

Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ

Межвузовский научный сборник
Выпуск 32

Издательство Саратовского университета
2025

Вопросы прикладной физики: Межвуз. науч. сб. – Саратов: Издательство Саратовского университета, 2025. – Вып. 32 – 64 с.: илл.

В сборнике представлены научно-технические работы по нанотехнологическим аспектам в области формирования современных вакуумных источников электронной эмиссии. На примере трёхслойной углеродной нанотрубки продемонстрирована эффективность методики построения крупнозернистых моделей многостенных углеродных нанотрубок на основе силового поля MARTINI для моделирования их взаимодействий с биологическими системами. Приводится обзор исследований свойств графеновых наноструктур с дефектом двойной вакансии типа 5-8-5. В методическом разделе систематизированы публикации, содержащие рекомендации по подготовке и представлению диссертационных работ. В историческом разделе описаны фрагменты истории научного сотрудничества физиков Саратовского государственного университета и Башкирского государственного университета (Уфимского университета науки и технологий), связанные с именем профессора Р. З. Бахтизина. Раздел PERSONALIA посвящен профессору М. В. Давидовичу в связи с его 75-летием со дня рождения; здесь представлены его основные научные публикации в области физической электроники, электродинамики, плазмоники и фотоники.

Для специалистов в области теоретической и прикладной физики, а также для аспирантов и студентов физико-технических специальностей вузов.

Редакционная коллегия:

О. Е. Глухова – главный редактор
В. М. Аникин – научный редактор
О. А. Черкасова – ответственный секретарь

Редакционный совет:

| | |
|-------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| В. М. Аникин | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| В. Б. Байбурин | Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А. |
| А. Ю. Герасименко | Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники» Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| О. Е. Глухова | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| М. В. Давидович | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| Т. М. Крачковская | АО «Научно-производственное предприятие “Алмаз”» |
| М. М. Слепченков | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| О. А. Черкасова | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |
| С. В. Чурочкина | Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского |

МАТЕРИАЛЫ ВАКУУМНОЙ ЭМИССИОННОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 621.3.032.21:621.385.6

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ ВОЛЬФРАМОВОГО ПОРОШКА СЛОИСТЫМИ НАНОУГЛЕРОДНЫМИ ЧАСТИЦАМИ НА ЕГО ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И НА КОНСТРУКТИВНЫЕ СВОЙСТВА КАТОДНОЙ МАТРИЦЫ

Т. М. Крачковская, Ю. В. Якимович, Ю. Р. Кузнецова, Е. А. Давыдова

Аннотация. В работе представлено исследование влияния применяемого для изготовления каркасов металлопористых катодов модификации вольфрамового порошка с присадкой слоистых нанокристаллических частиц типа астралены. Показано, что модификация порошка астраленами оказывает влияние на такие параметры, как средний размер зерна, усадку, а также на конструктивные свойства (пористость и газопроницаемость) катодных каркасов.

Ключевые слова: металлопористый катод, вольфрамовый порошок, металлопористый каркас, нанокристаллический углерод

Введение

Наноразмерные частицы различных материалов в современном мире всё больше находят применение в приборостроении. Обладая разнообразными электронными и механическими свойствами, они способны изменять характеристики других материалов даже при добавлении их в низких концентрациях. В частности, китайские разработчики катодной техники для электровакуумных приборов (ЭВП) создали равномерно легированную наноразмерным скандием (размер частиц от 300 – 500 нм) в количестве 5% (по массе) вольфрамовую матрицу методом жидкостного легирования (метод sol-gel) и сухого распыления порошков («spray drying method») [1]. Путем оптимизации процесса жидкостного легирования была создана структура матрицы из такого порошка с равномерным распределением открытых пор и Sc с низкой работой выхода [2]. Также, для совершенствования характеристик ЭВП с позиции увеличения долговечности, была исследована модификация металлопористого катода (МПК) слоистыми нанокристаллическими частицами – астраленами и углеродом [3]. Авторами [3–5] были исследованы эмиссионные свойства МПК М-типа с присадкой астраленов в количестве 0.5 мас.% в составе катодной матрицы, однако влияние модификации вольфрамового

порошка астраленами на его физические свойства и на конструктивные свойства катодного каркаса были недостаточно изучены. Из [6–7] известно, что физические свойства порошка, такие как активность, форма и размер частиц, определяют структуру катодных каркасов, формируемых из этих порошков, которая в свою очередь влияет на эмиссионные параметры катода.

Цель работы – выявление влияния модификации вольфрамового порошка слоистыми нанокристаллическими частицами типа астралены на его физические свойства (размер зерна, усадка) и конструктивные свойства катодной матрицы (плотность, пористость и газопроницаемость).

Экспериментальная часть

В работе исследованы отожжённые по стандартной технологии (при 1625°C в среде водорода) вольфрамовые порошки марки ВЧДК фракции А, марки ВЧДК фракции Б и их модификации с присадкой (по массе) 0.5% нанокристаллических частиц типа астралены. Подготовка смесей порошков вольфрама с астраленами проводилась по технологии, описанной в [8].

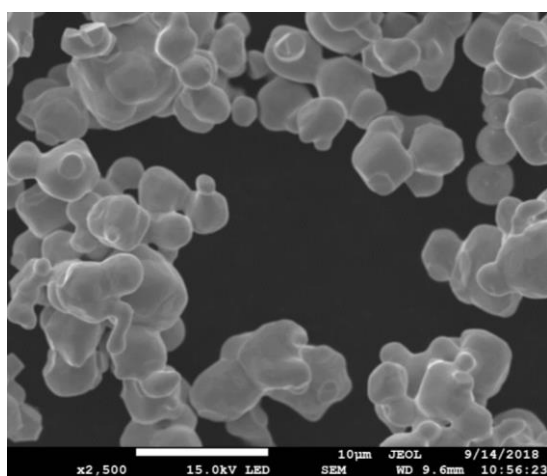
На рис. 1 представлены электронные изображения отожжённых вольфрамовых порошков чистой фракции А и с присадкой астраленов.

Для определения величины зерна порошка и усадки металлопористого каркаса в процессе спекания были использованы «пробные» таблетки диаметром 5.65 мм и высотой от 2.0 до 3.0 мм из исследуемых порошков и смесей. Параметры определяли по стандартной технологии, принятой на предприятии: плотность таблеток – взвешиванием и измерением геометрических размеров, средний размер зерна ($D_{ч}$) – по формуле:

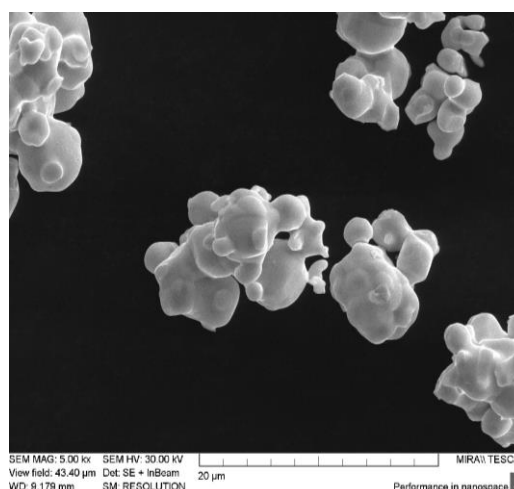
$$D_{ч} = \frac{0.079 \cdot p_n}{\left(1 - \frac{p_n}{y}\right) \cdot P_n},$$

где p_n – плотность дисков, спрессованных при удельном давлении 6 тс/см²; P_n – проницаемость дисков, спрессованных при удельном давлении 6 тс/см²; y – удельный вес: для чистого вольфрама 19.4 г/см³, для вольфрама с астраленами 19.314 г/см³.

В статье [6] указано, что процент усадки вольфрамового каркаса из вольфрамового порошка для фракций А и Б равен 14.5 % и 26.0 % соответственно, нами получены аналогичные параметры. Сравнение параметров исследованных порошков и смесей порошков приведено в табл. 1.



а



б

Рис. 1. Вольфрамовый порошок фракции А после отжига в водороде при 1625°C: а – без присадок; б – с присадкой астраленов 0.5% (по массе)

Таблица 1

Сравнение параметров порошков

| Название порошка | Средний размер зерна ($D_{ч}$), мкм | Усадка металлопористого каркаса ($\Delta V/V$), % |
|------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| ВЧДК фракция А | 3.91 | 14.69 |
| ВЧДК фракция А с астраленами | 4.85 | 12.77 |
| ВЧДК фракция Б | 1.62 | 26.06 |
| ВЧДК фракция Б с астраленами | 3.77 | 15.72 |

Согласно результатам проведенных измерений, присадка астраленов в вольфрамовый порошок обеих фракций укрупняет зерно, что приводит к уменьшению усадки катодного каркаса примерно на 2 и 10% для фракций А и Б соответственно, что указывает на прочные межмолекулярные связи образовавшихся

агломератов и повышение термической стабильности каркаса. Подобная связь между размером зерна и усадкой была отмечена и авторами [9].

Промышленно используемый вольфрамовый порошок после отжига должен обеспечивать соответствие установленным технологическим

зависимостям давления газопроницаемости спеченных катодных каркасов (минимального давления сжатого воздуха, необходимого для продавливания первого пузырька через пропитанный спиртом каркас, характеризующего максимальную

величину открытого порового канала) от их плотности и пористости.

Данные измерений параметров катодных каркасов из исследованных порошков и порошковых смесей приведены в табл. 2.

Таблица 2

Сравнение параметров катодных каркасов

| Название порошка | Плотность, г/см ³ | Давление газопроницаемости, кгс/см ² | Открытая пористость, % | Привес, % |
|-----------------------------------|------------------------------|-------------------------------------------------|------------------------|-----------|
| ВЧДК фракция А | 13.8 | 0.50 | 2.2 | 8.6 |
| ВЧДК фракция А с 0.5% астраленами | 13.8 | 0.2 | 21 | 7.8 |
| ВЧДК фракция Б | 13.8 | 0.59 | 30.2 | 8.3 |
| ВЧДК фракция Б с 0.5% астраленами | 13.8 | 0.62 | 25.1 | 7.8 |

Из данных табл. 2 следует, что при одинаковых значениях плотностей параметры катодной таблетки из модифицированных смесей имеют существенные отличия от катодных каркасов из чистого вольфрама по газопроницаемости в большую сторону и пористости, а соответственно и привесу, в меньшую сторону. Это говорит о том, что сформированная из модифицированных смесей катодная таблетка имеет иную структуру, особенно сильно различаются параметры для фракции Б. Поэтому далее была исследована зависимость давления газопроницаемости катодных таблеток из модифицированных смесей обеих фракций с присущим им средним размером зерна от плотностей в рабочем диапазоне (рис. 2).

Зависимость имеет вид, аналогичный полученному ранее для чистых вольфрамовых порошков фракций А и Б [6], однако численные значения существенно различаются. Из этого следует, при выборе параметров катодной таблетки из смесей вольфрамовых порошков с астраленами использовать критерии, определённые для серийного производства катодов из чистого вольфрама, некорректно. Следовательно, для формирования катодных каркасов с плотностью в рабочем диапазоне требуется

получить диапазон давлений прессования для каждой смеси порошков и оценить влияние присадки астраленов на этот параметр.

На рис. 3 представлены зависимости давлений прессования от получаемой плотности катодных каркасов для всех исследованных порошков и смесей. Из графиков следует, что для получения одной и той же плотности катодного каркаса давление прессования для модифицированных смесей гораздо выше, чем для чистых вольфрамовых порошков обеих фракций. Этот факт свидетельствует об устойчивости наночастиц к прессованию, который уже отмечался в [4] при разработке экспериментальной технологии изготовления катодного каркаса из вольфрамового порошка фракции Б с астраленами (0,5% по массе), для которых давление прессования катодных каркасов было в 2–3 раза выше, чем для чистого вольфрамового порошка фракции А.

