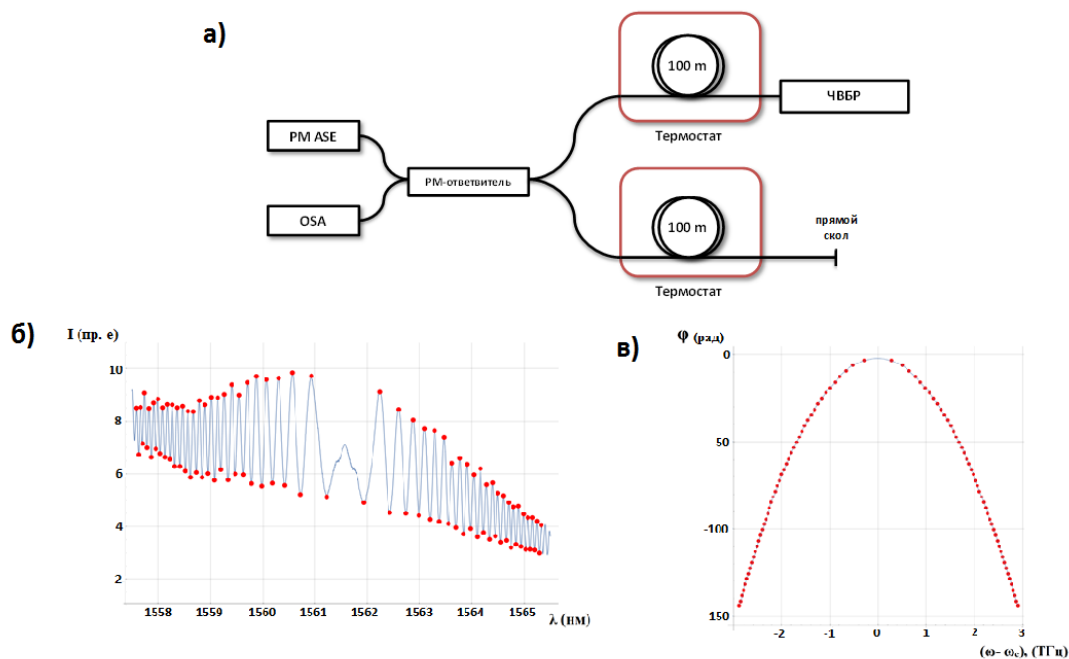


Рис. 1. а) Блок-схема установки для измерения дисперсии групповых скоростей ЧВБР. PM ASE – суперлюминесцентный источник поляризованного излучения, OSA – оптический спектроанализатор, ЧВБР – chirпованная волоконная брэгговская решётка, PM-ответвитель – волоконный 50/50 ответвитель, сохраняющий поляризацию. б) Характерная интерференционная картина, получаемая в процессе измерений. Красными точками выделены пики. в) Зависимость разницы фаз от частоты, восстановленная из измеренной интерференционной картины

### Литература

1. Hill K. O., Meltz G. Fiber Bragg grating technology fundamentals and overview // Journal of light wave technology. 1997. V. 15. N 8. P. 1263–1276.
2. Baranov, A. I. [et al.]. High power ultrashort fiber laser system at 1.55 um // Laser Optics (LO) 2016 International Conference IEEE. 2016. S1-6.
3. Andrusyak O. [et al.]. Cross-correlation technique for dispersion characterization of chirped volume Bragg gratings // Applied optics. 2009. V. 48. N 30. P. 5786–5792.
4. Shang H.T. Chromatic dispersion measurement by white-light interferometry on metre-length single-mode optical fibres // Electronics letters. 1981. V. 17. N 17. P. 603–605.
5. Cohen L. Comparison of Single-Mode Fiber Dispersion Measurement // Journal of Lightwave Technology. 1985. V. 3. N 5. P. 958–966.

УДК 621.391.63

### Разработка математической модели системы связи с АНПА в подводном положении через сеть бакенов (ретрансляторов)

Н.О.Костин<sup>1</sup>, А.В. Хельвас<sup>2</sup>, В.М. Шабунин<sup>1</sup>, Р.А. Пашков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО "Лаборатория моделирования систем"

В настоящее время для изучения Мирового океана все больше используют обитаемые подводные аппараты (ОПА) и необитаемые подводные аппараты (НПА), которые подразделяются на автономные (АНПА) и телеуправляемые (ТНПА). Для связи с АНПА используется в основном радиоканал наземной и спутниковой связи и гидроакустический канал связи. Если передача информации происходит с помощью радиоканала наземной и спутниковой связи, то АНПА приходится всплывать на

поверхность. У гидроакустического канала связи скорость передачи ограничивается явлением “затягивания” во времени принятых сигналов.

Целью проекта является разработка системы связи с АНПА в водной среде по оптическому каналу через сеть бакенов. В настоящее время уже ведется изучение использования оптического канала для передачи информации под водой [2].

Задачи проекта:

Разработка математической модели сети передачи данных.

Определение характеристик передачи сигнала по оптическому каналу для конкретных топологий сетей (на примере Севастопольской бухты).

Разработка технического решения для системы связи и проектирование бортового модуля АНПА и бакена.

Определение надежности системы передачи информации.

Оптический лазерный канал позволяет поддерживать связь между бакенами и АНПА на расстоянии до 100 метров. Для связи с АНПА необходимо создать сеть таких бакенов. Так, например, для создания сети, покрывающей Севастопольскую бухту, понадобится около 800 бакенов. Благодаря использованию данной технологии появляется возможность передавать информацию на АНПА, находящийся в подводном положении.

В качестве рабочей частоты будет использовано излучение в сине-зеленом диапазоне, так как в нем имеется низкое ослабление в водных средах [1].

В докладе приведены результаты математического моделирования мультиагентной стохастической сети передачи данных. Сделаны оценки требуемых характеристик размера пакета и объема буфера ретранслятора. Предложен подход к адаптивному динамическому изменению топологии сети передачи данных.

Предложенной системой связи смогут воспользоваться дайверы для общения между собой. Интересна эта разработка будет также различным экологическим организациям, которые используют необитаемые подводные аппараты.

Таким образом, система связи с АНПА, использующая оптический канал, может стать достойной альтернативой радиоканалу наземной и спутниковой связи и гидроакустическому каналу. Сеть передачи данных на основе множества бакенов имеет высокую надежность и устойчива к выходу из строя большого количества составляющих её бакенов. Кроме того, данную технологию могут использовать различные подводные аппараты и дайверы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-07-00815.

### Литература

1. Кузнецов С., Огнев Б., Поляков С. Система оптической связи в водной среде // Первая миля. 2014. № 2. С. 46–51.

УДК 53.083.2

### Пьезоэлектрический микрорезонатор для измерения поверхностной температуры полупроводников

*А.И. Голубева<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО НТО «ИРЭ-Полус»

Полупроводниковые гетероструктуры широко применяются в современных лазерных технологиях для создания источников интенсивного излучения. Увеличение оптической мощности может приводить к сильному разогреву активного элемента и, как следствие, снижению эффективности генерации. В данной работе для измерения и контроля температуры полупроводниковых структур предлагается использовать специальный зонд, основным элементом которого является оптически прозрачный пьезоэлектрический микрорезонатор. Данный микрорезонатор располагается на

торцемикроструктурированного волокна. Поперечный срез такого волокна (диаметр 500 мкм) представлен на рис. 1а. В нем сделано 7 отверстий. В боковые отверстия продеты тонкие золотые электроды. В центральное отверстие помещается волоконный световод, который может использоваться для регистрации оптического излучения от полупроводника или для оптической накачки.

На торце микроструктурированного волокна располагается микрорезонатор (рис. 1б) — кристалл ниобата лития  $\text{LiNbO}_3$  малых размеров, обладающий пьезоэлектрическими свойствами. Подавая напряжение на определенные электроды, можно получать разнообразные конфигурации электрического поля на торце микроструктурированного волокна. При совпадении частоты внешнего электрического поля с частотой одной из собственных колебательных мод микрорезонатора возбуждается пьезоэлектрический резонанс. При приложении напряжения на разные электроды было проведено математическое моделирование распределений потенциала электрического поля и механических деформаций, присущих собственным модам кристалла. На рис. 2а приведено характерное распределение потенциала электрического поля при подаче напряжения на диаметрально противоположные электроды. На рис. 2б представлено распределение амплитуд смещения точек микрорезонатора, рассчитанное для одной из собственных мод.

Блок-схема экспериментальной установки для регистрации отклика микрорезонатора на воздействие внешнего поля методом синхронного детектирования изображена на рис. 3. Кристалл находится в конденсаторе, образованном двумя электродами, на которые подается напряжение от РЧ-генератора  $U_{ген} = U_0 e^{i2\pi ft}$  с нагрузочного сопротивления  $R$  сигнал подаётся на измерительный вход синхронного детектора. В выбранном частотном диапазоне для каждого значения частоты  $f$  регистрируются амплитуда  $|U_R|$  и фаза  $\varphi$  напряжения на входе синхронного детектора.

Зависимость амплитуды  $|U_R|$  и фазы  $\varphi$  напряжения  $U_R$  от частоты в области резонанса на частоте 3,62 МГц при амплитуде напряжения генератора 10 В для микрорезонатора из  $\text{LiNbO}_3$  изображены на рис. 4а и б соответственно. Используемый кристалл имел сложный профиль со сколами, толщина 50 мкм, характерный размер 300 мкм.

При нагреве микрорезонатора происходит сдвиг частот его пьезоэлектрических резонансов. Проведя предварительную калибровку для резонансных частот при однородном разогреве микрорезонатора, можно измерять температуру полупроводниковой структуры, в контакте с которой находится кристалл, по сдвигу резонансной частоты [1]. Данный подход позволит измерять распределение температуры полупроводниковых гетероструктур в процессе генерации лазерного излучения.

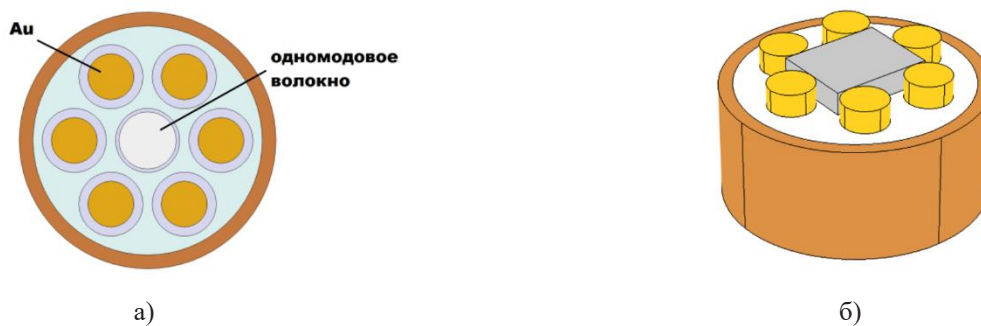


Рис. 1. Поперечное сечение микроструктурированного волокна (а), расположение микрорезонатора на торце волокна (б)



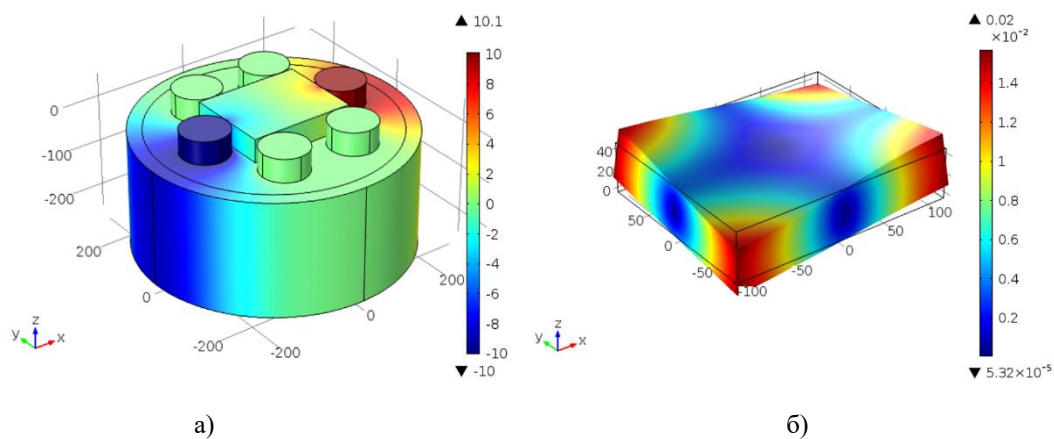


Рис. 2. Распределение потенциала электрического поля (а), деформации, вызванные резонансом на частоте 4,36 МГц (б)

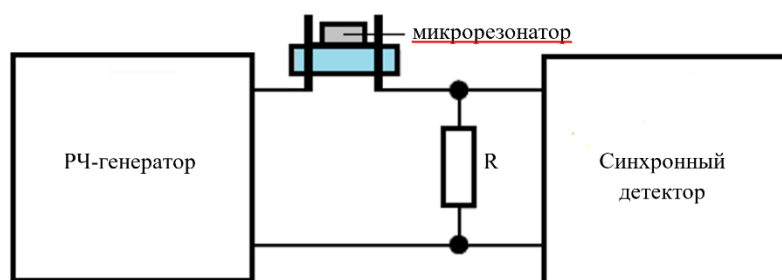


Рис. 3. Упрощённая электрическая схема экспериментальной установки

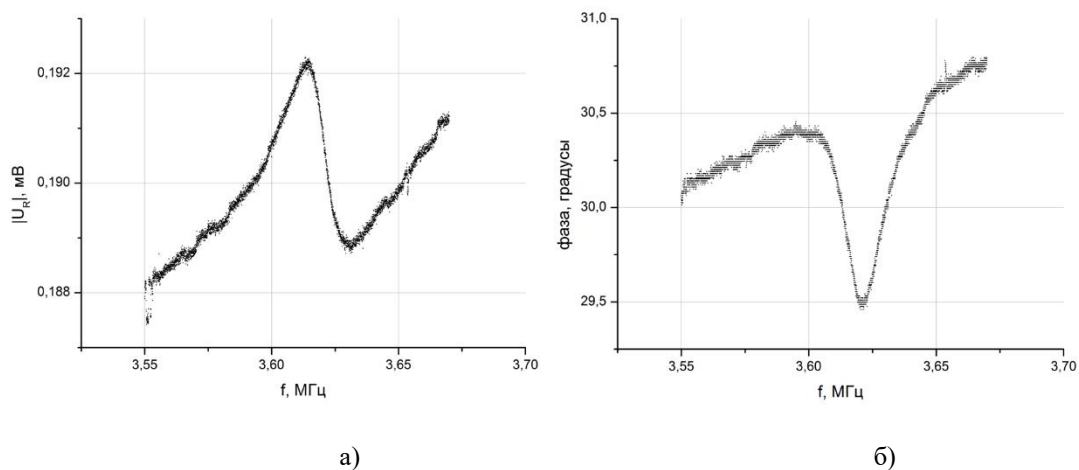


Рис. 4. Амплитуда отклика конденсатора с кристаллом  $\text{LiNbO}_3$  в области резонанса (а), фаза отклика конденсатора с кристаллом  $\text{LiNbO}_3$  в области резонанса (б)

### Литература

1. Ryabushkin O.A. [et al.]. Equivalent temperature of nonlinear-optical crystals interacting with laser radiation // Journal of the European Optical Society. 2011. V. 6. P. 11032.

УДК 537.311.3

## Исследование изменения оптоэлектронных свойств GaAs при воздействии лазерного излучения

*К.В. Зотов<sup>1</sup>, И.А. Сабитов<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Спектр применения волоконных лазеров охватывает широкий круг задач: от лазерной обработки материалов до термоядерного синтеза. Одним из преимуществ волоконных лазеров является их высокая эффективность, достигаемая во многом благодаря использованию в качестве источников накачки лазерных диодов на основе полупроводниковых гетероструктур. Они позволяют напрямую преобразовывать электрическую мощность в оптическую с высоким КПД. Мощности современных полупроводниковых диодов накачки могут достигать десятков ватт. Контроль изменения свойств полупроводниковых структур в условиях генерации мощного лазерного излучения представляет значительный интерес.

Существует множество методов исследования полупроводниковых структур. Одними из самых информативных являются методы модуляционной спектроскопии, основанной на периодическом возбуждении образца и анализе относительного изменения спектров отражения, вызванного этим воздействием [1]. Однако эти методы не могут дать представление о свойствах, связанных с транспортом носителей, что важно, так как в условиях генерации через лазерный диод проходит большой ток и характеристики излучения напрямую зависят от подвижности и концентрации носителей заряда. Для исследования таких свойств применяется метод измерений, основанный на эффекте Холла [2]. На рис. 1а изображена схема четырехзондового метода измерения подвижности и концентрации носителей. К контактам 1 и 3 подключается источник тока, контакты 4 и 5 служат для измерения продольной разности потенциалов, холловская ЭДС измеряется между контактами 2 и 5. Измерения холловского напряжения проводятся при двух противоположных направлениях магнитного поля. Измерив в эксперименте величину магнитного поля, поперечную разность потенциалов и силу тока через образец, можно определить концентрацию носителей заряда и их знак  $n = I/(qR_H)$ , где  $R_H$  – коэффициент Холла, связывающий ЭДС Холла и величину магнитного поля, при постоянной силе тока. Для подвижности из дифференциального закона Ома справедливо следующее выражение:  $\mu = I/(q\rho n)$ , где  $\rho$  – удельное сопротивление,  $q$  – заряд.

В настоящей работе исследовалось влияние излучения на концентрацию и подвижность электронов в объемном полупроводнике GaAs. В качестве источника излучения использовался синий лазерный диод с центральной длиной волны 440 нм, что соответствует фотону с энергией 2,81 эВ. Таким образом, энергии фотона синего диода достаточно для того, чтобы забросить электрон из валентной зоны в зону проводимости GaAs ( $E_g = 1,42$  эВ при  $T = 300$  К).

Для проведения холловских измерений была создана экспериментальная установка, схема которой показана на рис. 1б. Магнитное поле создается двумя постоянными магнитами из интерметаллида  $Nd_2Fe_{14}B$ , закрепленными в оправках. Индукция магнитного поля в области образца составляет  $B = 0,143$  Тл. Образец помещается в магнитное поле вертикально, через отверстие в верхней части каркаса, на специальном держателе, показанном на рис. 1в.

На рис. 2 изображены измеренные зависимости концентрации свободных носителей и их подвижности при различном значении мощности падающего на образец излучения синего лазерного диода.

Видно, что концентрация свободных носителей увеличивается с мощностью. Это обусловлено тем, что с увеличением мощности растет число фотонов, падающих на образец, и, как следствие, растет число переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости. Подвижность при увеличении мощности падающего излучения монотонно падает. Это можно объяснить рассеянием электронов на оптических фонах, число которых растёт при разогреве образца. При воздействии излучения малой мощности происходит скачкообразное увеличение подвижности, что может быть связано с рождением горячих электронов, экранирующих флуктуационный потенциал, обусловленный наличием примеси.

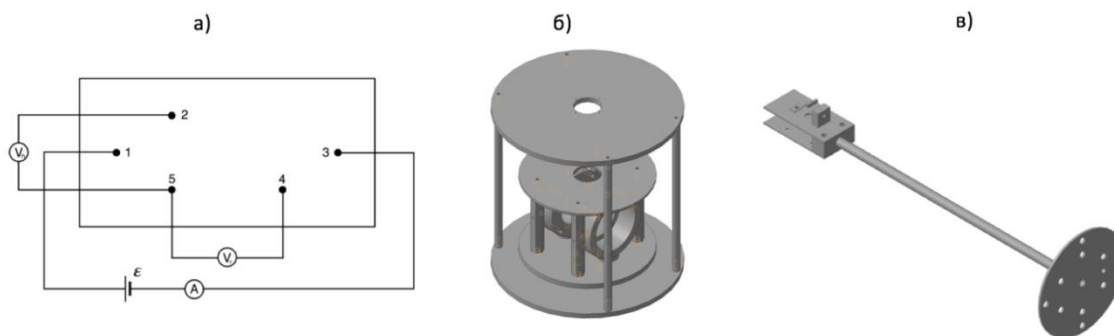


Рис. 1. а) Схема измерения четырехзондовым методом; б) экспериментальная установка; в) держатель образца

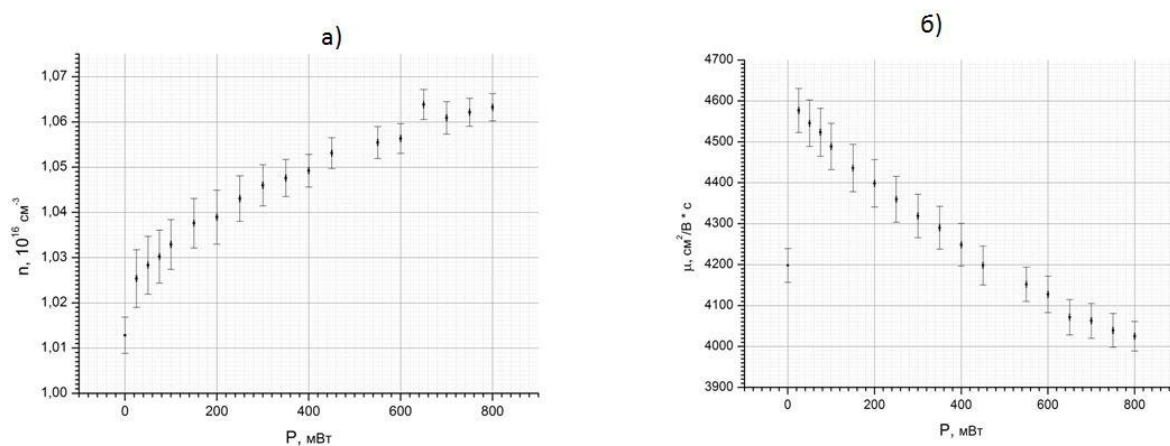


Рис. 2. Зависимости концентрации (а) и подвижности (б) от мощности излучения синего диода

Таким образом, была продемонстрирована принципиальная возможность использования холловских измерений для изучения свойств полупроводника, связанных с транспортом носителей заряда. Модификация разработанной установки позволит исследовать образцы с помощью методов модуляционной спектроскопии, эффекта Холла и метода пьезорезонансной спектроскопии.

### Литература

1. Batz B. Reflectance modulation at a germanium surface // Solid State Communications. 1966. V. 4. P. 241-243.
2. Rode D.L., Knight S. Electron transport in GaAs // Physical Review B. 1971. V. 3. N 8. P. 2534.

УДК 535.34

### Контроль неоднородного разогрева активной среды твердотельного лазера в условиях генерации лазерного излучения.

*А.Е. Корольков<sup>1,2</sup>, Д.И. Белоголовский<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН

Работа твердотельного лазера сопровождается неоднородным разогревом активной среды, что влечёт за собой негативные последствия. Например, слишком высокие температуры могут привести к ярко выраженной тепловой линзе и разрушению активной среды вследствие механических напряжений. Торцевая накачка активной среды лазера приводит к большому градиенту температуры в активной среде, в том числе и в продольном направлении. Кроме того, разогрев активной среды приводит к изменению значений сечений люминесценции и поглощения и к смещению их спектров, что может вызвать уменьшение эффективности работы лазера и изменение длины волны генерации. Поэтому контроль распределения температуры в активной среде является важной задачей. Как правило, температура образца регистрируется с помощью датчика, прикрепленного на его поверхности. Однако в том случае, когда датчик непрозрачен для лазерного излучения, поглощение рассеянного излучения вызывает дополнительный разогрев датчика температуры, что приводит к искажению результатов. По этой причине в данной работе в качестве датчиков предлагается использовать прозрачные для лазерного излучения пьезоэлектрические кристаллы.

Целью работы является демонстрация нового метода измерения продольного распределения температуры поверхности активной среды лазера с торцевой накачкой в условиях генерации лазерного излучения. Для этого был использован твердотельный лазер на основе кристалла  $\text{Nd}^{3+}:\text{YAG}$  размером  $5 \times 5 \times 40 \text{ мм}^3$  и концентрацией ионов ниодима 0,5% at, в котором активная среда накачивалась с торца излучением лазерного диода на длине волны 808 нм, максимальная мощность излучения накачки составляла 6 Вт. Для измерения продольного распределения температуры поверхности активной среды в качестве датчиков были использованы девять пробных пьезоэлектрических кристаллов ниобата лития размерами  $1,5 \times 1,5 \times 0,8 \text{ мм}^3$ , помещенных на поверхности  $\text{Nd}^{3+}:\text{YAG}$  вдоль оси  $Z$ , как показано на рис. 1. Температура пробных кристаллов определялась бесконтактно методом с помощью пьезоэлектрической резонансной спектроскопии.

Суть этого метода заключается в измерении комплексного адмиттанса конденсатора (пары электродов) с исследуемым пьезоэлектрическим кристаллом между обкладками в широком радиочастотном диапазоне. Для этой цели напряжение от РЧ-генератора подаётся через нагрузочное сопротивление  $R$  на конденсатор с кристаллом, а с помощью синхронного детектора измеряются амплитуда и фаза переменного напряжения на сопротивлении. При совпадении частоты одного из собственных резонансов пьезоэлектрика с частотой РЧ-генератора возникает резонанс. Зависимость резонансной частоты определённой моды пьезоэлектрического кристалла от температуры при однородном разогреве может быть описана линейной зависимостью:

$$Rf(T) = Rf(T_0) + K_{prt}(T - T_0),$$

где  $Rf$  – частота данного резонанса,  $K_{prt}$  – пьезорезонансный термический коэффициент,  $(T - T_0)$  – изменение температуры от начальной  $T_0$  до конечной  $T$ .

Тем самым, зная коэффициент  $K_{prt}$ , можно по сдвигу резонансной частоты определить изменение температуры в пьезоэлектрике [1].

В результате эксперимента были измерены продольные распределения температуры поверхности  $\text{Nd}^{3+}:\text{YAG}$  в условиях генерации для различных значений мощности накачки. На рис. 2 приведён пример для накачки мощностью 3,95 Вт. Из данного графика следует возникновение существенного градиента температур вдоль

распространения лазерного излучения, причём разогрев со стороны ввода накачки значительно выше.

Таким образом, было продемонстрировано, что пробные пьезоэлектрические кристаллы могут быть использованы в качестве температурных датчиков для измерения распределения температуры поверхности активной среды твердотельного лазера в условиях лазерной генерации с помощью пьезоэлектрической резонансной спектроскопии. Главное преимущество данного подхода заключается в прозрачности температурного датчика для используемого лазерного излучения, что позволяет избежать его дополнительного разогрева рассеянным излучением.

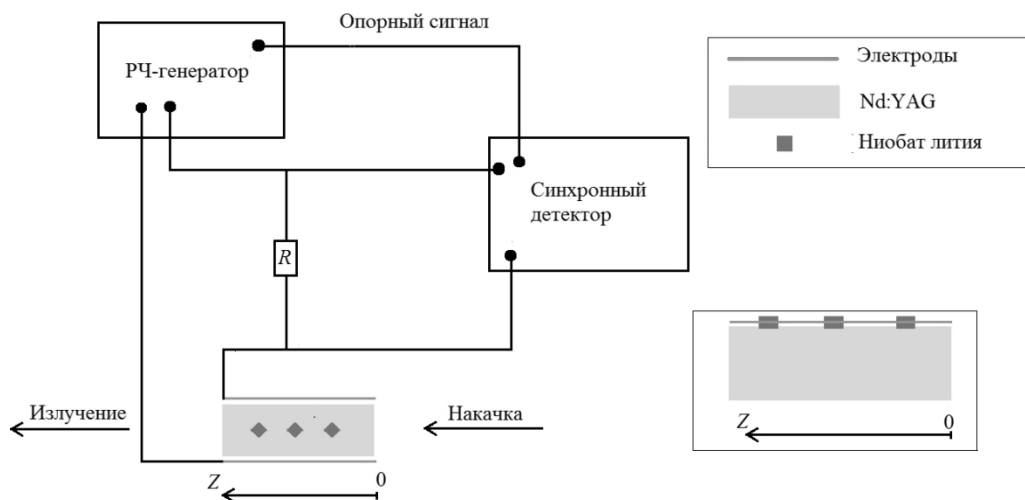


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

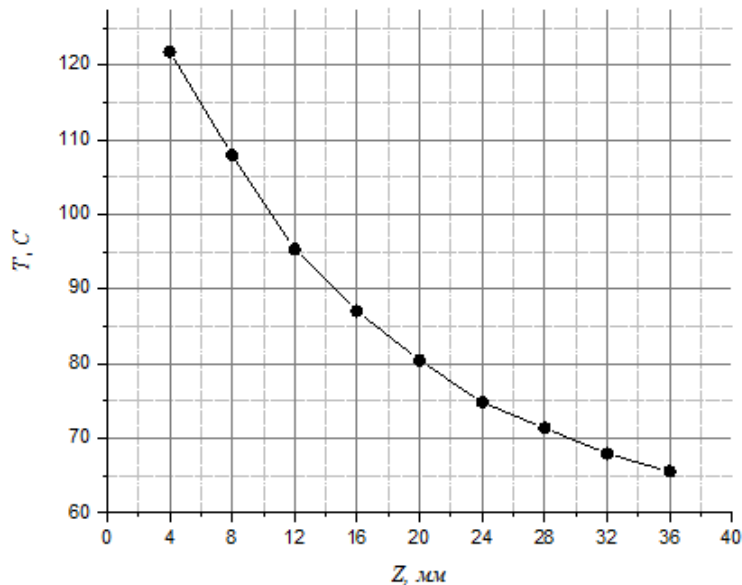


Рис. 2. Продольное распределение температуры поверхности Nd:YAG при мощности накачки 3,95 Вт.

### Литература

1. Ryabushkin O.A., Myasnikov D.V., Konyashkin A.V., Tyrtysnyy V.A. Equivalent temperature of nonlinear-optical crystals interacting with laser radiation // J. Eur. Opt. Soc.-Rapid Publ. 2011. V. 6. P. 11032.

УДК 53.083.2

## Новый метод регистрации оптического изображения лазерного пучка с помощью матрицы пьезоэлектрических кристаллов

*Т.О. Базаров<sup>1</sup>, В.В. Федоров<sup>1</sup>, А.В. Коняшкин<sup>1,2</sup>, О.А. Рябушкин<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

В большинстве современных систем регистрации оптического изображения используются светочувствительные полупроводниковые и пироэлектрические матрицы. Полупроводниковые матрицы обладают высоким пространственным разрешением, чувствительностью и быстродействием. Матрицы работают в спектральном диапазоне от мягкого ультрафиолета ( $\approx 200$  нм) и до ближнего ИК ( $\approx 1100$  нм). В свою очередь, пироэлектрические матрицы применимы в более широком диапазоне (короткий ультрафиолет–дальний ИК), однако их пространственное разрешение на порядок меньше, чем у полупроводниковых. Оба типа матриц обладают невысоким порогом оптического разрушения. Следовательно, для анализа мощных лазерных пучков необходимо использовать многоступенчатые системы ослабления пучка, которые искажают исходное распределение интенсивности. Таким образом, актуальна задача разработки прямого метода получения изображения мощных лазерных пучков в широком диапазоне длин волн.

Для регистрации изображения пучков в данной работе предлагается использовать матрицу пьезоэлектрических кристаллов, которые поглощают лишь малую часть падающего света. Каждый кристалл обладает своим набором собственных колебательных мод, частоты которых сильно зависят от температуры. Предварительно проводятся калибровочные измерения при однородном нагреве всей матрицы, что позволяет по измеренному сдвигу частот определять температуру кристаллов. Для возбуждения колебаний кристаллы помещаются в конденсатор. На электроды конденсатора подается напряжение и при совпадении частоты внешнего электрического поля с частотой собственной колебательной моды наблюдается резонанс. Фазочастотная характеристика (ФЧХ) адмиттанса конденсатора с пьезоэлектрическим кристаллом имеет характерные особенности вблизи резонансных частот. Зная коэффициент оптического поглощения кристалла, можно по кинетике разогрева определить падающую на кристалл мощность света. Рабочий диапазон длин волн матрицы ограничивается только лучевой стойкостью кристалла.

Для подтверждения работоспособности предложенного метода была создана матрица из 25 кристаллов ниобата лития. Каждый кристалл имел размер  $2,5 \times 1,5 \times 1$  мм<sup>3</sup> и располагался между парой цилиндрических электродов, образующих конденсатор.

С помощью системы мультиплексирования каждый конденсатор с кристаллом последовательно включался в измерительную цепь. Блок-схема установки изображена на рис. 1. Переменное напряжение с генератора подавалось на электроды активного конденсатора. Методом синхронного детектирования измерялся сигнал с нагрузочного сопротивления  $R$ . ФЧХ одного из резонансов приведена на рис. 2.

В качестве исследуемых источников излучения были использованы полупроводниковые лазерные диоды, излучающие на длинах волн 450 нм и 960 нм. Для увеличения поглощения и, как следствие, сдвига резонансных частот при воздействии лазерного излучения поверхности кристаллов были почернены.

Пучок лазерного излучения мощностью 400 мВт ( $\lambda = 450$  нм) был направлен в центр матрицы. Распределение сдвигов частоты резонансов кристаллов в матрице представлено на рис. 3. Полученное распределение в первом приближении пропорционально распределению интенсивности. Таким образом, пик интенсивности приходится на центральный кристалл.

В работе показана принципиальная возможность получения изображения с помощью матрицы пьезоэлектрических кристаллов. Реализован стенд и получены картины распределения интенсивности различных лазерных диодов. В дальнейшем планируется



значительно ускорить считывание информации, включив кристаллы в схему генератора Пирса.