Выявленные закономерности для модифицированных порошков позволяют рассчитывать на формирование из них равномерной структуры катодного каркаса, обладающего сообщающимися поровыми каналами правильной геометрической формы и малым разбросом по их размеру,

что является важнейшим фактором для получения высоких эмиссионных параметров за счет эффективного

поступления бария на эмитирующую поверхность [9].

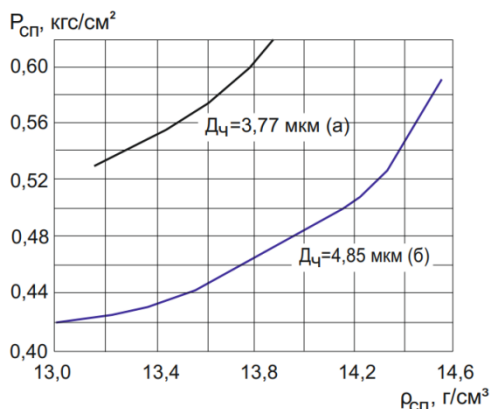


Рис. 2. Зависимость давления газопроницаемости от плотности вольфрамового каркаса из порошков: а – ВЧДК фракции Б с астраленами (0,5%); б – ВЧДК фракции А с астраленами (0,5%)

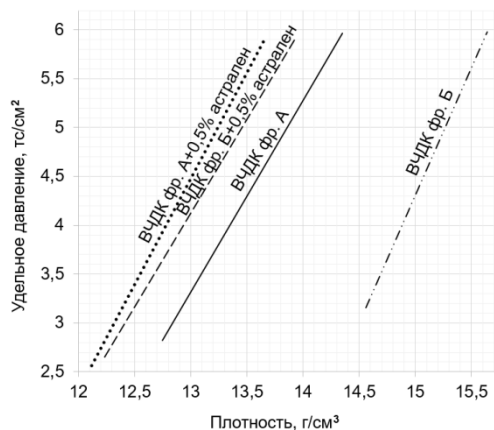


Рис. 3. Зависимость давления прессования и плотности катодных каркасов из чистых и модифицированных вольфрамовых порошков

Заключение

Согласно проведенным исследованиям, модификация вольфрамового порошка слоистыми наночастицами – астраленами – в количестве 0,5 мас.% оказывает положительное влияние на такие физические свойства порошка, как укрупнение зерна и снижение процента усадки катодного каркаса. Отмечено, что основные закономерности, такие как связь среднего размера зерна с усадкой и зависимость давления газопроницаемости от плотности, справедливы для чистых вольфрамовых порошков справедливы и для

модифицированных смесей. Однако численные зависимости отличаются за счет устойчивости наночастиц к прессованию. Поэтому для формирования катодных каркасов с плотностью в рабочем диапазоне получен собственный диапазон давлений прессования для каждой модифицированной смеси порошков, при использовании которого можно получить равномерную структуру катодной таблетки с высокими эмиссионными свойствами МПК. В дальнейшем планируется исследовать шлифы катодных каркасов из модифицированных смесей и численно определить размеры поровых каналов.

Библиографический список

1. Liu W., Zhang K., Wang Y., Pan K., Gu X., Wang J., Li J., Zhou M. Operating model for scandia doped matrix scandate cathodes // Applied Surface Science. 2005, vol. 251, iss. 1–4. P. 80–88. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2005.03.197>
2. Катоды с большой плотностью тока в докладах международной конференции по ЭВП 2012 IEEE IVES // Новости СВЧ-техники: информационно-рекламный сборник / ГНПП «Исток», Фрязино. 2013. № 1. С. 11–25.
3. Крачковская Т. М., Мельников Л. А., Глухова О. Е., Шунаев В. В., Шалаев П. Д. Металлопористые катоды, модифицированные наночастицами углерода, с высокой долговечностью для применения в приборах СВЧ // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46, вып. 13. С. 51–54. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.13.49593.18315> [Krachkovskaya T. M., Melnikov L. A., Glukhova O. E., Shunaev V. V., Shalaev P. D. Nanocarbon-modified metal porous cathodes with high durability for application in microwave devices // Tech. Phys. Lett. 2020. Vol. 46, iss. 7. P. 673–676. <https://doi.org/10.1134/S106378502007010X>].
4. Крачковская Т. М., Сторублев А. В., Сахаджи Г. В., Емельянов А. С. Исследование характеристик металлопористого катода, модифицированного наночастицами углерода // Известия высших учебных заведений России. Радиоэлектроника. 2018. № 4. С. 57–63. <https://doi.org/10.32603/1993-8985-2018-21-4-57-63>

5. Крачковская Т. М., Журавлев С. Д., Емельянов А. С., Богачев Р. Ю., Якимович Ю. В. Исследование эмиссионных свойств катодов М-типа, модифицированных нанокуглеродом // XIV Всероссийская научно-техническая конференция «Электроника и микроэлектроника СВЧ». Сборник докладов. Санкт-Петербург, 2–6 июня 2025 г. СПб. : Издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025. С. 186–189.

6. Мельникова И. П., Лясников В. Н., Лясникова А. В. Эмиссионные свойства металлопористых катодов // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2012. Т. 15. № 2. С. 84–90. EDN: РСХНОН

7. Мельникова И. П., Лясникова А. В. Влияние степени кристалличности порошков гидроксидоапатита и вольфрама на процесс изменения их гранулометрического состава при термомеханической обработке // Вестник СГТУ. 2011. № 4 (59). С.152–155. EDN: OWVSXL

8. Крачковская Т. М., Емельянов А. С., Журавлев С. Д. Способ изготовления металлопористого катода. Патент № 2823125. Заявл. 09.10.2023. Опубл.18.07.24.

9. Мельникова И.П., Лясников В.Н., Лясникова А.В. Взаимосвязь эмиссионной способности и долговечности металлопористых катодов с характеристиками вольфрамовых порошков // Электронная техника. Серия 1: СВЧ-техника. 2012, вып. 1 (512). С.30–37. EDN: TLTUAF

**EFFECT OF MODIFICATION OF TUNGSTEN POWDER
BY LAYERED NANOCARBON PARTICLES
ON ITS PHYSICAL PROPERTIES
AND STRUCTURAL PROPERTIES OF THE CATHODE MATRIX**

T. M. Krachkovskaya, Yu. V. Yakimovich, Yu. R. Kuznetsova, E. A. Davydova

Abstract. The paper presents a study of the effect of modification of tungsten powder used for the manufacture of metal-porous cathode frames by layered nanocarbon particles of the astralene type. It is shown that the modification of the powder with astralenes affects such parameters as the average grain size, shrinkage, as well as the structural properties of cathode frames, such as porosity and gas permeability.

Keywords: metal-porous cathode, tungsten powder, metal-porous frame, nanocarbon

Сведения об авторах

Крачковская Татьяна Михайловна, кандидат технических наук, начальник лаборатории № 2 НПК-12, АО «НПП «Алмаз». E-mail: Elektron.t@bk.ru

Якимович Юлия Владимировна, аспирант кафедры «Материаловедение и биомедицинская инженерия» института материаловедения, машиностроения и транспорта Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А., инженер-технолог АО «НПП «Алмаз»

Кузнецова Юлия Романовна, инженер-технолог АО «НПП «Алмаз»

Давыдова Елена Александровна, инженер-технолог АО «НПП «Алмаз»

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛОПОРИСТОГО КАТОДА М-ТИПА ПОСЛЕ НАРАБОТКИ МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

**Т. М. Крачковская, С. Д. Журавлев, Р. Ю. Богачев,
Д. А. Тихомиров, В. А. Соляник**

Аннотация: В статье представлено исследование морфологии и химического состава эмиссионной поверхности и поверхности среза металлопористого катода М-типа, выработавшего свой ресурс, методами сканирующей электронной микроскопии. Проведена оценка потенциальной эмиссионной долговечности, определяемой конструкцией катода. Выявлены причины, ограничивающие реализацию максимальной эмиссионной долговечности исследуемого металлопористого катода.

Ключевые слова: металлопористый катод; эмиссионная поверхность; активное вещество; долговечность

Введение

В настоящее время металлопористый катод (МПК) М-типа является самым распространенным источником электронов в электровакуумных приборах СВЧ-диапазона [1]. Наряду с плотностью отбираемого тока важнейшим эмиссионным параметром катода является долговечность, которая зависит от конструктивных и технологических особенностей изготовления катода, рабочей температуры, а также вакуумных условий его эксплуатации в приборе [2]. Из [3–5] известно, что падение эмиссионного тока в процессе наработки МПК М-типа определяется:

1) уменьшением запаса активного вещества (алюмината/алюмосиликата бария-кальция) по причине его испарения при высокой рабочей температуре и, как следствие, уменьшение бария на эмитирующей поверхности;

2) деградацией эмиссионного покрытия из металлов платиновой группы (Os, Ir, Ru) на эмитирующей поверхности катода, вызванного взаимной диффузией компонентов эмиссионной пленки с тугоплавким материалом катодной матрицы (W, Mo);

3) деградацией эмитирующей поверхности из-за отравления или распыления бария ввиду неблагоприятных вакуумных условий и ионной бомбардировки.

Целью работы ставится изучение деградационных особенностей металлопористого катода М-типа (пленка Os–Ir–Al) после выработки ресурса и

определение основного механизма, приведшего к снижению эмиссионной способности.

Описание исследуемого катода

Ускоренным испытаниям на долговечность в составе макета катодно-сеточного узла (КСУ) с встроенным гетероионным насосом (ГИН) подвергался МПК с пленкой Os–Ir–Al на эмитирующей поверхности толщиной 0.3–0.5 мкм. Вольфрамовая матрица (с пористостью 22%) была пропитана эмиссионным веществом – алюмосиликатом бария-кальция с молярным соотношением $3\text{BaO} \cdot 0.5\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 0.5\text{SiO}_2$. Испытания проходили без токоотбора в режиме непрерывного горения при повышенной температуре $\sim 1160^\circ\text{C}_{\text{ярк}}$, при которой коэффициент ускорения составил 7.2 относительно рабочей температуры катода.

В форсированном по температуре режиме катод отработал 800 ч с периодическим контролем (каждые 150 ч) эмиссионной способности и давления в макете (табл. 1), затем испытания были завершены. После 450 ч наработки, что соответствует 3240 ч рабочей долговечности при рабочей температуре $1090^\circ\text{C}_{\text{ярк}}$, один из критериев по падению эмиссионной способности (снижение температурного запаса ниже 50°C) не выполняется; следовательно, 3240 ч можно считать ресурсной эмиссионной долговечностью для данного катода.

В начале испытаний давление в макете составляло $2 \cdot 10^{-7}$ Торр, однако в процессе испытаний было нестабильно и ухудшалось

до $10^{-5} \div 10^{-4}$ Торр, поэтому перед измерениями эмиссионной способности проводилась дополнительная откачка ГИНОм до давлений $\sim 10^{-7} \div 10^{-8}$ Торр.

Таблица 1

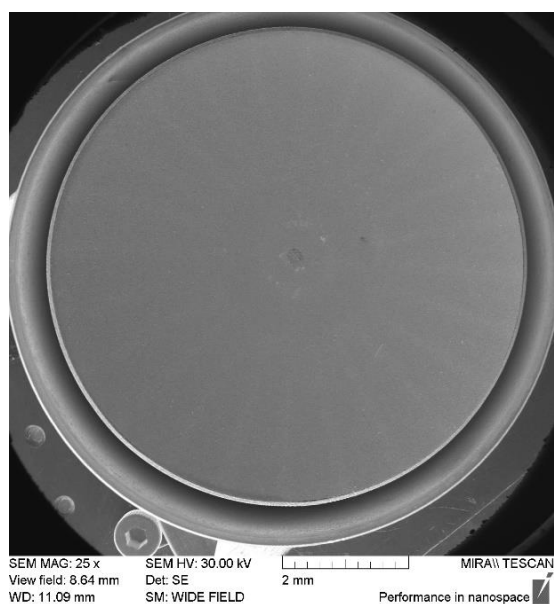
Данные ускоренного испытания на долговечность

| Наработка, ч | Температурный запас, °С | Давление в макете, Торр |
|--------------|-------------------------|-------------------------|
| 0 | 88 | $2 \cdot 10^{-7}$ |
| 150 | 75 | $1 \cdot 10^{-4}$ |
| 300 | 69 | $1 \cdot 10^{-5}$ |
| 450 | 56 | $1,8 \cdot 10^{-5}$ |
| 550 | 26 | $8 \cdot 10^{-5}$ |
| 700 | 17 | $4 \cdot 10^{-5}$ |
| 800 | 20 | $1,2 \cdot 10^{-5}$ |

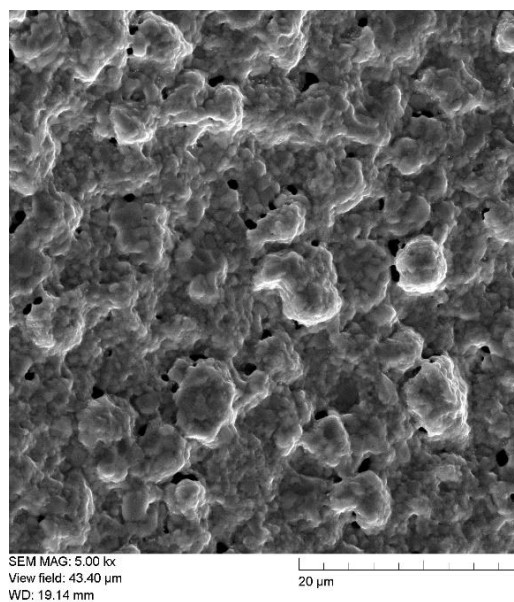
После испытаний катод был демонтирован из макета и исследован с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) с приставкой для рентгеноспектрального анализа. На рис.1 представлены изображения эмиссионной поверхности.

Исследование эмиссионной поверхности экспериментального образца

Поверхность катода имеет характерный матовый оттенок, присутствует слабый отпечаток сетки. При увеличении 5кх морфология поверхности достаточно развитая, отмечается большое количество равномерно распределённых пор размером $\sim 0.04 \div 0.1$ мкм, которые обычно отсутствуют в начале наработки [6]. Результаты рентгеноспектрального анализа поверхности представлены в табл. 2. Из данных таблицы следует, что поверхность однородна по химическому составу, на ней отсутствуют посторонние элементы, а компоненты эмиссионной пленки присутствуют в достаточном количестве (соотношение $(Os+Ir+Al)/W$ примерно 50/50, что считается оптимальным для достижения низкой работы выхода электронов с поверхности [7]).



а



б

Рис. 1. СЭМ-изображения эмиссионной поверхности катода: а – при увеличении 25х; б – при увеличении в 5000 раз (5.00кх)

Результаты рентгеноспектрального анализа поверхности представлены в табл. 2. Из данных таблицы следует, что поверхность однородна по химическому составу, на ней отсутствуют посторонние элементы, а компоненты эмиссионной пленки присутствуют в достаточном количестве (соотношение $(Os+Ir+Al)/W$

примерно 50/50, что считается оптимальным для достижения низкой работы выхода электронов с поверхности [7]).

Из анализа поверхности катода следует, что ее деградация выражена слабо и не может являться причиной снижения эмиссионной способности.

Таблица 2

Данные рентгеноструктурного анализа

| Метка спектра | s 1 | s 2 | s 3 | s 4 |
|---------------|--------|--------|--------|--------|
| O | 2.29 | 1.23 | 1.12 | 1.24 |
| Al | 0.81 | 0.70 | 0.63 | 0.78 |
| Ba | 0.83 | 0.59 | 0.48 | 0.55 |
| W | 47.45 | 47.14 | 46.29 | 46.74 |
| Os | 33.98 | 35.61 | 36.48 | 35.73 |
| Ir | 14.64 | 14.72 | 15.00 | 14.97 |
| Всего | 100.00 | 100.00 | 100.00 | 100.00 |

Исследование распределения компонентов активного вещества по глубине залегания металлопористой губки

Известно [8], что в процессе наработки приповерхностный слой вольфрамовой матрицы катода постепенно обедняется барием согласно зависимости:

$$e = At^{1/2}, \quad (*)$$

где e – глубина обеднения в мкм, t – время работы катода в часах, A – коэффициент обеднения, зависящий от температуры в $\text{мкм} \cdot \text{ч}^{-1/2}$.

Этот процесс приводит к изменению давления насыщенных паров активного вещества и постепенному обеднению барием эмитирующей поверхности, приводящего к снижению эмиссионной способности [3]. Поэтому, на СЭМ методом картирования поверхности был исследован срез вольфрамовой матрицы катода, полученный элетроискровой обработкой и протравленный в среде азота на глубину 5 мкм.

Картирование проводилось по интенсивности характеристического рентгеновского излучения вольфрама ($W\alpha$), бария ($Ba\alpha$) и кислорода ($O\alpha$) на одних и тех же участках (рис. 2, 3): в средней части эмиттера и на его краю, который сопрягается с корпусом, потому что диаметр катода имеет размер 10 мм, что может приводить к неравномерности. Поскольку другие компоненты активного вещества CaO и Al_2O_3 практически не расходуются по сравнению с Ba/BaO [9], то их распределение не рассматривалось.

Из рис. 2 видно, что обеднение барием и кислородом больше выражено в средней

части катода, чем на краю. Из рис. 3 следует, что на глубине 200 мкм от эмитирующей поверхности распределение бария и кислорода в середине и на краю примерно одинаково. Из сравнения рис. 2 и 3 следует, что наблюдается некоторое обеднение барием и кислородом приповерхностного слоя вольфрамовой матрицы катода, глубина обеднения составляет примерно $\sim 60 - 70$ мкм (рис 4.). Из этого следует, что согласно формуле (*), коэффициент обеднения A будет равен $2 - 2.5 \text{ мкм} \cdot \text{ч}^{-1/2}$ для температуры катода 1160°C .

Авторы [9] указывают, что минимальный порог испарения для поддержания эмиссионной способности катода с пористостью 20–32% обеспечивается при максимальной глубине обеднения бариевой компонентой открытых пор матрицы, равной 300 мкм. При подстановке в уравнение (*) найденного коэффициента A и максимальной глубины обеднения получаем, что потенциальная долговечность катода должна быть не менее 14000 ч.

Следовательно, в исследованном МПК максимальная потенциальная эмиссионная долговечность, определяемая конструктивными параметрами эмиттера, не была реализована из-за неблагоприятных вакуумных условий, к которым особенно восприимчивы катоды М-типа [5].

Выводы

В работе проведено исследование МПК М-типа после ресурсных испытаний. Проанализированы основные особенности деградации катода: изменение морфологии и химического состава эмиссионной поверхности, обеднение приповерхностного слоя бариевой компонентой, влияние вакуумных условий, проведена оценка вклада каждого фактора. Выявлено, что для исследованного катода основным ограничивающим его максимальную потенциальную эмиссионную долговечность, определяемую конструктивными параметрами, послужили неблагоприятные вакуумные условия.

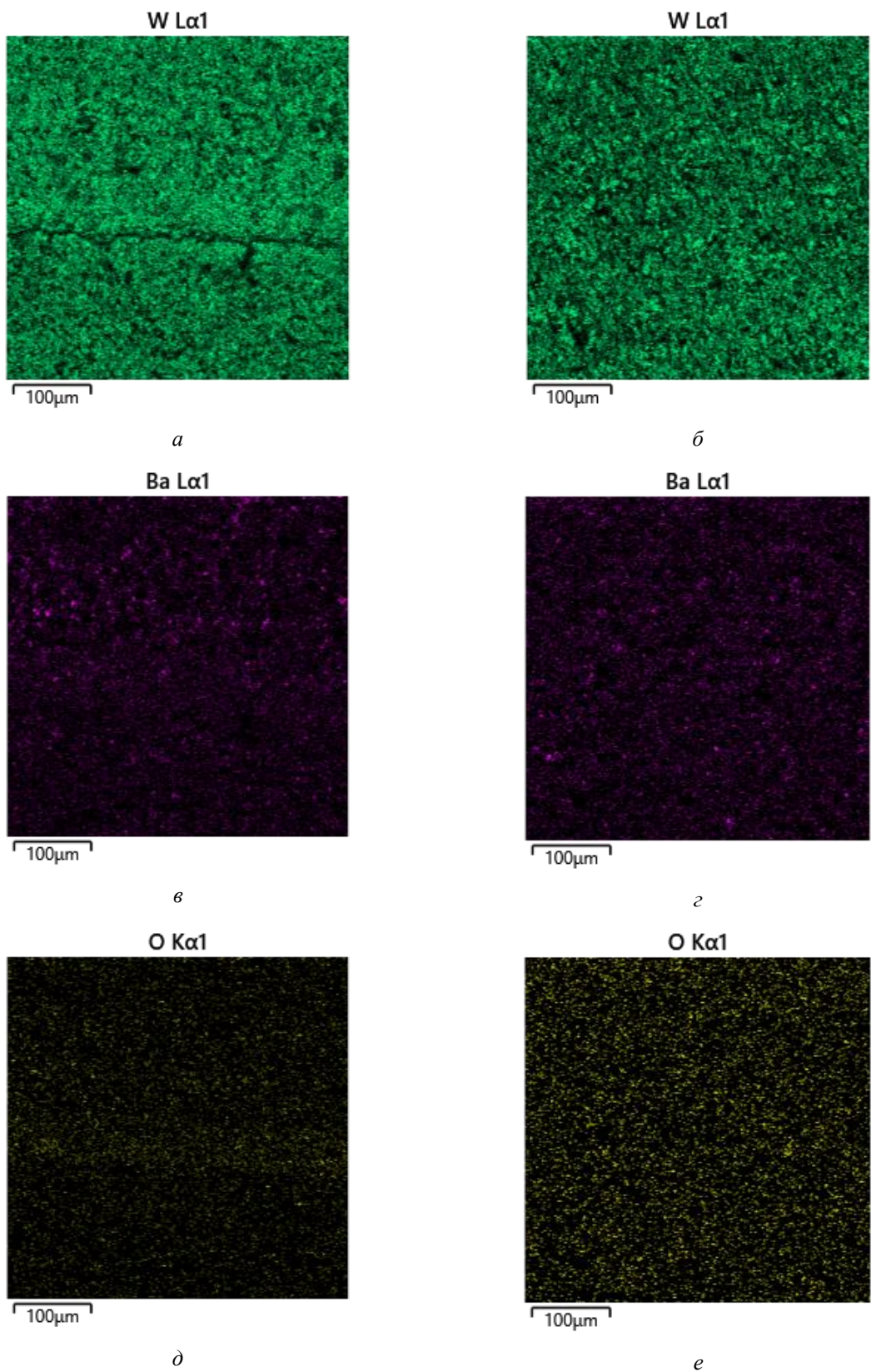


Рис. 2. Картирование травленного среза катода вблизи эмитирующей поверхности:
a, в, д – в средней части эмиттера по W, Ba и O соответственно;
б, г, е – на краю эмиттера по W, Ba и O соответственно.