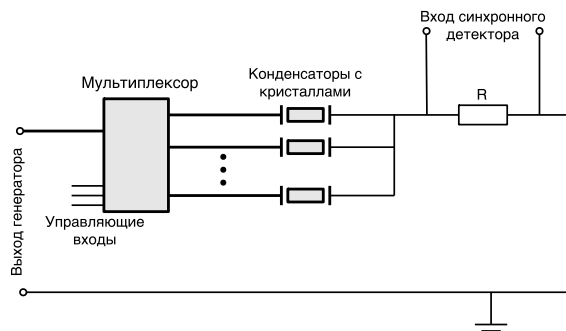


Рис. 4. Блок-схема измерительной цепи

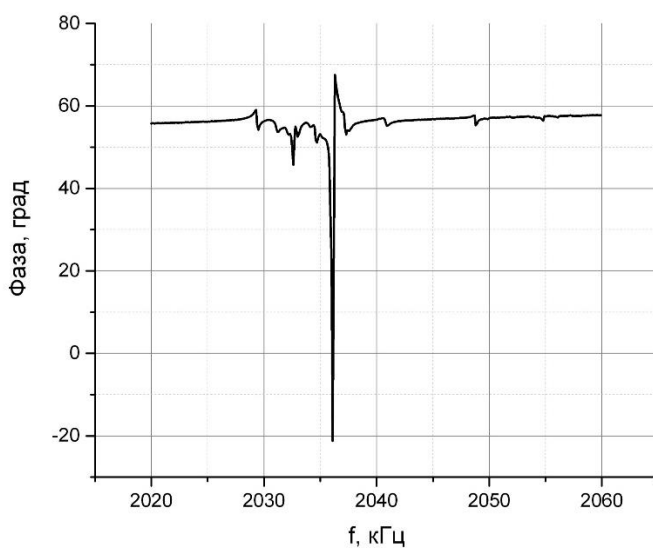


Рис. 5. ФЧХ тока через нагрузочное сопротивление

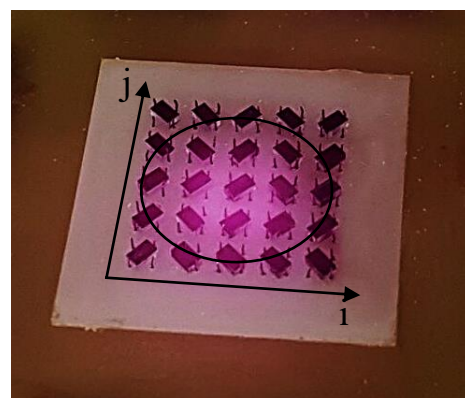
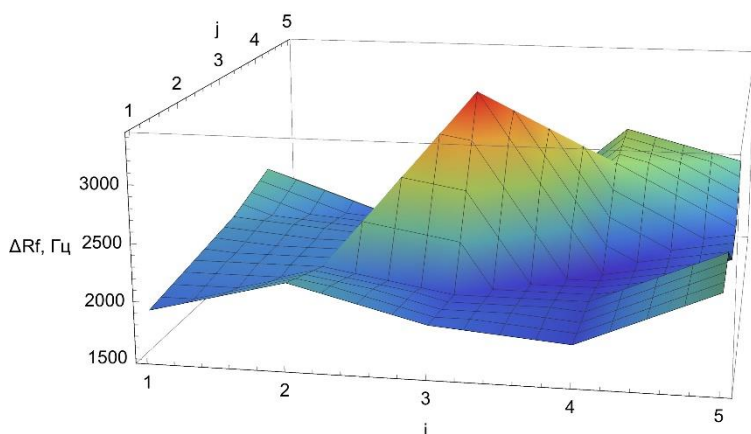


Рис. 6. Распределение сдвигов резонансной частоты в Гц (слева), фотография матрицы с пьезоэлектрическими кристаллами (справа). Контуром отмечена облучаемая область

### Литература

1. Ryabushkin O.A., Myasnikov D.V., Konyashkin A.V. Novel method for identification of intrinsic

УДК 535-15

**Параметрическая генерация широкополосного излучения среднего ИК-диапазона в кристалле ниобата лития с регулярной доменной структурой***И.А. Ларионов<sup>1,2</sup>, В.А. Тыртышный<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>ООО «НТО "ИРЭ-Полус"»

Источники излучения среднего инфракрасного (ИК) диапазона (3–8 мкм) востребованы для решения задач спектроскопии, дистанционного зондирования атмосферы и медицины. Наиболее массовая сфера применения может быть связана с хирургией и стоматологией, где требуется попадание длины волны излучения в пик коэффициента поглощения воды, который располагается вблизи 3 мкм. На данный момент для генерации в этом диапазоне применяются халькогенидные кристаллы (ZnSe, ZnS), легированные ионами хрома или железа, которые обладают широким спектром люминесценции в области 3–5 мкм [1]. Также можно получить генерацию вблизи длины волны 3 мкм, используя переход  $I_{11/2} - I_{13/2}$  в структуре энергетических уровней иона  $Er^{3+}$ [2]. В ряде статей описано нелинейное параметрическое преобразование излучения с длиной волны 1 мкм в средний ИК-диапазон. Этот метод выгодно отличается от вышеописанных тем, что преобразование может происходить с хорошей эффективностью без существенных потерь излучения в тепло. В качестве источника накачки в этом случае возможно применение мощных иттербиевых волоконных лазеров.

Наиболее интересные результаты по параметрическому преобразованию на данный момент достигнуты в нелинейных кристаллах с регулярной доменной структурой (РДС), таких как ниобат (PPLN) или танталат лития (PPLT). Как правило, рассматривается преобразование узкополосного излучения накачки в средний ИК-диапазон. Однако в работе [5] было показано, что ширина спектра параметрического усиления в РДС-кристаллах при некоторых условиях может быть достаточно большой для эффективного преобразования широкополосного излучения накачки. Экспериментальное подтверждение этого факта приведено в статье [4], где была использована резонаторная схема преобразователя на кристалле PPLN. Целью данной работы является подтверждение возможности эффективного широкополосного преобразования в однопроходной схеме, с использованием излучения на длине волны 1,5 мкм в качестве затравочного.

В нашем эксперименте излучения волоконного лазера преобразовывались в кристалле PPLN с периодом доменов 5 мкм (рис. 1а). В результате параметрического преобразования фотон иттербиевого лазера (1,7 мкм) “распадался” на два: 1,56 мкм и 3,4 мкм. Выходная мощность излучения лазера накачки с шириной спектра 7 нм достигала 60 Вт. В качестве источника затравочного излучения использовался узкополосный волоконный эрбиевый лазер на 1,56 мкм. Оба источника работали в импульсном режиме с частотой следования 3 МГц и длительностью 2 нс. Оптические импульсы лазеров были синхронизованы во времени с точностью около 1 нс. Пучки излучения накачки и затравочного сигнала совмещались в кристалле с РДС. Диаметры их перетяжек были равны 150 мкм. Кристалл был помещен в термостат для подстройки температуры синхронизма, которая составила около 70 градусов. На выходе из кристалла излучение трех спектральных компонент коллимировалось линзой и разделялось в пространстве при помощи призм  $CaF_2$ .

При увеличении мощности накачки наблюдалось усиление затравочного сигнала в кристалле, что свидетельствовало о параметрическом преобразовании. Зависимость мощности излучения на выходе кристалла от величины накачки показана на рис. 1б. При частоте следования 3 МГц и мощности накачки 60 Вт удалось получить около 7,5 Вт

излучения с эффективностью 12–13 %. Ширина спектра излучения 3,4 мкм оценивалась по разнице спектральных интенсивностей излучения накачки до и после кристалла и составила примерно 30 нм. На рис. 1в приведен спектр Yb-лазера и спектр преобразованного излучения накачки. Также на графике приведена расчетная зависимость периода доменов в нелинейном кристалле для достижения условия квазисинхронизма от длины волны накачки. Спектральный пик излучения лазера накачки сдвинут относительно максимума этой зависимости (1,06 мкм). Экспериментальные данные согласуются с этим результатом: в области 1,06 мкм эффективность максимальна, а излучение с длиной волны 1,08 мкм практически не участвует в преобразовании.

Продемонстрирована возможность эффективного параметрического преобразования широкополосного излучения иттербиевого волоконного лазера в средний ИК-диапазон при использовании затравочного сигнала. Более точное попадание линии лазера накачки в область 1,06–1,07 мкм должно позволить повысить эффективность. В дальнейшем предлагается исследовать эффект преобразования широкополосного излучения в кристалле танталата лития.

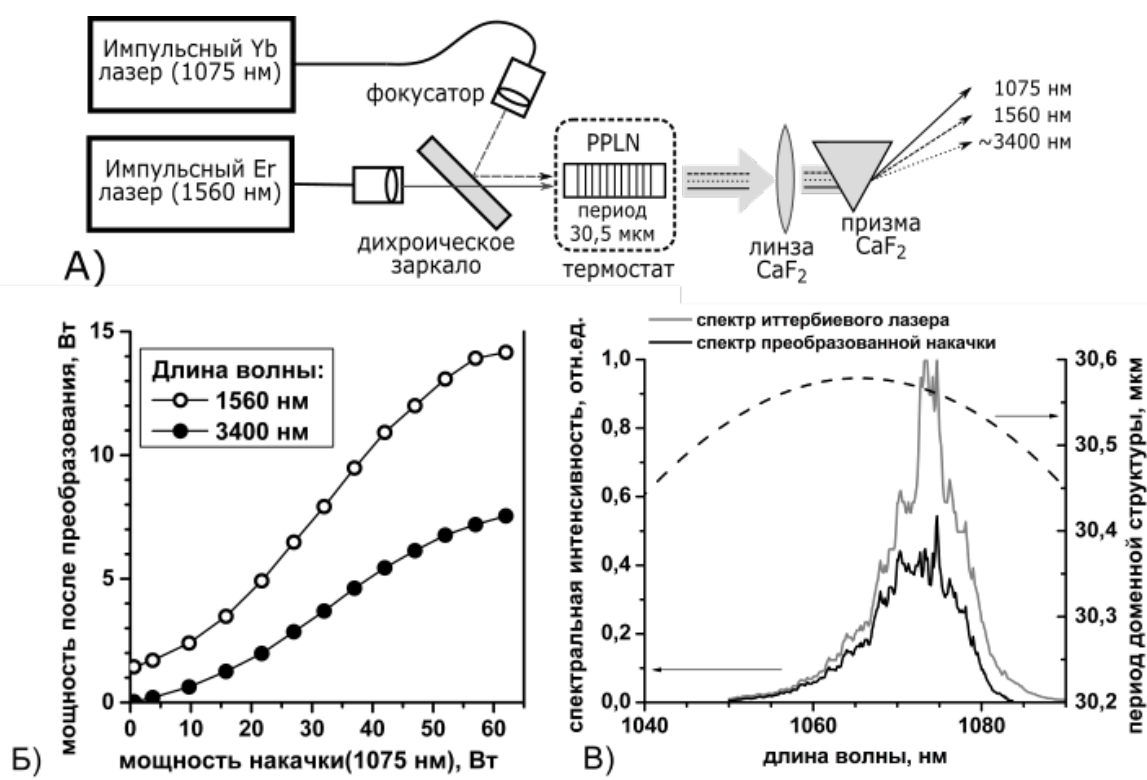


Рис. 1. А) Схема экспериментальной установки, б) выходная мощность преобразованного излучения, в) нормированный график спектра параметрического усиления и выходного излучения лазера (пиковая мощность импульсов накачки 11 кВт, температура кристалла 350 К)

### Литература

1. Mirov S.B. [et al.]. Recent progress in transition-metal-doped II–VI mid-IR lasers //IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 2007. V. 13. P. 810–822.
2. Aydın Y.O. [et al.]. Diode-pumped mid-infrared fiber laser with 50% slope efficiency // Optica. 2017. V. 4. P. 235–238.
3. Xu H. [et al.]. Investigation on the pump acceptance bandwidth for collinear quasi-phase-matching optical parametric amplification //Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials. 2009. V. 18. P. 141–151.

---

---

## Секция информационных технологий

---

---

УДК 530.182, 519.72, 621.391.2

### Сравнительная оценка адаптивности сетей с помощью перегруженных связей на примере цепочки отображений

*В.В. Чибисов, И.О. Куров, А.В. Кудряшов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Предметом исследования является адаптивность сетей в широком смысле. Под адаптивностью понимают свойство сети сохранять устойчивую динамику при наличии негативных факторов. Например, при обрыве некоторых связей, отключении нескольких узлов, зашумлении канала связи. При этом обычно полагают, что адаптивность не зависит от физической природы узлов сети, является характеристикой сетевой топологии. Поэтому имеет смысл говорить не об адаптивности какой-то конкретной сети, а всех сетей с топологией  $A$ . Предполагается, что топология  $A$  допускает матричную формализацию, то есть представима в форме матрицы  $N \times N$ , где  $N$  – число функциональных узлов в сети. При этом имеет значение только наличие или отсутствие связи между парой элементов и направленность связи (симметричная или однонаправленная). Запоздывание, физическая реализация, асинхронность и другие характеристики связей игнорируются.

Исследуются ансамбли логистических отображений с перегруженными связями. Хаотические ансамбли относятся к предметной области нелинейной динамики. Их изучение имеет самостоятельную теоретическую ценность в рамках теории хаоса. Однако, как выяснилось [1], ансамбли с перегруженными связями являются удобным инструментом для оценки адаптивности сетевых топологий. Слабая зависимость коллективной динамики от парциальной динамики методологически сближает ансамбли и сети, позволяет использовать их для взаимного моделирования. Кроме того, можно получить достаточно сложную управляемую динамику, соединяя простые и хорошо изученные нелинейные элементы. Например, динамика автономного логистического отображения детально изучена как численно, так и теоретически. Логистическое отображение используется, как правило, для демонстрационных (обучающих, иллюстративных) целей или как инструмент предварительного исследования более сложных систем. Полученные практические результаты, возможно, допускают обобщение на ансамбли с произвольными парциальными элементами. Однако цель исследований – изучение не хаотических ансамблей самих по себе, а исследование сетевых структур с помощью хаотических ансамблей. Это значит, что нет смысла усложнять или обобщать хаотический ансамбль, если его максимально простая конфигурация позволяет эффективно моделировать произвольные сети и оценивать их адаптивность.

Динамика ансамбля полностью определяется тремя объектами: матрицей связей  $A$ , вектором парциальных параметров  $p$ , вектором начальных условий  $x_0$ . Эволюция состояния ансамбля на каждой итерации описывается  $N$ -мерным преобразованием вида  $x_{n+1} = f(Ax_n)$ , где  $f$  –  $N$ -мерная логистическая вектор-функция  $f(Z_i) = p_i Z_i (1 - Z_i)$ . Заметим, что при декомпозиции (замене  $A$  на единичную матрицу) вектор-функция вырождается в систему из  $N$  независимых парциальных логистических отображений.

Вероятность финитной динамики  $wa(l)$  систем с матрицей связей  $A$  при перегрузке  $l$  оценивается следующим образом. Фиксируется матрица связей  $A$  и величина перегрузки  $l$ . Вектор начальных условий  $x_0$  выбирается случайно (равномерно) внутри единичного гиперкуба. Значения парциальных параметров в столбце  $p$  также выбираются случайно (равномерно) из отрезка  $[0, 1]$ . Осуществляется достаточно большое число итераций.

Эксперимент считается успешным, если в течение всего итерирования траектория системы ни разу не покинула окрестность нуля заданного радиуса. Результат каждой серии численных экспериментов представляет собой зависимость  $w_a(l)$  для ансамбля фиксированного размера. На рис. 1 представлены графики  $w_a(l)$  для цепочек с числом узлов от 2 до 15. Для удобства восприятия область значений ограничена от 0,25 до 0,75, вне этой области графики медленно прижимаются к уровню 0 и 1 соответственно. Напомним, что согласно [2] нас интересует только линейный участок графика.

Основным результатом является применимость метода для сетей простейшей топологии. Метод устойчив относительно изменения параметров хаотического ансамбля (набор парциальных параметров, начальные условия, фоновые связи, число узлов). Таким образом, зависимость разрушения динамики от перегрузки является универсальной в рамках одного топологического класса. Далее, для разных топологических классов наблюдается общность в характере разрушения. А именно, на всех (может быть, за исключением конечного числа) графиках  $w(l)$  существует линейный участок. Для рассмотренных топологий существует предельное значение углового коэффициента линейного участка. То есть для достаточно больших сетей адаптивность уже не зависит от дальнейшего разрастания сети. Кроме того, сравнение предельных угловых коэффициентов позволяет сравнивать адаптивности разных топологий. В частности, удалось упорядочить рассматриваемые топологии в порядке уменьшения адаптивности: короткая цепочка, длинная цепочка, простое кольцо, цепочка с симметричной связью, кольцо с симметричной связью.

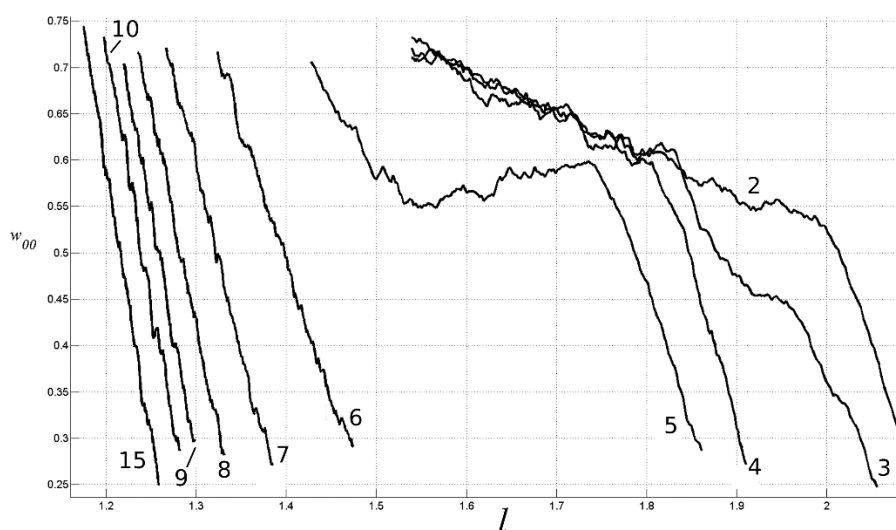


Рис. 1. Цепочки с числом узлов от 2 до 15

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта 17-07-00815 А.

#### Литература

1. Чибисов В.В., Шабунин В.М. Перегрузка связей как метод сравнительной оценки адаптивности сетей // Труды 59-й научн. конф. МФТИ. Секция информационных технологий, 22 ноября 2016 г. (<http://conf59.mipt.ru/static/prog.html>)
2. Дмитриев А.С., Ефремова Е.В., Лазарев В.А., Герасимов М.Ю. Сверхширокополосная беспроводная самоорганизующаяся прямохаотическая сенсорная сеть // Успехи современной радиоэлектроники. 2013. № 3. С. 19–30.

УДК 530.145

**Применение классических алгоритмов для решения ряда квантовых задач***Д.В. Зайцев*

12 ЦНИИ Минобороны России

Известно, например [1], что если в уравнение Шредингера

$$i\hbar = \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

подставить волновую функцию квазиклассической частицы

$$\psi = a \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right),$$

где  $a$  – медленно меняющаяся функция,  $S$  – действие системы, то после несложных преобразований можно получить классическое уравнение Гамильтона–Якоби для действия  $S$ , содержащее слагаемое с  $\hbar^2$ , и уравнение непрерывности для плотности вероятности нахождения рассматриваемой частицы  $P = a^2$  в том или ином месте пространства

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \operatorname{div} vP - v \operatorname{grad} P,$$

показывающее, что плотность вероятности «перемещается» по законам классической механики с классической скоростью в каждой точке.

Но, если квазиклассическая частица (система) обладает набором дискретных состояний  $S_i$ , то в этом случае легко показать [2], что уравнение непрерывности трансформируется в известную в теории марковских процессов систему уравнений Колмогорова  $dP_i/dt = -\mu_i P_i + \mu_{i-1} P_{i-1}$ , описывающую изменения вероятностей  $P_i$  нахождения системы в состояниях  $S_i$  ( $\mu_i$  интенсивность перехода частицы из состояния  $S_i$ ).

То, что уравнения Колмогорова не содержат в явном виде потенциальную энергию  $U(r)$ , объясняется тем, что интенсивности переходов  $\mu$  определяются скоростью  $v$ , значение которой в свою очередь и зависит от потенциальной энергии.

Тогда для исследования ряда квантово-механических задач, таких как взаимодействие излучения с веществом, когда под  $S_i$  можно подразумевать количество частиц  $i$ , находящихся в некотором возбужденном состоянии, можно использовать аппарат теории марковских процессов, например [3].

С ростом числа состояний рассматриваемой системы общая временная сложность стандартных алгоритмов будет составлять  $O(n^4)$ , что существенно осложняет нахождение решения.

Поэтому в работах [4, 5] изложен метод «волны вероятности» для нахождения вероятностей предельных состояний сложной системы. Идея метода «волны вероятности» заключается в том, что расчет вероятностей предельных состояний рассматриваемой системы аналогичен расчету волнового фронта волны на основе принципа Гюйгенса–Френеля для расчета дифракции оптического излучения, т.е. для расчета вероятности  $P_{ij}$  нахождения рассматриваемой системы в состоянии  $S_{ij}$  необходимо просуммировать вероятности переходов  $p^{i-1j}$  и  $(1-p^{ij-1})$  из соседних состояний  $S_{i-1j}$  и  $S_{ij-1}$  с соответствующими весами  $P_{i-1j}$  и  $P_{ij-1}$

$$P_{ij} = p^{i-1j} P_{i-1j} + (1 - p^{ij-1}) P_{ij-1}.$$

Оценка временной сложности алгоритма, основанного на методе «волны вероятностей», составляет  $O(n^2)$ , что сопоставимо со сложностью квантовых алгоритмов.

Предложенный метод «волны вероятности» позволяет рассчитать вероятности нахождения рассматриваемой системы в предельных состояниях за один проход.



Хотя алгоритм и не позволяет рассчитать фазу предельного состояния, но для его реализации не требуется квантовый компьютер.

### Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
2. Zaitsev D.V. Estimation of ultrashort laser pulse penetration depth into plasma at multiphoton collisional absorption // Вопросы атомной науки и техники. Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт». 2000. № 1.
3. Zaitsev D.V. Mathematical model of laser generation on the basis on the Markov processes theory // В сборнике: Industrial Lasers and Laser Applications '95 Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. Troitsk, Moscow Region, Russian Federation. 1996. С. 2-7.
4. Зайцев Д.В. Моделирование боя на основе теории сетей массового обслуживания // Стратегическая стабильность. 2007. № 4 (41).
5. Зайцев Д.В., Сосков Д.Ю., Салов В.Е. Принципы построения математических моделей боя в условиях военных конфликтов низкой интенсивности // Вооружение и экономика. 2016. № 3 (36).

УДК 53.083

### **Разработка оптического прибора для измерения скорости автономного необитаемого подводного аппарата (АНПА) в подводном положении**

*Е.М. Шарова, А.В. Хельвас*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
ООО «Лаборатория моделирования систем»

При разработке систем автономной навигации АНПА важной задачей является определение скорости АНПА относительно водной среды. На рынке представлен достаточно широкий спектр приборов на основе анемометров или доплеровских локаторов оптического или ультразвукового диапазона (см., например [1, 2]).

Предложен метод измерения скорости АНПА в подводном положении на основе регистрации и обработки изображений забортной воды с находящимися в ней примесями с лазерным подсветом и устройством для измерения скорости АНПА в подводном положении посредством обработки последовательности изображений с видеокамеры, формируемого с лазерным или светодиодным подсветом.

По серии изображений регистрируется и измеряется перемещение частиц в потоке воды относительно АНПА. Для устранения погрешности, связанной с влиянием на формирование изображений градиента скорости потока жидкости вдоль нормали к поверхности АНПА в системе отсчета, связанной с АНПА, предложено реализовать подсветку области, находящейся за пределами пограничного слоя. Актуальность разработки данного прибора связана с тем, что имеющиеся аналоги, которые будут описаны в докладе, обладают рядом недостатков. Создание устройства обеспечит возможность измерения скорости АНПА от 0,01 м/с до 10-15 м/с (за счет использования скоростной камеры) и с относительной ошибкой, не превышающей 1% на глубине до 1 км. Использование лазерного подсвета позволит проводить измерения в дневное и ночное время на любой глубине. В качестве приемника на стадии НИОКР использованы высокоскоростные камеры ХИМЕА.

Таким образом, проверена гипотеза о возможности измерения скорости АНПА в подводном положении с помощью предложенного подхода. Разрабатываемый аппарат будет использован при создании АНПА, глубина погружения которых достигает 1 км. Также он может быть использован при разработке надводных судов.

### Литература

1. *Саранчин А.И., Полковников В.Ф., Завьялов В.В.* Индукционный электронный лаг ИЭЛ-2М: Учеб. пособие. Владивосток: 2003. С. 40.
2. *Краснов В. Н.* История навигационной техники: Зарождение и развитие технических средств кораблевождения // М.: Наука, 2001. 312 с.

УДК681.11

#### **Разработка системы управления центром масс АНПА (автономных необитаемых подводных аппаратов)**

*С.К. Грачев<sup>1</sup>, Д.С. Северов<sup>1</sup>, А.В. Хельвас<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>ООО «Лаборатория моделирования систем»

Современные автономные необитаемые подводные аппараты (АНПА) имеют обширную классификацию по многим признакам, в том числе и по используемым механизмам управления направлением движения. В данной работе рассматриваются АНПА планирующего типа (глайдеры). Для управления дифферентом относительно продольной и поперечной оси инерции рассматриваемых аппаратов используются, как правило, системы, основанные на перемещении груза или перекачке балласта.

В прототипе АНПА разработки Лаборатории автономных систем МФТИ основной подсистемой управления центром масс являются электродвигатель и червячная передача. Их совместная работа обеспечивает перемещение центров масс судна вдоль его продольной и поперечной осей.

Подобный принцип работы системы управления дифферентом сопряжен с рядом существенных недостатков конструкции: высокое энергопотребление, снижающее время автономной работы, высокий уровень шума, повышающий общую заметность и, следовательно, вероятность обнаружения судна. И самое главное – большое время отработки управляющего воздействия, что негативно сказывается на его управляемости и надежности.

Предлагаемая система управления центром масс АНПА имеет принципиально иной механизм действия и лишена вышеуказанных недостатков за счет использования электромагнитной катушки для перемещения центра масс.

Модуль управления центром масс представляет собой автономный модуль в составе АНПА, включающий : корпус из прочного, токнепроводящего материала (например, пластика или композита), цилиндрическая емкость с вязкой жидкостью; металлический груз, находящийся внутри емкости, обмотка, источник тока, система управления на основе микроконтроллера для регулировки силы и направления подачи тока. Подобных устройств на АНПА может быть несколько (минимум два), и все они связаны между собой и управляются единым бортовым вычислителем.

Получен вид передаточной функции устройства управления и исследованы его динамические характеристики. Проведено экспериментальное исследование созданного макета изделия.

Разработанное решение может использоваться при создании АНПА планирующего типа сверхлегкого класса.

## Определение расстояния до объектов с помощью мобильного девайса

*И.О. Куров<sup>1</sup>, Е.Н. Мескова<sup>2</sup>, А.Г. Еременко<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Московский архитектурный институт (государственная академия)

Сейчас для определения расстояния до объектов используют рулетки, стереокамеры, построение стереокартины, строящей 3D сцену, дальномеры и прочие методы, для применения которых необходимо обладать оборудованием и знаниями во многих областях. Предлагается использовать некоторые характеристики камеры, такие как размер матрицы или размер пикселя и фокусное расстояние, линейные размеры объекта, формулу плоской линзы, а также библиотеку обработки изображений для детектирования объекта для определения расстояния – Open Source Computer Vision Library (OpenCV).

Расчеты и решение задачи описываются с использованием камеры на Apple iPhone 5s. Укажем характеристики камеры: размер матрицы: 1/3 дюйма (4,896 мм × 3,672 мм) [X × Y], фокусное расстояние: 4,12 мм (29,7 мм эквивалент) [F], разрешение картинки: определяем OpenCV 3264 × 2448 [Width × Height], размер пикселя: 1.5 мкм [X × 1000Width].  $H$  – линейные размеры нашего объекта. Нам известны: F, H и h (находим с помощью OpenCV). Используя формулу плоской линзы и подобие треугольников легко получаем формулу для нахождения расстояния до объекта:  $d = F (H / h + 1)$ . Для полученной формулы надо определить h – размер изображения на матрице камеры в миллиметрах. Используя библиотеку OpenCV и последовательное выполнение алгоритмов:

1. Детекторобъекта. Используем поиск фигуры и выделение цвета.
2. Создаем boundrect для детектирования площади, нахождения диаметра объекта в пикселях на изображении Height image.
3. Переводим пиксели в мм.
4. Если используем videocapture, то выполняем последовательность алгоритмов выше по каждому кадру или через каждые  $N$  fps. Можно использовать высокоскоростную камеру, результат не изменится, хотя и повысится качество детектируемого объекта. Разумно использовать подобное оборудование в случае быстро движущегося объекта, например, мяча для гольфа, тенниса или шайбу.
5. Если объект находится в движении, то используя videocapture, сравнение двух кадров, детектирование разницы (покажет перемещение мяча за 1 или  $n$  кадров) можем также определить расстояние до мяча + расстояние, на которое мяч переместился по плоскости (проводим эту же операцию, только в одной плоскости).

В результате определяем размер объекта в миллиметрах, а значит, и расстояние до объекта.

Для тестирования алгоритма использовался мяч для гольфа с  $H = 42.67$  миллиметров, процесс детектирования выполнялся по видеофайлу с помощью покадрового анализа и сравнения. Пример обработанных кадров показаны на рис. 1.

Для наиболее точного определения размера объекта на изображении находим наибольший линейный размер фигуры и строим окружность. Важным замечанием является необходимость подсчитывания центра масс изображения для исключения влияния засветки и некорректного определения размеров. Так же для быстрого поиска объекта в реальном времени, например, во время видеопотока, ключевое влияние оказывает динамический подбор цветового значения объекта в зависимости от падающего на него света и прочих действий на его натуральный окрас.

В дальнейшем планируется использование нейронных сетей для лучшего поиска объектов, классифицирование объектов по типам детектирования.

Перспективным направлением развития является обучение алгоритма нахождению и классифицированию архитектурных объектов по размерам, типам и палитре, используя библиотеки Google и Яндекс. Подобное использование поможет ускорить обучение алгоритма на принципиально различных объектах посредством сети Интернет.

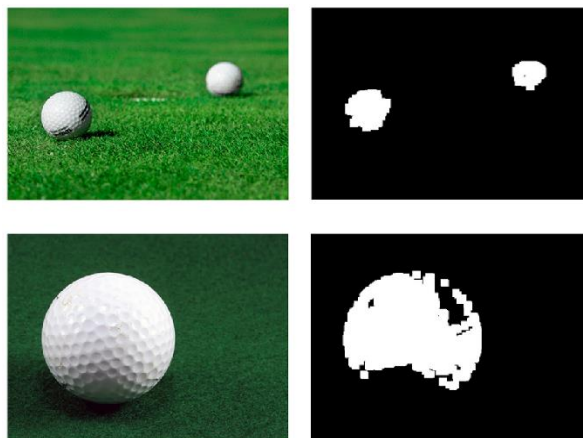


Рис. 9. Пример проанализированных кадров.

### Литература

1. *Broadie M., Bansal M.*. A simulation model to analyze the impact of hole size on putting in golf // Proceedings of the 2008 Winter Simulation Conference, 2008, pages 2826–2834.
2. *Penner R.* The physics of golf // Rep. Prog. Phys. 66 (2003) 131–171 PII: S0034-4885(03)31567–2.

УДК 004.042

### Перспективы использования нового устройства на базе акселерометрии для исследования сложной моторной деятельности человека

*Н.Г. Беляйкина<sup>1</sup>, А.М. Данилов<sup>2</sup>, О.В. Левашов<sup>3</sup>, А.В. Хельвас<sup>4</sup>, Е.О. Япрынец<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

<sup>2</sup>Институт точной механики и вычислительной техники РАН им. С.А. Лебедева

<sup>3</sup>ФГБНУ «Институт полиомиелита и вирусных энцефалитов им. М.П. Чумакова»

<sup>4</sup>ООО «Лаборатория моделирования систем»

Имеется целый ряд сложных зрительно-моторных действий, которые требуют от человека хорошей моторной координации движений (например, при нештатной стыковке космических аппаратов, как в известном случае попыток ручной стыковки кораблей Союз 7 и Союз 8). Поэтому актуальной является задача исследования зрительно-моторной деятельности человека, в том числе для задач практического отбора операторов с хорошими координационными способностями. До сих пор для исследования этих способностей применяются примитивные тесты типа "пробы Озерецкого", разработанные много лет назад [1, 2, 3]. Этот тест выполняется в виде поочередного быстрого сжимания кистей левой и правой руки испытуемого, сидящего за столом или стоящего перед экспериментатором, оцениваются качественно и, конечно, не позволяет оценить в полном объеме сложную зрительно-моторную деятельность человека.

Нами разработана новая методика цифровой беспроводной регистрации произвольных движений человека в пространстве на основе акселерометрии и распознающих нейронных сетей. Устройство представляет собой манипулятор со встроенным инерциальным модулем и рекуррентной нейронной сетью на серверной компоненте [4]. Устройство имеет форм-фактор «Волшебной палочки». Диагностика проводится в режиме реального времени. Эта методика позволяет регистрировать произвольные движения руки человека (в том числе и двух рук, выполняющих реципрокные движения), запоминать их и оценивать отклонения от стандартных (эталонных) траекторий движений. Это позволяет провести количественную оценку эффективности зрительно-моторной координации испытуемого и надежно

классифицировать его способности как слабые, удовлетворительные, хорошие или отличные.

В рамках данной методики нами разработаны алгоритмы цифровой обработки данных с помощью нейронной сети, позволяющие выявить различие между темпами выполнения движений рук по заданным траекториям ("жестов"), сбои или отставания одной или обеих рук, персеверации и устойчивые стереотипные движения, игнорирование одной из рук. С помощью разработанного нами "алфавита жестов" можно выявить «зажатость» как локтевого сустава, так и кисти.

Экспериментальная проверка методики.

1. Испытуемые. Участвовало три группы испытуемых: 1. Дети от 4 до 16 лет. 2. Взрослые испытуемые без двигательных нарушений. 3. Пожилые испытуемые от 60 до 80 лет.

2. Процедура. Испытуемые должны были последовательно выполнять четыре типа несложных эталонных движений руки ("жестов"): "движение по прямой влево-вправо", "движение по прямой вверх-вниз", "круговое движение по часовой стрелке", "круговое движение против часовой стрелки".

3. Результаты. В докладе приведены результаты исследования и обсуждается различие в эффективности выполнения данных "тестов" испытуемыми трех разных возрастных групп.

4. Обсуждение. Предлагаемая методика может подготовить прорыв в области исследования произвольной зрительно-моторной активности человека. Это позволит применять ее в самых разных практических задачах – в спорте, в эргономике, в нейропсихологии, а также при реабилитации больных с двигательными нарушениями.

#### Литература

1. Хохлов Н.А., Ковязина М.С. [и др.]. Проба на реципрокную координацию рук // Материалы конференции МГУ, М: МГУ, 2016, № 6. С. 142.
2. Лурия А.Р. Высшие корковые функции человека и их нарушения при локальных поражениях мозга. М.: Моск. ун-та, 1962. С. 168.
3. Максименко А.Н., Ковязина М.С. Пособие для практических занятий по нейропсихологической диагностике. М.: Теревинф, 1998. С. 44.
4. Хельвас А.В., Беляйкина Н.Г. [и др.]. Распознавание жестов с помощью нейронной сети и применение этого подхода для создания игровых гаджетов нового поколения // Труды МФТИ 2017 № 2. С. 166–176.

УДК 681.2

#### Распознавание ведущего полушария головного мозга с помощью "волшебной палочки".

*Д.В. Зайцева<sup>1</sup>, А.С. Зайцев<sup>1</sup>, Е.О. Япрынцев<sup>3</sup>, А.С. Чвырь<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Институт точной механики и вычислительной техники РАН им. С.А. Лебедева

Целью исследования является проверка возможности распознавания ведущего полушария головного мозга испытуемых путем регистрации и анализа жестов, выполняемых испытуемыми с помощью специально разработанного гаджета – "волшебной палочки" [1]. Гаджет представляет собой указку – "волшебную палочку", в ручке которой находится электронное устройство, включающее инерциальный модуль IMU9250, вычислительный модуль STM32F4, модуль связи ESB и аккумуляторную батарею.

При выполнении жестов происходит предварительная обработка полученных данных и передача информации о трехмерном движении на сервер с развёрнутой рекуррентной искусственной нейронной сетью. Искусственная нейронная сеть (ИНС)

создана путем имитации модели сетей нейронов. Используя алгоритмы, которые имитируют процессы реальных нейронов, есть возможность обучать ее.

Проведен эксперимент по обучению и тестированию нейронной сети и разработанного трекера движений по определению ведущего полушария головного мозга.

Обучение выполнялось для выборки из  $N = 20$  испытуемых, на которых производилось обучение и контрольной группы из  $M = 20$  испытуемых. При обучении использовались четыре вида циклических (начальная точка совпадает с заключительной) жестов – "круговое движение по часовой стрелке", "круговое движение против часовой стрелки", "правая восьмерка", "левая восьмерка", "знак зорро".

Обе группы содержали правшей, левшей и переученных левшей.

В докладе приведены результаты эксперимента и оценки вероятностей ошибок первого и второго рода при решении задачи классификации испытуемых на левшей, правшей и переученных левшей. Основным результатом исследования является проверка возможности использования разработанного устройства для анализа психофизических свойств испытуемых с измеримыми результатами проводимых экспериментов.

### Литература

1. Хельвас А.В., Беляйкина Н.Г. и др. Распознавание жестов с помощью нейронной сети и применение этого подхода для создания игровых гаджетов нового поколения. // Труды МФТИ 2017. Т 9, № 2. С. 166-176.



УДК 621.384.3/5

**Вольт-фарадное профилирование концентрации носителей заряда в гетероструктурах AlGaAs/GaAs***Н.С. Батмановская<sup>1,2</sup>, Д.А. Папкеев<sup>1,2</sup>, В.Е. Гончаров<sup>1,2</sup>*<sup>1</sup>АО «НПО «Орион»<sup>2</sup>Московский технологический университет МИРЭА

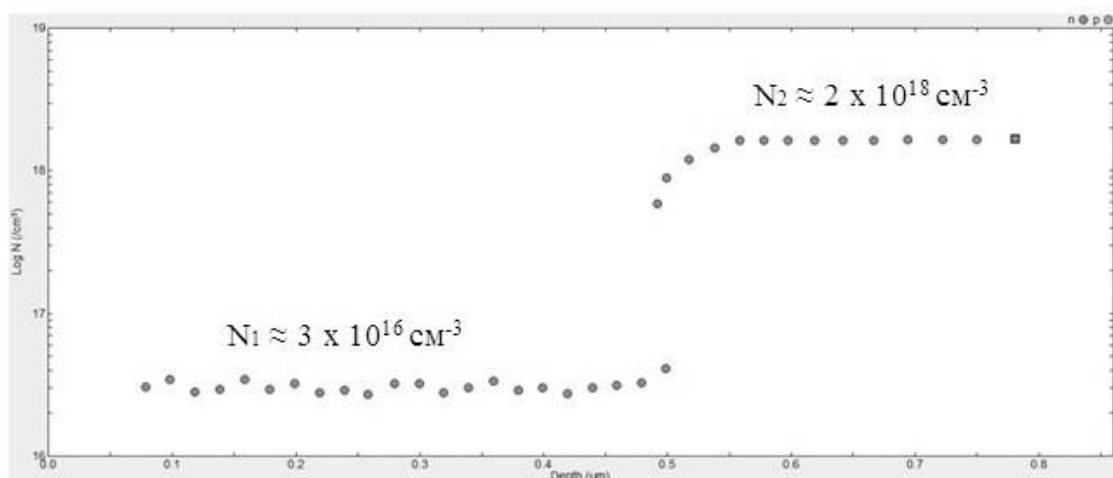
Фотоэлектроника является областью науки и техники, которая изучает вопросы исследования и принципы работы приборов и систем, преобразующих оптические сигналы в электрические. Самыми главными первичными элементами таких приборов являются фотоприемники. В наше время отрасль, разрабатывающая различные фотоприемные устройства, развивается чрезвычайно быстрыми темпами, однако фундаментальные принципы, на базе которых строятся данные приборы, остаются неизменными [1].

Важно отметить, что перед изготовлением нового фотоприемного устройства необходимо провести контроль качества полупроводникового материала, исследовать и измерить его различные характеристики и параметры, в том числе и электрофизические, поскольку качество будущего устройства главным образом зависит от его основы. Именно поэтому в рамках данной работы была поставлена задача измерения одного из электрофизических параметров – концентрации носителей заряда.

В качестве образца была выбрана сложная многослойная структура с квантовыми ямами на основе AlGaAs/GaAs. Структуры такого типа используются для создания QWIP – фотоприемников, поскольку процессы оптической ионизации в квантовых ямах значительно повышают эффективность будущего устройства [2].

Изучив и проанализировав различные методы измерения электрофизических параметров полупроводниковых материалов, выбор был сделан в пользу электрохимического вольт-фарадного профилирования. Для осуществления метода вольт-фарадных измерений необходимо наличие контакта Шоттки, однако принципиальным ограничением является глубина профилирования, которая зависит от обратного напряжения пробоя диода Шоттки [3]. Использование электрохимического CV-профилометра (ECV-профилометра) позволяет преодолеть это ограничение в виде глубины профилирования, так как в приборе задействована специальная электрохимическая система травления. Материал можно профилировать до любой глубины при управляемой и рассчитываемой скорости, если правильно использовать выбранную электрохимическую реакцию растворения. Поверхность раздела полупроводник/электролит ведет себя как диод Шоттки и поэтому позволяет снимать измерения концентрации носителей обычным образом [4].

Таким образом, данный метод является наиболее удобным для исследования многослойных эпитаксиальных структур, однако для его осуществления необходимо подбирать для каждого материала подходящий электролит. Для исследуемой структуры с квантовыми ямами на основе AlGaAs/GaAs были подобраны два электролита – на основе этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА) и «Тайрон». Результаты проведенных измерений профиля концентрации носителей заряда в образце гетероструктуры AlGaAs/GaAs n-типа представлены на рис. 1 и рис. 2.



$$h_{12} = 0.5 \text{ мкм}$$

Рис. 1. Профиль концентрации носителей заряда в гетероструктуре AlGaAs/GaAs n-типа (электролит – тайрон)

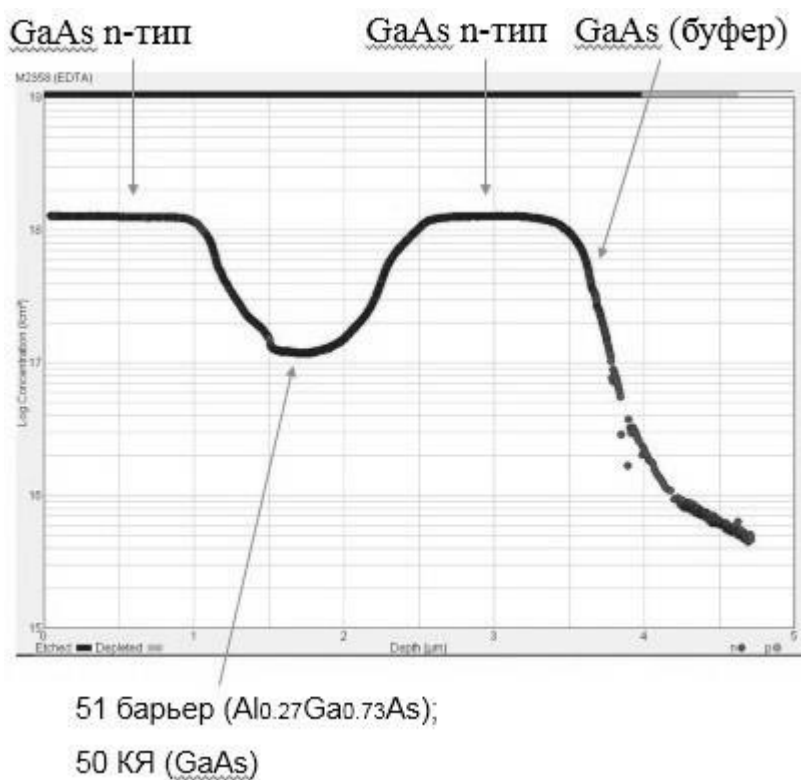


Рис. 2. Профиль концентрации носителей заряда в гетероструктуре AlGaAs/GaAs n-типа (электролит – ЭДТА).

### Литература

1. Филачев А.М. Твердотельная фотоэлектроника. Фотодиоды. М.: Физматкнига, 2011. 448 с.
2. Schneider H., Liu C. H. Quantum well infrared photodetectors. Springer, 2007. 248 p.
3. Kaniewska M., Slomka I. C-V profiling of GaAs using electrolyte barriers // Crystal Research&Tech.

2001. V. 36. N, 8—10. P. 1113.

4. Вакив Н.М., Завербный И.Р., Заячук Д.М., Круковский С.И., Мрыхин И.О. Установка электрохимического профилирования для диагностирования эпитаксиальных структур GaAs // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2005. № 3. С. 40—45.

УДК 621.384.3/5

## Исследование пространственного распределения состава КРТ фоточувствительных элементов в матрицах ИК-диапазона

*Р.В. Давлетшин<sup>1,2</sup>, А.В. Никонов<sup>1,2</sup>, П.С. Лазарев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>АО «НПО «Орион»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Перед разработчиками современных фотоприемных устройств ИК-диапазона остро стоит задача контроля как параметров матричных фотоприемных устройств, так и характеристик гетероэпитаксиальных структур (ГЭС), на основе которых изготавливаются такие устройства [1]. Одним из ключевых параметров фоточувствительных элементов (ФЧЭ) на основе тройных соединений кадмий—ртуть—теллур (КРТ), влияющим на выходные оптические характеристики матриц ФЧЭ, является состав рабочего фоточувствительного слоя КРТ [2]. В данной работе проведено исследование распределения состава КРТ фоточувствительных элементов по площади матриц ФЧЭ, чувствительных в ИК-диапазоне спектра. Разработана расчетная модель, позволяющая вычислить состав фоточувствительного слоя из спектральной характеристики ФЧЭ.

Наиболее распространенной методикой исследования спектральных характеристик фотоприемных устройств является фурье-спектрометрия [3]. Данный комплекс методик основан на применении явления интерференции, что обуславливает высокую точность определения волновых чисел, высокое разрешение и почти полное отсутствие рассеянного света. Математическое определение фурье-преобразования требует наличие бесконечных пределов интегрирования для функции интенсивности, однако в реальных экспериментах эта функция имеет конечные пределы из-за технических ограничений измерительной аппаратуры. При исследовании применялась модель дискретного Фурье-преобразования. Кроме того, для интерферометра Майкельсона характерно аппаратное уширение узких спектральных линий. В связи с некогерентностью лазера, неточности юстировки и других погрешностей, возникают трудности с разрешением спектральных линий согласно критерию Релея. Облегчить решение задачи нахождения спектра и избавиться от таких ограничений помогает метод аподизации с использованием оконных функций. Проведенное сравнение оконных функций различных типов (прямоугольное окно, окно Хэмминга, окно Барлетта—Ханна, окно Блэкмана) показало оптимальную оконную функцию для исследований спектральных характеристик МФЧЭ. При проведении измерений спектральных характеристик чувствительности с низкими значениями отношения сигнал (шум) по матрице фоточувствительных элементов применялись методики подавления шумов. Проведено сравнение методик фильтрации шума: исследовалось влияние на спектральную характеристику чувствительности метода скользящего среднего и его вариаций, интерполяции сплайнами, кривых Безье, фильтрации Савицкого—Голея. Установлено, что метод Савицкого—Голея является наиболее оптимальной методикой фильтрации спектральных характеристик чувствительности, не нарушающей диапазон чувствительности и устраняющей влияние шума благодаря возможности подстройки порядка полинома и ширины окна сглаживания [4].

Ключевым объектом интереса в ходе измерений являлись значения границ чувствительности по уровню 0,5 и максимума чувствительности для фоточувствительных элементов исследуемых матриц. Объектом исследований являлись линейки и матрицы фоточувствительных элементов на основе тройных растворов кадмий—ртуть—теллур (КРТ) различных форматов (4 × 288, 6 × 576, 10 × 1024, 320 × 256, 640 × 512 элементов),

чувствительных в ИК-диапазоне. По результатам измерения спектральных характеристик чувствительности для каждого элемента матрицы вычислялось значение ширины запрещенной зоны, связанное с длинноволновой границей чувствительности:

$$\lambda_c = \frac{hc}{E_g} = 1,24 \frac{1}{E_g}$$

В свою очередь ширина запрещенной зоны КРТ связана с температурой измерений и составом  $x$  фоточувствительного материала  $Cd_xHg_{1-x}Te$  эмпирическим соотношением Хансена [5]:

$$E_g = -0,302 + 1,93x + (1 - 2x)5,35 \times 10^{-4}T - 0,810x^2 + 0,832x^3$$

Таким образом, путем измерения спектральной характеристики чувствительности и последующего вычисления состава КРТ каждого фоточувствительного элемента можно судить об однородности состава по площади матрицы и, как следствие, о характеристиках чувствительности матричного фотоприемного устройства в целом.

В качестве примера в данной работе приводятся результаты исследования для образца фоточувствительной линейки формата  $6 \times 576$  спектрального диапазона 8-12 мкм. Из-за особенностей конструкции измерялись интерферограммы каждого четвертого ФЧЭ на линейке с последующими фурье-преобразованием и обработкой спектральной характеристики чувствительности. Зависимость значений границ и максимума чувствительности от порядкового номера фоточувствительного элемента показана на рис.1.

Полученное распределение длинноволновой границы чувствительности свидетельствует о наличии неоднородности состава КРТ по площади матрицы фоточувствительных элементов. Распределение коротковолновой границы зависит от особенностей конструкции МФПУ и спектральных характеристик (коэффициенты пропускания и поглощения) оптического фильтра. Для всех ФЧЭ в линейке построено пространственное распределение длинноволновой границы чувствительности, из которого можно сделать заключение об однородности значений чувствительности по элементам матрицы, а также о качестве матрицы в целом. Разработанная методика позволяет рассчитывать состав КРТ фоточувствительных элементов с повышенной точностью и проводить отбраковку матриц по диапазону чувствительности в экспресс-режиме.

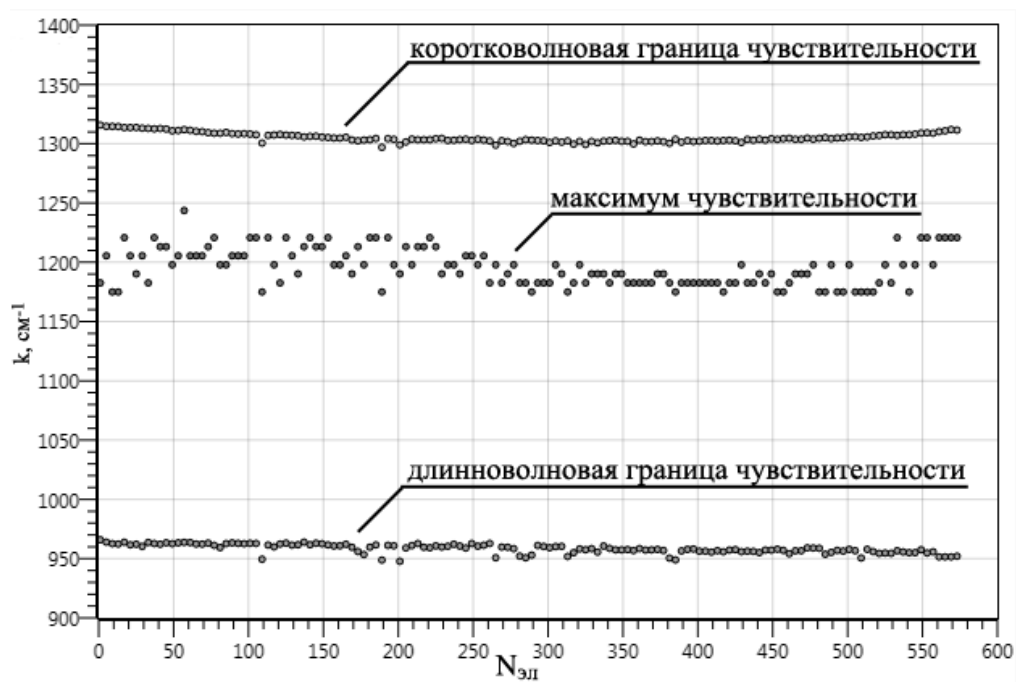


Рис. 1. Распределение границ и максимума чувствительности ВЗН канала линейки формата  $6 \times 576$

### Литература

1. Burlakov I.D., Dirochka A.I., Korneeva M.D., Ponomarenko V.P., Filachev A.M. Solid state photoelectronics: the current state and new prospects // J. of Comm. Tech. and El. 2016. V. 61. I. 10. P. 1166.
2. Stafeev V.I., Boltar K.O., Burlakov I.D. [et al.]. Mid- and far-IR focal plane arrays based on HgCdTe photodiodes // Semiconductors. 2005. V. 39. I. 10. P. 1215.
3. Белл Р. Дж. Введение в фурье-спектроскопию. М.: Мир, 1975. 382 с.
4. Никонов А.В., Яковлева Н.И., Давлетшин Р.В., Егоров А.В. Исследование методик фильтрации спектральных характеристик чувствительности матричных фотоприемных устройств // Прикладная физика. 2017. N 2. С. 25.
5. Рогальский А. Инфракрасные детекторы / под ред. А.В. Войцеховского. Нск: Наука, 2003. 636 с.

УДК 621.383

### Численные методы расчета сигналов крупноформатных фотоприемных устройств

**В.А. Стрельцов**

АО «НПО «Орион»

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В большинстве случаев электронно-оптический тракт матричного фотоприемного устройства (МФПУ), работающего в режиме сканирования, можно считать линейным. В рамках теории линейных систем выходные сигналы рассчитываются с помощью операции свертки входного сигнала и импульсных характеристик отдельных звеньев системы. В линейном приближении оптико-электронные системы (ОЭС) рассматривают в виде набора линейных подсистем с известными импульсными характеристиками, в том числе: объектив, устройство сканирования, устройства, осуществляющие фотопреобразование, аналоговую и цифровую фильтрацию.

В работе представлены аналитические выражения для расчета сигналов на выходе ОЭС, рассмотрены различные методы численного расчета сигналов на ЭВМ, в том числе

наивный метод и метод Фурье. Реализация данных методов на CPU и на GPU позволила определить их ограничения, произвести сравнительный анализ скорости и погрешности вычислений.

Разработанные средства существенно повысили производительность моделирования выходных сигналов и расчета характеристик ОЭС, что позволило осуществлять обработку последовательностей изображений формата не менее  $20\,000 \times 20\,000$  каждое. Полученный инструмент в составе комплексной математической модели будет использован при разработке алгоритмов цифровой обработки сигналов ОЭС, при оптимизации фотоэлектрических характеристик ОЭС.

### Литература

1. Козлов К.В., Патрашин А.И., Стрельцов В.А., Математическая модель крупноформатного инфракрасного фотоприемного устройства при временной задержке и накоплении // Успехи прикладной физики. 2017. Т.5. N 2. С. 155-173.

УДК 621.384.3/5

### Разработка усовершенствованного метода и математического обеспечения измерения квантовой эффективности и темнового тока фоточувствительных элементов ИК МФПУ

*В.С. Ковшов<sup>1,2</sup>, А.И. Патрашин<sup>1</sup>, А.В. Никонов<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>АО «НПО «Орион»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

В результате разработки и изготовления инфракрасных матричных фотоприемных устройств (ИК МФПУ) возникает необходимость оценки однородности таких параметров ФЧЭ по площади матрицы, как темновой ток и квантовая эффективность [1]. Однородность этих параметров может являться критерием уровня технологии изготовления полупроводниковых структур для матриц, изготовления самих матриц и изготовления МФПУ. Для качественного МФПУ необходима однородность измеряемых параметров по всем ФЧЭ не хуже 5–10 % [2]. Кроме того, необходимо учитывать, что величины темновых токов ФЧЭ не должны превышать некоторое граничное значение, соответствующее используемому в ФЧЭ полупроводниковому соединению. Аналогичные требования предъявляются к квантовой эффективности ФЧЭ. В целом дефектность ФЧЭ определяется техническими требованиями к конкретному фотоприемному устройству. В рамках данного исследования решена общая задача расчета квантовой эффективности и темнового тока ФЧЭ, разработано программное обеспечение для расчета квантовой эффективности и темнового тока по всем элементам фоточувствительной матрицы.

При работе ИК МФПУ в реальных условиях регистрируется полный сигнал, включающий сумму фотосигнала  $U_\phi$ , прямо пропорционального величине квантовой эффективности, темнового сигнала  $U_T$ , обусловленного эффективным темновым током ФЧЭ, и постоянного сигнала, характеризующего начальный уровень отсчета выходного сигнала, определяемый лишь рабочими параметрами выходного каскада мультиплексора. Фотосигнал  $U_\phi$  включает, как упоминалось выше, кроме фоновой компоненты, также компоненты от излучения входного окна, холодного светофильтра и холодного экрана. Эти компоненты можно считать малыми по сравнению с фоновой.

Тогда величины темнового сигнала и фотосигнала ФЧЭ будут определяться следующими выражениями:

$$U_{Tij} = \frac{I_{Tij} \cdot \tau_0}{C_n}, \quad U_{\phi ij} = \frac{I_{\phi ij} \cdot \tau_0}{C_n},$$



где  $I_T$  – эффективный темновой ток ФЧЭ,  $\tau_0$  – время накопления,  $I_\phi$  – фототок, генерированный излучением, падающим на ФЧЭ,  $C_n$  – накопительная емкость в ячейке мультиплексора,  $i$  и  $j$  – индексы, указывающие на расположение ФЧЭ в матрице. Разработана расчетная модель, позволяющая рассчитывать значения квантовой эффективности и темнового тока из зарегистрированных значений темнового сигнала и фотосигнала, измеренных при различных температурах измерения и временах накопления.

Разработанный метод измерения квантовой эффективности и темновых токов обеспечивает снижение трудоемкости измерения фотоэлектрических характеристик МФПУ. Метод является автоматизированным и позволяет проводить измерения без ущерба для матриц фоточувствительных элементов за достаточно короткий промежуток времени. Метод является значительно более эффективным по сравнению с прямыми методами измерения, например зондовыми, в силу их огромной трудоемкости и угрозы повреждения ФЧЭ.

### Литература

1. Патрашин А.И. [и др.]. Метод расчета квантовой эффективности и темнового тока в матричных ФПУ // Прикладная физика. 2013. N. 6. С. 5.
2. Патрашин А.И. Метод расчета параметров ИК матричного фотоприемного устройства // Прикладная физика. 2010. N. 2. С. 103.

УДК 621.3.049.77

### Стабилизированный источник опорного тока для глубоководных интегральных схем

Ю.А. Якимов<sup>1,2</sup>, И.С. Моцев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>АО «НПО «Орион»

<sup>2</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Стабильный источник тока или напряжения является важным блоком аналоговой части схемы. Источник опорного тока выполняет функцию генератора стабильного тока, слабо чувствительного или почти не чувствительного к колебаниям напряжения питания, температуры и к разбросу параметров элементов [1].

Принцип работы независимого от температуры источника тока заключается в сложении тока, пропорционального абсолютной температуре ( $I_{TAT}$ ) и тока, противоположного абсолютной температуре ( $I_{STAT}$ ), так чтобы результирующий опорный ток слабо зависел от температуры. На рис. 1 показана разработанная электрическая схема такого источника тока. Для простоты не обозначена подсхема старта, наличие которой в данной реализации обязательно.

Генераторы тока построены на основе схемы источника опорного напряжения, равного ширине запрещенной зоны (bandgap reference), и источника тока с постоянной крутизной (beta multiplier) с использованием интегральных резисторов и диодов для генерации  $I_{TAT}$  и  $I_{STAT}$ . Используемые решения обеспечивают слабую зависимость работы источника от напряжения питания и разброса параметров транзисторов, что, например, может быть важно для улучшения радиационной стойкости и снижения влияния разброса параметров транзисторов на опорный ток.

Источник тока должен работать стабильно в широком температурном диапазоне от  $-200$  °С до  $+60$  °С, поэтому для разработки необходимо иметь соответствующие температурные зависимости элементов. В предложенной схеме токи  $I_{TAT}$  и  $I_{STAT}$  определяются резисторами и диодами и в меньшей степени зависят от транзисторов. Температурные коэффициенты резисторов и диодов в области ниже  $-60$  °С определялись с

помощью моделирования в системе TCAD технологии изготовления приборов и их электрических характеристик.

Для генерации тока  $I_{\text{СТАТ}}$  в данной схеме необходимо использование большого сопротивления; в таком случае обычно применяются резисторы на основе p-кармана, которые занимают малую площадь. Но как показало моделирование в TCAD, они меняют знак температурного коэффициента при температуре ниже  $-100$  °C. Также ниже температуры вымораживания примеси значительно увеличивается удельное сопротивление. Для гарантии работы источника  $I_{\text{СТАТ}}$  в широком диапазоне в схеме задействованы резисторы на основе  $n^+$ -области. Они имеют положительный температурный коэффициент на очень широком интервале температур и имеют меньший технологический разброс.

На рис.2 показаны зависимости опорного тока от температуры и напряжения питания. Источник тока разработан по технологии  $0,34$  мкм. Опорный ток составляет  $16$  мкА. Диапазон напряжений питания для гарантированной стабилизации тока  $2,5$ – $4,5$  В при номинальном напряжении равном  $3,3$ В. Время включения составляет не более  $2$  мкс. Средний температурный коэффициент тока  $10$  нА/°C. Потребляемая мощность составляет  $200$ – $460$  мкВт в зависимости от температуры и напряжения питания. Использование транзистора в диодном включении позволяет с помощью схемы токового зеркала отражать ток в любую другую схему. Напряжение на выходе в диапазоне  $77$ – $330$  К составляет  $0,75$ – $0,95$  В, что находится примерно в точке нулевого температурного коэффициента тока транзистора.

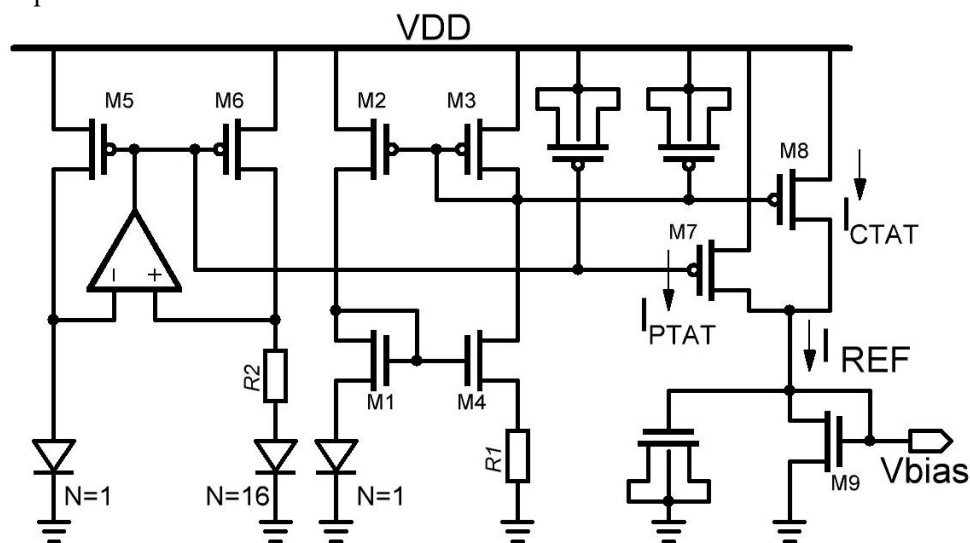


Рис. 1 Схема источника опорного тока

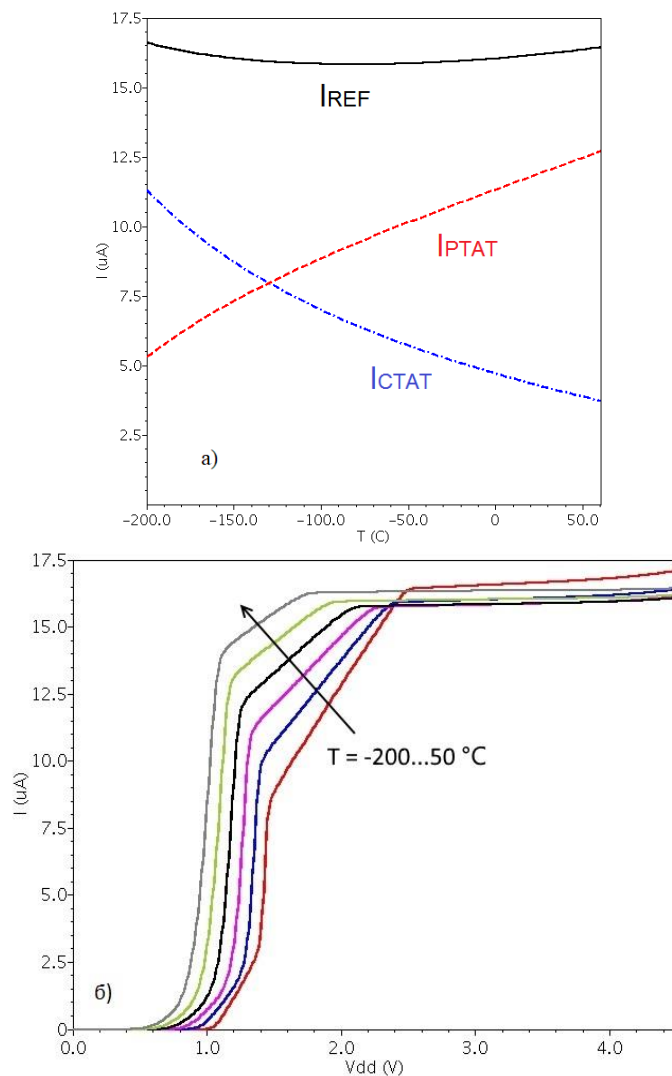


Рис 2. а) температурные зависимости опорного тока  $I_{REF}$  и токов  $I_{PTAT}$  и  $I_{STAT}$  в интервале от 77 до 330 К при напряжении 3,3 В; б) Зависимость опорного тока  $I_{REF}$ , от напряжения питания

### Литература

1. *Baker R.J.* CMOS Circuit Design, Layout, and Simulation (3rd edition). USA: Wiley–IEEE Press, 2010. 1208 p.

УДК 621.3.089.5

### Установка контроля пятна рассеяния ИК-объективов на основе матричного фотоприемного устройства

*А.Д. Юдовская, А.В. Полеский*

АО «НПО «Орион»

В настоящее время в связи со стремительным развитием ИК-техники уделяется большое внимание созданию методов и средств оценки качества ее составных частей. Одним из наиболее информативных методов оценки качества объективов является прямой контроль пятна рассеяния. Для обеспечения этих измерений впервые предложена установка для контроля объективов ИК-диапазона на основе матричного фотоприемного устройства (МФПУ), структурная схема которой представлена на рис. 1.

Преимуществами данной установки является возможность быстрого и точного контроля функции рассеяния точки (ФРТ), а также возможность измерения полихроматических аберраций. Проанализирован метод измерений с выделением метрологически важных требований, предъявляемых к основным узлам установки.

Математическое моделирование работы установки позволило сформулировать требования к основным узлам установки: тест-объекту (диафрагмы), коллиматору, испытываемому ИК-объективу, проекционной системе и МФПУ с системой регистрации и обработки. Показано, что увеличение проекционной системы должно быть подобрано таким образом, чтобы центральная часть пятна рассеяния исследуемого объектива (кружок Эйри) умещалась в 8–10 пикселях МФПУ. При этом качество проекционной системы – дифракционное. Рекомендуемое соотношение ширины пятна рассеяния ИК-объектива и диафрагмы (тест-объекта) 6:1 (должно обеспечиваться соотношением фокусных расстояний объектива и коллиматора, а также размером диафрагмы). Динамический диапазон МФПУ с системой регистрации изображения должен быть не менее 80 дБ (14 бит).

Стоит отметить, что основной ошибкой измерения функции концентрации энергии в пятне является ошибка измерения полной энергии пятна рассеяния. Данную проблему можно решить путём расширения динамического диапазона измерительного тракта до 80 дБ (14 бит для оцифровки полезного сигнала), например, путём обработки серии кадров с разным временем накопления [1].

В ходе экспериментальной отработки подтверждены теоретические расчеты в части определения оптимального динамического диапазона МФПУ с системой регистрации.

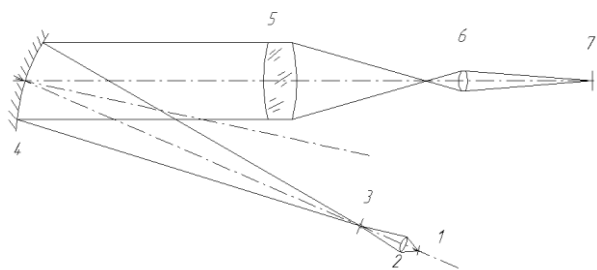


Рис. 1. Структурная схема установки:

- 1 – источник инфракрасного излучения (АЧТ или глобар), 2 – конденсор,  
3 – точечная диафрагма, 4 – зеркальный коллиматор, 5 – контролируемый объектив,  
6 – микрообъектив, 7 – МФПУ

### Литература

1. Richards A., Cromwell B. Superframing: Scene Dynamic Range Extension of Infrared Cameras. // Proc. SPIE 5612, Electro-Optical and Infrared Systems: Technology and Applications, 199 (Dec. 6, 2004). Doi: 10.1117/12.578376.

УДК 51-74, 53.088.3

### Исследование точности определения параметров спектральной характеристики ИК и УФ ФПУ

*А.В. Полесский, Н.А. Соломонова, Н.А. Семенченко*

АО «НПО «Орион»

Относительная спектральная характеристика (ОСХ) является важным параметром фотоприемников (ФП) и фотоприемных устройств (ФПУ). На практике при измерении ФПУ используется не сама ОСХ, а параметры, которые получаются при ее обработке: коэффициент использования излучения источником приемным устройством, граничные

длины волн по уровню сигнала 0,1 (или 0,5) и длина волны, соответствующая максимуму чувствительности. При этом вопрос ошибки измерения этих параметров в литературе слабо освещен, а за ошибку измерения принималась точность измерения ОСХ, которая представляет собой величину смещения каждой точки графика спектральной чувствительности по четырем направлениям: вверх, вниз, влево, вправо.