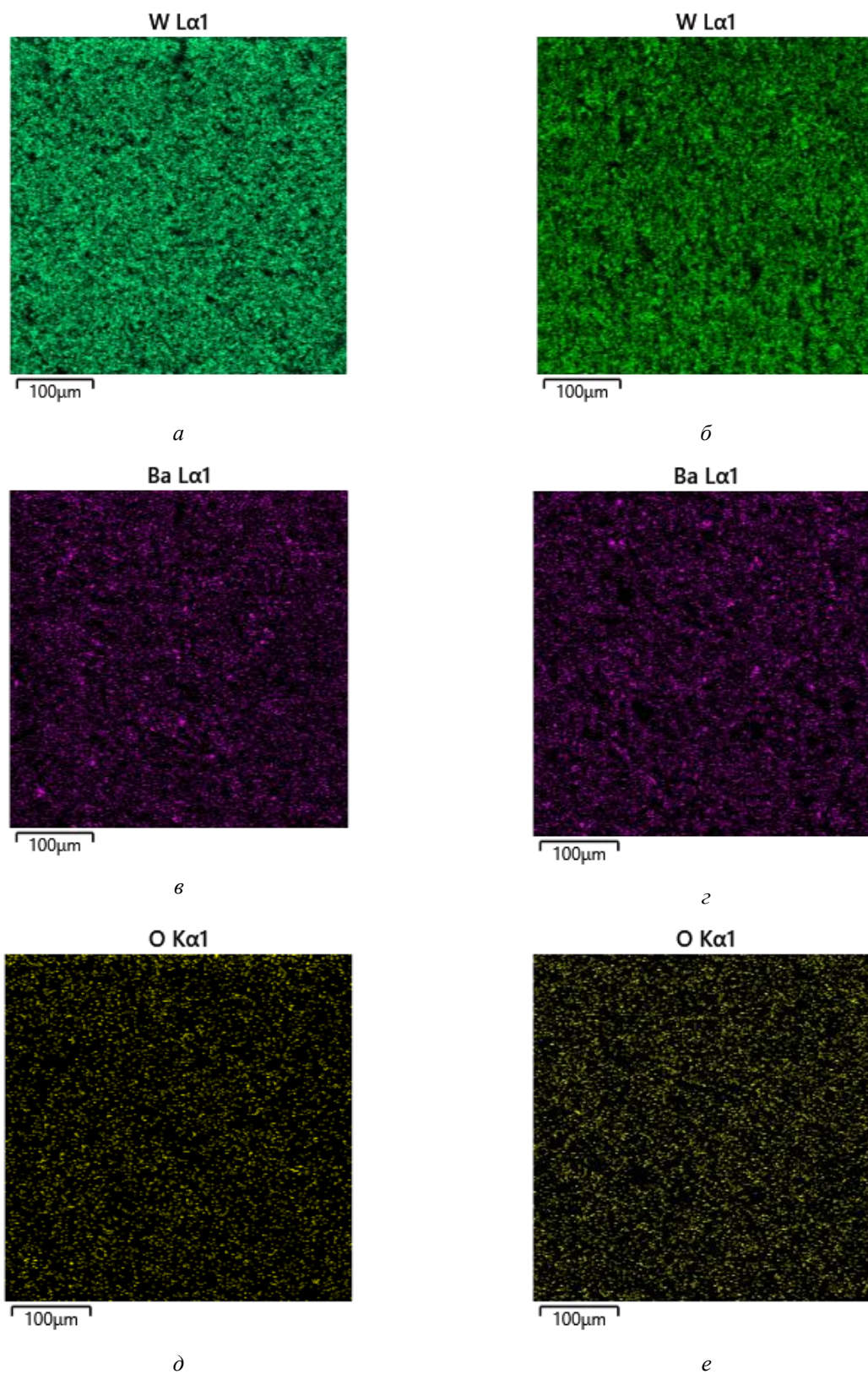


Рис. 3. Картирование травленного среза катода на глубине 200 мкм:
a, в, г – в средней части эмиттера по W, Ba и O соответственно;
б, г, е – на краю эмиттера по W, Ba и O соответственно

Библиографический список

1. Modern developments in vacuum electron sources / Gärtner G., Knapp W., Forbes R. G., eds. Springer, 2020. xviii+ 597 p. (Topics in Applied Physics. Vol. 135). <https://doi.org/10.1007/978-3-030-47291-7>
2. Козлов В. И. Эмиссионные свойства и долговечность металлопористых катодов для СВЧ приборов : (по данным отечественной и зарубежной печати за 1975—1982 гг.) // Обзоры по электронной технике. Серия 1. Электроника СВЧ. М. : ЦНИИ «Электроника», 1983, вып. 8 (541). 54 с.
3. Aida T., Tanuma H., Sasaki S., Yaguchi T. Emission life and surface analysis of barium impregnated thermionic cathodes // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74, iss. 11. P. 6482–6487. <https://doi.org/10.1063/1.355136>
4. Grant T. J. Emission degradation characteristics of coated dispenser cathode // IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). Los Angeles, CA, USA (December 7 – 10, 1986). 1986. P. 700–703.
5. Ворожейкин В. Г. , Набоков Ю. И., Козлов В. И., Андреев А. А. Устойчивость к отравлению металлопористых катодов // Электронная техника. Серия 1. Электроника СВЧ. 1975. Вып. 11. С. 56–58.
6. Крачковская Т. М. Исследование деградации эмиссионной поверхности модифицированных наноуглеродом катодов М-типа в процессе наработки // Электронная техника. Серия 1. СВЧ-техника. 2025, вып. 4 (568). С. 37–49. EDN: QOFANE
7. Li W.-C., Roberts S., John T. Balk effects of substrate bias on microstructure of osmium-ruthenium coatings for porous tungsten dispenser cathodes // IEEE Transactions on electron devices. 2009. Vol. 56, no. 5. P. 805–811. <https://doi.org/10.1109/TED.2009.2015628>
8. Roquais J. M., Poret F., le Doze R., Ricaud J. L., Monterrin A., Steinbrunn A. Barium depletion study on impregnated cathodes and lifetime prediction // Applied Surface Science. 2003. Vol. 215, iss. 1 – 4. P. 5–17. [https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(03\)00318-0](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(03)00318-0)
9. Смирнов В. А. Коннов А. В. Восстановление эмиссии металлопористых катодов электровакуумных приборов СВЧ // Электронная техника. Серия 1: СВЧ-техника. 2024, вып.2 (562). С. 23–28. EDN: VDYBIF

STUDY OF A DISPENSER M-TYPE CATHODE AFTER PRODUCTION BY SCANNING ELECTRON MICROSCOPY

T. M. Krachkovskaya, S. D. Zhuravlev, R. Yu. Bogachev, D. A. Tikhomirov, V. A. Solyanik

Abstract. This article presents a study of the morphology and chemical composition of the emission surface and cut surface of an M-type dispenser cathode that has reached the end of its service life, using scanning electron microscopy. The potential emission life, determined by the cathode design, is assessed. The factors limiting the maximum emission life of the studied MPC are identified.

Keywords: dispenser cathode; emission surface; active substance; durability.

Сведения об авторах

Крачковская Татьяна Михайловна, кандидат технических наук, начальник лаборатории № 2 НПК-12, АО «НПП «Алмаз». E-mail: Elektron.t@bk.ru

Журавлев Сергей Дмитриевич, кандидат технических наук, начальник НПК-12, АО «НПП «Алмаз». E-mail: Zhuravlevsd@almaz-rpe.ru

Богачев Ростислав Юрьевич, зам. начальника НПК-12, АО «НПП «Алмаз». E-mail: Bogachevru@almaz-rpe.ru

Тихомиров Дмитрий Александрович, аспирант кафедры ««Электронные приборы и устройства» института электронной техники и приборостроения Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А., начальник сектора, АО «НПП «Алмаз». E-mail: TikhomirovDA@almaz-rpe.ru

Соляник Вадим Александрович, аспирант кафедры ««Электронные приборы и устройства» института электронной техники и приборостроения Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А., инженер-технолог, АО «НПП «Алмаз». E-mail: mailvadim1636@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТОЛЩИНЫ ПЛЕНКИ МЕТАЛЛОВ, НАНЕСЕННОЙ С ПОМОЩЬЮ ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО МЕТОДА, НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОПОРИСТОГО КАТОДА

В. А. Соляник, А. Ю. Мирошниченко, Ю. В. Якимович

Аннотация: Проведено сравнение трех методик измерения толщины тонких пленок порядка 0.1 мкм: 1) с использованием интерференционного микроскопа Линника, 2) с помощью растрового электронного микроскопа (пленки на поликоровых свидетелях), 3) посредством рентгено-флуоресцентного анализа. Изложен основной принцип работы установки ионно-плазменного травления и покрытия. Выявлены положительные и отрицательные стороны изложенных методик. Показано, что для достижения достоверного результата методы РФА и РЭМ необходимо использовать в совокупности.

Ключевые слова: металллопористый катод; процесс ионно-плазменного травления и покрытия; пленки из тугоплавких металлов; рентгено-флуоресцентный анализ, растровый электронный микроскоп

Введение

Металлопористый катод (МПК) – современный источник электронов в электровакуумных приборах. Важнейшим направлением в достижении максимальной эффективности МПК с точки зрения эмиссионных параметров является нанесение пленки тугоплавких металлов на эмитирующую поверхность катода [1]. Экспериментально было выяснено, что пленка из чистого осмия или в комбинации с другими металлами платиновой группы (иридий, рутений), снижает работу выхода электронов с поверхности МПК на несколько десятых долей эВ [2 – 4]. Однако толщина пленки не должна превышать 1 мкм [5], поэтому контроль толщины и равномерности нанесенной пленки является актуальной задачей.

В настоящее время для нанесения тонких пленок тугоплавких металлов на эмиссионную поверхность МПК используются установки ионно-плазменного травления и покрытия. Важным процессом в производстве катодов так же является травление эмиссионной поверхности, поскольку после ее токарной доработки, поры вольфрамового каркаса завальцовываются. Травление должно происходить на определенную глубину ~5–15 мкм, чтобы поры по всей эмиссионной поверхности были раскрыты для наибольшей эффективности диффузии активного вещества к поверхности катода.

Глубина травления определяется экспериментально. Покрытие наносится сразу после травления на шероховатую поверхность, которая представляет собой «гористую» структуру [6], что усложняет задачу измерения её толщины.

Целью работы ставилась разработка методики измерения толщины пленки тугоплавких металлов, наносимой с помощью ионно-плазменного метода, и способа определения толщины фактического напыления по поверхности катодов.

Конструкция установки травления и покрытия

Рабочая камера установки травления и покрытия катодов показана на рис. 1. Цифрой 1 обозначена оправка, в которую загружаются катоды эмиссионной поверхностью вниз, Цифра 2 отмечает прямонакальный катод, который является источником электронов, ионизирующих инертный газ. Цифрой 3 показана заслонка, которая закрыта в режиме травления (когда потенциал подается на катоды), и открыта в режиме покрытия, когда потенциал подается на таблетку – источник материала покрытия.

Оправка с катодами статична и в 1.5 – 2 раза больше по диаметру, чем таблетка; расстояние между покрываемой поверхностью и таблеткой сравнительно невелико. Описанная конструкция не обеспечивает однородное по поверхности

напыление. Отклонение от заданной его толщины может достигать 20–30%.

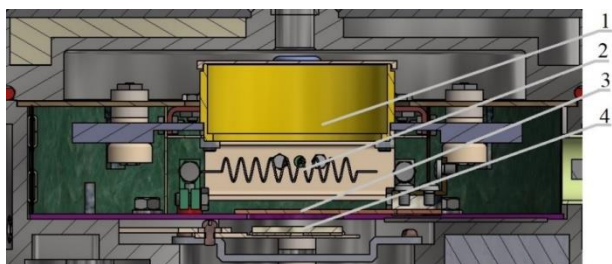


Рис. 1. Камера установки ионно-плазменного травления и покрытия катодов

Основной принцип работы установки ионно-плазменного травления и покрытия

Травление происходит за счет взаимодействия ионов инертного газа с обрабатываемой поверхностью, вследствие которого с поверхности детали выбиваются частицы, соизмеримые с массой иона. В режиме покрытия ионы бомбардируют таблетку с веществом, которое конденсируется на поверхности детали [7].