Целью данной работы являлось определение точности измерения основных параметров ОСХ, используемых на практике, путем моделирования процесса измерения ОСХ и ее последующей обработки. Особое внимание было уделено коэффициенту использования, который применяется в расчетах основных фотоэлектрических параметров ФП и ФПУ (вольтовая чувствительность, удельная способность обнаружения, пороговый поток).

В результате проведенных исследований был сделан вывод о том, что для увеличения точности измерений коэффициента использования необходимо согласовывать диапазоны спектральной чувствительности источника излучения и измеряемого ФПУ. В большинстве случаев измерения следует проводить при ОСШ не менее 100 в максимуме спектральной характеристики. Дальнейшее увеличение ОСШ не приводит к существенному увеличению точности. Ошибка определения коэффициента использования при соблюдении выше описанных условий составляет не более 10%. Ошибка измерения граничных длин волн составляет примерно 2%. Ошибка определения длины волны соответствующей максимуму чувствительности составляет 3% при явно выраженном максимуме и при невыраженном – 30%.

### Литература

1. Деомидов А.Д., Полесский А.В., Семенченко Н.А., Соломонова Н.А., Тресак В.К. // Успехи прикладной физики. 2016. Т. 4, № 5. С. 485.
2. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: физматлит, 1975. 2-е издание.

УДК 621.384.3/5

### Фотолюминесценция гетероэпитаксиальных структур с квантовыми ямами на основе AlGaAs/GaAs

*М.Р. Юскаев, В.Е. Гончаров, Д.А. Пашикев, А.В. Никонов*

<sup>1</sup>НАО «НПО «Орион»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Повсеместное использование перспективных полупроводниковых материалов в технологии разработки современных фотоприемных устройств предполагает тщательное исследование физических свойств как самих материалов, так и сложных полупроводниковых соединений на их основе [1]. Фотоприемные устройства на основе гетероструктур АЗВ5 с квантовыми ямами (QWIP-структуры) обладают рядом преимуществ по сравнению с ФПУ на основе традиционных узкозонных полупроводников, в том числе устойчивостью к воздействию температурных изменений и ионизирующему излучению. Данная работа посвящена исследованию оптических характеристик твердых растворов AlGaAs и отработке методики контроля качества фоточувствительных элементов на основе гетеропары GaAs/AlGaAs посредством анализа спектров фотолюминесценции.

Исследуемые гетероэпитаксиальные структуры с квантовыми ямами на основе AlGaAs/GaAs представляют собой полупроводниковые пластины, содержащие область стравленного контактного слоя GaAs глубиной порядка 2,2 мкм. Травление слоя обусловлено его шириной и сильным легированием, из-за чего глубина проникновения возбуждающего излучения не превышала ширины этого слоя (1 мкм), таким образом, стравленный верхний слой обеспечивал возбуждение фотолюминесценции в QWIP-

структуре. На изображении, полученном с помощью электронного микроскопа (рис. 1) отчетливо видна слоистая структура образца, слои AlGaAs толщиной 45 нм перемежаются с барьерами GaAs толщиной 5 нм.

При измерении спектров фотолюминесценции образец подвергался возбуждающему излучению Nd: YAG-лазера с режимом модуляции добротности (Q-switch) с длиной волны излучения 0,266 мкм. Длительность и мощность импульса составляли 6 нс и 1,005 мВт. Интенсивность возбуждающего излучения регулировалась с помощью ослабляющих фильтров. Диаметр точки, в которую фокусировалось возбуждающее излучение на поверхности образца, составлял порядка 100 мкм.

В ходе исследования проведено измерение спектров фотолюминесценции наноразмерных гетероструктур при различных температурах (300К и 7К). При температуре 7К наблюдается четкий спектр фотолюминесценции, показанный на рис. 2. Сдвиг пика фотолюминесценции на энергию 1,6 эВ объясняется увеличением ширины запрещенной зоны из-за понижения температуры. Наблюдаемое раздвоение пика излучения свидетельствует о том, что в системе присутствует квантовая яма с составом, незначительно отличающимся от состава арсенида алюминия-галлия в других ямах. Также на спектре отмечены вклады фонного повторения и пик экситонной фотолюминесценции GaAs.

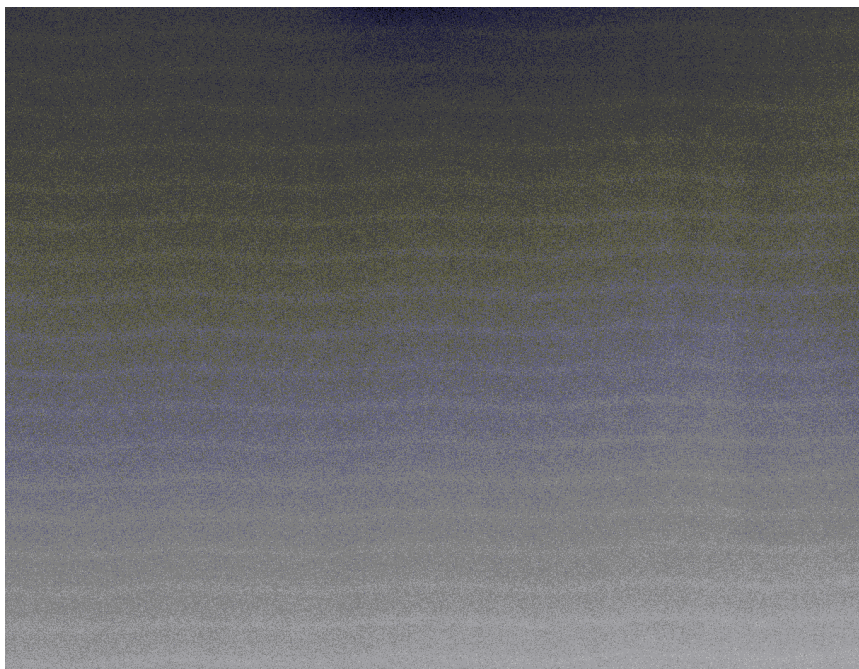


Рис. 1. Изображение гетеро структуры с квантовыми ямами AlGaAs/GaAs, полученное с помощью электронного микроскопа



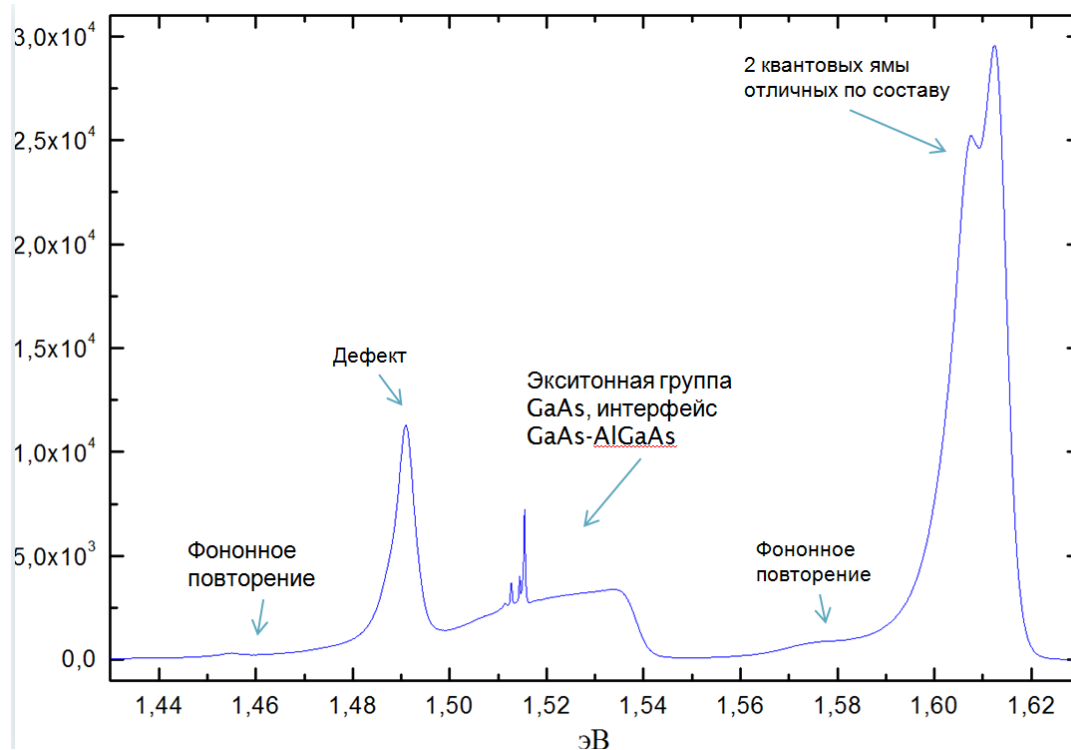


Рис. 2. Спектр фотолюминесценции образца при температуре 7К

### Литература

1. Бурлаков И.Д. [и др.]. Твердотельная фотоэлектроника. Современное состояние и прогноз развития (обзор к 50-летию факультета физической и квантовой электроники Московского физико-технического института (ГУ)) // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2, № 5. С. 509.

УДК 621.384.3/5

### Методы оптической профилометрии в части технологического контроля фоточувствительных материалов для инфракрасных фотоприемных устройств

*А.К. Ильясов, В.Е. Гончаров*

АО «НПО «Орион»

Фотоприемные устройства (ФПУ), работающие в инфракрасном диапазоне, создаются в основном эпитаксиальным нанесением тонких слоев на специально подготовленную подложку высокого качества «epi-ready» [1, 2]. Своевременные исследования морфологии подложек перед эпитаксией, а также выращенных эпитаксией структур позволяют повысить производительность труда при изготовлении ФПУ и качество изготавливаемых изделий. Благодаря прецизионным методам исследований можно понять причину возникновения дефектов, дать рекомендации по изменению режимов выращивания и проведению дополнительной обработки поверхности подложки перед выращиванием.

В рамках данной работы достаточно подробно изучены конфокальный и интерферометрический методы оптической профилометрии. В конфокальном режиме работы топографическое 3D-изображение строится следующим образом. Сначала снимается набор «оптических срезов» (изображений, снятых при разных положениях объектива по оси Z), затем для каждого пикселя анализируются зависимости интенсивности света от положения объектива по оси Z. Затем восстанавливается объемное

изображение из расчета, что пик интенсивности соответствует положению оптимального фокуса для данной точки поверхности. В интерферометрическом методе принцип построения изображения заключается в следующем: снимаются несколько интерферограмм с фазами  $0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$ , чтобы рассчитать высоту поверхности в каждой точке детектирования. В течение измерения интерференционный сигнал варьируется путем изменения оптической разности хода между объектным и опорным лучом. Изучаемая поверхность может быть измерена только тогда, когда интерферометрические полосы будут видны. Измеряемый диапазон высот изучаемой поверхности всегда должен находиться внутри глубины резкости объектива.

Накоплен обширный объем экспериментальных данных, полученных на профилометре Sensofar P $\mu$  Neox, в котором как раз реализованы конфокальный и интерферометрический методы, описанные в работе. Анализ имеющихся теоретических и экспериментальных данных позволил сформулировать рекомендации по оптимальному с нашей точки зрения применению различных методов для различных задач технологического контроля фоточувствительных материалов (табл. 1)

Таблица 1.

Исследуемый параметр объекта	Описание и сравнение	Рекомендуемый метод
Шероховатость полупроводниковых пластин для ФП	Конфокальный метод позволяет получить представление о морфологии и шероховатости пластины. Если измеренная шероховатость оказалась небольшой (<100 нм), то можно при необходимости уточнить полученный результат интерферометрическим методом.	Конфокальный метод
Шероховатость подложек «epi-ready» для МЛЭ	Интерферометрический метод обладает наиболее высокой точностью измерений в случае исследования подобных гладких поверхностей.	Интерферометрический метод
Неплоскостность полупроводниковых пластин для ФП	Конфокальный метод позволяет получить профиль поверхности пластины в краткие сроки с достаточным разрешением. Интерферометрический метод не рекомендуется как более длительный, и при сильном перепаде рельефа контрастность сильно снижается (вплоть до 0).	Конфокальный метод
Рельеф (и дефекты) полупроводниковых пластин для ФП ( $\Delta Z < 100$ нм)	Интерферометрический метод позволяет получить точные данные при измерении такого рельефа. При использовании конфокального режима, особенно для высот порядка десятков нм, вносится значительная погрешность в процессе измерений.	Интерферометрический метод

Рельеф (и дефекты) полупроводниковых пластин для ФП ( $\Delta Z \gg 100$ нм)	Конфокальный метод позволяет исследовать подобные объекты с хорошим разрешением при большом увеличении. Интерферометрический метод не позволяет разрешить такие перепады высот в силу того, что возникают неоднозначности при расшифровке интерферограмм, приводя к ошибкам при реконструкции изображения.	Конфокальный метод
--	---	--------------------

Таблица 1.

### Литература

1. Zhang T., Clowes S. K., Debnath M., [et al.]. High mobility thin InSb films grown by molecular beam epitaxy // Appl. Phys. Lett. 2004. I. 84. P. 4463.
2. Johnson Andrew D. InSb/In<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>Sb focal plane detector arrays grown by MBE // Proc. SPIE. 1999. V. 3629. P. 288.

УДК 621.384.3/5

### Выращивание эпитаксиальных слоев GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии для фотоприемных устройств на основе квантовых ям

*А.Л. Зыбинская, Д.А. Пашкеев, А.Д. Шабрин*

АО «НПО «Орион»

Одним из интересных диапазонов инфракрасной области является диапазон волн, лежащих в пределах от 8 до 14 мкм, что представляет собой одно из окон прозрачности атмосферы. Самыми распространёнными приёмниками для данного диапазона спектра являются полупроводниковые фотоприёмники [1]. Наиболее популярным материалом для создания таких приемников является прямозонный полупроводник Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te, обладающий в рассматриваемом спектральном диапазоне наилучшими теоретическими характеристиками. Однако практическая реализация теоретических возможностей является трудоемким и дорогостоящим технологическим процессом [2]. Связано это, в первую очередь, с невысокой технологичностью данного материала.

В связи с этим предпринимаются попытки поиска новых материалов для создания на их основе фотоприемных элементов, отвечающих современным требованиям [3]. Одним из распространенных материалов для создания фотоприемников на основе квантовых ям является гетеропара GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As вследствие почти идеального согласования параметров решетки этих материалов и структурного совершенства всей совокупности слоев [4]. Такие приемники обладают рядом преимуществ. Во-первых, потенциальные барьеры препятствуют протеканию сквозного темнового тока и позволяют варьировать концентрацию легирующей примеси в широких пределах. Во-вторых, простое изменение геометрии квантоворазмерных слоев позволяет изменять спектральные и электрофизические характеристики фотоприемника в широких пределах [5]. В-третьих, технология материалов группы A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> достаточно хорошо отработана, что позволяет производить фотоприемники с более низкой стоимостью рабочих элементов.

Фоточувствительные структуры с квантовыми ямами выращиваются эпитаксиальными методами. Самым распространенным методом является метод молекулярно-лучевой эпитаксии. Он позволяет получать наиболее чистые и кристаллически совершенные структуры на основе гетеропары GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Изучение процессов, происходящих при эпитаксиальном выращивании материалов на основе твердого раствора AlGaAs, является важной задачей. Именно поэтому целью данной

работы было определение оптимальных условий выращивания эпитаксиальных слоёв бинарного соединения GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

В ходе выполнения работы были освоены теоретические основы и получены практические навыки по контролю состава остаточных газов, исследование кристаллического совершенства подложек и растущих слоев, а также по определению вида реконструкции поверхности в процессе эпитаксии методом дифракции быстрых электронов. Численно определен оптимальный состав остаточных газов внутри ростовой камеры установки МЛЭ. Также показано, что при давлении остаточных газов, равном  $10^{-5}$  Торр, время осаждения монослоя из молекул остаточных газов составляет 1 с, а при уменьшении давления до  $10^{-11}$  Торр время осаждения увеличивается до  $10^4$  с, при этом длина свободного пробега молекул распыляемых материалов увеличивается на 5 порядков.

Принято участие в подготовке установки МЛЭ к выращиванию эпитаксиальных слоев, а также в выращивании эпитаксиального слоя GaAs на подложке GaAs (100). Рост проводился при температурах, близких к  $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ , и соотношениях потоков Ga/As, соответствующих реконструкции  $(2\times 4)$ , что подтвердилось посредством дифракции быстрых электронов. В дальнейшем для более детального понимания процесса МЛЭ слоев GaAs необходимо проведение исследований возникающих в процессе роста видов реконструкций поверхности и их зависимости от соотношений молекулярных потоков и температуры подложки.

На рис. 1 представлены результаты, полученные в процессе эпитаксии методом дифракции быстрых электронов. В процессе роста были подобраны такие условия, что рост шел с реконструкцией  $(2\times 4)$ .

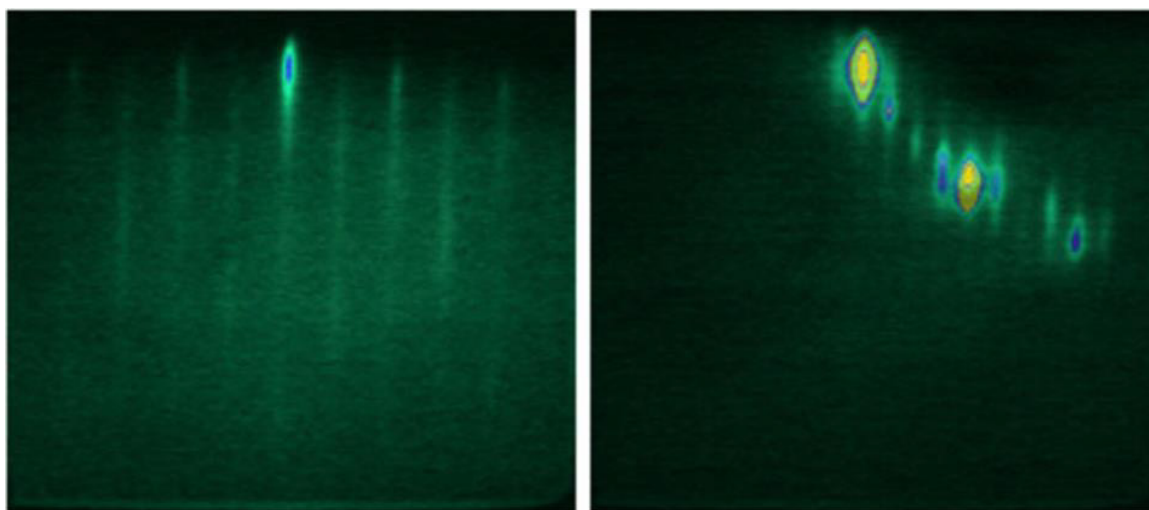


Рис. 1. ДБЭ в процессе выращивания GaAs

### Литература

1. Rogalski A. Infrared detectors. London: CRC Press, 2011. 876 p.
2. Capper P., Garland J. Mercury Cadmium Telluride Growth, Properties and Applications. Oxford: Wiley-Blackwell, 2011. 556 p.
3. Бурлаков И. Д., Дирочка А. И., Корнеева М. Д., Пономаренко В. П., Филачев А. М. Твердотельная фотоэлектроника. Современное состояние и прогноз развития // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 5. С. 509.
4. Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. P. 5815.
5. Розеншер Э М., Винтер А.Б. Оптоэлектроника. М.: Наука, 2004. 590 С.

## Исследование фотоэлектрических характеристик МФПУ ультрафиолетового диапазона спектра

*П.И. Мольков, Д.Л. Балиев*

АО «НПО «Орион»

Использование ультрафиолетовых матричных фотоэлектронных модулей на основе р-і-n фотодиодов, изготовленных в структурах AlGaN, перспективно для решения ряда важных задач военного и гражданского назначения, таких как пеленгация ракет для предупреждения опасности ракетного нападения, обнаружение компонентов биологического и химического оружия, обнаружение очагов радиоактивного заражения, экологический мониторинг атмосферы, контроль горения в реактивных двигателях, мониторинг возгораний и пожаров, УФ-астрономия и медицина, неразрушающий контроль деталей машин и механизмов и многое другое [1].

Для ближней УФ-области спектра предпочтительным является условие, когда ширина запрещенной зоны фоточувствительного полупроводникового материала составляет более 3,2–6,2 эВ, как это наблюдается в тройных соединениях AlGaN. Для создания современных матричных ФПУ ближней УФ-области спектра в настоящий момент наиболее перспективным направлением развития считается применение широкозонных полупроводников группы нитридов, таких как AlN, GaN [2]. Материал AlGaN обеспечивает чувствительность УФ ФПУ в трех основных ультрафиолетовых спектральных областях. Приборы, основанные на нитридных соединениях, привлекательны благодаря высоким напряжениям пробоя и высоким скоростям носителей заряда, что способствует быстрому преобразованию оптического сигнала в электрический.

В качестве структур фоточувствительных элементов для ФПУ на основе твердых растворов AlGaAs были разработаны р-і-n-структуры [3], которые позволяют реализовывать наибольшие значения обнаружительной способности и вольтовой чувствительности. Для считывания сигнала с матриц ФЧЭ на основе AlGaN использовалась кремниевая БИС считывания с входной ячейкой, выполненной на основе емкостного трансимпедансного усилителя (СТИА). Применение данного типа входной ячейки обусловлено низкими темновыми токами и низким уровнем шума р-і-n-фотодиодов из AlGaN [4].

Проведены исследования зависимости соотношения сигнал/шум в матричном фотоприемном устройстве видимого-слепого диапазона спектра производства АО «НПО «Орион» от времени накопления (рис. 1) и напряжения смещения. Измерения показали, что среднее значение шума фотодиодов постоянно при изменении времени накопления в пределах от 1 до 30 мс и при изменении напряжения смещения в пределах от 2,8 до 8,1 В (без учета падения на транзисторах БИС). Сделан вывод о преобладании шума БИС считывания над шумами фоточувствительных элементов. Построенная зависимость сигнал/шум от времени накопления в диапазоне от 1 до 30 мс показала, что для достижения наибольшего соотношения сигнал/шум необходимо работать при максимально возможном времени накопления.

Для снятия вольт-амперных характеристик был использован метод аддитивного измерения тока [5]. Из измеренной вольт-амперной характеристики можно сделать вывод, что характерный темновой ток составил  $4 \cdot 10^{-15}$  А. При этом измеренный темновой ток фотодиода после стыковки с БИС считывания ниже, чем ток, измеренный на пластинах исходного материала (порядка  $1 \cdot 10^{-13}$  А). Данное расхождение предположительно связано с пределами возможностей измерения ВАХ на пластинах.

Построенные зависимости соотношений сигнал/шум и количества неработоспособных элементов от напряжения смещения фотодиодов показали, что наилучшее сигнал/шум достигается при максимальном напряжении смещения, однако и количество дефектных (по соотношению сигнал/шум) фотодиодов возрастает. Таким

образом, напряжение смещения должно подбираться исходя из требований по дефектности в решаемых задачах.

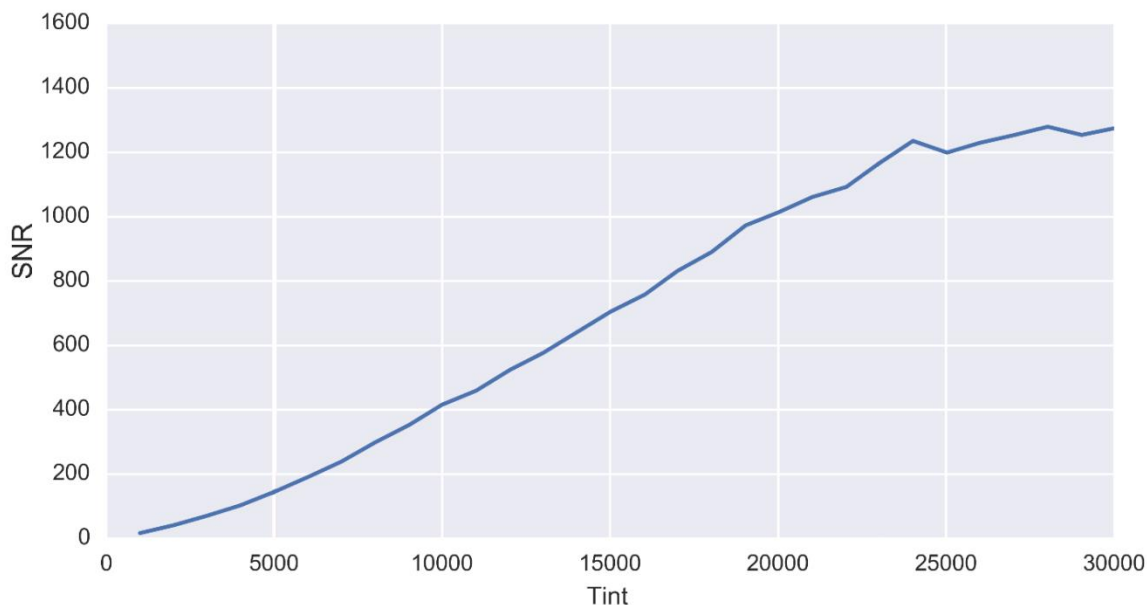


Рис. 1. Зависимость соотношения сигнал/шум от времени накопления. По оси X – время накопления, мкс; по оси Y – соотношение сигнал/шум

### Литература

1. Болтарь К.О., Бурлаков И.Д., Пономаренко В.П., Филачев А.М., Сало В.В. Твердотельная фотоэлектроника ультрафиолетового диапазона (обзор) // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 6. С. 623.
2. Болтарь К.О., Бурлаков И.Д., Филачев А.М., Сало В.В., Яковлева Н.И. Матрицы р-і-п-фотодиодов из AlGaN ультрафиолетового диапазона спектра // Прикладная физика. 2013. № 6. С. 54..
3. Болтарь К.О., Бурлаков И.Д., Седнев М.В., Яковлева Н.И. Характеристики матриц р-і-п-фотодиодов из AlGaN фотоприемных устройств ультрафиолетового диапазона // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1. № 2. С. 200.
4. Бурлаков И.Д., Болтарь К.О., Яковлева Н.И. [и др.]. Матричные фотоприемные модули ультрафиолетового диапазона спектра на основе гетероэпитаксиальных структур AlGaN // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1. № 3. С. 344.
5. Балиев Д.Л., Болтарь К.О. Методы измерения вольт-амперных характеристик фотодиодов в многорядном ИК-фотоприемнике // Прикладная физика. 2016. № 2. С. 71.

УДК 621.383.4

### Исследование влияния рабочего режима трансимпедансного усилителя на основе каскодного включения на сигналы и шумы матричных фотоприемных устройств

*В.В. Прасков, А.В. Никонов, П.С. Лазарев*

АО «НПО «Орион»

Коротковолновый инфракрасный диапазон (SWIR) представляет огромный интерес с точки зрения развития направлений фотоэлектроники, которые включают системы ночного видения, системы безопасности, камеры пассивного и активного обнаружения целей, системы детектирования возгораний и другие системы, позволяющие расширить



возможности применения фотоприемных устройств, работающих в видимом диапазоне спектра [1].

Объектом исследования стала гетероструктура, которая имеет дополнительный барьерный слой и образует nВр-структуру. Использование широкозонного барьерного слоя InAlAs в наногетероструктуре имеет огромное значение, т.к. его наличие решает проблему пассивации поверхности матрицы фоточувствительных элементов (МФЧЭ), что подразумевает эффективное устранение поверхностных токов утечки и туннелирования [11]. В данной работе проведено исследование: влияния выбора рабочей точки трансимпедансного усилителя на основе каскодного включения на сигналы и шумы матричных фотоприемных устройств, разработка модели изменения шумов и сигналов в зависимости от режима работы каскодного включения, измерение величины паразитной ёмкости барьерного слоя в nВр в структурах InGaAs.

В ходе работ была построена эквивалентная схема исследуемого фотодиода (рис. 1). Было учтено, что pin-фотодиоды представляют собой высокоомную область, расположенную между сильнолегированными  $p^+$  и  $n^+$  областями с малыми диффузионными длинами неосновных носителей [12]. Исходя из этого, можно сказать что сопротивление и ёмкость  $p$ - и  $n$ - областей пренебрежимо мала.

В ходе построения теоретической модели, основываясь на схеме фотодиода, были получены следующие эквивалентные формулы для шума  $\delta U$  и сигнала  $\Delta U$ :

$$\delta U \sim \sqrt{\frac{1}{C_1 + C_2(V_{cas})}}, \Delta U \sim \frac{1}{C_3 + C_2(V_{cas})}.$$

Здесь  $C_2(V_{cas})$  – исследуемая ёмкость каскода, зависящая от напряжения на нём.  $C_1$  – ёмкость барьера. Конкретно нас интересовала зависимость отношения сигнал/шум от ёмкостей исследуемой схемы. Для нахождения максимума отношения мы продифференцировали отношение сигнал/шум по  $C_2(V_{cas})$ :

$$\left( \frac{\Delta U}{\delta U} \right)'_{C_2} = 0$$

и получили зависимость:

$$C_2(V_{cas}) = 2C_1 - C_3.$$

Таким образом было получено, что для достижения максимума отношения сигнал/шум, эти три величины должны быть мало того, что одних порядков, они также должны приблизительно удовлетворять полученному уравнению, чтобы максимум отношения сигнал/шум попал в необходимую полосу частот.

В качестве примера в данной работе приводятся результаты исследования для МФПУ формата 320×256 на основе соединений арсенидов индия-галлия (InGaAs) с барьерным слоем (рис. 2).

Из рис. 2 можно заметить, что максимум отношения сигнал/шум достигается при минимальном шуме. Сигнал начинает свой рост раньше шума, и в тот момент, когда значение шума начинает возрастать, образуется пик. Причину, по которой напряжение, при котором шум начинает, расти сдвинуто относительно сигнала, ещё предстоит выяснить, но факт остаётся фактом – при достижении определённой полосы частот, мы имеем ярко выраженный максимум. Анализ этой зависимости позволил выбрать новую рабочую точку каскода и повысить показатель сигнал/шум на 30%.

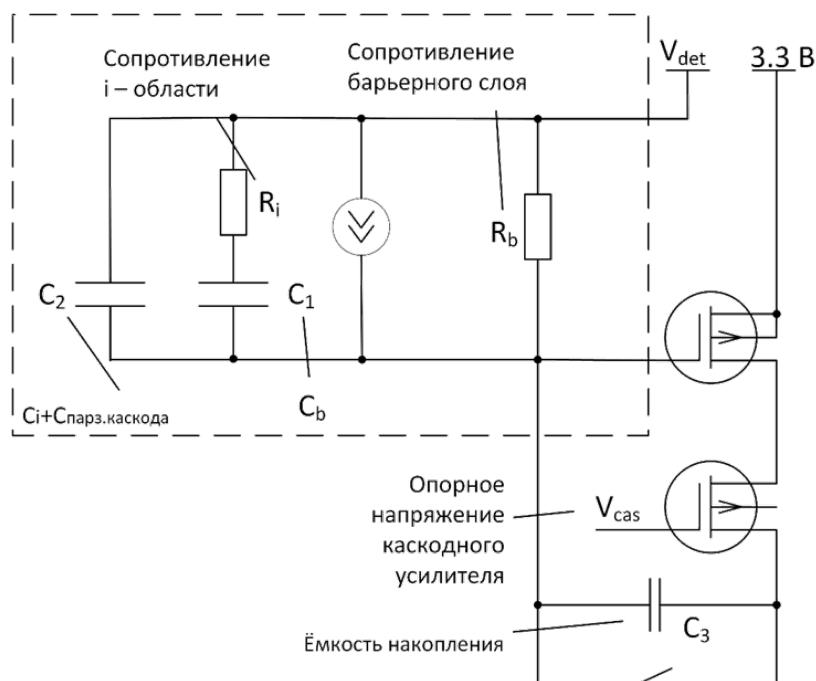


Рис. 1. Эквивалентная схема фотодиода в сопряжении с каскодным усилителем

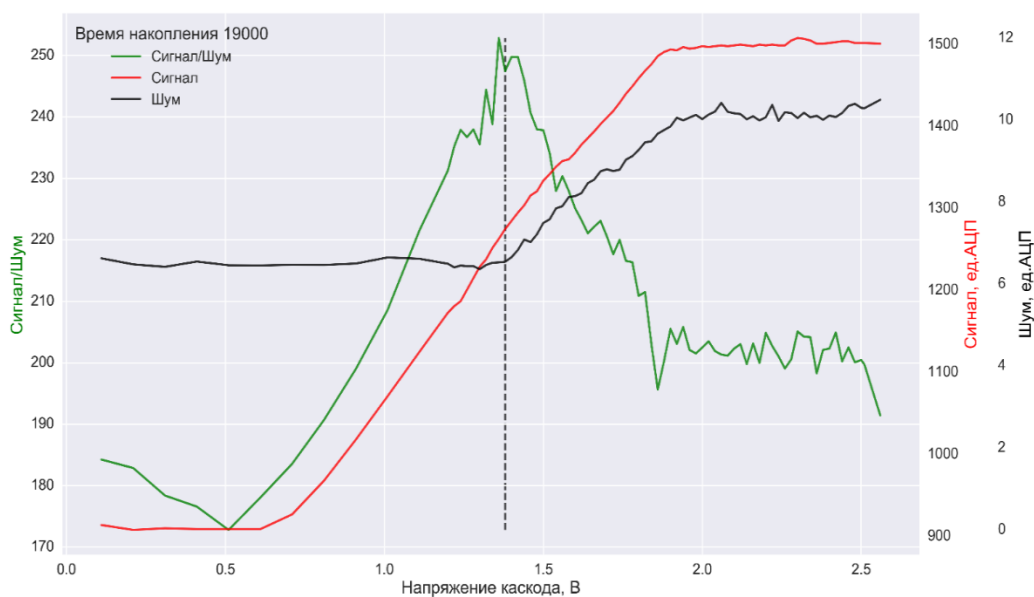


Рис. 2. Зависимость сигнала, шума и отношения сигнал/шум

### Литература

1. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Физические основы. М.: Физматкнига, 2005. 335 с.
2. Яковлева Н.И., Болтарь К.О., Седнев М.В., Лопухин А.А., Коротаев Е.Д. Лавинный матричный фотомодуль формата 320×256 на основе тройных соединений группы  $A_3B_5$  с поглощающим слоем InGaAs и барьерным слоем InAlAs // Прикладная физика. 2015. № 1. С. 87.
3. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фотодиоды. М.: Физматкнига, 2011. 448 с.

## Методы рентгеновской дифрактометрии в технологии фотоприемных устройств

*А.Е. Гончаров, А.Д. Шабрин, В.Е. Гончаров*

АО «НПО «Орион»

В настоящее время повышение уровня рабочих параметров фотоприемных устройств является важной задачей в оптоэлектронике [1]. Технологически этого можно добиться путем контроля характеристик исходного материала, в частности качества и однородности кристаллической структуры, а также наличия дефектов, которые при разработке приборов приводят к большим токам утечки, низкой фоточувствительности и высоким темновым токам, а при проведении эпитаксиальных процессов – к появлению макродефектов роста.

Поэтому изучение методов определения кристаллического совершенства полупроводниковых структур, их использование и усовершенствование имеет важное прикладное значение. Некоторые из таких методов основаны на явлении рентгеновской дифракции.

Рентгеновская дифрактометрия представляет широкие возможности для проведения исследований различных материалов и определения большого количества структурных параметров. Она подразумевает запись кривой качания образца, т.е. зависимость интенсивности излучения от углового положения образца. Для исследований применялся рентгеновский дифрактометр Bruker D8 Discover, в котором реализованы двух- и трехосевая схемы, в зависимости от используемых компонентов вторичной оптики [2].

В данной работе проведено исследование кристаллического совершенства полупроводниковых пластин после различных стадий технологической обработки. Разработана методика определения угла рассогласования поверхности полупроводника и кристаллографической плоскости. Для определения кристаллического совершенства была освоена стандартная методика, в которой для исследуемого образца определяется оптимальное положение относительно падающего излучения. Затем в нескольких точках поверхности с требуемым шагом по  $x$  и  $y$  записываются кривые качания. Это позволяет получить карты распределения параметров этих кривых, таких как интенсивность, полуширина (FWHM), положение максимума, количество пиков и т.д., которые, в свою очередь, характеризуют качество структуры образца.

Исследования пластины InSb проводились после каждой стадии технологической обработки (после первичного травления, химико-механической полировки (ХМП), химико-динамической полировки (ХДП)), и следующие стадии уже выполнялись с учётом наших результатов. В результате были получены значения параметров кривых качания после разных этапов обработки, сравнение которых приведено в табл. 1.

Однако не всегда стандартная методика позволяла в полной мере проанализировать структуру исследуемых образцов. На некоторых пластинах были обнаружены разориентированные области (блоки), которые отчетливо видны на карте угловых положений максимумов кривых качания. Возник вопрос об определении величины угла разориентации таких блоков, так как если она будет достаточно велика, то на границе перехода сформируется дефектная область, непригодная для создания ФЧЭ.

Для того, чтобы определить разориентацию между блоками, нужна была методика определения разориентации между поверхностью полупроводника и семейством кристаллографических плоскостей для каждого блока угла.

Для определения угла разориентации была разработана модель эксперимента, состоящего из двух этапов. На первом этапе поверхность пластины располагается параллельно пучку падающего излучения. При этом минимизируются механические приборные ошибки, неточность расположения образца на столике. На втором этапе требуемое семейство кристаллографических плоскостей устанавливается так, чтобы для них выполнялось условие Вульфа–Брэгга [3].

Результатом проведения второго этапа эксперимента стало оптимальное положение пластины, которое позволяет получить максимальное отражение от данного набора плоскостей и рассчитать угол разориентации. Полученные при этом значения  $\theta$  описывают гармоническую кривую из-за механических неточностей позиционирования, а также из-за наличия разориентации отражающих плоскостей и поверхности пластины. Чтобы выделить из них полезную информацию и использовать ее для расчетов, необходимо аппроксимировать их функциями синуса.

Для определения оптимального положения образца и расчета угла разориентации была разработана математическая модель, разработан алгоритм аппроксимации и создано программное обеспечение для обработки экспериментальных данных.

Разработанная методика определения угла разориентации была применена для измерения разориентации блоков пластины InSb. Для этого были измерены углы разориентации кристаллографических плоскостей относительно поверхности кристалла в двух точках. Угол разориентации в точке 1 составил  $0,52^\circ$ , а в точке 2 –  $0,60^\circ$  в противоположном направлении. Тогда разориентация блоков друг относительно друга составляет  $1,12^\circ$ .

Таким образом, благодаря тому, что наши исследования проводились на каждом этапе обработки, начиная с нарезки слитка, удалось скорректировать технологию и в итоге добиться высокого совершенства кристаллической структуры пластины, что подтверждается сравнением результатов после первого травления и последнего этапа ХДП. Разработанная методика позволяет определять разориентацию блоков в кристалле с помощью созданного программного обеспечения.

Таблица 1

Этап обработки	Сред. знач. FWHM, °	Диапазон знач. FWHM, °	Отношение диапазона интенсивности к максимальной интенсивности, %
Травление	0,0050	0,0065	55
ХМП	0,0051	0,0098	64
ХДП	0,0046	0,0034	50
Повторное ХДП	0,0044	0,0015	23

### Литература

1. Бурлаков И.Д., Пономаренко В.П., Филачев А.М., Дегтярев Е.В. // Прикладная физика. 2007. № 2. С. 43.
2. Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокора разрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. М.: Наука, 2002. С. 274.
3. Богдан Т.В. Основы рентгеновской дифрактометрии: учебно-методическое пособие. М.: МГУ, 2012. С. 60.

УДК 621.384.3/5

### МФПУ формата 640×512 с шагом 15 мкм на основе гомоэпитаксиальной структуры InSb

*П.В. Власов, К.О. Болтарь, П.С. Лазарев, А.А. Лопухин*

Научно-производственное объединение «Орион»

Исследованы характеристики матричного фотоприемного устройства (МФПУ) формата 640×512 элементов с шагом 15 мкм с фоточувствительным элементом, изготовленным в эпитаксиальном слое антимолибдита индия с выращенным  $p-n$  - переходом на отечественной высоколегированной подложке. Проведено сравнение фотоэлектрических характеристик и пространственного разрешения МФПУ на основе

эпитаксиального InSb с аналогичными серийными МФПУ на основе объемного антимонида индия.

Для изготовления матриц фотодиодов как для эпитаксиальных, так и для объемных структур InSb использовалась меза-технология с глубиной разделения элементов  $\sim 1$  мкм [1, 2]. Матрицы фоточувствительных элементов (МФЧЭ) гибридизировались индиевыми микроконтактами с БИС считывания и уменьшались до толщины 10–20 мкм. Для объемных уменьшенных структур InSb однородность толщины и качество пассивации обратной стороны чувствительного слоя имеет огромное значение [3], а для эпитаксиальных структур эти характеристики гарантируются процессом эпитаксиального выращивания.

По основным фотоэлектрическим параметрам МФПУ, в том числе по среднему значению эквивалентной шуму разности температур и количеству дефектных элементов МФПУ на основе эпитаксиального InSb, не уступают серийным МФПУ на основе объемного антимонида индия.

Пространственное разрешение оценивалось по глубине модуляции выходного сигнала МФПУ формата  $640 \times 512$  элементов с шагом 15 мкм с относительным отверстием холодной диафрагмы 1:4 и объективом с фокусным расстоянием 205 мм на мире Фуко. В табл. 1 приведена зависимость глубины модуляции выходного сигнала от толщины МФЧЭ на пространственных частотах мира 3,5 мрад<sup>-1</sup> и 5,5 мрад<sup>-1</sup>.

По пространственному разрешению МФПУ на основе эпитаксиального InSb превосходят МФПУ на основе объемного антимонида индия.

Таблица 1

Тип МФПУ	Толщина МФЧЭ, мкм	Глубина модуляции	
		мира 3,5 мрад <sup>-1</sup>	мира 5,5 мрад <sup>-1</sup>
Эпитаксиальный	5	0,72	0,44
Объемный	10	0,70	0,37
Объемный	11	0,64	0,30
Объемный	15	0,45	0,14

### Литература

1. Бурлаков И.Д., Болтарь К.О., Мирофьянченко А.Е. [и др.]. Исследование структур InSb, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Успехи прикладной физики. 2015. Т. 3, № 6. С. 559.
2. Болтарь К.О., Власов П.В., Лопухин А.А. и др. Характеристики серийных матричных фотоприемных устройств на основе антимонида индия формата  $320 \times 256$  // Успехи прикладной физики. 2013. Т. 1, № 6. С. 733.
3. Болтарь К.О., Власов П.В., Лопухин А.А. и др. Динамическая взаимосвязь в матричных фотоприемниках среднего инфракрасного диапазона спектра // Прикладная физика. 2013. № 6. С. 67.

УДК 621.384.3/5

## Матрица фотодиодов формата 640×512 на основе nВр-структур с поглощающим слоем InGaAs

*Н.А. Иродов, К.О. Болтарь, М.В. Седнев, Н.И. Яковлева*

АО «НПО «Орион»

Актуальной задачей фотоэлектроники является создание матричных фотоприемных устройств (МФПУ) ближнего инфракрасного диапазонов спектра на эпитаксиальных слоях InGaAs/InP [1, b2].

В МФПУ традиционно используются матрицы фоточувствительных элементов (МФЧЭ), изготовленных по планарной технологии, или меза-технологии, освещаемые со стороны подложки. В разработанных nВр-структурах широкозонный барьерный слой позволяет в меза-планарной технологии изолировать фотодиоды друг от друга не открывая поверхность узкозонного фоточувствительного слоя [2].

Проведены исследования вольтамперных характеристик (ВАХ) фотодиодных матриц фоточувствительных элементов (ФЧЭ) формата 320×256 с шагом 30 мкм на основе гетероэпитаксиальных nВр структур, выращенных методом МОС-гидридной эпитаксии с поглощающим  $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ , барьерным  $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}$ , варизонным и AlGaInAs и дельта-легированными слоями на подложках InP для коротковолнового ИК-диапазона спектра. Фотодиодные матрицы изготовлены по планарной, меза-технологии и меза-планарной технологиям.

В матрицах, изготовленных по меза-планарной технологии на nВр-структурах, успешно сочетаются малый темновой ток и высокая чувствительность к ИК-излучению диапазона 0,9–1,7 мкм при низких напряжениях смещения. Темновой ток элементов матриц ФЧЭ с шагом 30 мкм при напряжении смещения –0,1 В составляет 50–130 фА при температуре 300 К.

Электрофизические параметры функциональных слоев исходных гетероэпитаксиальных nВр структур эффективно влияют на темновые токи и чувствительность элементов матриц. Уменьшение толщины области переменного состава AlGaInAs до 5 нм приводит к увеличению в 2,5–9 раз темнового и фототока, что обусловлено увеличением взаимосвязи элементов. Уменьшение концентрации доноров в этом слое с  $3,5 \times 10^{10}$  до  $1,5 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup> увеличивает как темновой, так и фототок фотодиодов матриц на порядок.

На основе проведенных исследований оптимизированы параметры функциональных слоев nВр структур и изготовлены высокоэффективные матрицы фотодиодов формата 320×256 с шагом 30 мкм и 640×512 с шагом 15 мкм. Удельная обнаружительная способность МФПУ превышает  $10^{13}$  Вт<sup>-1</sup>·см·Гц<sup>1/2</sup>, дефектность менее 0,5%.

### Литература

1. Филачев А.М., Патрашин А.И., Булаков И.Д., Болтарь К.О., Шабаров В.В. Математическое моделирование инфракрасного матричного фотоприемного устройства // Успехи прикладной физики. 2016. Т. 4, № 3. С. 272.
2. Фотоприемные устройства на основе эпитаксиальной системы кадмий–ртуть–теллур / отв. ред. А.Л. Асеев. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2012. 258 с.
3. Яковлева Н.И., Болтарь К.О., Седнев М.В., Патрашин А.И., Иродов Н.А. Матричные фотоприемные устройства коротковолнового инфракрасного диапазона спектра с лавинным усилением сигнала на основе гетероэпитаксиальных структур InGaAs // Прикладная физика. 2014. № 2. С. 45.
4. Седнев М.В., Болтарь К.О., Иродов Н.А., Демидов С.С. Исследование фотоэлектрической взаимосвязи элементов матричных ФП на основе гетероэпитаксиальных структур InGaAs // Прикладная физика. 2015. № 3. С. 73.



**Фотоприемные матрицы на основе InSb с повышенной надежностью***А.С. Мягков, Е.А. Климанов, А.А. Лопухин*

АО «НПО «Орион»

Постоянно растущий интерес к оптоэлектронным приборам в современном мире обусловлен их повсеместным использованием в огромном количестве различных приборов. Они применяются как в военной промышленности, так и в гражданском секторе.

Задачи, которые должны решать современные оптоэлектронные приборы, постоянно усложняются, в связи с чем необходимо совершенствовать технологии изготовления таких устройств. Ключевым элементом любого оптоэлектронного прибора является фотоприемное устройство (ФПУ), предназначенное для преобразования оптического сигнала в электрический. Дальнейшее развитие таких технологий упирается в задачу развития существующего или создания более совершенного приемника излучения. Одним из способов решения этой проблемы является совершенствование технологии создания ФПУ, а именно: этапа уменьшения базовой области матричного фоточувствительного элемента, сделанного на основе антимолибдита индия [1].

Такая процедура дает следующие положительные результаты: увеличение квантового выхода, уменьшение взаимосвязи матричных элементов, снижение нагрузки на индиевые микроконтакты (напряжение, возникающие при охлаждении пластин).

Данная операция в процессе изготовления МФПУ является наиболее сложной, так как необходимо сохранять высокую точность толщины ( $\pm 1$  мкм) МФЧЭ по всей площади базовой области (9,6×7,7 мм для формата 640×512 с шагом 15 мкм) [2].

Так же на краях кристалла происходит преуменьшение и толщина «крыла» (область фоточувствительного элемента не прикрепленная к БИС) фотоприемника достигает долей микрона, что делает его менее надежным. Такое «крыло» особенно подвержено внешнему воздействию (воздушные потоки при очистке МФЧЭ от пыли перед нанесением пленок) и на нем образуются дополнительные трещины и разломы, которые могут прорасти через базовую область МФЧЭ.

Для совершенствования операции уменьшения была предложена методика создания прецизионных углублений («канавок») на лицевой стороне МФЧЭ, которые должны устранить проблемы, возникающие на этапе уменьшения, тем самым увеличивая надежность, качество и выход годных приборов (рис. 1).

Основными функциями прецизионных углублений являются: формирование бездефектного края, удаление «крыла» МФЧЭ, контроль глубины травления на этапе уменьшения [1].

Главные требования, предъявляемые к формированию прецизионных углублений: одинаковая глубина по всему периметру кристалла, минимальное боковое подтравливание технологического слоя, канавки не должны мешать дальнейшим операциям изготовления МФЧЭ.

Для выполнения поставленных требований было предложено 3 формы канавок.

1. Широкая линия.
2. Узкая линия.
3. Узкая «канавка» в форме синусоиды.

В результате исследований было определено, что оптимальной формой «канавки» является узкая линия, вытравленная под углом 45 градусов к кристаллографическим осям. Такое решение было продиктовано, с одной стороны, преимуществом перед широким углублением, заключающемся в более высокой точности краев и меньшей рельефности при фотолитографии, с другой стороны, «канавка» синусоидальной формы не имеет явных преимуществ, так как при существующей анизотропии травления, глубина и вероятность возникновения дефекта для обеих форм остаются одинаковыми.

Окончательный результат изготовления МФПУ приведен на рис. 2 и для сравнения границ на рис. 3 представлено фотоприемное устройство, изготовленное без использования прецизионных углублений.

Различия краев кристаллов заметны даже без увеличения, из чего можно сделать вывод, что технология прецизионных углублений значительно увеличивает качество исполнения фотоприемного устройства, его надежность и, как следствие, выход годных приборов. Данная технология позволяет оптимизировать производство, упростить процесс уменьшения МФЧЭ и при этом не требует больших затрат, так как для её применения используется то же оборудование и ресурсы, что и в процессе создания МФПУ без прецизионных углублений.

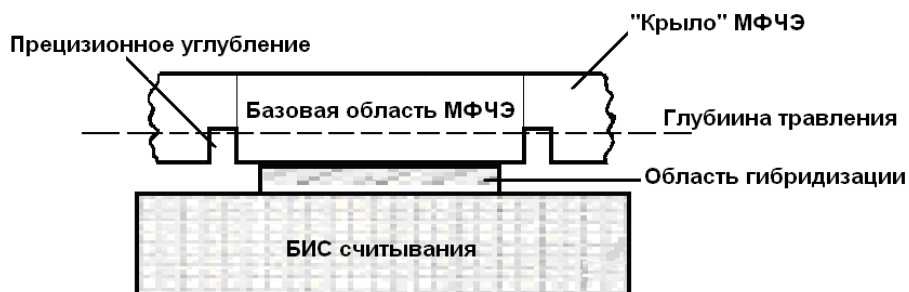


Рис. 1. Уменьшение базовой области матричного фоточувствительного элемента

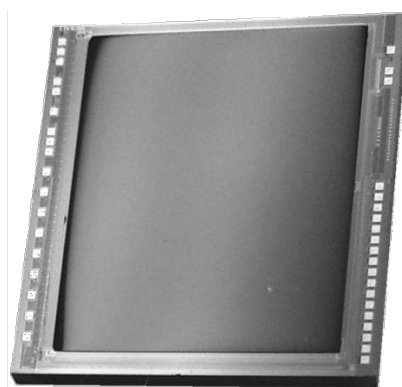


Рис. 2. МФПУ с использованием прецизионных углублений

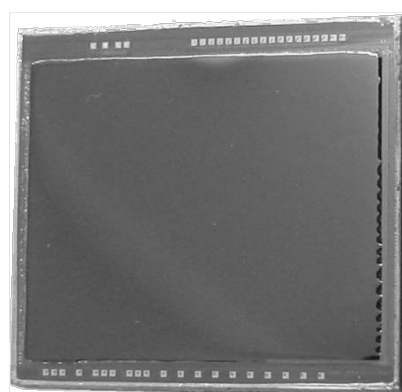


Рис. 3. МФПУ без использования прецизионных углублений

### Литература

1. Патент РФ № 2011118000/28, 04.05.2011.
2. Процессы жидкостного химического травления. СПб.: СПб ГЭТУ, 2008. 142 с.
3. Патент США 09/802,448, 09.03.2001.

УДК 621.382

**Разработка маршрута аттестации ОРС-решений при переходе на новую версию программного обеспечения*****В.В. Иванов, А.В. Кузовков, В.С. Ерушевич, А.А. Сапожкин, И.А. Кочетов***Национальный исследовательский университет «МИЭТ»  
АО «НИИМЭ»

Современные системы расчёта ОРС решений представляют собой сложнейший комплекс функциональных модулей, работающих с учетом физических и химических свойств материалов, характеристик производственного процесса, технических возможностей производственного оборудования и многих других параметров. С течением времени происходит увеличение объёмов и сложности обработки данных, в программных модулях появляются новые алгоритмы, параметры и опции, в результате чего старые версии программного обеспечения (ПО) становятся недостаточно эффективными для дальнейшего использования. Это обуславливает необходимость перехода к новым версиям ПО для разработки ОРС решений [1, 2].

Основной маршрут аттестации новой версии ПО включает в себя разработку и включение в комплект фотошаблонов (ФШ) матрицы элементов контролируемых размеров, изготовление партии пластин и анализ результатов. Данный способ является ресурсоемким и занимает достаточно много времени (2–3 итерации), поэтому была поставлена задача разработать более эффективное решение.

В результате был разработан маршрут аттестации, основанный на моделировании процесса литографии и сравнении результатов ОРС, полученных с помощью разных версий ПО. Данный маршрут включает в себя следующие этапы.

1. Выбор проекта (топологии) для проведения аттестации.
2. Проведение коррекции эффектов оптической близости (ОРС) при помощи двух версий ПО: базовой и новой, требующей аттестации.
3. Моделирование результатов фотолитографии для обоих вариантов обработки.
4. Сравнение результатов и поиск наиболее значимых различий.
5. Анализ проблемных участков.
6. Подготовка управляющей информации для изготовления ФШ.
7. Изготовление пластин и проведение измерений.
8. Анализ результатов путём преобразования SEM-изображений (микрофотографий) в полигоны топологии и их наложения.

На данный момент разработаны программные средства для реализации части данного маршрута вплоть до поиска и извлечения проблемных участков. Дальнейший вектор работы направлен на автоматизацию обработки результатов измерений.

**Литература**

1. *Красников Г.Я., Горнев Е.С.*, Развитие полупроводниковой микроэлектроники ОАО «НИИМЭ и Микрон» // История отечественной электроники. В 2-х томах. М.: Столичная энциклопедия, 2012.
2. *Латишинов Б.А.* Технология литографических процессов: учебное пособие. М: Московский государственный институт электроники и математики, 2011. С. 95.
3. *Шелетин Н.А.* Особенности суб-100 нанометровых технологий СБИС // В кн.: Международная конференция «Микроэлектроника 2016» // Интегральные схемы и микроэлектронные модули: проектирование, производство и применение, сборник докладов. Алушта 2016. М.: Техносфера, 2016. С. 22–30.

4. Колобов А.В., Кузовков А.В., Иванов В.В., Арлин Р.А., Разработка OPC-модели для технологии уровня 65 нм // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника. 2016. № 4 (164). С. 4–9.

УДК 621.3.049.774

### Разработка инструмента для расстановки SRAF

А.В. Колобов<sup>1,2</sup>, А.В. Кузовков<sup>2</sup>, В.В. Иванов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

Известно, что, начиная с определенных размеров, на фоторезистивной маске проявляются эффекты оптической близости (укорачивание линий, округление углов, зависимость геометрических размеров полигонов от плотности их расположения). Избавиться от этих эффектов или свести их количество к минимуму возможно с помощью набора методов повышения разрешения (RET – Resolution Enhancement Technologies) [1, 2]. Одним из этих методов является расстановка вспомогательных фигур (SRAF, Sub-Resolution Assist Feature).

Вспомогательные фигуры – дополнительные линии, которые расставляются в свободные места в топологии. Ширина этих линий намного меньше, чем минимальный размер, используемый в данной технологии. Из-за этого при засветке резиста через фотошаблон SRAF не пропечатываются, но излучение интерферирует на этих фигурах, и изображение на пластине улучшается. Использование вспомогательных фигур в качестве дополнения к Model-Based OPC позволяет добиться улучшения разрешающей способности, а также уменьшения времени обработки данных при проведении операции OPC [3].

Расстановка SRAF происходит по определенным правилам. Среди них: толщина, расстояние между фигурами, тональность слоя, межслойное взаимодействие и т.д. Для расстановки SRAF компанией MentorGraphics предлагается инструмент CalibreOPCsbar®. Этот инструмент является проприетарным, поэтому недоступен для свободного использования. После изучения документации было принято решение разработать инструмент со схожим функционалом, но с помощью доступных средств.

Для разработки были выбраны два языка программирования: SVRF (Standard Verification Rule Format) и TCL (Tool Command Language). Для обоих языков программирования MentorGraphicsCalibre® имеет встроенные компиляторы. Язык SVRF использовался для написания «DRC-деки» – набора правил, по которым во входном топологическом файле находятся места для расстановки вспомогательных фигур. Язык TCL использовался для взаимодействия с пользователем (установка необходимых параметров, выбор входных и выходных данных, включение/отключение правил).

В ходе работы было реализовано несколько правил, по которым можно расставить вспомогательные фигуры. Инструмент был протестирован на топологии уровня технологии 90 нм вместе с уже имеющимся набором для проведения OPC и показал хороший результат. В планах – реализация большего количества правил и возможность внедрения в используемые технологические маршруты.

### Литература

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С. Развитие полупроводниковой микроэлектроники ОАО «НИИМЭ и Микрон» // история отечественной электроники. В 2-х томах. М.: Статичная энциклопедия, 2012.
2. Шелепин Н.А. Особенности суб-100-нанометровых технологий СБИС // Международная конференция «Микроэлектроника 2015» Интегральные схемы и микроэлектронные модули: проектирование, производство и применение, сборник докладов, Алушта 2016. М.: Техносфера, 2016. С. 22–30.
3. Кузовков А.В., Иванов В.В. Использование непечатаемых вспомогательных структур для повышения разрешающей способности фотолитографии. [Электронный ресурс] // Всероссийская научно-техническая конференция «Студенческая научная весна: Машиностроительные

технологии»: материалы конференции, 5–8 апреля, 2016, Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана. М.: ООО «КванторФорм», 2016.

4. *Andreas Torsy, Olivier Toublan, Rainer Zimmermann, Harry Smyth, Jens Hassmann.* Detailed Process Analysis for Sub-Resolution Assist Features Introduction. Mentor graphics technical publication. URL: <https://www.mentor.com/products/ic-manufacturing/resources/overview/detailedprocess-analysis-for-sub-resolution-assist-features-introduction-f876204b-7738-4f5e-9d41-34c7e7fa3ee4>

УДК 51-74

## Методика оптимизации источника освещения в фотолитографии

*Е.Л. Харченко, А.В. Кузнецов, В.В. Иванов*

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»  
АО «НИИМЭ»

Современная фотолитография добилась значительных успехов в реализации субмикронных размеров элементов [1, 2]. Наряду с технологиями непрерывно совершенствуется и оборудование. В частности появилась возможность использовать источник экспонирующего излучения произвольной формы [3].

Цель работы – выработать методику оптимизации освещения, которая сочетает в себе относительно небольшое количество варьируемых параметров и высокую точность представления источника. Для достижения поставленной цели необходимо решить три проблемы.

1. Математическое представление источника.
2. Выбор критерия оптимизации.
3. Выбор способа оптимизации.

В результате проведенного анализа был выбран метод представления источника на основе ядер [4]. Суть метода заключается в представлении источника в виде суперпозиции базисных функций – полиномов Цернике [5]. Варьируя коэффициенты при полиномах, можно создать источник любой конфигурации.

В качестве критерия оптимизации используется совокупность трех параметров: расхождение воздушного изображения с исходной топологией, производная на кривой интенсивности (NILS) и гладкость источника.

Проанализировав существующие способы оптимизации, мы выбрали способ DFO [6, 7], т.е. без вычисления производных. Суть DFO заключена в поиске доверительного интервала коэффициентов полинома Цернике. Каждый из этих коэффициентов необходимо изменять по очереди в пределах заданного интервала. На выходе получаем оптимизированный вектор коэффициентов и, соответственно, новый вид источника.

В результате работы был получен метод оптимизации источника освещения для фотолитографических установок. Моделирование показало, что выбранный метод работает и оптимизированный источник позволяет увеличить разрешающую способность на технологическом уровне 90 нм.

## Литература

1. *Красников Г.Я., Горнев Е.С.* Развитие полупроводниковой микроэлектроники ОАО «НИИМЭ и Микрон», история отечественной электроники. В 2-х томах. М.: Столичная энциклопедия, 2012.
2. *Колобов А.В., Иванов В.В., Кузовков А.В., Арилин П.А.* Разработка OPC-модели для технологии уровня 65 нм // Электронная техника. 2016. № 4 с. 4–9.
3. *Bekaert J., Laenensa B., Verhaegena S., Van Looka L., Trivkovic D., Lazzarinoa F., Vandenberghea G., van Adrichemb P., Sochab R., Baronb S., Tsaib M. C., Ningb K., Hsub S., Liub H.Y., Mulderc M., Boumac A., van der Heijdenc E., Mouraillec O., Schreelc K., Findersc J., Dusac M., Zimmermann J., Gräupnerd P., Neumann J.T., Hennerkesd C.* Freeform illumination sources: An experimental study of



- source-mask, optimization for 22 nm SRAM cells, // Proc. SPIE 7640. Optical Microlithography XXII 2010. February 23. p. 29.
4. Wu X., Liu S., Li J., Lam E.Y., Efficient source mask optimization with Zernike polynomial functions for source representation. // J. Opt. Express. 2014. V. 22. № 4. p. 3924–3937.
  5. Бездидько С.Н., Ровенская Т.С. Полиномы Цернике в проектировании оптических систем: уч. пособие Ч. 1, 2006. С. 44.
  6. Wen Lv, Shiyuan Liu, Xiaofei Wu and Edmund Y. Lam Illumination source optimization in optical lithography via derivative-free optimization. // Journal of the Optical Society of America A. 2014. V. 31, p. B19
  7. Conn R., Scheinberg K., Vicente L.N. Introduction to Derivative-Free Optimization. // MOS/SIAM Series on Optimization. SIAM. Philadelphia, MA. 2009. V 8.

УДК 519.688

## Оптимизация разработки топологии случайной конфигурации для отработки OPC-решений

*Е.В. Ипатова<sup>1,2</sup>, В.В. Иванов<sup>2</sup>, А.В. Кузовков<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

С уменьшением проектных норм всё более важную роль в процессе проектирования фотошаблонов играет этап коррекции оптической близости (ОПС) [1]. Для оценки эффективности ОПС-решения необходимо подбирать топологию, включающую тестовые структуры наиболее разнообразных форм [2]. Однако из-за непредсказуемого характера реальной топологии стандартные тестовые структуры не могут охватить весь ряд возникающих опасных точек, то есть областей, в которых проявляется эффект оптической близости. В связи с этим, появилась проблема создания топологии случайной конфигурации.

Целью данной работы является разработка программного решения по созданию топологии случайной конфигурации с учетом технологических требований и минимизация ее площади. Для генерации топологии были решены следующие задачи:

- 1) написан скрипт, организующий автоматическую генерацию топологии случайной конфигурации из элементарных блоков по заданным технологическим параметрам;
- 2) реализована возможность настройки predetermined структур, задаваемых по желанию пользователя;
- 3) организован учет веса элементарного блока и веса угла поворота;
- 4) строена проверка правил проектирования.

Сгенерированная топология имеет случайный характер построения, благодаря чему включает нестандартные топологические структуры. Однако для эффективного моделирования необходимо оптимизировать занимаемую топологией площадь с целью удаления участков, не содержащих опасных точек.

Для оптимизации площади необходимо выявить литографически опасные точки. По итогам анализа существующих методов поиска опасных точек было принято решение использовать метод выделения топологически ориентированных структур [3, 4]. Данный метод реализуется в два этапа. Сначала проводится поиск потенциально опасных точек. После чего выбранные области фильтруются по критерию сложности для избегания повторения стандартных тестовых структур [5].

Итогом данной работы стал программный комплекс, позволяющий с незначительными затратами временных и человеческих ресурсов генерировать топологию случайной конфигурации, имеющую высокую плотность литографически опасных точек, а следовательно, высокую эффективность для оптического моделирования.



### Литература

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С. Развитие полупроводниковой микроэлектроники ОАО «НИИМЭ и Микрон» // история отечественной электроники. В 2-х томах. М.: Столичная энциклопедия, 2012.
2. Колобов А.В., Иванов В.В., Кузовков А.В., Арилин Р.А. Разработка OPC-модели для технологии уровня 65 нм // Электронная техника. 2016. № 4 с. 4–9.
3. Seongbo S., Woohyun C., Youngsoo S., Synthesis of lithography test patterns through topology-oriented pattern extraction and classification // Proc. SPIE 9053. Design-Process-Technology Co-optimization for Manufacturability VIII. P. 1–10. Mar. 2014.
4. Seongbo S., Youngsoo S. Topology-oriented pattern extraction and classification for synthesizing lithography test patterns // Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS Jan. 2015. V. 14, I. 1. 013503. 1–12.
5. Matsunawa T., Maeda S., Ichikawa T., Nojima S., Tanaka S., Mimotogi S., Nosato H., Sakanashi H., Murakawa M., Takahashi E., Generator of predictive verification pattern using vision system based on higher order local autocorrelation // Proc. SPIE. Mar. 2012. 8326. P. 151–158.

УДК 621.382.2/3

### Оптимизация параметров FinFET на КНИ для применения в схемах цифровой электроники

*Е.И. Титова<sup>1,2</sup>, Г.В. Баранов<sup>1,2</sup>, А.С. Ключников<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

Предел масштабирования традиционной планарной технологии лежит в технологических нормах порядка «25нм» [1], в то время как переход на трехмерные конструкции транзисторов позволяет распространить масштабирование вплоть до проектных норм 7/5 нм. Одной из наиболее перспективных трехмерных конструкций транзисторов является Tri-gate FinFET на КНИ. В отличие от FinFET на объемном кремнии, имеющим промышленное внедрение, преимуществами такой структуры являются лучшее подавление короткоканальных эффектов и высокая технологичность изготовления [2].

Построение конструкции транзистора сопряжено с достижением технических требований, предъявляемых к выходным характеристикам транзисторов при разработке конкретного схематехнического решения. В качестве целевого изделия в данной работе рассматривается схема инвертора, являющаяся базовым блоком цифровых интегральных микросхем. Целью работы является разработка конструкции КМОП-пары на основе Tri-gate FinFET на КНИ, позволяющей максимизировать быстродействия и минимизировать тепловыделение схемой инвертора, построенной на их основе.

Исследование электрофизических параметров устройств проводилось путем приборного моделирования в программной среде TCAD. В ходе работы было проведено предварительное моделирование дискретных транзисторов, а также схемы инвертора и кольцевого осциллятора. Рассмотрено влияние профилей легирования в канале и в слабелегированных областях стока и истока (LDD-областях) на пороговое напряжение и токи утечки транзистора.

Кроме того, на примере схемы инвертора показано преимущество в производительности Tri-gate FinFET на КНИ по сравнению с планарными транзисторами, изготовленными по технологическим нормам 90 нм.

### Литература

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов – Нано- и микросистемная техника. М.: Техносфера, 2011. 800 с.
2. Hars A. FinFET Isolation: Bulk Vs. SOI // Semiconductor engineering. 2013, May 13<sup>th</sup>.

УДК 621.315.592

## Исследование процессов глубокого травления кремния для технологии трехмерной интеграции

*Н.А. Тсиукарис<sup>1,2</sup>, О.П. Гуцин<sup>2</sup>, И.В. Матюшкин<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

Формирование минимальных топологических размеров полупроводниковых структур является одной из основных задач микроэлектроники. Для ее решения, помимо совершенствования оборудования и методов литографии, в последнее время разрабатывается и используется технология трехмерной упаковки слоев, или 3D-интеграция. Преимущества 3D-интеграции заключаются в многофункциональности, повышении производительности, снижении энергопотребления, миниатюризации, удешевлении и повышении надежности устройств. Для успешного внедрения этой технологии в промышленное производство необходимо усовершенствовать и адаптировать процесс плазмохимического травления путем моделирования и тщательного подбора параметров процесса травления для формирования глубоких отверстий в кремнии.