К положительным особенностям таких установок можно отнести сравнительно низкую скорость напыления (~15-17 нм/мин), возможность нанесения покрытий комбинированного состава благодаря ионно-плазменному методу распыления таблетки, возможность прервать процесс напыления, а затем продолжить нанесение пленки. Отрицательными особенностями таких установок являются высокая требовательность к скорости откачки, скорости напуска инертного газа и сложность установки дополнительного измерительного оборудования вследствие компактности рабочей камеры, а самое главное – неравномерность толщины напыляемой пленки и глубины травления.

Измерение распределения толщины пленки по поверхности

До недавнего времени толщины пленки ~0.1-1.0 мкм измеряли с помощью интерференционного микроскопа Линника [8]. Поскольку толщина пленки соизмерима с длинами волн видимого диапазона, этот

метод не давал требуемой точности измерения до 0.01 мкм. Ранее нами было предложено измерение толщины пленки на поликорковых свидетелях с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ) [9]. Получено распределение толщины пленки по трем свидетелям с насечками. Свидетели были расположены таким образом, чтобы точки, где измеряются толщины пленки, были расположены на диаметре оснастки.

По графику распределения (рис. 2) четко видно, что в центре оснастки толщина напыления самая большая и убывает к периферии, что согласуется с конструкцией камеры. Однозначно можно сказать, что данный метод дает возможность измерить толщину пленки в явном виде, так как в электронном микроскопе исследуется торцевая поверхность пленки.

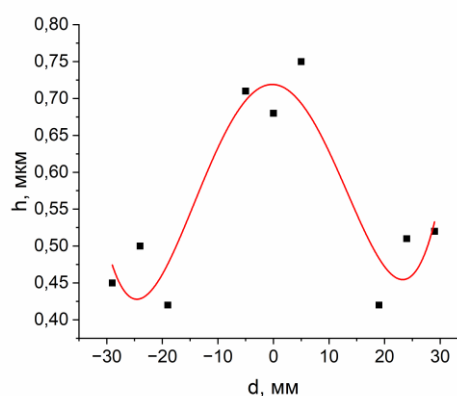


Рис. 2. Распределение толщины пленки при измерениях с помощью РЭМ

Для получения более точной картины необходимо большее количество точек. Но на базе данного метода значительное увеличение количества точек на измеряемой поверхности является технически сложной задачей, и потому было принято решение искать альтернативные методы измерения. Решением проблемы является третий рассматриваемый нами способ измерения толщины напыления – рентгенофлуоресцентный анализ (РФА). С помощью этого метода оказывается возможным измерять толщину пленки непосредственно на катодах, на поверхности любого металла, видимого для анализатора, и во сколько угодно большом количестве точек. Для формирования поверхностного слоя был

использован молибден; диаметр заготовки был выбран по размеру оснастки для напыления (изготовить вольфрамовый диск диаметром 70 мм не представлялось возможным). Молибденовый диск был протравлен для получения однородной

шероховатости поверхности, и затем был проведен процесс напыления.

Измерения проводились в 200 точках, в результате чего было получено распределение толщины поверхностного слоя, представленное на рис. 3.

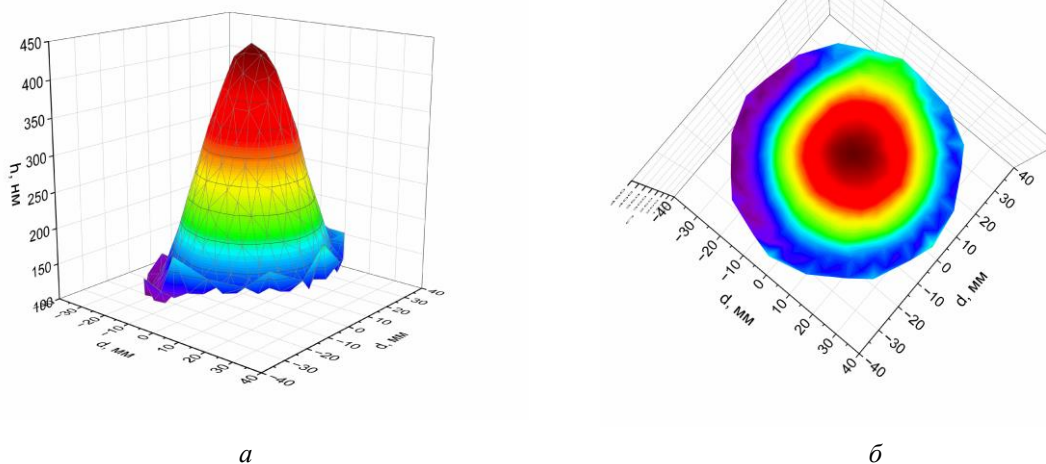


Рис. 3. Распределение толщины слоя, полученное в измерениях с помощью РФА: *а* – 3D-поверхность, образовавшаяся при напылении пленки, *б* – вид сверху на эту поверхность (цвет онлайн)

Распределение, полученное на основе измерений РФА (рис. 3, *а*) по виду совпадает с распределением, полученным на РЭМ, что говорит о корректности предложенного метода. Четко видны имеющие форму окружности зоны (рис 3, *б*), где достигаются определенные значения толщины пленки (выделены цветом). Расположение катодов в оснастке как раз имеет форму окружности и по полученному распределению можно прогнозировать толщину напыления на поверхности катода, который размещен на заданном расстоянии от центра оснастки.

Однако наряду с неограниченным количеством точек для измерений на поверхности объекта метод РФА имеет существенный недостаток, который заключается в том, что измерения основаны на спектре излучения объекта, которые могут быть некорректно интерпретированы программным обеспечением.

Минимизировать ошибку измерений можно путем дополнительных калибровок.

Выводы

В работе рассмотрены несколько методов измерения пленок тугоплавких металлов $\sim 0,1$ мкм. Оценены положительные и отрицательные стороны этих методов. Интерференционная микроскопия является самым простым способом измерения в части приготовления свидетелей, но не может обеспечить высокую точность измерения. Электронная микроскопия с одной стороны дает возможность измерять толщину пленки в явном виде, но не дает возможности построить топологию всей поверхности. Рентгено-флуоресцентный метод измерения является непрямым методом измерения толщины, но он является неразрушающим методом, а, следовательно, дает возможность измерять катоды, участвующие в производстве с высокой точностью. Для достижения наиболее достоверного результата необходимо применять методы электронной микроскопии и рентгено-флуоресцентного анализа в совокупности.

Библиографический список

1. Дюбуа Б. Ч., Королёв А. Н. Современные эффективные катоды (К истории их создания на ФГУП НПП «Исток») // Электронная техника. Серия 1: СВЧ-техника. 2011, вып. 1 (508). С. 5–24. EDN: NSHUBZ
2. Горелова Е. Г. Технологические особенности осмирования металлопористых катодов СВЧ-приборов // Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е. В. Арменского. Москва, 17 февраля – 01 марта 2017 г. М. : Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ. 2017. С. 293–294. EDN: YOBLTZ
3. Крачковская Т. М., Шалаев П. Д. Испытания на долговечность металлопористых катодов, модифицированных нанолуглеродом в составе ЛБВ // Электроника и микроэлектроника СВЧ. 2021. Т. 1. С. 241–243. EDN: GHOFGL
4. Li W. C., Roberts S., Balk T. J. Effects of substrate bias on microstructure of osmium-ruthenium coatings for porous tungsten dispenser cathodes // IEEE Transactions on electron devices. 2009. Vol. 56, no. 5. P. 805–811. <https://doi.org/10.1109/TED.2009.2015628>
5. Гилмор А. С. Лампы с бегущей волной. М. : Техносфера. 2013. 616 с.
6. Дюбуа Б. Ч., Михальченков А. Г., Поливникова О. В., Темиряева М. П. Влияние структуры поверхности металлопористых катодов на их эмиссионные свойства // Электронная техника. Серия 1: СВЧ-техника. 2010, вып. 1 (504). С. 25–34. EDN: MNHGAV
7. Иосилевич Л. Ш., Сахаджи Г.В., Сухов В. П., Данилина Е. Е. Автоматизирование технологических процессов ионно-плазменного травления и напыления при изготовлении импрегнированных металлопористых катодов для ламп бегущей и обратной волны // Наука и бизнес: пути развития. 2013. №10 (28). С. 40–47. EDN: RUSHDT
8. Мешалкин А.Ю., Андриеш И. С., Абашкин В. Г., Присакар А. М., Тридох Г. М., Акимова Е. А., Енаки М. А. Цифровой метод измерения толщины нанометровых пленок на базе микроинтерферометра МИИ // Электронная обработка материалов. 2012, вып. 6. С. 114–118. EDN: RAHIOX
9. Соляник В. А., Емельянов А. С., Богачев Р. Ю. Параметры осмиевых пленок на поверхности металлопористого катода и методы контроля // Вопросы прикладной физики: межвуз. науч. сб. – Саратов : Издательство Саратовского университета, 2024. Вып. 31. С. 15–18. EDN: MZBWYN

INVESTIGATION OF THE THICKNESS DISTRIBUTION OF A METAL FILM USING THE ION-PLASMA METHOD ON THE SURFACE OF A METAL-POROUS CATHODE

V. A. Solyanik, A. Yu. Miroshnichenko, Yu. V. Yakimovich

Abstract: The article describes three methods for measuring the thickness of thin films of the order of 0.1 microns: the Linnik interference microscope, the measurement of film thickness on polycore witnesses using a scanning electron microscope (SEM), and X-ray fluorescence analysis (XFA). The basic principle of operation of the ion plasma etching and coating unit is described. As a result of the conducted research, the positive and negative sides of all the described methods were revealed, the analysis showed that in order to achieve a reliable result, the methods of RF and SEM must be used in combination.

Keywords: metalloporous cathode; ion plasma etching and coating process; films made of refractory metals; X-ray fluorescence analysis, scanning electron microscope.

Сведения об авторах

Соляник Вадим Александрович, аспирант кафедры «Электронные приборы и устройства» института электронной техники и приборостроения Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А., инженер-технолог, АО «НПП «Алмаз». E-mail: mailvadim1636@gmail.com

Мирошнichenko Алексей Юрьевич, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры «Электронные приборы и устройства» института электронной техники и приборостроения Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А.

Якимович Юлия Владимировна, аспирант кафедры «Материаловедение и биомедицинская инженерия» института материаловедения, машиностроения и транспорта Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А., инженер-технолог, АО «НПП «Алмаз»

НАНОТЕХНОЛОГИИ

УДК 530.145.81

КРУПНОЗЕРНИСТЫЕ МОДЕЛИ: АНАЛИЗ, МЕТОДИКА, МОДЕЛИРОВАНИЕ

О. Е. Глухова, П. А. Колесниченко

Аннотация. Разработана методика построения крупнозернистых моделей многостенных углеродных нанотрубок на основе силового поля MARTINI. Цель разработки – снижение вычислительных затрат при сохранении ключевых геометрических характеристик нанотрубок для моделирования их взаимодействий с биологическими системами. Эффективность предложенного подхода продемонстрирована на примере трёхслойной углеродной нанотрубки: достигнуто шестикратное сокращение числа частиц при адекватном воспроизведении внутреннего диаметра, межстенного расстояния (3.4\AA) и длины элементарной ячейки (11.273\AA). Полученная модель открывает возможности для крупномасштабного моделирования нанотрубок и их комплексов с биомембранами в рамках крупнозернистой молекулярной динамики.