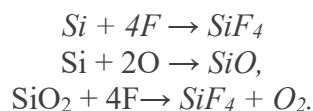
Рассмотрены технологические преимущества и недостатки разных процессов травления для изготовления глубоких сквозных каналов. Был изучен состав плазмы  $SF_6 + O_2$ . Специфическими реакциями в плазме являются реакции окисления радикалов  $SF_x$  ( $x \leq 5$ ). Учитывая реакции, происходящие в плазме  $SF_6 + O_2$  в общем случае [1], а также на поверхности Si и  $SiO_2$  [2,4], выбраны основные из них для корректного и поддающегося обработке теоретического моделирования. С помощью экспериментально полученных данных [5] рассчитываются концентрации компонентов плазмы. Также были получены зависимости концентрации компонентов  $SF_6 + O_2$  плазмы от содержания в ней  $O_2$ . Полученные концентрации компонентов плазмы используются для расчета скоростей травления Si и  $SiO_2$ . Было получено, что вероятность  $\varepsilon$  двух основных реакций равна:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= (7.18 \pm 0.45) \times 10^{-5} \text{ для реакции } SiO_2 + 4F \rightarrow SiF_4 + O_2 \\ \varepsilon_2 &= (8.75 \pm 0.41) \times 10^{-3} \text{ для реакции } Si + 4F \rightarrow SiF_4 \end{aligned}$$

А скорости травления Si и  $SiO_2$  равны:

$$\begin{aligned} V_{st} &= h_0 \omega c_{1,st} = \frac{h_0 R_3 \omega (R_1 + R_2)}{R_3 (R_1 + R_2) + \omega_1 (R_2 + R_3)} \text{ для } Si, \\ V_{st} &= h_0 \omega c_{st} = \frac{h_0 R_3 \omega}{R_3 + \omega} \text{ для } SiO_2, \end{aligned}$$

Где  $h_0 = 3.35 \text{ \AA}$  – толщина монослоя,  $\omega$  – частота десорбции прямо пропорционально зависящая от частоты осцилляции атомов в твердом теле,  $a_{st}$  – это постоянная концентрация молекул  $SiF_4$  в результате всего одной реакции,  $c_{1,st}$  – постоянная концентрация молекул  $SiF_4$ , получаемых в результате трех основных реакций, включенных в модель травления Si и представленных ниже.



### Литература

1. Chase M.W., Jr. NIST-JANAF Thermochemical Tables // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1998. Monograph 9. P. 1963.
2. Gomez S., Belen R.J., Kiehlbauch M., Aydil E.S., // J. Vac. Sci. Technol. 2004 A 22, 606.
3. Oehrlein G.S., Chan K.K., Jaso M.A., Rubloff G.W., // J. Vac. Sci. Technol.. 1989. A 7. 1030.
4. d'Agostino R., Flamm D.L. // J. Appl. Phys. 1981. 52. 162.

## Сравнительный анализ методов измерения количественных характеристик шероховатости наноразмерных структур

*А.А. Шаранов, Г.В. Баранов*

АО «НИИМЭ»

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Постоянное развитие технологий производства КМОП интегральных микросхем выражается в масштабировании всех линейных размеров транзисторов [1]. На ряду с этим статистический разброс значений критических размеров структур не масштабируются [2]. Следовательно, начиная с некоторого размерного порога, влияние статистического разброса будет постепенно усиливаться, и данные эффекты более недопустимо игнорировать. Теоретически и экспериментально установлено, что начиная с технологических норм «90нм» такие размерные эффекты приводят к деградации характеристик приборов и ухудшению их воспроизводимости по кристаллу [3,4].

Количественными показателями качества изготовления линейного элемента на интегральной схеме служат величина неровности края (LER) и неравномерности ширины (LWR). Однако применяются и другие параметры, характеризующие пространственное распределение отклонений краевых точек элементов. К наиболее популярным методикам оценки количественных характеристик шероховатости следует отнести анализ спектральной плотности мощности исследование функции корреляции. Поскольку математическая обработка первичных результатов измерений ставит перед собой цель обобщения количественных показателей шероховатости на всю область кристалла (пластины) по анализу отдельных малоразмерных кадров, то наиболее важным критерием оценки эффективности методики следует считать воспроизводимость результатов вторичных измерений одних и тех же объектов на соседних кадрах.

В данной работе в качестве таких объектов выступает плотная периодическая решётка Si плавников шириной порядка 30 нм. Кадры были получены на растровом электронном микроскопе (РЭМ) Hitachi CG4000, имеющего разрешение 1.8 нм. В ходе исследования разработана программа “LER&LWR Calculator”, в автоматизированном режиме осуществляющая определение величины линейной шероховатости по 3 методам, предложенным в [5]: по определению, по уровню насыщения функции корреляции отклонений от линейной аппроксимации координаты края линии и по уровню графика спектральной плотности мощности в зоне низких пространственных частот.

Результаты показывают, что наилучшая стабильность результата достигается при определении величины линейной шероховатости по определению, а именно по формуле:

$$LER = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad (1)$$

Анализ полученных результатов подтверждает предположения, высказанные в [6], о том, что исследование частотного распределения спектра шероховатости целесообразно проводить для определения причин, вносящих вклад в величину шероховатости. Однако коэффициент разброса величины LER, оценённой с использованием данных методов, оказывается больше в 1.3–1.5 раза в сравнении с расчётом по формуле (1).

### Литература

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. М.: Техносфера, 2011. С. 800.
2. Allan A., Edenfeld D., Joyner W., Kahng A., Rodgers M., and Zorian Y. International Technology Roadmap for Semiconductors // IEEE Comput. Jan. 2002.
3. Lee J.-Y., Shin J., Kim H.-W., Woo S.-G., Cho H.-K., Han W.-S., Moon J.-T. Effect of line edge roughness (LER) and line width roughness (LWR) on Sub-100 nm Device Performance // Proc. of SPIE. 2004. V. 5376. P. 426–433

4. Вонг Б.П., Миталл А., Цао Ю., Старр Г. Нано-КМОП-схемы и проектирование на физическом уровне. М.: Техносфера, 2014. С. 432.
5. Constantoudis V., Patsis G.P., Tserepi A., and Gogolides E. Quantification of line-edge roughness of photoresists. II. Scaling and fractal analysis and the best roughness descriptors // J. Vac. Sci. Technol. B. 2004. V. 21, N 3. P. 1019–1026.
6. Levi S., Schwarzband I., Kris R., Adan O., Shi E., Zhang Y., Zhou K. Edge roughness characterization of advanced patterning processes using power spectral density analysis (PSD) // Proc. of SPIE. 2016. V. 9782. P. 97820I-1–9.

УДК 621.382.323

### **Методы повышения пробойного напряжения транзисторов, ориентированных на высокое напряжение питания.**

*Д.С. Мизгинов<sup>1,2</sup>, П.В. Игнатов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (Государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

В настоящее время laterally diffused metal-oxide-semiconductor (LDMOS) транзисторы (рис.1) широко используются в автомобильной и авиационной промышленности, в оборудовании для телекоммуникаций и в бытовой электронике. Преимуществом данного вида высоковольтных транзисторов является хорошая совместимость со стандартной КМОП-технологией, что позволяет использовать их совместно с другими компонентами интегральных схем, рассчитанными на низкое напряжение питания. LDMOS-транзисторы должны соответствовать требованиям, как низкое сопротивление в открытом состоянии, высокое напряжение пробоя, высокое входное сопротивление, высокая скорость переключения и плотность тока. В данной работе представлены конструктивно-технологические методы, применяющиеся для повышения пробойного напряжения и снижения сопротивления LDMOS-транзистора.

Главной задачей при проектировании LDMOS-транзистора является достижение компромисса между напряжением пробоя и сопротивлением в открытом состоянии. Для достижения данного компромисса применяется концепция reduce surface field (RESURF) [1]. Суть этой концепции заключается в снижении поверхностного электрического поля транзистора за счёт полного обеднения области дрейфа LDMOS-транзистора. Причём полное обеднение области дрейфа должно быть достигнуто до того, как произойдёт пробой структуры. При полном обеднении области дрейфа, вместо одного пика поверхностного электрического поля (рис. 2), возникает 2 пика, меньших по модулю, что, в свою очередь, позволяет достичь более высокого напряжения пробоя.

Существует множество конструктивно-технологических решений для снижения поверхностного поля LDMOS-транзисторов. В данной работе рассмотрены такие конструкции, как: LDMOS транзистор с чередующимися столбцами n-типа и p-типа (superjunction) [2]; с двойным и тройным обеднением области дрейфа (double/triple resurf) [3]; со скрытой воздушной прослойкой [4]; со ступенчатой конструкцией затвора [5] и с латеральным неоднородно легированным слоем в области дрейфа [6].

Также рассмотрены некоторые модификации конструкции superjunction. В одной из модификаций рассмотрен вариант конструкции, в котором между чередующимися столбцами n-типа и p-типа добавлены слои с диэлектриком [2]. В другой модификации конструкции superjunction в столбцах n-типа n-канального транзистора вблизи поверхности имплантирован латеральный неоднородно легированный слой [7]. Данные методы позволяют добиться лучшего распределения поверхностного электрического поля, и, таким образом, повысить пробойное напряжение.

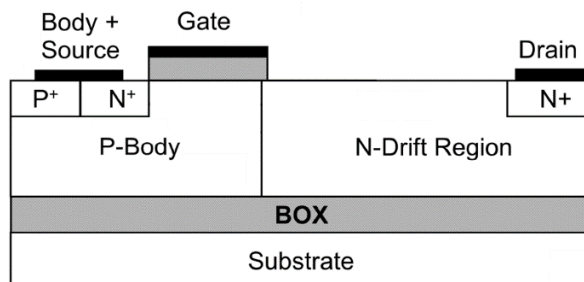


Рис. 1. Стандартная конструкция LDMOS-транзистора.

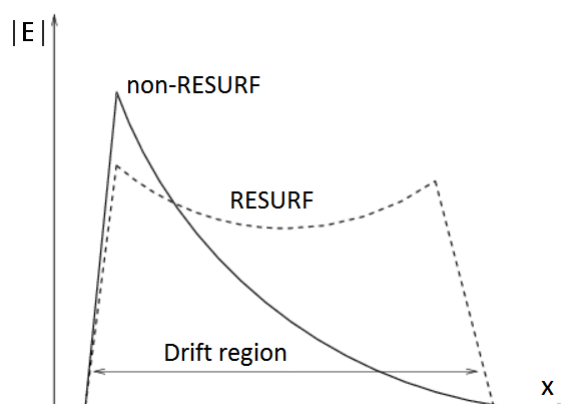


Рис. 2. График зависимости модуля напряжённости поверхностного электрического поля от координаты области дрейфа LDMOS-транзистора.

### Литература

1. *Suntiha H.D., Keshaveni N.* Reduced Surface Field Technology For LDMOS: A Review // International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering. June 2014. V. 4, I. 6. P. 173–174.
2. *Chen H., Ming L., Xiaoying H., Weifeng S.* Review of Super Junction LDMOS // IETE Technical Review. Jul/Aug 2011. V. 28 I. 4. P. 327–335.
3. *Disney D.R., Paul A.K., Darwish M., Basecki R., Rumennik V.*, new 800 V lateral MOSFET with dualconduction paths // *Power Semiconductor Devices and ICs. 2001*, P. 399–402.
4. *Kim S.-H., Park I.-Y., Choi Y.-I., Chung S.-K.* Enhancement of Breakdown Voltage for SOI RESURF LDMOS Employing a buried Air Structure // Journal of the Korean Physical Society, December 2001 V. 39, P. 39–41.
5. *Kumar M. J., Sithanandam R.* Extended p+. Stepped Gate LDMOS for Improved Performance // IEEE Transactions on Electron Devices, July 2010. V. 57, No. 7. P. 1719–1724.
6. *Jingjing J. [et al.]* Improving Breakdown Voltage for a Novel SOI LDMOS with a Lateral Variable Doping Profile on the Top Interface of the Buried Oxide Layer // Advances in Condensed Matter Physics, Vol. 2015, Article ID 762498. 6 pages.
7. *Chen W., Zhang B., Zhaoji L.* Optimization of super-junction SOI-LDMOS with a step doping surface-implanted layer // Semiconductor Science and Technology. 2002. V. 22, I. 5. P. 464–470, 2007.

УДК 621.382

## Существующие методы и проблемы верификации OPC решений

*Е.С. Шамин<sup>1,2</sup>, А.В. Кузовков<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

Одним из важных этапов современного процесса подготовки информации для фотолитографии является коррекция оптической близости (далее OPC – OpticalProximityCorrection). Проведение этапа OPC требует применения специальных инструментов (EDA – Electronic Design Automation). Предлагаемые сегодня средства EDA реализуют различные механизмы коррекции для технологий разных уровней.

Одним из ключевых этапов OPC является верификация результата коррекции. В ходе верификации определяются опасные точки топологии, где результат моделирования фотолитографии в значительной степени расходится с исходной топологией.

В рамках работы был проведен обзор инструментов верификации OPC от трех лидирующих разработчиков.

1. Mentor Graphics (OPC verify [1], ORC [2]).
2. Synopsys (Proteus LRC [3]).
3. Cadence (Litho Physical Analyzer [4]).

Изучены и описаны механизмы работы инструмента ORC (Optical Rule Check) компании Mentor Graphics, используемого в АО «НИИМЭ». Были выявлены недостатки ORC, проявляющиеся при проверке ошибок типа «Перемычка» и «Разрыв» (рис.1). Также было проведено сравнение данного инструмента с более новым продуктом Mentor Graphics – OPC verify, обладающим значительными преимуществами относительно инструмента ORC.

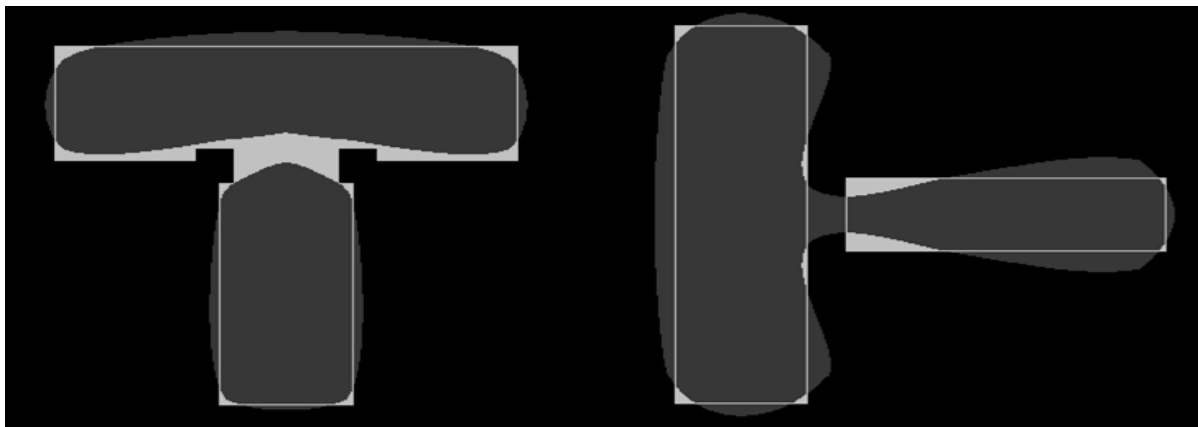


Рис.1. «Перемычка» и «Разрыв»

### Литература

1. Calibre® OPC verify™ User's and Reference Manual. Version 2014.3. Mentor Graphics Corporation. 2014. P. 452.
2. Calibre® OPC pro™ User's and Reference Manual Version 2014.3. Mentor Graphics Corporation. 2014. P. 720.
3. Proteus LRC Full-chip verification through process window.  
URL: <https://www.synopsys.com/silicon/mask-synthesis/proteus-lrc.html>
4. Cadence Litho Physical Analyzer. Full-Chip, Model-Based Design Manufacturability Checking and Contour Shape Prediction. URL: <http://pdf2.solecsy.com/569/6c0fdc41-2dc1-4c05-adf9-710908e72936.pdf>



## Реализация блокирования самосовмещенных линий при мультипаттернировании для формирования линий металлизации с шагом 40 нм и менее

*М.В. Литаврин<sup>1,2</sup>, О.П. Гуцин<sup>1</sup>, Е.С. Горнев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>АО «НИИМЭ»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Мультипаттернирование позволило продолжить масштабирование технологии чипов до нормы 28 нм и далее. Самосовмещенное двойное паттернирование (SADP) и самосовмещенное четырехкратное паттернирование (SAQP), а также итерации Litho-Etch/Litho-Etch (LELE) широко используются в полупроводниковой индустрии, так как это позволяет формировать структуры с суб-193i-литографическими размерами для таких слоев, как FIN, затворы и критические слои металлизации. Для мультипаттернирования требуется использовать нескольких фотомасок, что очень дорого и увеличивает сложность маршрута, а также вариации ошибок размещения края, зависящие главным образом от точности совмещения. Для снижения требований к совмещению для передовых технологических норм (7 нм и ниже) можно использовать подход блокирования самосовмещенных линий (БСЛ). Этот подход снижает требование к точности совмещения за счет высоких селективностей травления и позволяет ослабить требования к совмещению для cut-маски с величины полушага до величины (3 × полушаг). Самосогласование является последней тенденцией масштабирования, и ведутся активные исследования самосогласованных маршрутов для различных критических слоев, таких как контакты, переходные окна и металлизация.

В этой статье мы рассматриваем недорогую гибкую стратегию БСЛ для формирования критического металлического слоя на нормах 7 нм и далее от формирования маски до травления low-k. Подход основан на SADP с шагом 40 нм с двумя cut-масками, совместимыми с подходом № 1, так и подходом № 2, и использует диэлектрические пленки, широко применяемые в BEOL. Как следствие, этот подход совместим с традиционными методами травления, осаждения и очистки, которые оптимизированы для травлений диэлектриков. Мы рассмотрим основные шаги и селективности, необходимые для реализации этих подходов, а также отметим особенности каждого подхода.

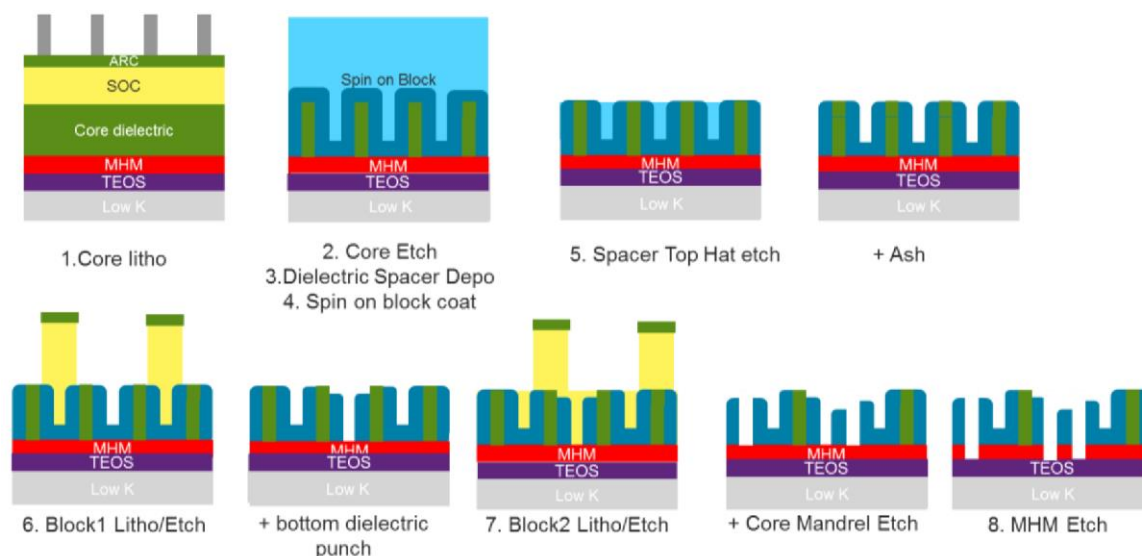


Рис. 1. Вариант № 1 реализации блокирования самосовмещенных линий

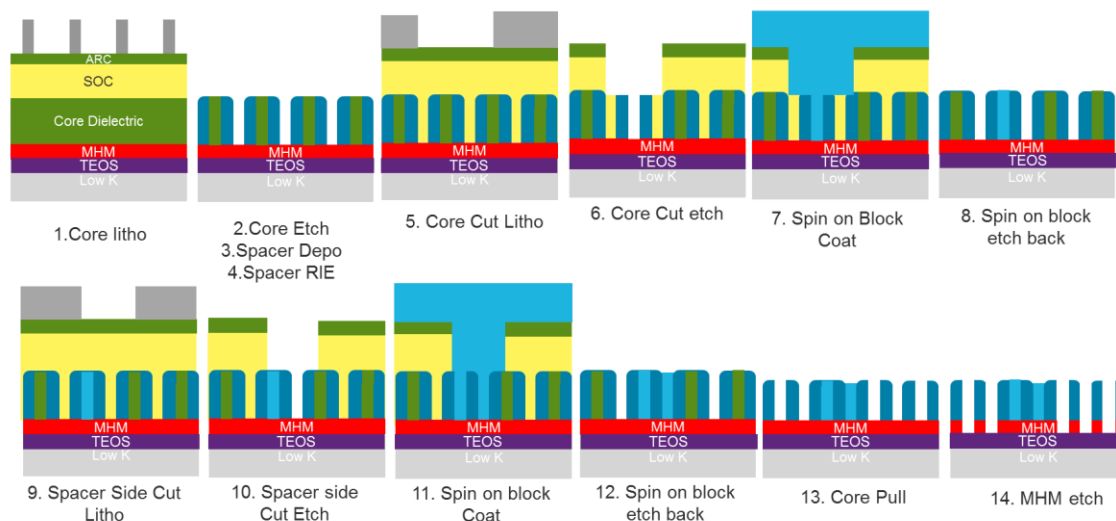


Рис. 2. Вариант № 2 реализации блокирования самосовмещенных линий

### Литература

1. Raley A., Mohanty N., Sun X. [et al.]. Self-aligned blocking integration demonstration for critical sub-40 nm pitch Mx level patterning // Proc. SPIE 10149. Advanced Etch Technology for Nanopatterning VI. 7 April 2017. 1014900.

УДК 621.382

### Обзор и анализ существующих подходов к реализации DET – триггеров

*М.А. Горчакова<sup>1,2</sup>, Л.Г. Нидеккер<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

При разработке изделий микроэлектроники для мелкосерийных поставок, является целесообразным использование полузаказных микросхем, что позволяет значительно сократить расходы и время проектирования. Одним из видов сверхбольших интегральных схем (СБИС) полузаказного типа является базовый матричный кристалл (БМК) – набор некоммутированных элементов, регулярно расположенных на кристалле.

Для реализации определенной функции на базе БМК, создается шаблон рисунка межсоединений, который воспроизводится на этапе формирования зашивочных слоев металлизации. КМОП (комплементарная структура металл–оксид–полупроводник) является доминирующей технологией, применяемой при проектировании матричных СБИС, за счет наибольшей плотности упаковки базовых ячеек, быстродействия и малого энергопотребления. Базовая ячейка поля БМК обычно представляет собой набор транзисторов р- и n-типов. В зависимости от разновидности соединения транзисторов, можно получить элемент, выполняющий логическую функцию «И-НЕ» или «ИЛИ-НЕ». На основе базовых ячеек строятся логические элементы различной сложности. Это могут быть как обычные комбинаторные элементы, так и последовательная логика, мультиплексоры и т.д. Триггеры являются одной из самой важной составляющей цифровых схем. Их параметры, такие как задержка переключения, потребляемая мощность, площадь и др., напрямую влияют на скорость работы и производительность всей СБИС. Следовательно, особое внимание во время проектирования схем должно быть уделено их разработке [1–2].

В настоящее время все больше и больше возникает потребность в высокоскоростных цифровых схемах с низким энергопотреблением. В цифровых СБИС наибольшее потребление происходит при переключении триггеров в момент подачи

синхросигнала. Так как стандартные триггеры переключаются только по одному фронту тактовой частоты (либо положительному, либо отрицательному), то потребление на другом фронте не является «функциональным», то есть на нем не происходит перезаписи регистров. Для решения данной проблемы используются различные конструкции D-триггеров, работающих по двум фронтам (DET – триггеров). Такой триггер за один период синхросигнала может обработать два значения. Таким образом, можно снизить тактовую частоту в два раза при неизменной скорости передачи данных.

В данном исследовании рассмотрены некоторые реализации DET – триггеров [3–5]. Проанализированы их параметры, такие как потребляемая мощность на цепях распространения тактового сигнала и сигнала данных, общая потребляемая мощность и задержки. Произведено сравнение этих схем и выявлены недостатки и преимущества каждой из них. Так же рассмотрен вопрос реализации DET – триггеров на основе стандартных ячеек БМК.

### Литература

1. Красников, Г.Я. Физико-технологические принципы и методы обеспечения качества КМОП БИС массового производства: Автореф. дис. д-ра техн. наук. М., 1996.
2. Домрачев В. Г. Базовые матричные кристаллы и матричные БИС. М., 1992.
3. Chung, Wai, Timothy Lo, and ManojSachdev. A comparative analysis of low-power low-voltage dual-edge-triggered flip-flops // IEEE transactions on very large scale integration (VLSI) systems. 2002. 10.6. 913-918.
4. Cheng, Kuo-Hsing, and Yung-Hsiang Lin. A dual-pulse-clock double edge triggered flip-flop for low voltage and high speed application, // Circuits and Systems, 2003. ISCAS'03. Proceedings of the 2003 International Symposium on IEEE. 2003 V. 5.
5. Pedram, Massoud, Qing Wu, and Xunwei Wu. A new design of double edge triggered flip-flops.// Design Automation Conference, 1998. Proceedings of the ASP-DAC'98. Asia and South Pacific. IEEE. 1998.

УДК 621.382.322

### Исследование влияния конструкции и методов формирования на n-канальный LDMOS-транзистор

*Е.А. Ганыкина<sup>1,2</sup>, П.В. Игнатов<sup>2</sup>, Е.С. Горнев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО «НИИМЭ»

В настоящее время производство кремниевых мощных полевых транзисторов занимает важное место в полупроводниковой электронике. Из-за своих преимуществ перед биполярными транзисторами как в линейном режиме, так и в режиме переключения, именно мощные МОП-транзисторы являются наиболее распространёнными элементами интегральных микросхем [1]. При изготовлении таких транзисторов используются различные технологии. Основные из них: биполярная, DMOS – МОП-технология, сделанная по методу двойной диффузии, VMOS – технология с использованием вертикальной МОП-структуры, LDMOS – кремниевая МОП-технология с боковой диффузией. При разработке и производстве мощных полевых транзисторов используются все три технологии. Однако сейчас на первое место в силу своих преимуществ выходят LDMOS-транзисторы. Они используются в различных областях, где диапазон рабочих напряжений существенно выше, чем тот, который могут обеспечить традиционные КМОП-транзисторы. Так, типичные напряжения, используемые в портативной электронике, составляют 24 В, в автомобильной электронике 60 В, а для телекоммуникационных систем достигают свыше 100 В [2].

LDMOS-транзисторы (рис. 1) являются достаточно нетривиальным конструктивно-технологическим решением. Благодаря высокому уровню развития современного программного обеспечения для численного моделирования полупроводниковых приборов

становится возможным исследование современных LDMOS-транзисторов без проведения аналитических расчетов. Проведение приборно-технологического моделирования позволит изучить влияние конструктивных и технологических факторов на электрические параметры LDMOS-транзисторов и выработать правила для их проектирования. Построение модели и проектирование мощных LDMOS-транзисторов даст возможность создавать устройства с заданными электрическими параметрами при минимальном количестве проверок и экспериментальных партий, что является весьма актуальной задачей.

В настоящей работе исследованы конструктивные параметры и электрофизические характеристики высоковольтной реализации элементной базы, выполненной на объемном кремнии. Охвачено теоретическое рассмотрение и конструктивно-технологическое предложение к реализации транзистора с повышенным пробивным напряжением на структуре объемного кремния с возможностью потенциальной интеграции в уже освоенный предприятием технологический маршрут создания прибора. Проведена практическая часть с использованием среды компьютерно-технологического моделирования по части формирования прибора с предложенной конструкцией и её последующей оптимизацией.

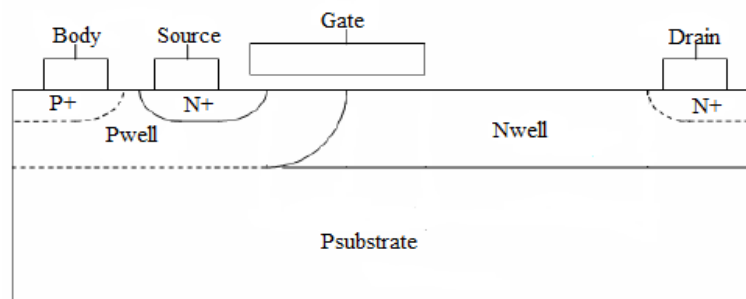


Рис. 1. Поперечный разрез LDMOS-транзистора [3]

Работа выполнена при поддержке АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники».

### Литература

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. С. 2–5.
2. Кожевников В. [и др.]. Мощные СВЧ LDMOS-транзисторы ОАО «НИИЭТ» для средств радиосвязи и радиолокации // Электронные компоненты. 2015. № 4. с. 60–63.
3. Ma Y., Jeng M. C., Liu Z. HVMOS and LDMOS Modeling Review // Cadence Design Systems, Inc. 2007.

## Исследование и разработка технологии атомно-слоевого осаждения оксида алюминия

*С.С. Зюзин<sup>1,2</sup>, К.В. Руденко<sup>3</sup>, А.В. Мяконьких<sup>3</sup>, О.П. Гуцин<sup>1</sup>, В.А. Гвоздев<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>АО «НИИМЭ»

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>3</sup>Физико-технологический институт РАН

Атомно-слоевое осаждение (ALD) является важнейшим методом для нанесения тонких плёнок и имеет множество применений. На данный момент полупроводниковая промышленность является главным мотивационным фактором развития ALD. Процесс миниатюризации вывел требования по нанесению тонких плёнок на атомный уровень. Создаются структуры с усложнённой топологией, которые должны быть равномерно покрыты плёнкой. Ни один другой существующий на сегодняшнее время метод нанесения тонких плёнок не позволяет достичь более равномерного нанесения по сравнению с ALD. ALD удовлетворяет всем необходимым требованиям к нанесению тонких плёнок: равномерность, однородность, прецизионность осаждения [1].

С научной точки зрения в мире достаточно хорошо изучено множество различных вариаций ALD. Однако для дальнейшего уменьшения степени неоднородности, уменьшения затрат на проведение процесса осаждения и, самое главное, для попадания в температурный интервал последующих операций (например, для получения нужных механических и химических свойств отжиг полимера происходит при температурах, не превышающих 250 °С), и соблюдения термобюджета СБИС [2, 4] требуется более полное рассмотрение атомно-слоевого осаждения плёнки оксида алюминия при пониженных температурах (порядка 200 °С).

В работе проведено исследование и разработка технологии ALD оксида алюминия  $Al_2O_3$  при пониженных температурах. Рассмотрены основные принципы ALD, альтернативные методы нанесения тонких плёнок (PVD, CVD), обоснован выбор используемого метода. Технология опробована на тестовой партии образцов, проведены измерения основных параметров осаждённых плёнок (толщины, неоднородности; результаты измерений приведены в табл. 3).

Полученные результаты позволяют встроить технологию низкотемпературного ALD в имеющееся производство в условиях повышенных требований к температурному режиму процессов, в частности применить её при осаждении жёсткой маски для последующего анизотропного травления глубоких отверстий в кремнии.

Исследование выполнено при поддержке АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» и физико-технологического института РАН.

**Результаты измерений образцов с осажденной пленкой  $Al_2O_3$ .**

Таблица 1

Образец	Средняя толщина $M(x)$	Мин. толщина $\min(x)$	Макс. толщина $\max(x)$	Ср. кв. откл. $\sigma_x$	$\sigma_x/M(x)$	$\max(x) - \min(x)$
						$\max(x) + \min(x)$
1	46,80	46,72	46,89	0,04	0,001	0,0017
2	47,15	47,02	47,26	0,04	0,001	0,0024
3	47,05	46,95	47,16	0,04	0,001	0,0022
4	47,19	47,07	47,29	0,04	0,001	0,0023
5	47,24	47,15	47,36	0,04	0,001	0,0022
Средние значения	47,09	46,98	47,19	0,04	0,001	0,0022

## Литература

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. С. 2–5.
2. Miakonkikh A.V. [et al.]. Elements for hard X-ray optics produced by cryogenic plasma etching of silicon // The International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2016. International Society for Optics and Photonics, 2016. С. 1022421–1022421–5.
3. Tan C.S., Gutmann R.J., Reif L.R. (ed.). Wafer level 3-D ICs process technology. Springer Science & Business Media. 2009.
4. Parasuraman J. [et al.]. Deep reactive ion etching of sub-micrometer trenches with ultra high aspect ratio // Microelectronic Engineering. 2014. Т. 113. С. 35–39.

УДК 535.3

### Дифракционные решетки в составе интерфейса полосковых волноводов структур микроэлектроники

А.А. Марахин<sup>1,2</sup>, М.Ю. Барабаненков<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО НИИМЭ

<sup>3</sup>Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов

Основными объектами исследования работы являются интегрированные на планарных волноводах дифракционные решетки и устройства ввода/вывода излучения, выполненные на их основе. Задача оптимизации параметров дифракционной решетки, включённой в состав полоскового волновода, для наиболее эффективного ввода излучения в волновод была разбита на несколько этапов:

- 1) теоретические оценки оптимальных параметров;
- 2) компьютерное моделирование распределения поля в структуре;
- 3) анализ соответствия полученных при моделировании результатов теоретическим оценкам.

При максимизации эффективности ввода излучения учитывались следующие параметры структуры: угол падения пучка ( $\varphi$ ), период дифракционной решетки ( $T$ ), толщина оксидного слоя под волноводом ( $D$ ), высота решетки ( $h$ ), ширина зубцов решетки ( $a$ ), оптические плотности волновода, оксидного слоя и воздуха ( $n_1, n_2, n_3$ ), соответственно.

$$\frac{2\pi n_1}{\lambda_0} 2d \sin \theta_0 = 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{1 - \left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2}{(\sin \theta_0)^2} - 1} + 2 \tan^{-1} \sqrt{\frac{1 - \left(\frac{n_3}{n_1}\right)^2}{(\sin \theta_0)^2} - 1},$$

$$n_3 k_0 \sin \varphi_0 + \frac{2\pi}{T} \approx n_3 k_0 \cos \theta_0.$$

Данные соотношения связывают угол падения пучка с периодом решетки и другими параметрами структуры. При расчётах было принято, что оптимальная с точки зрения распространения излучения толщина волновода равняется 220 нм [1], оптическая плотность кремния  $n_1 = 3.477 + 2 \cdot 10^{-7}i$ , оптическая плотность оксида кремния  $n_2 = 1.46$ , оптическая плотность воздуха  $n_3 = 1$ . Соотношения получены из принципа: для максимизации эффективности ввода излучения необходимо создать в волноводе поле, максимально близкое по своей структуре к моде волновода. Это достигается за счет совпадения горизонтальной компоненты волнового вектора одного из дифракционных порядков (в данной работе первого), и константы распространения для данной моды, что достигается подбором угла падения излучения и периода решетки (рис. 1).

Эффективность ввода излучения ограничивается сверху отражением. Минимизация отражения достигается за счёт подбора толщины оксидного слоя ( $D$ ). Зависимость коэффициента отражения от толщины  $\text{SiO}_2$  оценивается исходя из упрощённой модели, исключая влияние на зависимость решетки на поверхности волновода.



Для поиска конкретных значений параметров структуры, соответствующих максимуму эффективности ввода, из выделенной с помощью теоретических оценок области было проведено компьютерное моделирование процесса ввода излучения в волновод.

Результаты компьютерного эксперимента довольно хорошо сошлись с теоретическими предсказаниями; теоретические зависимости, в свою очередь, помогли значительно сузить круг поиска оптимальных параметров структуры (Рис. 3).

По результатам моделирования удалось получить параметры структуры ( $T = 650$  нм,  $a/T = 0.5$ ,  $D = 1.32$  мкм,  $\varphi = 0.54$  рад), соответствующие эффективности ввода в 48,6%.

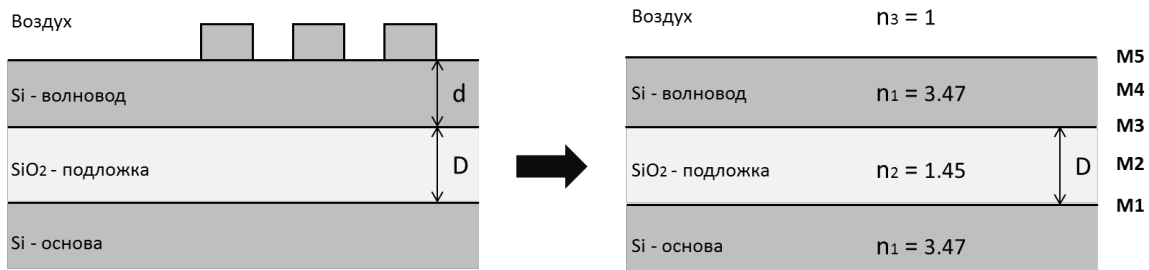


Рис. 1. Иллюстрация основного принципа максимизации эффективности ввода излучения.

Рис. 2. Иллюстрация упрощения модели для расчета оптимальной толщины оксидного слоя (D).

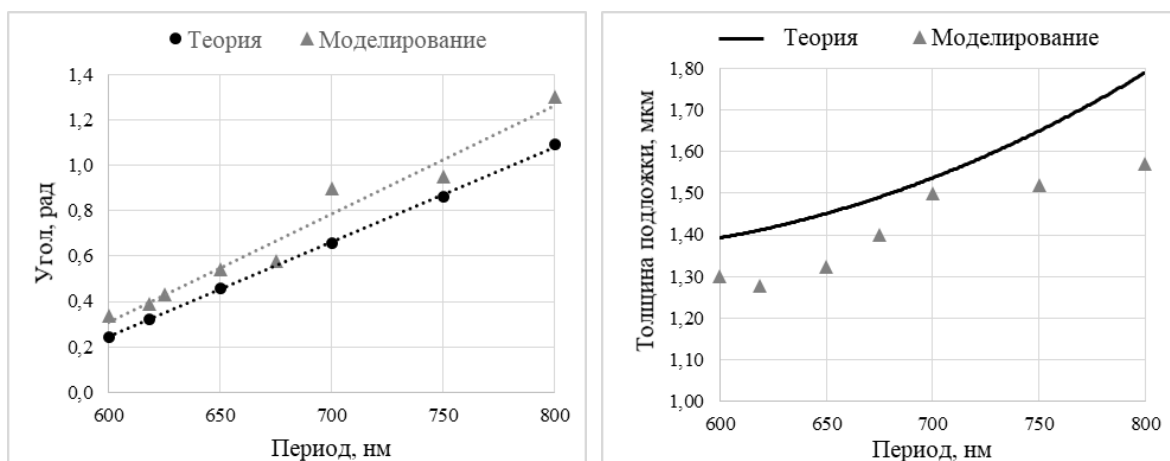
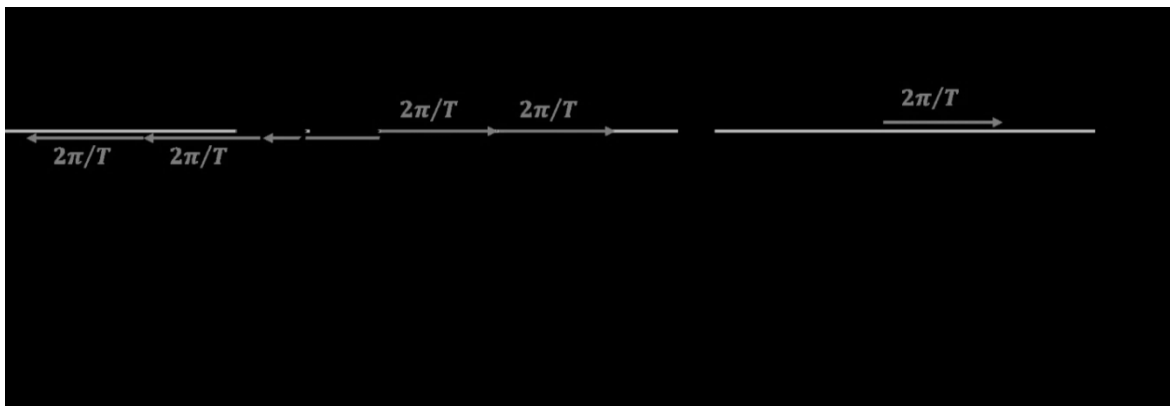


Рис. 3. Иллюстрация упрощения модели для расчета оптимальной толщины оксидного слоя (D)

### Литература

1. Lee K. K. [et al.]. Effect of size and roughness on light transmission in a Si/SiO2 waveguide:

- Experiments and model // Appl. Phys. Lett. 2000.
2. *Otrobchouk R., [et al.]*. High-efficiency light coupling in a submicrometric // Applied optics. 2000.
  3. *Sohlström H., [et al.]*. Apodized waveguide-to-fiber surface grating couplers // [www.kth.se](http://www.kth.se). 2013.
  4. *Popov E., [et al.]*. Gratings: Theory and Numerical Applications. Second Revisited Edition // Aix Marseille Universite, CNRS, Centrale Marseille, Institut Fresnel. 2014.
  5. *Макушкин М. [и др.]*. Современное состояние и перспективы развития фотонных ИС. // Эксперсс-информация по зарубежной электронной технике, 2017. вып. 10.
  6. *Пранин В. Д. [и др.]*. Курс лекций «Элементы и устройства интегральной оптоэлектроники». Самара, 2012.

УДК 621.382

## Моделирование методом Монте-Карло образования вторичных электронов в кристаллическом кремнии

*Е.В. Кузнецова*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

При расчете методом Монте-Карло возбуждения вторичных быстрых электронов. Использовалась гибридная модель для дискретного и непрерывного процесса потери энергии.

Теория Молльера [1] описывает дифференциальное сечение неупругого рассеяния, которое определяет скорость генерации быстрых вторичных электронов.

$$\frac{\sigma_{in}}{d\zeta} = \frac{B}{E} \left( \frac{1}{\zeta^2} + \frac{1}{(1-\zeta)^2} - \frac{1}{\zeta(1-\zeta)} \right), \quad (1)$$

$$B = \frac{2\pi e^4}{mv^2},$$

где  $e$  – заряд электрона,  $v$  – скорость электрона,  $m$  – масса электрона,  $E$  – энергия электрона,  $\zeta$  – переданная энергия электрона, нормированная на энергию электрона.

Уравнение Резерфорда определяло дифференциальное сечение упругого рассеяния.

Уравнение Бете было использовано для определения потерь энергии в случае упругого рассеяния.

$$-\left(\frac{dE}{dS}\right)_{Bethe} = 2B \sum_i N_i Z_i \ln\left(\frac{1.166E}{I_i}\right), \quad (2)$$

где  $N_i$  – количество  $i$ -х атомов на единицу объема,  $Z_i$  – зарядовый номер  $i$ -го атома,  $I_i$  – энергия ионизации  $i$ -го атома.

В результате расчетов были получены: зависимость длины свободного пробега электрона от энергии электрона в кремнии, вероятность возникновения вторичных электронов от энергии первичного электрона (рис. 1), а также профиль поглощенной энергии в кремнии при экспонировании кремния электронным лучом.

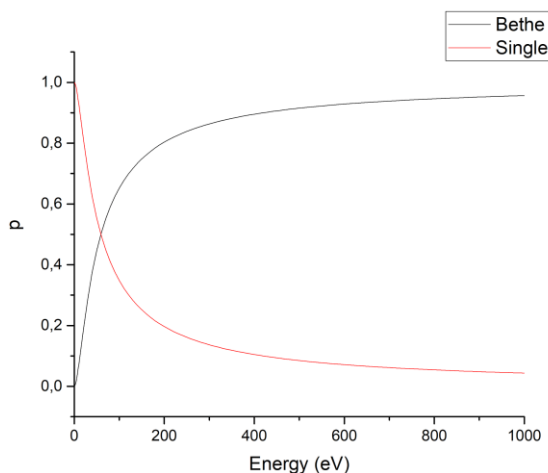


Рис. 1. Вероятности (р) упругого взаимодействия первичного электрона в кремнии (черная кривая) и неупругого взаимодействия (красная кривая)

### Литература

1. *Masatoshi Kotera, Kenji Murata, Koichi Nagami.* Monte Carlo simulation of fast secondary electron production in electron beam resists // *Journal of Applied Physics*. 1981. V. 52. P. 4396.
2. *Asuman Aydin.* Monte Carlo calculations of low energy positrons in silicon // *NUKLEONIKA* 2005. V. 50(1). P. 37–42.

УДК 621.382.322

### Инерциальный варикап для БИНС

*А.В. Самсонова<sup>1,2</sup>, Ю.В. Шульга<sup>2</sup>, А.Г. Итальянцев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>АО НИИМЭ

В настоящее время наиболее актуальными направлениями функциональной микроэлектроники являются создание малоразмерных, надежных и недорогих инерциальных приборов контроля параметров движения объектов.

Проблема навигации является одной из наиболее востребованных задач военной промышленности, гражданской авиации и мобильных технологий. Навигационные системы могут принимать сигналы спутниковой навигации, других внешних источников или быть независимыми от внешнего сигнала (ИНС). Узлы ИНС находятся непосредственно на борту ориентируемого объекта, что делает их независимыми от внешних источников и каналов связи с ними. Преимуществами методов инерциальной навигации являются высокая помехозащищенность, полная автономность, и возможность полной автоматизации всех процессов навигации

Основой любого датчика ИНС является чувствительный элемент (ЧЭ). Наиболее распространенные ЧЭ датчиков линейных и угловых ускорений выполняются по МЭМС технологии или с использованием пьезоэлектрического эффекта: пьезоэлектрический акселерометр, вибрационный гироскоп, емкостной акселерометр и гироскоп-камертон. Принципы детектирования сигналов от таких ЧЭ основаны на детектировании изменения силы тока или напряжения при инерциальных перегрузках. Такой подход имеет ряд недостатков.

Однако существуют не только аналоговые методы формирования сигнала, но и более развитые цифровые.

В работе используется следующая схема детектирования внешней перегрузки: к кварцевому резонатору подключается объект чувствительный к инерциальным

перегрузкам и меняющий емкость в зависимости от величины перегрузки. Сигналом в этом случае является частота резонатора, изменяющаяся в зависимости от величины подключенной емкости. В качестве переменной емкости используется ЧЭ балочной конструкции.

С использованием теоретических оценок, моделирования и экспериментальных исследований в работе рассмотрена цепочка преобразования: инерциальная перегрузка → прогиб балочной конструкции варикапа → ёмкость варикапа → частота кварцевого резонатора. Исследование электрофизических параметров устройства проводилось путем приборного моделирования в программной среде Comsol.

Также был проведен эксперимент, позволяющий получить передаточную функцию напрямую.

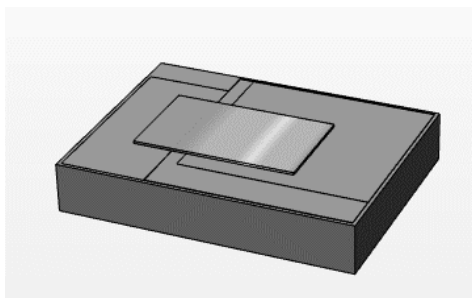


Рис. 1. Варикап балочной конструкции, выполненный из кремния

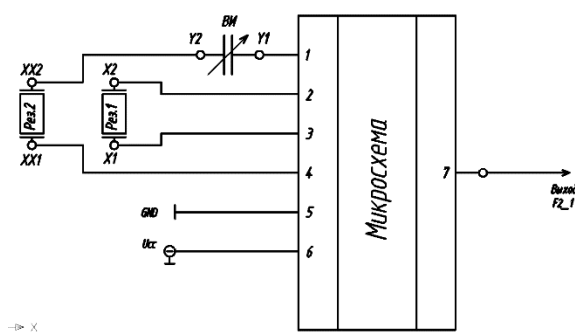


Рис. 2. Принципиальная схема измеряемого образца

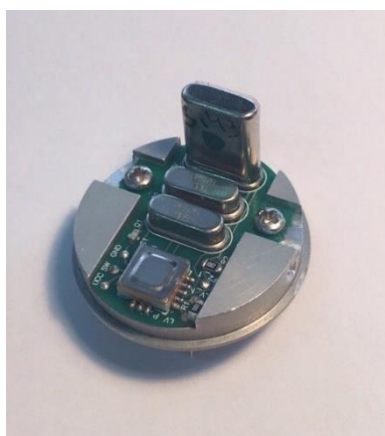


Рис. 3. Датчик контроля угловой скорости высокودинамичных объектов

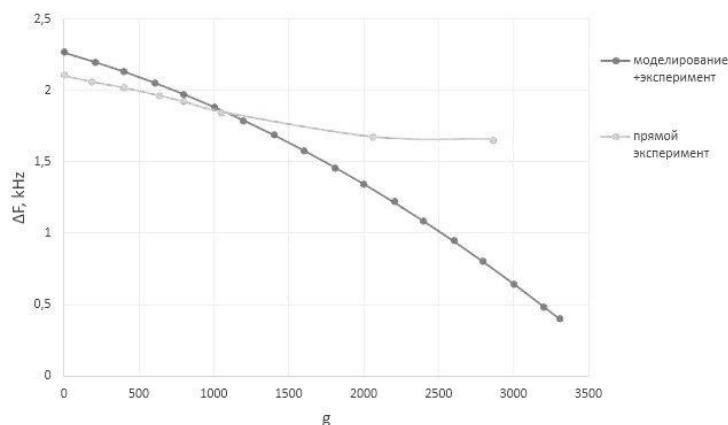


Рис. 4. Сопоставление теоретических оценок с данными прямого эксперимента

### Литература

1. Щербо А.Г. Основы теории упругости и пластичности. Новополюк: ПГУ, 2008. 240 с.
2. Янчич В.В. Пьезоэлектрические датчики вибрационного и ударного ускорения: Учебное пособие Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2008. 77 с.
3. Шахнович И. МЭМС-гироскопы – единство выбора // Электроника: наука, технология, бизнес. 2007. 20071, № 1. 76 с.
4. Патент 10.04.2009 РФ. Интегральный микромеханический гироскоп-акселерометр // Коноплев Б.Г., Лысенко И.Е., Шерова Е.В. Бюл. № 10. 2009.
5. European Patent Application EP 1416249 A1, приоритет от 28 октября 2002.
6. US Patent 6.862.934, приоритет от 10 апреля 2003.

УДК 581.787

## Применение волноводных пересечений с использованием дискретных элементов в интегральной фотонике

А.А. Сапегин<sup>1,2</sup>, М.Ю. Барабаненков<sup>1,3</sup>, А.Г. Итальянцев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИ молекулярной электроники

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (Государственный университет)

<sup>3</sup>Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов

Проведен литературный обзор и анализ современных конструкторских решений в области построения планарных волноводных пересечений. Теоретически обоснована возможность создания волноводных пересечений на дискретных кластерах наночастиц из золота и алюминия.

Одним из основных направлений развития микроэлектроники сегодня – увеличение скорости передачи и обработки информации. Увеличение скорости путем совершенствования электронных интегральных схем (ИС) достигает физического и технологического предела [1]. Передовые топологические нормы на данный момент составляют десятки нанометров. Дальнейшее уменьшение размера транзистора приближает его к размеру нескольких атомов, что обуславливает существенный вклад квантовых эффектов в параметры транзисторов. Одним из альтернативных решений является разработка гибридных фотонных интегральных схем (ФИС), по причине более высокой скорости передачи сигнала и меньших тепловых потерь в таких системах. Кроме того, ФИС потенциально позволяют расширить имеющийся динамический частотный диапазон на 3–4 порядка (до  $10^{15}$  Гц). В связи с данными факторами, построение ФИС

является одним из приоритетных направлений развития ведущих научных центров и предприятий микроэлектронной промышленности (Intel, IBM) [2].

Одними из основных компонентов ФИС являются волноводы и пересечения на их основе, служащие для передачи, обработки и разводки сигналов в пределах ФИС. Построение высокоэффективных волноводных пересечений с низкими потерями позволяет создавать развитую архитектуру без высоких затрат энергии. Однако для расчетов волноводных пересечений неприменимы стандартные методы расчета электронных ИС. При построении необходимо учитывать такие параметры, как длина волны, профиль моды и наличие дифракции на неровностях конструкции волноводной системы.

Одной из передовых концепций на сегодняшний день является предложенная в работе [3] оптимизация волноводного пересечения путем расширения и придания специальной формы области пересечения волноводов. Идея заключается в ослаблении дифракции с помощью подавления широкоугольных компонент. Тем самым режим распространения вблизи пересечения приближается к плоской волне. Для этого расширяют ядро волновода, что может быть сделано с помощью эллиптических или параболических расширителей. Однако такого рода конструкции требуют детального расчета, точности и технологической воспроизводимости элементов структуры пересечения, и характеризуются большой длиной областей пересечения (как минимум 10 мкм). Для уменьшения дифракционных потерь в области пересечения, авторы [3] предложили схему, которая снижает разность показателей преломления одновременно с удержанием моды внутри волновода на большей части волноводного пересечения. Меньшая разность показателей преломления уменьшает дифракцию в части пересечений, а также обратные отражения. Понижение  $\Delta n$  достигается методом двойного травления. Благодаря этому методу возникает несколько полезных изменений в области пересечения. Во-первых, мода не выходит за пределы волновода почти во всей области пересечения. Во-вторых, меньший коэффициент преломления в областях с небольшим травлением создаёт эффект выпрямления изогнутых фазовых фронтов волны. С использованием вышеперечисленных методов авторам [3] удалось свести потери к 3,2% интенсивности.

Альтернативой данной концепции является построение волноводных пересечений на дискретных элементах (цилиндрах, решетках, столбиках) [4]. В таких системах ЭМ-волна распространяется за счет возбуждения электрических токов в цепочке наноразмерных частиц. Такие системы также показали низкие потери интенсивности, однако оказались достаточно чувствительными к технологии изготовления и точности исполнения отдельных дискретных элементов.

В настоящем докладе приведены результаты теоретических расчетов собственных мод, их ширины, добротности дискретных систем, состоящих из нескольких наночастиц в планарной геометрии в зависимости от их взаимного расположения, формы, материала и размера. Результаты теоретических расчетов показывают возможность создания волноводных пересечений на основе сфер и цилиндров из золота и алюминия с низкими потерями интенсивности.

### Литература

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития. // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. С. 2–5.
2. Макушин М., Хомчик А. Современное состояние и перспективы развития фотонных ИС // Экспресс-информация по зарубежной электронной технике. 2017. Вып. 10.
3. Bogaerts W., Dumon P., Thourhout D. V., Baets R. Low-loss, low-cross-talk crossings for silicon-on-insulator nanophotonic waveguides // Opt. Lett. 2007. V. 32. P. 2801–2803.
4. Bock P. J., Cheben P., Schmid J. H., Lapointe J., Delage A., Xu D.-X., Janz S., Densmore A., Hall T. J. Subwavelength grating crossings for silicon wire waveguides // Optics Express. 2010. 18 (15) 16146–16155.



## Разработка микросхемы квадратурного цифрового супергетеродинного приемника

*А.А. Малыгин, Р.С. Михеев*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
АО НИИМЭ

Современные тенденции в радиоэлектронике – это создание радиоприемников, способных одновременно поддерживать несколько стандартов модуляции. Также полоса вещания становится все более ценным ресурсом, что накладывает жесткие ограничения на линейность и уровень шумов. Таким образом, актуальным решением становится аналого-цифровое преобразование на ранней стадии приема, что подразумевает использование полосовой дельта-сигма модуляции [1].

Данная разработка позволяет улучшить качество обработки РЧ-сигнала за счёт использования дельта-сигма модуляции и ранней цифровой обработки (квадратурная демодуляция происходит в цифровом виде). В стандартной схеме приема используются блоки: антенна, мшу, фильтры, смесители, АЦП. Спектр полезного сигнала переносится с несущей частоты на нулевую (демодулируется) и затем оцифровывается с помощью низкочастотного АЦП.

В таком подходе есть недостатки, такие как высокие нелинейные искажения в аналоговом тракте, влияние низкочастотных шумов АЦП и т.д. При использовании данного подхода схемы проектируются с большим количеством аналоговых блоков, что является причиной нелинейности и ограничивает точность. Цифровые приемники (рис. 1) позволяют значительно улучшить эти характеристики за счет перевода сигнала в цифровой вид на ранней стадии приема (на промежуточной частоте).

Основным аналого-цифровым ядром в данных приемниках является полосовой или квадратурный дельта-сигма модулятор. Он превращает аналоговый сигнал на промежуточной частоте в цифровой поток низкочастотных данных с распределенным спектром шума квантования таким образом, что его плотность мощности вытесняется из области промежуточной частоты (области частот полезного сигнала) в область высоких и низких частот. Следующие этапы: перенос спектра с промежуточной на нулевую частоту и фильтрация происходят в цифровом виде. С помощью данной техники преобразования характеристики приема существенно улучшаются.

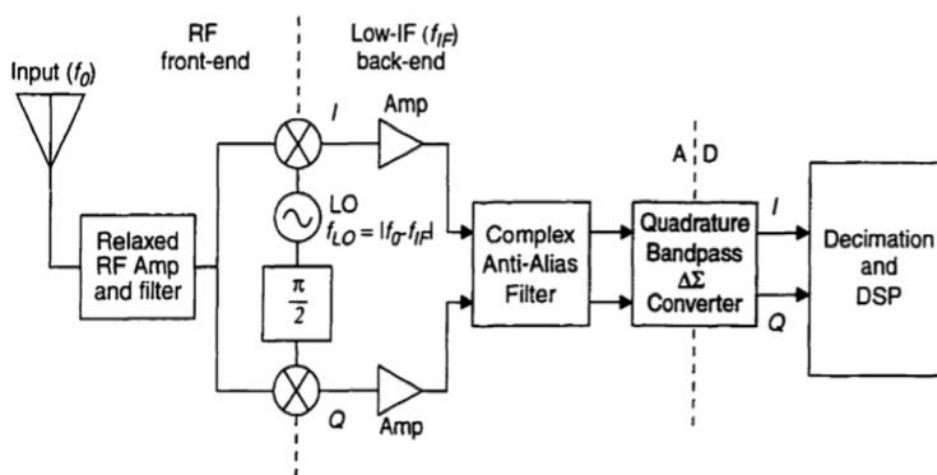


Рис. 1 Структура приемника [2]

## Литература

1. Schreier R. [et al.]. Understanding delta-sigma data converters. Piscataway, NJ : IEEE press, 2005. 446 с.
2. Marttila J., Allén M., Valkama M. Design and analysis of multi-stage quadrature sigma-delta A/D converter for cognitive radio receivers // Computer Aided Modeling and Design of Communication Links and Networks (CAMAD), 2011 IEEE 16th International Workshop on. IEEE. 2011. С. 138–142.

УДК 004.032.26

### Математическая модель конечного автомата абстрактного нейрона

*Г.С. Теплов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
АО «НИИМЭ»

Предлагается теоретико-множественная модель конечного автомата абстрактного нейрона (КААН). Модель предназначена для аппаратной реализации искусственных нейронов на основе цифровых, аналоговых и гибридных схемотехнических решений. Конечный автомат абстрактного нейрона описывается набором конечных множеств  $(N, E, W, Q, \Delta, \Lambda, T)$ , где  $N$  – множество индексов входов;  $E$  – алфавит включающий множества всех возможных входных  $E_{input}$  и выходных  $E_{output}$  символов;  $W$  – линейно упорядоченное множество весовых коэффициентов;  $Q$  – множество определения функций активации  $Dom\lambda$ ;  $\Delta$  –  $n$ -арная функция учета взвешенных информационных входных сигналов,  $n = |N|$ ;  $\Lambda$  – множество функций активации  $\lambda_i$  реализуемых на данном КААН  $\lambda_i \in \Lambda$ ;  $T$  – множество функций изменения параметров КААН  $\Delta, \Lambda$  и  $\tau_i \in T$ .

Множества  $E_{input}$  и  $E_{output}$  содержат множества информационных  $E_{in}$  и управляющих  $E_r$  символов, что дает следующее описание каждого входного  $I_i$  (1) и выходного  $O_i$  (2) сигналов КААН:

$$I_i = \left\{ (i_1, i_2, \dots, i_j) \mid i_j = (e_{in}, e_r) \wedge j \in N \wedge e_{in} \in E_{in} \wedge e_r \in E_r \wedge ((E_{in} \cup E_r) \subseteq E_{input}) \right\}, \cup_i I_i = I, \quad (1)$$

$$O_i = \{ (e_{in}, e_r) \mid e_{in} \in E_{in} \wedge e_r \in E_r \wedge E_{in} \subseteq E_{output} \wedge E_r \subseteq E_{output} \}, \cup_i O_i = O. \quad (2)$$

Все возможные комбинации весовых коэффициентов информационных входов могут быть представляются в виде множества векторов:

$$V = \{ v_i \mid v_i = (w_1, w_2, \dots, w_j) \wedge j \in N \wedge \forall w_j \in W \}. \quad (3)$$

Учет весового коэффициента каждого  $j$ -го информационного входа  $\delta_j(e_{in}, w_j)$ , может быть реализован операцией сложения или умножения. Множество всех возможных результатов операций учета весовых коэффициентов всех информационных входов КААН образует область определения  $n$ -арной функции учета взвешенных сигналов  $Dom\Delta$ , что позволяет представить  $\delta$  в виде покомпонентной операции над векторами  $\delta(I_i, v)$ .

$$\Delta: I \times V \rightarrow Q, q^{t+1} = \Delta^t \left( \delta^t(I_i^t, v^t) \right). \quad (4)$$

Функция активации  $\lambda_i$  КААН в общем случае имеет вид

$$\lambda_i: Q \rightarrow O, o^t = \lambda^t(q^t). \quad (5)$$

Функция изменения параметров КААН описывается следующим образом:

$$\tau_i: E_r \rightarrow V \times \Delta \times \Lambda \times T, (v^{t+1}, \Delta^{t+1}, \lambda^{t+1}, \tau^{t+1}) = \tau^t(I_i^t). \quad (6)$$

При рассмотрении одного КААН, нет смысла говорить об асинхронном режиме работы либо о работе модели «integrateandfire», так как данный подход возможен только в сетях КААН. Для описания асинхронной работы сетей на основе КААН и моделей

«integrateandfire» функции (4), (5) должны быть изменены. Функция (4) должна быть перезаписана с учетом предыдущего состояния нейрона в виде

$$\Delta: I \times V \times Q \rightarrow Q, q^{t+1} = \Delta^t(\delta^t(I_i^t, v^t), q^{t-1}). \quad (7)$$

Функция активации (5), с учетом параметра срабатывания  $\lambda_i$  принимает вид

$$\lambda_i: Q \rightarrow O, o^{tA} = \lambda^{tA}(q^t), \quad (8)$$

где  $t_A$  – период срабатывания функции активации КААН.

Приведенное выше описание позволяет сопоставить модель КААН модели конечного автомата Мура [1]. Функции перехода в новое состояние могут быть поставлены в соответствие две независимые друг от друга функции КААН  $\tau_i$  (6) и  $\Delta$  (7), функции вывода выходного сигнала – функция активации  $\lambda_i$  (8). Таблица №1 демонстрирует сопоставление между функциями и множествами автомата Мура и КААН.

С учетом существующих подходов к аппаратной реализации функции  $\Delta$  [2, 3] и учетом возможной необходимости применения периодических и «почти периодических функций» в качестве функции активации КААН, блок-схема имеет вид представленный на рис. 1.

Сопоставление КААН автомату Мура

Таблица 1

Объект	Автомат Мура	КААН
Множество внутренних состояний	S	$V \times \Delta \times \Lambda \times T$
Алфавит входных символов	X	I
Алфавит выходных символов	Y	O
Начальное состояние	$S_0 \in S$	$\Delta^{t=0}(\delta(\emptyset, v_0), q_0); \tau^{t=0}(\emptyset)$
Функция переходов	$\delta: X \times S \rightarrow S$	$\Delta: I \times V \times Q \rightarrow Q; \tau: E_r = V \times \Delta \times \Lambda \times T$
Функция вывода символов	$\lambda: S \rightarrow Y$	$\lambda_i: Q \rightarrow O$
Динамика переходов	$s^{t+1} = \delta(x^t, s^t)$	$q^{t+1} = \Delta^t(\delta^t(I_i^t, v^t), q^{t-1}), (v^{t+1}, \Delta^{t+1}, \lambda^{t+1}, \tau^{t+1}) = \tau^t(I_i^t)$
Динамика вывода символов	$y^t = \lambda(s^t)$	$o^{tA} = \lambda^t(q^t)$

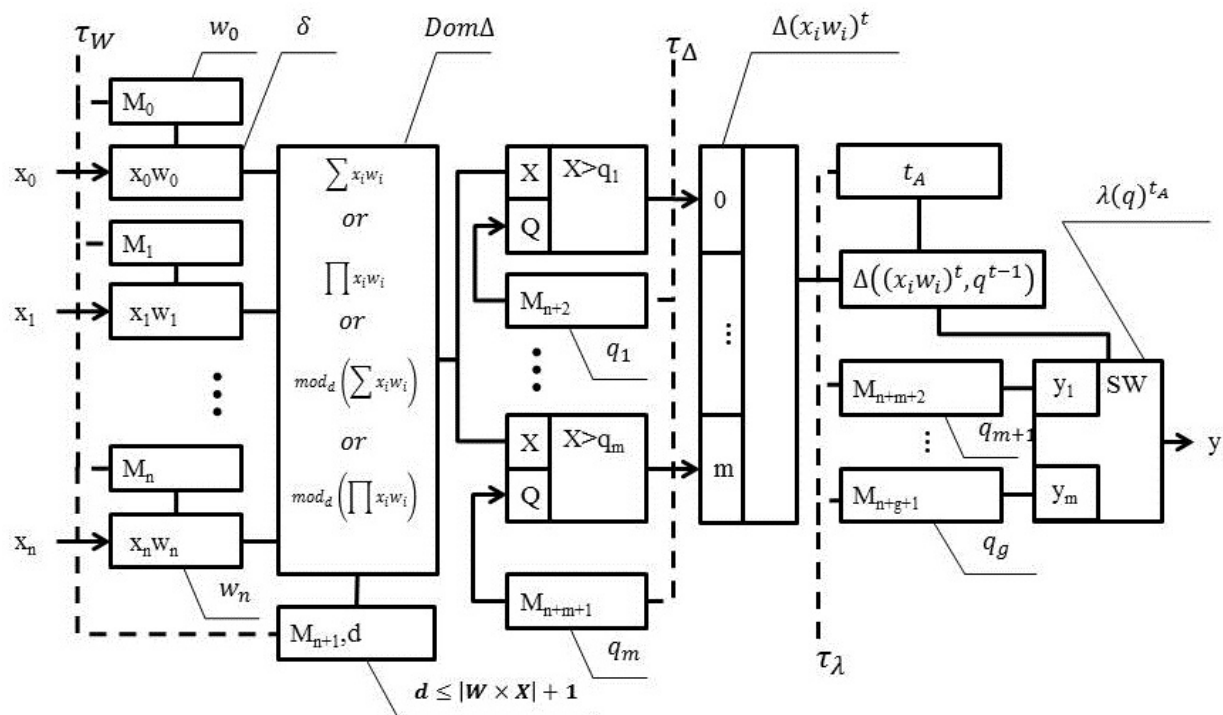


Рис. 1. Блок-схема КААН для асинхронных сетей:  $X$  – входные сигналы.  $Y$  – выходные сигналы.  $M$  – регистры памяти.  $t_A$  – программируемый таймер. Блок  $\Delta(x_i w_i)$  – схема определения текущего наибольшего  $q^t$ . Блок  $\Delta((x_i w_i)^t, q^{t-1})$  – сумматор с накоплением и функциями сложения, вычитания и сброса

Работа выполнена при содействии (без поддержки) РФФИ, проект № 17-07-00570 А.

### Литература

1. Edward P. Moore GEDANKEN-EXPERIMENTS ON SEQUENTIAL MACHINES // Automata Studies, Annals of Mathematical Studies. Princeton University Press 1956. V. 34. P. 129-153.
2. McCulloch W.S., Pitts W.A. A logical Calculus of Ideas Immanent in Nervous Activity. // Bull. Mathematical Biophysics, 1943
3. Koch C., Poggio T., McKenna T., Davis J., Zornetzer S.F. Eds. Multiplying with Synapses and Neurons in Single Neuron Copmputations // Academic Press Inc., San Diego, CA, USA, 1992 Ch 12. P. 315–319. ISBN 0-12-48415-X.

**Вклад различных механизмов переноса ионов  
в электрический ток в планарных электрохимических преобразователях**

*Д.А. Жевненко<sup>2,3,5</sup>, Е.С. Горнев<sup>3,5</sup>, С.С. Вергелес<sup>4,5</sup>, Т.В. Криштон<sup>2</sup>, П.В. ДУДКин<sup>2,5</sup>,  
В.Г. Криштон<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов

<sup>2</sup>АО НИИМЭ

<sup>3</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Электрохимические системы очень перспективны для построения новой элементной базы микроэлектроники [1]. Одно из важнейших направлений – это создание микроразмерных электрохимических датчиков ускорения и давления, которые выигрывают у систем на иных принципах работы в эффективности преобразования механического сигнала в электрический ток [2, 4]. Основные перспективы связаны с планарными электрохимическими преобразователями, производимыми по микроэлектронной технологии, значительно расширяющей возможности для промышленного производства [5].

В данной работе мы моделировали процессы переноса заряда в планарном электрохимическом преобразователе на основе трехкомпонентного электролита, в присутствии механического сигнала. Планарный преобразователь представляет собой пакет кремниевых кристаллов со сформированной электродной структурой, помещенный в объем с жидким электролитом. Электролит под воздействием механического поля омывает электроды и обеспечивает дополнительный перенос ионов между ними. Дополнительный ток пропорционален внешнему механическому сигналу (ускорению или давлению) [2, 4].

На основании модели, представленной в [4, 5], в данной работе были получены картины основных распределений: поле скоростей, распределение концентрации, градиент концентрации, потоки ионов в объеме. Исследован вклад механизмов переноса ионов в трехкомпонентном электролите в суммарный электрический ток, оценен относительный вклад механизмов переноса их влияние на основные характеристики преобразователя. Показано, что вклад электромиграционного переноса может оказаться существенным.