Ключевые слова: молекулярная динамика, крупнозернистые модели, многостенные углеродные нанотрубки

Введение

Молекулярная динамика (МД) является чрезвычайно полезной методологией для исследования поведения биомолекул и биомолекулярных систем, а также материи в целом на уровне детализации, который все еще недоступен во время экспериментов [1–5]. Наиболее точной является трактовка на квантово-механическом уровне [6, 7]. Этот подход в настоящее время ограничен системами с *небольшим числом атомов*. Молекулярная динамика подразумевает проведение моделирования на уровне *всех атомов* (*полноатомное* моделирование). Благодаря огромным достижениям в компьютерных технологиях и алгоритмах [3], включая создание мощных суперкомпьютеров [8, 9], моделирование в масштабе миллисекунд теперь осуществимо для небольших белков, и даже возможно запускать моделирование целых вирусов или фрагментов клеток в масштабе микросекунд [10]. Но этого все еще недостаточно, чтобы охватить временной масштаб биологических событий. Поэтому, после того как Олдер и Уэйнрайт [1] опубликовали результаты своего первого моделирования МД, Левитт и Уоршелл [11] попытались сократить атомистическое представление системных исследований. Это сокращение называется

крупнозернистой моделью (Coarse Grained, CG).

С крупнозернистой моделью можно расширить временной и размерный масштаб моделирования на порядки, тем самым охватывая биологические масштабы [12–14]. Однако крупнозернистое моделирование гораздо сложнее в реализации и имеет гораздо больше недостатков по сравнению с подходами, основанными на полном атомизме, поскольку в компьютерной модели игнорируются мелкозернистые степени свободы [15–18].

Связанная с этим проблема – построение уравнений движения. Практически во всех подходах протяжённые структуры представляются точечными массами, подобно атомным ядрам в полно атомном моделировании [12], однако они не всегда сферичны. Способами учета анизотропии протяженных структур могут быть динамика твердого тела с использованием кватернионов [19,20] или их представление в виде растяжимых стержней [21].

Наиболее значительная сложность заключается в разработке крупнозернистых силовых полей [12–14, 22, 23]. Обычно функциональные выражения заимствуются из атомарных силовых полей, что является недостаточным для моделирования

структуры исследуемых систем, поскольку мелкозернистые степени свободы, хотя явно и не учитываются в CG-моделях, могут сильно влиять на динамику системы [24–27].

В данной работе вначале будут рассмотрены основные положения теории крупнозернистых моделей, их построение и молекулярная динамика на их основе при приложении к биомолекулам (поскольку они лежат в основе метода). Затем будет рассмотрено приложение CG-преобразования на модели углеродных нанотрубок (УНТ). После чего, будет показана реализация перехода из полноатомной модели УНТ в крупнозернистую, с учётом рассмотренной теоретической основы.

1. Методы исследования

1.1. Основы динамики CG: разделение крупнозернистых и мелкозернистых движений

Рассмотрим систему, показанную на рис. 1 (фрагмент полисахаридной цепи), которая становится крупнозернистой при выборе некоторых переменных (к примеру, координат атомов гликозидного кислорода при игнорировании остальных координат элементов структуры). Пусть

$$\frac{d}{dt} \mathbf{P}_i(t) = -\nabla_{\mathbf{R}_i} W(\mathbf{R}) - \frac{1}{k_B T} \sum_i \int_0^t \left\langle \left[\delta \mathbf{F}_i^Q(\tau) \right] - \left[\delta \mathbf{F}_j(\tau)^Q \right]^T \right\rangle \mathbf{v}_i(\tau) d\tau + \delta \mathbf{F}_i^Q(t). \quad (1)$$

Здесь $W(\mathbf{R})$ – потенциал усреднённой силы, $\delta \mathbf{F}_i^Q$ – флуктуация силы (вокруг среднего значения силы), действующая на i -е зерно, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, $\mathbf{v}_i = \mathbf{P}_i / M_i$ – скорость i -го зерна, где M_i – масса, соответствующая i -му зерну, $\nabla_{\mathbf{R}_i} = (\partial/\partial X_i, \partial/\partial Y_i, \partial/\partial Z_i)$ – оператор градиента в декартовых координатах i -го зерна, $\langle \dots \rangle$ – среднее по ансамблю.

Первый член в правой части уравнения (1) представляет собой среднюю силу, действующую на i -е зерно, второй член

$$\mathbf{R}_s = [R_1, R_2, \dots, R_s]^T \text{ и } \mathbf{P}_s = [P_1, P_2, \dots, P_s]^T$$

обозначают степени свободы крупнозерновой модели и соответствующие им импульсы;

$$\mathbf{r}_i = [r_{i1}, r_{i2}, \dots, r_{is}]^T \text{ и } \mathbf{p}_i = [p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{is}]^T$$

мелкозернистые степени свободы и импульсы, соответствующие атомам в позиции i . На данном этапе предполагается, что \mathbf{R}_s и \mathbf{P}_s – координаты центров масс зерен и соответствующие импульсы.

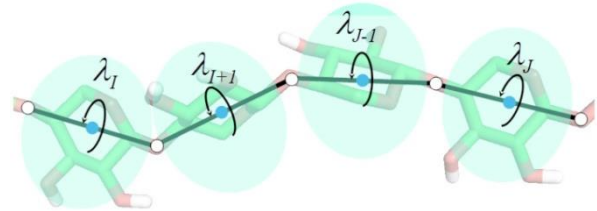


Рис 1. CG-модель на основе участка поли-α-D-глюкозной цепи. Сферой (синим цветом) представляют собой соединённые сахарные кольца, а углы λ для вращения вокруг осей виртуальных связей O–O являются вторичными степенями свободы, которые отсутствуют в модели CG

Используя формализм проекционного оператора Мори–Цванцига и уравнения Лиувилля [15, 28, 29], Кинджо и Хёдо [16], можно вывести уравнения движения для крупнозернистых степеней свободы в предположении, что крупнозернистые степени свободы являются центрами масс зерен:

соответствует силам трения, а последний – флуктуирующим (стохастическим) силам. Потенциал средней силы и флуктуирующие силы определяются, соответственно, как

$$W(\mathbf{R}) = -k_B T \ln \frac{\int_{\mathbf{r}} \exp \left[-\frac{V(\mathbf{R}; \mathbf{r})}{k_B T} \right] d\Omega_{\mathbf{r}}}{\int_{\mathbf{r}} d\Omega_{\mathbf{r}}}, \quad (2)$$

где $V(\mathbf{R}; \mathbf{r})$ — функция потенциальной энергии системы, $d\Omega_{\mathbf{r}}$ – элемент объема, соответствующий мелкозернистым степеням свободы, и

$$\delta \mathbf{F}_i^Q(t) = e^{i\hat{Q}t} \delta \mathbf{F}_i^Q(0), \quad (3)$$

где $\hat{\mathbf{L}}$ – оператор Лиувилля, $\hat{\mathbf{Q}}=1-\hat{\mathbf{P}}$ – оператор проекции координат и импульсов полноатомной системы на крупнозернистые координаты и импульсы [15, 16, 28, 29].

Из уравнения (1) следует, что суммарное движение крупнозернистых степеней свободы определяется средними силами, в то время как мелкозернистые степени свободы влияют на движение крупнозернистых степеней свободы посредством сил трения и флуктуирующих сил. Силы трения зависят от всей истории корреляции между флуктуирующими силами и скоростями зерен [17, 30–32].

В практических реализациях члены трения и стохастической силы берутся из уравнения Ланжевена [33], что эквивалентно предположению, что флуктуационные силы и скорости крупных зерен коррелируют только в течение бесконечно малого периода времени. Это приводит к замене последних двух членов в правой части уравнения (1) на члены, соответствующие чистому трению и стохастической силе [15, 17, 21, 30, 32, 33]:

$$\mathbf{G}\ddot{\mathbf{q}} = -\nabla_{\mathbf{q}}U(\mathbf{q}) - \mathbf{\Gamma}\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{f}^{rand}, \quad (4)$$

где \mathbf{G} – матрица инерции, \mathbf{q} , $\dot{\mathbf{q}}$ и $\ddot{\mathbf{q}}$ – обобщённые крупнозернистые координаты, скорости и ускорения соответственно, U – эффективная крупнозернистая функция энергии (которая возникает из потенциала средней силы) [24, 25, 27], $\mathbf{\Gamma}$ – это матрица трения, \mathbf{f}^{rand} – случайные силы.

Из уравнения (1) можно сделать вывод, что сила трения и стохастическая сила взаимосвязаны; фактически, они связаны через матрицу трения:

$$\mathbf{f}^{rand} = \left(\frac{k_B T}{\delta t} \mathbf{\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{N}(0,1) \quad (5)$$

где $\mathbf{N}(0,1)$ – это многомерное нормальное распределение с нулевым средним и единичной матрицей дисперсии-ковариации, δt – шаг по времени.

Силы трения и стохастические силы можно разделить на те, что обусловлены

растворителем, и те, что возникают из-за усреднения внутренних степеней свободы растворённого вещества, порождая так называемое внутреннее трение. В крупнозернистых моделях с неявным растворителем все степени свободы растворителя усредняются. Поэтому внутреннее трение оказывает на динамику значительно меньшее влияние по сравнению с трением, обусловленным растворителем [34]. Следовательно, стохастические силы и силы трения в таких моделях обычно приписываются исключительно растворителю. В крупнозернистых моделях с явным растворителем вклад растворителя в трение меньше, но всё ещё значим, поскольку вращательные степени свободы молекул растворителя усредняются – и, соответственно, стохастические и диссипативные силы также должны учитываться в молекулярной динамике с такими моделями. Вязкость растворителя в моделировании МД с неявным растворителем обычно искусственно снижается. Именно это предположение обеспечивает огромное ускорение вычисления крупнозернистой динамики по сравнению с полно атомной динамикой [33].

1.2. Применение крупнозернистой модели в молекулярной динамике

Уравнение (4) можно применять к любой системе координат. В большинстве приложений выбираются координаты центров масс зерен крупнозернистой структуры, а зерна рассматриваются как точечные массы [27, 35]. В этом случае матрица инерции – диагональная. Матрица трения также обычно диагональная [3,4]. Для моделей с неявным растворителем предполагается, что только он вносит вклад в трение. В некоторых подходах рассматриваются гидродинамические взаимодействия с растворителем [36–38], при этом матрица трения обычно имеет форму Ротне-Прагера [39]:

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I = -\nabla_{\mathbf{R}_I} U(\mathbf{R}) - \gamma_I \dot{\mathbf{R}}_I + \sqrt{\frac{k_B T \gamma_I}{\delta t}} \mathbf{N}(0,1), \quad (6)$$

$$\mathbf{R}_I = \frac{\sum_{i \in \{I\}} m_i \mathbf{r}_i}{M_I}, \quad (7)$$

$$M_I = \sum_{i \in \{I\}} m_i, \quad (8)$$

где \mathbf{R}_I – это положение центра масс зерна I с массой M_I , γ_I – коэффициент трения зерна I , $\mathbf{N}(0,1)$ – трехмерный вектор нормально распределенных чисел с нулевым средним значением и единичной дисперсией, δt – шаг по времени.

Коэффициенты трения обычно выражаются с помощью закона Стокса [40]:

$$\gamma_i = 6\pi r_i \eta, \quad (9)$$

где η – вязкость растворителя, r_i – радиус Стокса зерна, который получается путём сложения эффективного размера молекулы воды (1.4 Å) с эффективным радиусом Вандер-Ваальса зерна.

При наличии трения и стохастических сил должна сохраняться не полная энергия, а кинетическая температура:

$$T_{kin} = \frac{E_k}{N_f k_B} \quad (10)$$

(E_k – кинетическая энергия системы, N_f – число степеней свободы); эти вклады в силы, таким образом, обеспечивают термостат. Термостат Ланжевена очень стабилен и обеспечивает правильное распределение температуры [41]. Поэтому его использование рекомендовано даже в полноатомной МД с явным растворителем [42].

1.3. Эффективные функции и потенциальной энергии

Средние силы, действующие на крупнозернистые степени свободы, являются консервативными силами, определяющими движение системы в крупнозернистом представлении. Естественным следствием этого является то, что прототипом эффективной функции энергии крупнозернистой системы служит потенциал средней силы, в котором

вторичные (мелкозернистые) степени свободы проинтегрированы (см. (2)).

Однако точный потенциал средней силы специфичен для каждой конкретной системы и чрезвычайно сложно вычислим. Поэтому необходимо разрабатывать приближения, в которых эффективная функция энергии разбивается на переносимые компоненты, подобно атомарным силовым полям.

Существует два основных подхода: «снизу вверх» (bottom-up) и «сверху вниз» (top-down) [12, 26, 35]. В первом подходе энергетические члены выводятся из детализированных атомарных взаимодействий, как в работе Левитта и Варшела [11], тогда как во втором подходе силовое поле строится так, чтобы воспроизводить измеримые макроскопические свойства системы, как в силовом поле MARTINI [43].

Многие методы сочетают подход «снизу вверх» при выводе отдельных крупнозернистых энергетических членов и подход «сверху вниз» при их объединении в рабочее силовое поле.

Самый прямолинейный метод построения крупнозернистого силового поля – заимствование соответствующих выражений из атомарных силовых полей. Эффективная функция энергии в этом случае представляет собой сумму локальных членов:

энергии растяжения виртуальных связей (U_s);

энергии изгиба виртуальных валентных углов (U_θ);

торсионных членов, описывающих вращение вокруг виртуальных связей (U_{or});

парных взаимодействий, включающих электростатические и несвязанные компоненты.

Растворитель либо моделируется явно, либо неявно учитывается в потенциалах; во втором случае может добавляться дополнительный член V_{solv} .

Полное выражение для энергии задаётся уравнением:

$$U = \sum_i \frac{1}{2} k_i^d (d_i - d_i^o)^2 + \sum_i \frac{1}{2} k_i^\theta (\theta_i - \theta_i^o)^2 + \sum_i \sum_n a_i^{(n)} [1 + \cos(n\gamma_i)] + b_i^{(n)} [1 + \sin(n\gamma_i)] + 332 \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{D r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + V_{solv}. \quad (11)$$

Здесь d_i , d_i^o , k_i^d – длина, равновесная длина и силовая константа i -й виртуальной связи; θ_i и θ_i^o – фактическое и равновесное значения виртуального угла связи, k_i^θ – силовая константа i -го виртуального угла связи; γ_i – i -й виртуальный двугранный угол связи; $a_i^{(n)}$ и $b_i^{(n)}$ – коэффициенты в выражениях для торсионных потенциалов; q_i – парциальный заряд на i -м зерне, D – относительная диэлектрическая проницаемость; σ_{ij} , ϵ_{ij} – константы потенциала Леннард-Джонса для взаимодействия зерна i с зерном j , r_{ij} – расстояние между этими зёрнами.

Выражения типа (11) называют неоклассическими. Именно такие выражения реализованы в наиболее популярном силовом поле MARTINI [43–47].

Коэффициент 332 в выражении для кулоновской энергии введён для выражения энергии в ккал/моль, если расстояние выражено в ангстремах, а заряды – в единицах заряда электрона.

Неоклассические выражения, как правило, не позволяют создать силовые поля, способные адекватно моделировать структуры исследуемых систем без привлечения внешней информации. Причина заключается в том, что потенциал средней силы не может быть разложен на чисто парные взаимодействия, даже если исходная атомарная энергетическая функция является парной [24, 25, 48].

Для корректного моделирования структур необходимо вводить многочастичные члены. Кроме того, потенциалы взаимодействия между зёрнами в большинстве крупнозернистых силовых полей обычно слишком «липкие», что приводит к чрезмерно компактным смоделированным структурам [49–53]. Эта «липкость» возникает из-за дисбаланса взаимодействий, который может быть вызван отсутствием специфических кросс-

параметров Леннард–Джонса для пар частиц разного размера или слишком слабыми константами сил связи [54].

Эта проблема была решена в силовом поле MARTINI 3 [55].

1.4. Силовое поле MARTINI

Среди CG-моделей в области биомолекулярного моделирования особенно популярен MARTINI благодаря своему простому и интуитивно понятному принципу модульного построения. Модель MARTINI основана на схеме отображения «четыре-в-один» и параметризована с использованием подхода «сверху вниз», где основной целевой величиной служили данные термодинамического распределения между фазами.

Несвязанные взаимодействия между нейтральными шариками в MARTINI описываются исключительно потенциалами Леннард–Джонса, тогда как для заряженных шариков дополнительно учитываются кулоновские взаимодействия. В модели выделены четыре основных класса типов шариков – C , N , P и Q , обозначающие неполярные, умеренно полярные, полярные и заряженные химические группы соответственно. Также существуют подтипы. Это позволяет более точно отразить химическую природу соответствующей атомной структуры. В пределах одного основного типа подтипы различаются либо буквенным индексом, обозначающим способность к образованию водородных связей (d – донор, a – акцептор, da – и донор, и акцептор, 0 – отсутствие способности), либо числовым индексом, указывающим степень полярности (от 1 – низкая полярность до 5 – высокая полярность). В принципе, все шарики имеют одинаковый размер и называются обычными (R , regular). В виде

исключения были введены специальные малые (*S*, small) шарики для моделирования циклических соединений, для которых схема «четыре-в-один» неприменима. Для корректного воспроизведения расстояний при преобразовании и образовании водородных связей между нуклеотидами потребовались ещё более мелкие – крошечные (*T*, tiny) — шарики. Однако параметризация кросс-взаимодействий между *S*- и *T*-шариками с *R*-шариками проводилась эмпирически, без строгой систематики.

Несвязанные взаимодействия. Для описания несвязанных взаимодействий используется сдвинутый потенциал Леннарда–Джонса 6–12:

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right], \quad (12)$$

где σ_{ij} – минимальное расстояние сближения между двумя частицами, ε_{ij} – энергия (глубина) их взаимодействия.

Для всех пар взаимодействий предполагается одинаковый эффективный размер: $\sigma = 0.47$ нм, за исключением двух особых классов – циклических соединений и так называемых «антифризных» частиц. Молекулы «антифриза» имеют такое название, поскольку в модели MARTINI молекулы воды имеют температуру, несколько отличную, от их заданной при моделировании температуры. Подобное обстоятельство было исправлено в MARTINI 3. Существует ещё одно исключение: для взаимодействий между заряженными частицами (типа *Q*) и наиболее аполярными типами (*C1* и *C2*) радиус отталкивания увеличен до $\sigma = 0.62$ нм. Взаимодействия разделены на 10 уровней. Это позволяет точнее настраивать модель для воспроизведения экспериментальных растворимостей.

Помимо взаимодействия по Леннарда–Джонсу, заряженные группы (тип *Q*) несут полный заряд q_{ij} взаимодействующий посредством сдвинутого кулоновского потенциала энергии:

$$U_{el}(r) = \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}, \quad (13)$$

где ε_r — относительная диэлектрическая проницаемость, равная 15 для явного экранирования.

Связанные взаимодействия. Связанные взаимодействия между химически связанными зёрнами описываются слабым гармоническим потенциалом $V_{bond}(R)$, определяемым уравнением (14):

$$V_{bond}(R) = \frac{1}{2} K_{bond} (R - R_{bond})^2 \quad (14)$$

где $R_{bond} = \sigma = 0.47$ нм – равновесное расстояние, $K_{bond} = 1250$ кДж моль⁻¹ нм⁻² – силовая константа.

Взаимодействие по Леннарда–Джонсу исключается между связанными (валентно соединёнными) зёрнами. Связанные зёрна в среднем находятся несколько ближе друг к другу, чем соседние несвязанные зёрна. Использование единственного значения равновесной длины связи и константы силы не является обязательным требованием. Для более точного отражения химической структуры подлежащей системе могут применяться различные значения. Для учёта жёсткости цепи используется слабый гармонический потенциал $V_{angle}(\theta)$ конусного типа для валентных углов, определяемый выражением:

$$V_{angle}(\theta) = \frac{1}{2} K_{angle} \{ \cos(\theta) - \cos(\theta_0) \}^2. \quad (15)$$

Взаимодействия по Леннарда–Джонсу между частицами, разделёнными двумя связями, не исключаются – они учитываются в полной мере. Параметры K_{angle} и θ подбираются индивидуально для исследуемого типа молекул.

Интерпретация временно́го масштаба. По сравнению с атомарными моделями, динамика, наблюдаемая в CG-моделях, происходит быстрее. Основная причина – значительно более гладкий энергетический ландшафт, обусловленный увеличенным размером частиц. Кроме того, отсутствует трение, возникающее из-за атомных степеней свободы, которые в CG-модели усреднены или проигнорированы. На основе сравнения коэффициентов диффузии в CG- и многоатомных системах

было установлено, что эффективное время, охватываемое CG-моделью MARTINI, в 2–10 раз больше, чем реальное физическое время. Важно отметить, что динамика системы также зависит от того, какие массы задаются CG-шарикам. В целях увеличения скорости вычисления обычно используются стандартные массы $m = 72$ а.е.м., что соответствует массе четырёх молекул воды. Однако, особенно для циклических систем, присвоение всем зернам стандартных масс приводит к значительному занижению динамики. Для точного анализа кинетических свойств в таких случаях

следует использовать более реалистичные массы.

Параметризация молекул силовым полем MARTINI. Параметризацию молекул силовым полем Martini можно разделить на три этапа (рис.2). Первый этап состоит из сопоставления химической структуры с компьютерной моделью (CG), второй этап – выбор подходящих межмолекулярных взаимодействий, а третий этап – оптимизация модели путём сравнения с результатами моделирования на уровне полноатомной модели и/или экспериментальными данными.

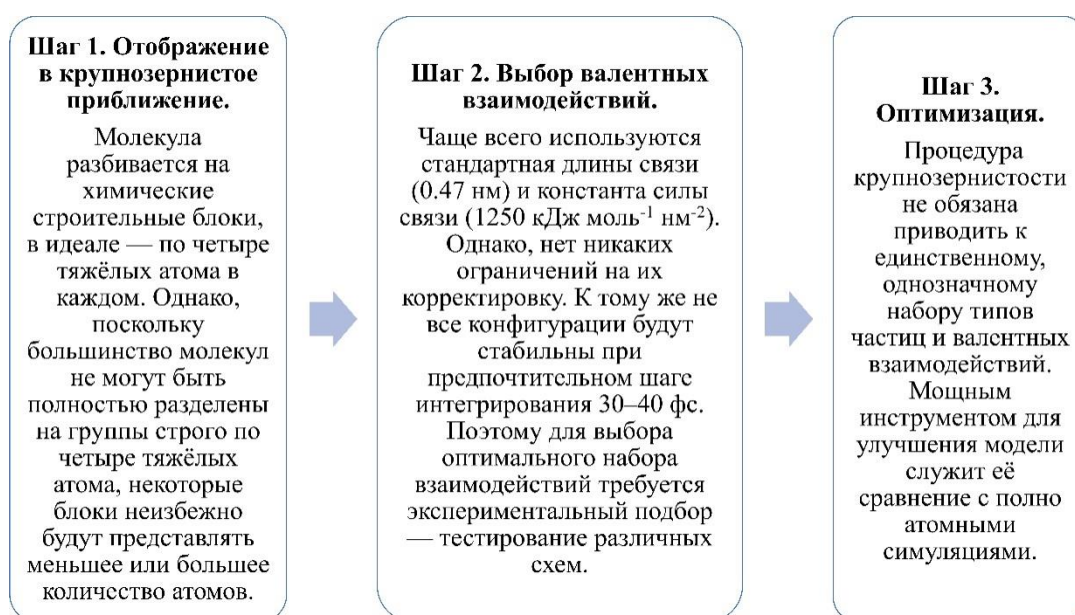


Рис.2. Этапы параметризации силовым полем MARTINI

1.5. Применение CG-теории для углеродных нанотрубок

Как было показано в п. 1.4, применимость модели MARTINI зависит от правильно подобранных параметров для исследуемых систем. Вообще говоря, способов замены полноатомной модели УНТ на крупнозернистую существует несколько. Для УНТ малого диаметра может производиться замена участка трубки на одно зерно, которое будет находиться в центре цилиндра, образуемого атомами углерода трубки так, что УНТ заменяется цепочкой связанных линейно зёрен. Данный подход малоприменим для трубок большого диаметра. Для подобных структур

существует методика замены полноатомной модели трубки кольцами из зёрен с заданными углами и длинами связей. При этом происходит замена гексагона на одно зерно.