Полученные результаты позволяют более точно исследовать механизмы переноса, на которых функционируют электрохимические преобразователи, а также дадут нам знания основных связей и закономерностей между плотностью тока и характеристиками прибора (геометрическими, с точки зрения пространственного распределения плотностей токов, и электрохимическими, с точки зрения характеристик электролита и электродов), которые можно будет использовать для улучшения его характеристик.

Планарные электрохимические преобразователи применяются в промышленных акселерометрах и датчиках для сейсморазведки [9, 10] и потенциально имеют очень широкую область применения [4], например, для систем инерциальной навигации (БИНС/IMU), включая беспилотные и управляемые летательные и подводные аппараты (например, [11, 12]), в робототехнике для систем управления, для автомобильных датчиков, в охранных системах и бытовой потребительской электронике.

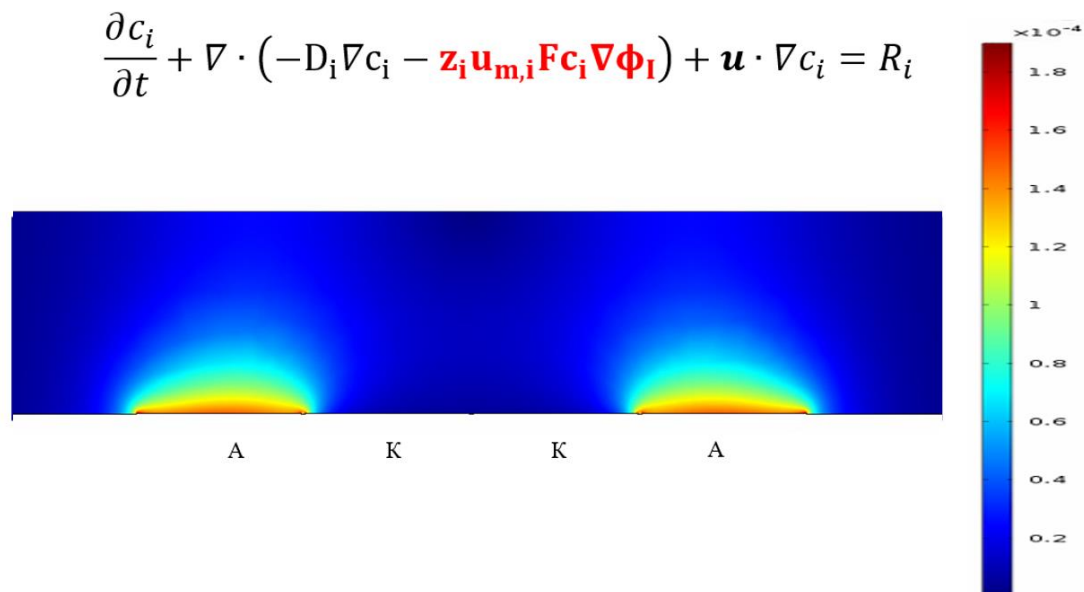


Рис. 2. Пространственное распределение вклада в поток ионов, обусловленного электромиграцией. Красным выделено слагаемое, описывающее электромиграцию ионов под действием электрического поля

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-07-00981.

### Литература

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. С. 2–5.
2. Криштон В.Г., Агафонов В.М., Бугаев А.С. Технологические основы преобразователей параметров движения на принципах переноса массы и заряда в электрохимических микросистемах // Электрохимия. 2012. Т. 48, № 7. С. 820–829.
3. Агафонов В.М., Криштон В.Г., Сафонов М.В. Измерительные устройства на основе молекулярно-электронного переноса в микро- и наноструктурах // Нано- и Микросистемная техника. 2010. Т. 6. С. 47–53.
4. Шабалина А.С., Зайцев Д.Л., Егоров Е.В., Егоров И.В., Антонов А.Н., Бугаев А.С., Агафонов В.М., Криштон В.Г. Молекулярно-электронные преобразователи в современных измерительных приборах. // Успехи современной радиоэлектроники., 2014. №9. С. 33–42.
5. Жевненко Д.А., Вергелес С.С., Криштон Т.В., Терешонок Д.В., Горнев Е.С., Криштон В.Г. Моделирование процессов переноса массы и заряда в планарных электрохимических преобразователях. // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2016. № 4 (164). С. 31.
6. Zhevnenko D.A., Vergeles S.S., Krishtop T.V., Tereshonok D.V., Gornev E.S., Krishtop V.G. The simulation model of planar electrochemical transducer // Proc. SPIE 10224. ICMNE 2016. 102241I. doi:10.1117/12.2267082
7. Shabalina A.S., Krishtop V.G. The precision seismometer based on planar electrochemical transducer // Proc. SPIE 10224. ICMNE 2016. 102241K. doi:10.1117/12.2267099
8. Novikov A.V., Egorchikov A.E., Dolgov A.N., Gornev E.S., Popov V.G., Egorov I.V., Krishtop V.G. The planar silicon-based microelectronic technology for electrochemical transducers // Proc. SPIE 10224. ICMNE 2016. 102241J. doi:10.1117/12.2267095;
9. Агафонов В.М., Криштон В.Г., Егоров И.В. Сейсмические датчики на принципах молекулярно-электронного переноса в твердотельных и жидкостных микроструктурах // Приборы и системы разведочной геофизики. 2013. Т. 43. № 1. С. 39–49.
10. Bugaev A.S., Agafonov V.M., Krishtop V.G., Antonov A.N., Veretin V.S. Seismic sensors for oil and gas complex on the molecular-electronics transduction in the solid state and liquid microsystems // Oil & Gas Field Engineering 2013. Special Issue №3: Results of 2012. P. 46–52.
11. Zaitsev D., Antonov A. and Krishtop V. Angular MET sensor for precise azimuth determination // Proc. SPIE 10224. ICMNE 2016. 102241H. doi:10.1117/12.2267073



## Учет туннельной проводимости при разработке высокотемпературного кремниевого преобразователя давления на КНИ-структуре

*И.В. Годовицын, В.С. Суханов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Рассмотрены ключевые элементы высокотемпературного кремниевого преобразователя давления на КНИ-структуре. В отличие от традиционного преобразователя, в котором тензорезистор расположен в теле мембраны и изолирован от мембраны p–n–переходом, а также слоем диэлектрика для предотвращения поверхностных утечек, в кремниевом преобразователе давления на КНИ-структуре тензорезистор изолирован от мембраны слоем диэлектрика [1,2]. Слои диэлектрика также используются для изоляции мембраны и тензорезисторов от шин металлизации. На рис. 1 приведен эскиз двух вариантов структуры преобразователя давления в области тензорезистора.

За счет высоких изолирующих свойств КНИ-структуры могут быть достигнуты следующие количественные и качественные показатели работы преобразователя давления:

- 1) температурный диапазон до 600 °С (по некоторым сведениям до 760 °С);
- 2) диапазон ускорений до 200 g;
- 3) возможность работы в агрессивной и окислительной средах.

Для определения ограничения на толщину изолирующего слоя рассмотрена электрическая схема включения тензорезисторов. В рабочем режиме между тензорезисторами и подложкой присутствует разность потенциалов, заданная напряжением питания мостовой схемы. Разность потенциалов создает электрическое поле в диэлектрическом слое. Величина данного электрического поля зависит от толщины слоя SiO<sub>2</sub> и напряжения питания. При небольшой толщине диэлектрического слоя возможно создание условий для преодоления электронами энергетического барьера между Si и SiO<sub>2</sub> и туннелирования в диэлектрический слой. Плотность туннельного тока для аморфных диэлектриков, подобных SiO<sub>2</sub>, определяется формулой Фаулера–Нордгейма:

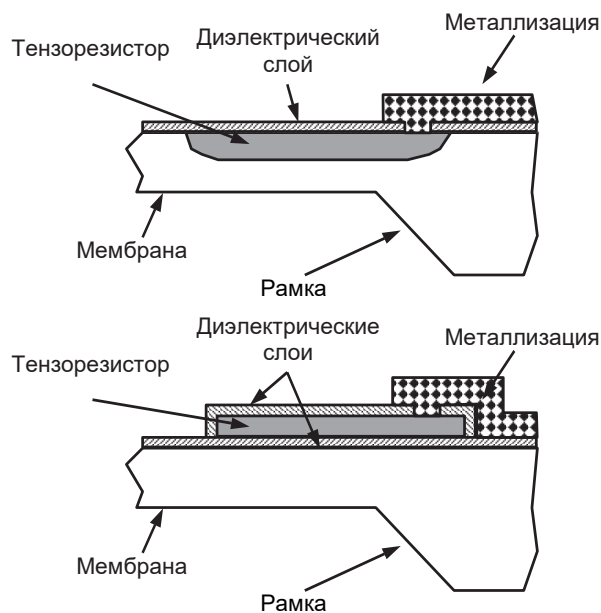
$$J_{\text{tun}} = \frac{q^3 m_{\text{eff}}}{8\pi m_{\text{diel}} h q \Phi_B} E^2 \exp\left(-\frac{8\pi\sqrt{2q m_{\text{diel}} \Phi_B^{3/2}}}{3hE}\right), \quad (1)$$

где  $q$  – заряд электрона,  $m_{\text{eff}}$  – эффективная масса электрона в Si,  $m_{\text{eff}}=1,18m_0$  [3],  $m_{\text{diel}}$  – эффективная масса электрона в SiO<sub>2</sub>,  $m_{\text{diel}} = 0,3m_0$  [3],  $\Phi_B$  – высота потенциального барьера между Si и SiO<sub>2</sub>,  $\Phi_B = 3,2$  eV,  $h$  – постоянная Планка,  $E$  – величина электрического поля в диэлектрике,  $E=\Delta U/d_{\text{ок}}$ ,  $\Delta U$  – разность потенциалов,  $d_{\text{ок}}$  – толщина слоя SiO<sub>2</sub>.

Срок службы диэлектрика определяется величиной прошедшего через него заряда. Если величина прошедшего заряда превышает критическую  $Q_{\text{bd}}$ , вероятность пробоя диэлектрика и, соответственно, выхода преобразователя из строя равна 50%. Для термического SiO<sub>2</sub> величина  $Q_{\text{bd}}$  составляет от 0,1 до 10 Кл/см<sup>2</sup>. Примем в качестве среднего значения величину  $Q_{\text{bd}}$  равную 1 Кл/см<sup>2</sup>. Предположим, что требование к сроку службы преобразователя давления составляет 10 лет, что приблизительно равно  $3,2 \cdot 10^8$  с. Таким образом, средняя плотность туннельного тока на протяжении периода эксплуатации не должна превышать  $3,1 \cdot 10^{-9}$  А/см<sup>2</sup>.

На рис.2 приведены результаты расчета плотности туннельного тока в соответствии с выражением Фаулера–Нордгейма (1).

Как можно видеть, величина туннельного тока  $3,1 \cdot 10^{-9}$  А/см<sup>2</sup> при напряжении 5 В соответствует толщине SiO<sub>2</sub> около 100 Å. Данную толщину SiO<sub>2</sub> можно принять в качестве отправной точки для определения ограничения на уменьшение толщины изолирующих слоев структуры чувствительного элемента.



аб

Рис. 1 Эскиз двух вариантов структуры преобразователя в области тензорезисторов.

а – тензорезистор в теле мембраны;

б – тензорезистор на поверхности мембраны;

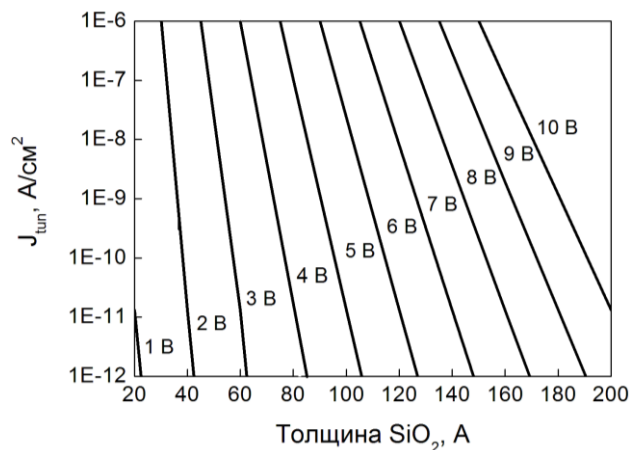


Рис. 2 Зависимость туннельного тока от толщины диэлектрика и приложенного потенциала

Работы выполнены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Соглашение №14.577.21.0245, уникальный идентификатор ПНИЭР RFMEFI57717X0245).

### Литература

1. Balavalad K. B., Sheeparmatti B. G., International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT) // A Review on Evolution, Current Trends and Future Scope of MEMS Piezoresistive Pressure Sensors. November 2015. V. 4. I. 11. P. 321–325.
2. Meti S. [et al.], MEMS Piezoresistive Pressure Sensor: A Survey // Int. Journal of Engineering Research

- and Applications. April 2016. V. 6, I. 4. P. 1. P. 23-31.
3. da Silva Jr E.F., de Vasconcelos E.A., Stošić B.D., de Sousa J.S., Farias G.A., Freire V.N., Dynamics of SiO<sub>2</sub>:SiOx:Si multilayer growth and interfacial effects on silicon quantum well confinement properties // Materials Science and Engineering 2000. B74. P. 188–192.

УДК 537.611

### Исследование минимальной возможной ошибки декодирования некоторых кодов

*И.М. Фалалеев<sup>1,2,3</sup>, Г.В. Коваль<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>НИИ молекулярной электроники

<sup>3</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Работа посвящена изучению моделей статистической физики, возникающих в связи с задачами теории передачи информации. Было показано, что задача декодирования методом максимального правдоподобия эквивалентна нахождению основного состояния модели с замороженным беспорядком [1]. Алгоритмы исследования свойств систем с замороженным беспорядком плохо разработаны и основной метод нахождения энергии основного состояния есть рассмотрение предела при  $T \rightarrow 0$  трансфер-матриц [2]. В этой же работе представлен метод, не требующий рассмотрения предельного перехода  $T \rightarrow 0$ . Данный метод позволил получить рекуррентные соотношения для энергии основного состояния, кратности вырождения энергии, минимальной, максимальной и средней намагнитченности.

Из-за наличия шума при передаче информации могут возникать ошибки, что приводит нас к задаче обнаружения и исправления этих ошибок. В данной работе будет использоваться метод корректирующих кодов.

Недавно было показано [1], что коды с исправлением ошибок математически эквивалентны теоретическим моделям неупорядоченных спиновых систем. В частности, декодирование с минимальной вероятностью ошибки (или МОД), широко используемое в сообщениях, эквивалентно нахождению основного состояния некоторого гамильтониана спинового стекла.

Эквивалентность между моделью спинового стекла и кодами, исправляющими ошибки, заключается в следующем. Выход канала представляет собой последовательность  $M$  действительных чисел  $J^{out} = \{J_k^{out}, k = 1, \dots, M\}$ , которые являются случайными величинами, подчиняющимися распределению вероятностью  $P(J_k^{out} | J_k^{in})$ . Выход канала  $J^{out}$  известен, можно вычислить вероятность  $P(\tau | J^{out})$ , что определенная последовательность  $\tau = \{\tau_i, i = 1, \dots, N\}$  была выходом источника (т. е. информационное сообщение).

Вероятность  $P(\tau | J^{out})$  для любой последовательности  $\tau = \{\tau_i, i = 1, \dots, N\}$ , чтобы быть исходным сообщением, в зависимости от выхода канала  $J^{out} = \{J_k^{out}, k = 1, \dots, M\}$  определяется формулой

$$\ln P(\tau | J^{out}) = \text{const} - H_s(\tau) + \sum_{i=1}^N C_{i_{k_1} \dots i_{k_p}}^{(k)} B_k \tau_{i_{k_1}} \dots \tau_{i_{k_p}} \equiv -H_t(\tau), \quad (1)$$

где

$$B_k = B_k(J_k^{out}) = \frac{1}{2} \ln \frac{P(J_k^{out} | 1)}{P(J_k^{out} | -1)}. \quad (2)$$

Мы видим в этом выражении гамильтониан спинового стекла, где распределение связей определяется вероятностью  $P(J_k^{out} | J_k^{in})$ .

Доказательство состоит в следующем. Вероятность  $P(\tau | J^{out})$  того, что выход источника

$\tau = \{\tau_i, i = 1, \dots, N\}$ , когда выходной канал  $J^{out}$ , по формуле Байеса,

$$P(\tau | J^{out}) = \frac{P_s(\tau)P(J^{out} | J^{in})}{\sum_{\tau} P_s(\tau)P(J^{out} | J^{in})}, \quad (3)$$

$$\ln P(\tau | J^{out}) = \text{const} + \sum_{k=1}^M \ln P(J_k^{out} | J_k^{in}) + \ln P_s(\tau), \quad (4)$$

$$\ln P(J_k^{out} | J_k^{in}) = \frac{1}{2} \ln(P(J_k^{out} | 1)P(J_k^{out} | -1)) + \frac{J_k^{in}}{2} \ln \frac{P(J_k^{out} | 1)}{P(J_k^{out} | -1)}, \quad (5)$$

где константа означает независимость от  $J^{in}$ . Чтобы завершить доказательство, нужно вставить значение  $J^{in}$ .

При условии, что величины  $P(J_k^{out} | \pm 1)$  не зависят от  $k$ , введем обозначения:

$$\beta = \frac{1}{2} \ln \frac{P(J_k^{out} | 1)}{P(J_k^{out} | -1)}, \quad H(\tau) = - \sum_{i=1}^N J_k^{out} C_{i_{k_1} \dots i_{k_p}}^{(k)} \sigma_{i_{k_1}} \dots \sigma_{i_{k_p}}. \quad (6)$$

Итоговое выражение

$$P(\tau | J^{out}) = \text{const} \cdot \exp(-\beta H(\tau)). \quad (7)$$

Эта формула является связью корректирующих кодов и одномерной модели с замороженным беспорядком, в которой  $H(\tau)$  интерпретируется как гамильтониан системы, а  $\beta$  (так называемая обратная температура Нишимори) как обратная температура  $\beta = 1/kT$ . Были проведены компьютерные вычисления этих величин, проанализированы свойства больших систем от характеристик замороженного беспорядка.

Все результаты были получены для кода  $J_i^{(1,in)} = \sigma_i \sigma_{i+2}$ ,  $J_i^{(2,in)} = \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}$  и цепочки из  $N = 10^7$  спинов.

Среднее значение максимальной намагниченности  $M^{\max} = 99$ , при  $p = 0.05$ .

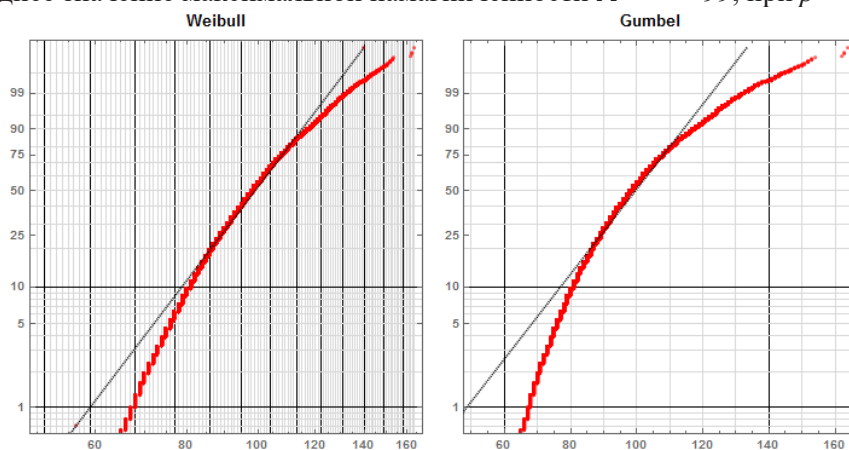


Рис. 1. Сравнение реального распределения с распределением Вейбула и Гумбеля

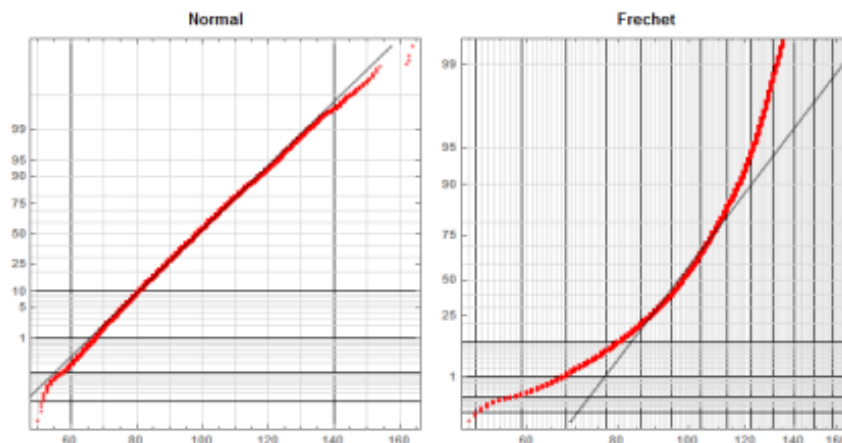


Рис. 2. Сравнение реального распределения с нормальным распределением и Фрэхта

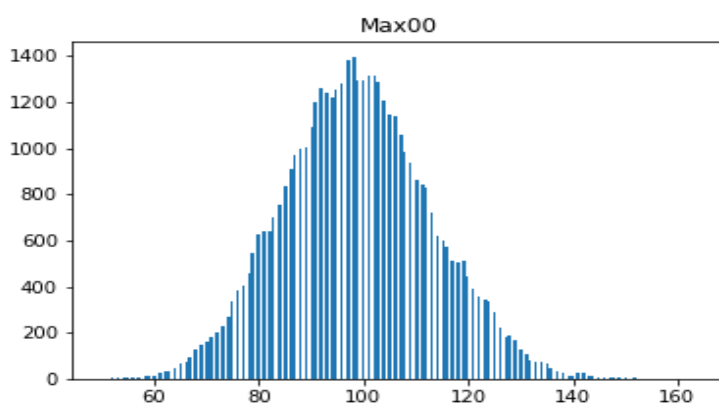


Рис. 3. График распределения намагниченности

### Литература

1. *Sourlas N.*, 1994. *Europhys. Lett.* V. 25. P. 159.
2. *Dress C., Amic E., Luck J.M.* 1994 *J. Phys. A: Gen.* 1998. V. 28 P. 135-147.
3. *Sourlas N.* *Nature* V. 1989. 339. P. 693.
4. *Rujan P.* *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. P. 2968.
5. *Shannon C. E., Weaver W.*, *A Mathematical Theory of Communication* 1963.
6. *Sourlas N.* In *Statistical Mechanics of Neural Networks*, in *Lect. Notes Phys.*, 1990. P. 368.

УДК 621.3.049.77

### **Теоретическое обоснование причин изменения параметров считывания радиочастотных меток UHF-диапазона при их контакте с плотными внешними средами**

*М.Ю. Ларионов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В настоящее время широкое применение для целей маркировки и идентификации приобретают средства радиочастотной бесконтактной идентификации (RFID).

К идентификаторам относятся: бесконтактные пластиковые и бумажные карты, тонкие метки – самоклейки, метки, изготовленные в корпусном (пластиковом) варианте – теги, идентификаторы в миниатюрных стеклянных баллонах-болюсах.

Основу любого из перечисленных конструктивов составляет транспондер, то есть микросборка антенны и смонтированной на ней микросхемой радиочастотной идентификации.

При всем многообразии исходных параметров конструкция транспондера должна обеспечить хорошее «попадание» в резонансную частоту (865 МГц, принятая сегодня во всем мире рабочая частота UHF-диапазона RFID-устройств) и иметь приемлемую добротность LC-контура, чтобы обеспечить необходимую (по возможности, максимальную) дальность считывания идентификатора. При практическом применении меток в зависимости от окружающей среды дальность считывания может варьироваться в широком диапазоне значений.

Автор исследовал причины смещения пика резонансной частоты (дальности считывания) метки, расположенной вплотную к диэлектрику, в меньшую сторону от значения 865 МГц – резонансной частоты работы метки в свободном пространстве, а так же исследовал явление отсутствия считывания метки при её плотном контакте с металлом. В ходе исследования снимались соответствующие частотные характеристики, была составлена эквивалентная схема антенны метки и теоретическое обоснование смещения резонансного пика, в частности, с использованием теории Максвелла для электромагнитного поля.

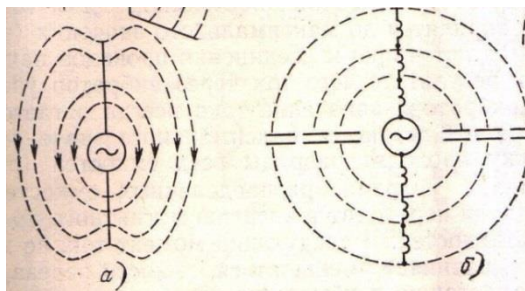


Рис. 1. Эквивалентная схема вибратора (антенны) метки. Предполагается, что конденсаторы слева и справа, изображенные на рисунке б), по конструкции совершенно одинаковы и между обкладками имеют воздушный зазор

В итоге практика показала очень хорошее совпадение теоретических расчетов с экспериментальными данными (на частоте излучателя – 865 МГц) и «сдвиг» резонансной частоты метки в сторону ее уменьшения, при плотном контакте с диэлектриком, а также отсутствия считывания метки при плотном контакте с металлом.

### Литература

1. Трофимова Т.И. Курс физики: учеб. пособие для вузов / Т.И. Трофимова. – 11-е изд., стер. М.: Издательский центр «Академия», 2006. 560 с.
2. Отчёт ОКР ММД ПАО «Микрон», АО «НИИМЭ», 2017. 81 с.
3. Машкова, Т.Т., Степанов, С.В. Основы радиотехники: учебник для техникумов. – М.: Радио и связь, 1992. – 232 с.: ил.



## Механизмы снижения латерального разрешения в методе сухого электронно-лучевого травления резиста

Ф.А. Сидоров<sup>1,2</sup>, А.Е. Рогожин<sup>1</sup>, М.А. Брук<sup>3</sup>, Е.Н. Жихарев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Физико-технический институт Российской академии наук

<sup>3</sup>АО «Научно-исследовательский физико-химический институт имени Л.Я. Карпова»

Экспонирование полимерного резиста (полиметилметакрилат (ПММА), поли- $\alpha$ -метилстирол и др.) электронным лучом при температуре, превышающей температуру стеклования резиста, приводит к отделению мономеров резиста от молекул резиста по механизму “zipper” [1, 2]. При этом диффузия отделенных мономеров резиста вызывает разрыв новых молекул. Это приводит к цепной реакции деполимеризации резиста, лежащей в основе метода сухого электронно-лучевого травления резиста (СЭЛТР) [3]. Таким образом, в методе СЭЛТР формирование рельефа в резисте происходит непосредственно при экспонировании за счет покидания мономерами резиста объема травления и дальнейшей релаксации резиста (рис. 1).

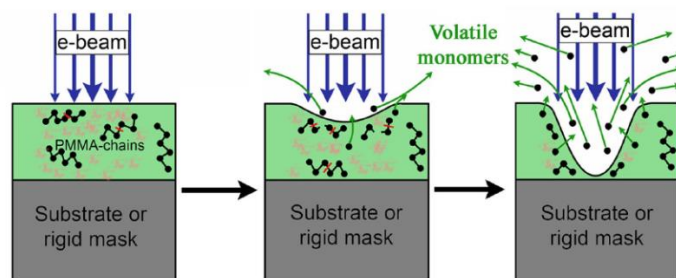


Рис. 1. Процесс сухого электронно-лучевого травления резиста

Чувствительность ПММА в методе СЭЛТР в сотни раз превышает чувствительность при обычной электронно-лучевой литографии, что выражается специфической формой кинетической кривой травления (рис. 2а [4]). Это обеспечивает высокую производительность метода СЭЛТР – экспонирование площади  $3 \times 3.9 \text{ мм}^2$  занимает 10–100 секунд при дозе 0.1–1 мкКл/см<sup>2</sup>. Однако повышенная чувствительность резиста приводит к некоторым дополнительным эффектам. Во-первых, получающиеся структуры имеют скругленные стенки (рис. 2б [4]). Во-вторых, несмотря на высокое разрешение по вертикали (около 1 нм), метод обеспечивает довольно низкое латеральное разрешение. Были проведены эксперименты с использованием электронных микроскопов ZeissUltra-55 (диаметр пучка – 5 нм) и CamscanS4 (диаметр пучка – 200 нм). При использовании микроскопа Ultra-55 ширина линии составила 200–500 нм для резиста ПММА 950 К при экспонировании вдоль параллельных линий, при использовании микроскопа CamscanS4 – 2–4 мкм при тех же условиях.

Механизмы, снижающие латеральное разрешение метода СЭЛТР могут быть разделены на 4 группы – механизмы, связанные с взаимодействием электронного пучка с молекулами резиста, химические, механические и термические механизмы. В этой работе исследовано влияние рассеяния первичных электронов на латеральное разрешение метода СЭЛТР. Для моделирования рассеяния первичных электронов в системе ПММА/Si использовался алгоритм CASINO [5]. Исследование влияния рассеяния первичных электронов основывалось на предположениях о пропорциональности между поглощенной дозой и временем экспонирования; пропорциональности между поглощенной дозой и количеством актов взаимодействия электронов с молекулами резиста; отсутствием уменьшения толщины резиста во время экспонирования.

Было проведено сравнение результатов моделирования 80 000 электронов из пучков с диаметром 5 нм и 200 нм и начальной энергией 20 кЭв и экспериментальных результатов, полученных для системы 80 нм ПММА/S4 и Ultra-55 (при температуре травления 116 °С) [4]. Ширина области травления была определена как 500 нм для микроскопа Ultra-55 и 3 мкм для микроскопа CamscanS4. На основе этого были построены кинетические кривые травления, которые позволили определить часть дозы (относительно всей поглощенной дозы), полученную образцами на границах области травления, что составило 0.005 и 0.077 для экспериментов с микроскопами CamscanS4 и Ultra-55 соответственно. Из моделирования были получены границы области травления как координаты, соответствующие 2 % взаимодействий первичных электронов с молекулами резиста (от полного числа взаимодействий). Они составили 15 нм и 300 нм для пучков диаметром 5 нм и 200 нм соответственно. Полученные результаты позволяют сделать вывод о незначительном влиянии рассеяния первичных электронов на разрешение метода СЭЛТР.

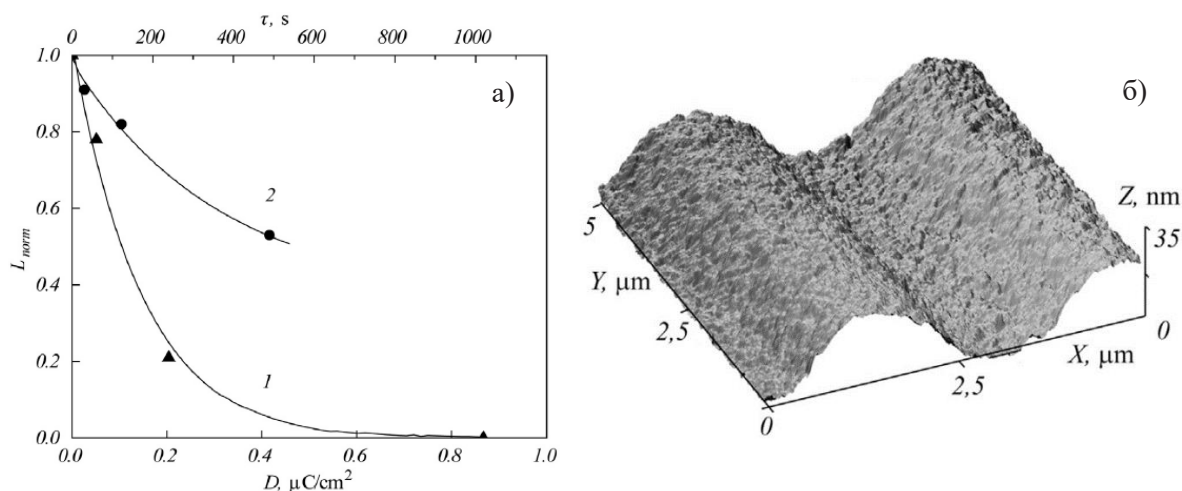


Рис. 2. а) Кинетическая кривая травления для ПММА 950К (зависимость нормированной толщины резиста от поглощенной дозы) при толщинах слоя ПММА 900 нм (кривая 1) и 340 нм (кривая 2), экспонирование проводилось в электронном микроскопе CamscanS4 при температуре 160 °С; б) АСМ-изображение структуры, полученной при экспонировании в микроскопе CamscanS4 при экспонировании вдоль параллельных линий (расстояние между линиями – 3.3 мкм), начальная толщина слоя ПММА 950К – 80 нм, доза – 0.6 мкКл/см<sup>2</sup>, сила тока – 1.9 нА/см<sup>2</sup>

### Литература

1. Bruk M.A., Zhikharev E.N., Streltsov D.R., Kalnov V.A., Spirin A.V. // Microelectronic Eng. 2013. V. 112. P. 1.
2. Bruk M.A., Kondrat'eva M.V., Baranov A.A., Pebalk K.V., Sergeev A.M., Kozlova N.V. Polymer Science. Series A. 1999. V. 41. P. 159.
3. Bruk M.A., Zhikharev E.N., Kalnov V.A., Spirin A.V., Streltsov D.R. Method of masking pattern formation in positive e-beam resist layers // Russian Bulletin of Inventions 2013. V. 9. patent 2478226.
4. Bruk M.A., Zhikharev E.N., Streltsov D.R., Kalnov V.A., Spirin A.V. Formation of micro- and nanostructures with well- rounded profile by new e-beam lithography principle, Microelectronic Eng. V. 155. P. 92–96.
5. Hovington P., Drouin D., Gauvin R., CASINO: A new montecarlo code in C language for electron beam interaction – part I: Description of the program, The J. of scan. Microscopy. V. 19. P. 1–14.



Научное издание

Труды  
60-й Всероссийской научной конференции МФТИ

**Электроника, фотоника и молекулярная физика**

20-26 ноября 2017 года

Составители:

*М.В. Милов, В.А. Яворский, С.А. Зайцев*

Редакторы:

*В.А. Дружинина, И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева*

Корректоры:

*И.А. Волкова, О.П. Котова, Н.Е. Кобзева*

Набор и вёрстка:

*М.А. Чайковский*

Подписано в печать 12.12.2017. Формат 60 × 84 <sup>1</sup>/<sub>8</sub>.

Усл. печ. л. 35,75. Тираж 60 экз. Заказ № 608.

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»

141707, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9  
Тел. (495)408-58-22

---

"Полиграфия "ПРОДВИЖЕНИЕ"  
123592, г. Москва, ул. Кулакова дом 20, стр. 1Б  
E-mail: info@prodv.pro  
Тел. (495) 988-93-68



# DS

ISBN 978-5-7417-0644-2



9 785741 706442