В данном подходе углеродная нанотрубка состоит из частиц типа CNP (Carbon-Nitrogen-Phosphorus) [56, 57], образующих кольцо из различного числа зерен. Соседние частицы в кольце и между кольцами вдоль продольной оси соединены гармоническими связями с равновесной длиной 0.47 нм с силовой константой 5000 кДж·моль⁻¹·нм⁻². Для повышения жёсткости нанотрубки между удалёнными (дистальными) кольцами введены дополнительные длинные связи с той же

константой силы, но с длиной, равной $n \times 0.404$ нм, где n — количество колец между соединяемыми частицами. Валентные углы описываются косинусным угловым потенциалом с силовой константой $350 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ нм}^{-2}$ и равновесным углом 135° в кольцах (157° в более широкой нанотрубке), а также 90° и 180° между кольцами. Более крупная нанотрубка моделируется упругой сеткой с силовой константой $20\,000 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ нм}^{-2}$ и отсечкой 1 нм [58–62].

2. Результаты

2.1. Объект исследования

В работе исследовалась многостенная углеродная нанотрубка (МУНТ), состоящая из трёх слоёв, т.е. из трёх коаксиально расположенных УНТ типа $(m, 2m)$ с внутренним диаметром 4 нм, междустенным расстоянием равным 3.4 \AA , что соответствует эффективному расстоянию сил Ван-дер-Ваальса между атомами углерода. Полноатомная модель МУНТ показана на рис. 3. Вектор трансляции каждой УНТ в отдельности, входящей в состав МУНТ, одинаковый и равен 11.273 \AA . Число атомов элементарной ячейки равно 1848.

2.2. Используемый инструментарий

Как было сказано, существуют разные методы перехода от полноатомной модели УНТ к крупнозернистой. Поскольку в настоящем исследовании МУНТ имеет большой внутренний диаметр, наиболее подходящим способом перехода является метод расположения зёрен в кольце по длине окружности УНТ, а колец — вдоль оси цилиндра с определённым углом поворота колец друг относительно друга. Подробные численные данные были приведены в п. 1.5. Подробнее остановимся на инструментарии, позволяющем создать крупнозерновую модель УНТ, которая соответствовала бы полноатомной модели. С этой целью использовалась программа с открытым исходным кодом, написанная на языке python [58]. Она позволяет не только создавать сами крупнозернистые модели,

но также силовые поля к ним, используя MARTINI версии 2.1. Как было показано в п. 1.4, не существует общего правила перехода к крупнозернистой модели. Главным является соответствие характеристик полученной CG-модели либо с полноатомным моделированием, либо с экспериментом. Используемая программа содержит данные поля для зёрен, полученные эмпирическим путём.

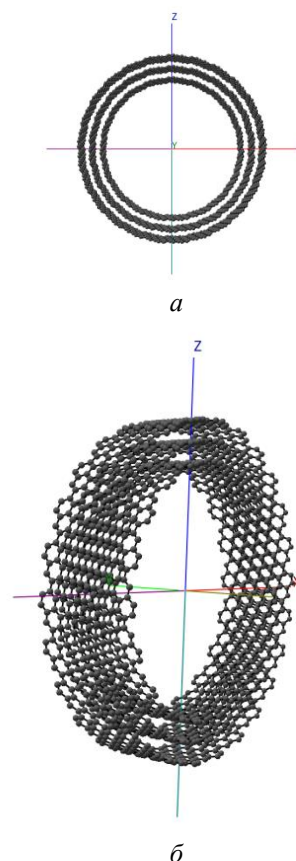


Рис. 3. Элементарная ячейка полноатомной модели трёхслойной МУНТ: *а* – вид сверху, *б* – общий вид

Основные параметры, передаваемые в программу — это число колец, число зёрен в кольце и силовая константа. На рис. 4 показана модель структуры.

Следует отметить, что сам программный код изначально разработан для создания CG-моделей УНТ с функциональными группами на концах. Однако в данной работе рассматриваются только чистые УНТ, поэтому при создании моделей функциональные группы были отключены.

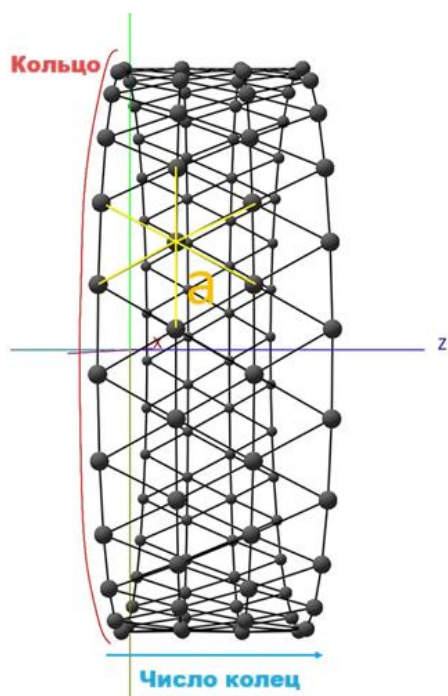


Рис. 4. Геометрическое представление CG-модели: кольца с зёрнами, находящимися на равновесном расстоянии друг от друга

2.3. Результаты моделирования

Как было показано в п. 1.5. принцип построения крупнозернистой модели УНТ, подходящий для данной работы, состоит в замене одного гексагона из шести атомов углерода на одно зерно.

Исходя из этого принципа, можно сосчитать число гексагонов в трубке вдоль длины её окружности. Если число гексагонов чётное, то его необходимо разделить на два. Если число нечётное, то нужно добавить одно зерно к результату. Проведя данные расчёты, получаем: для внутренней УНТ число зёрен в кольце 27, для центральной УНТ – 31, для внешней УНТ – 35.

Минимально необходимое число колец определяется, исходя из длины элементарной ячейки полноатомной трубки. Учитывая равновесное расстояние между зёрнами, равное 0.47 нм, получаем, что для наиболее близкого соответствия длин полноатомной модели (11.273 Å) необходима CG-модель из четырёх колец, поскольку расстояние между кольцами равно 4.07 Å.

В результате работы программы были получены структурные файлы (.gro), файлы топологии (.itp) и файл позиционных

ограничений (.itp). Структурные файлы содержат индексы, типы и координаты зёрен. Зёрна, как было сказано ранее, имеют неполярный тип CNP. Файлы топологии «.itp» содержат сведения, необходимые для силового поля MARTINI о каждом зерне – его тип, заряд, поляризацию, массу, индекс. Имеются также данные и о связях между зёрнами, их силовой константе, расстоянии, угле между ними. Эти данные были описаны в п. 1.5. Файл позиционных ограничений имеет то же расширение «.itp» и содержит сведения об ограничениях в движении зёрен.

Для полученных моделей УНТ в отдельности, их пар, а также всей трёхслойной МУНТ была проведена минимизация энергии в программном макете GROMACS 2024.5.

Эффективный радиус сил ван дер Ваальса был выбран равным 1.1 нм, временной шаг равным 40 фс. Поскольку эффективный радиус ван дер Ваальсова взаимодействия должен быть как минимум меньше половины длины транслируемой структуры, было взято четыре элементарных ячейки крупнозерновых моделей, то есть 16 колец. Общая длина, таким образом, составила 4.894 нм.

Условием наличия минимума энергии структуры являлось достижения значения максимальной силы, действующей на атом F_{\max} равной менее $10 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ нм}^{-1}$. Значения рассчитанной энергии нанотрубок после минимизации представлены в таблице, в которой отражены структуры, число зёрен, из которых они состоят, их энергия после её минимизации, а также время, за которое было достигнуто условие стабильности структуры. Можно сделать вывод, что все структуры, модели которых были построены, являются стабильными, их энергия отрицательна. Более того, с ростом числа зёрен в структуре энергия возрастает по абсолютному значению, что также подтверждает справедливость полученных результатов. Время достижения стабильности структуры не превышает 14 пс в случае УНТ наименьшего диаметра.

На рис. 5–7 показаны структура CG-моделей нанотрубок и графики изменения их энергии от времени при её минимизации.

Как видно из рис. 5–7, за время моделирования энергия структур изменялась в пределах 5% от исходного значения. Это означает, что первоначально созданные CG-модели являлись достаточно стабильными.

3. Обсуждение результатов

В работе была успешно реализована процедура построения крупнозернистой модели трёхслойной многостенной углеродной нанотрубки (МУНТ) на основе силового поля MARTINI.

Важно подчеркнуть, что ранее крупнозернистые модели в рамках MARTINI разрабатывались исключительно для одностенных углеродных нанотрубок; модели МУНТ, учитывающие коаксиальную многослойную структуру, до настоящего времени не были представлены.

Сокращение числа частиц примерно в шесть раз подтверждает эффективность подхода с точки зрения снижения вычислительных затрат, что открывает возможность моделирования значительно более крупных систем (какими являются

МУНТ и жгуты из них) и более длительных временных масштабов. При этом сохранение ключевых структурных характеристик (цилиндрической симметрии, коаксиального расположения слоёв) свидетельствует о корректности выбранной стратегии отображения – замены гексагональных фрагментов графеновой решётки на отдельные неполярные зёрна типа CNP с соответствующими валентными ограничениями.

Для структур с полученными моделями были успешно проведены минимизации энергии в программном пакете GROMACS. Полученные значения энергий отрицательны и увеличиваются по абсолютному значению с ростом числа зёрен в структурах, что показывает корректность и физическую достоверность представленных структур.

Таким образом, разработанная модель представляет собой методологическое новшество и надёжную основу для последующих исследований взаимодействий МУНТ с биологическими мембранами и другими сложными средами в рамках крупнозернистого подхода.

Результаты минимизации энергии исследуемых наноструктур

| № | Структура | Число зёрен | E_{pot} , кДж/моль | Время, пс |
|---|-----------------|-------------|-----------------------------|-----------|
| 1 | Внутренняя УНТ | 324 | -387.702 | 14 |
| 2 | Центральная УНТ | 504 | -599.602 | 10 |
| 3 | Внешняя УНТ | 684 | -814.662 | 7 |
| 4 | 1 и 2 УНТ | 828 | -989.435 | 9 |
| 5 | 1 и 3 УНТ | 1008 | -1203.088 | 13 |
| 6 | 2 и 3 УНТ | 1188 | -1415.944 | 7 |
| 7 | МУНТ | 1512 | -1804.540 | 13 |

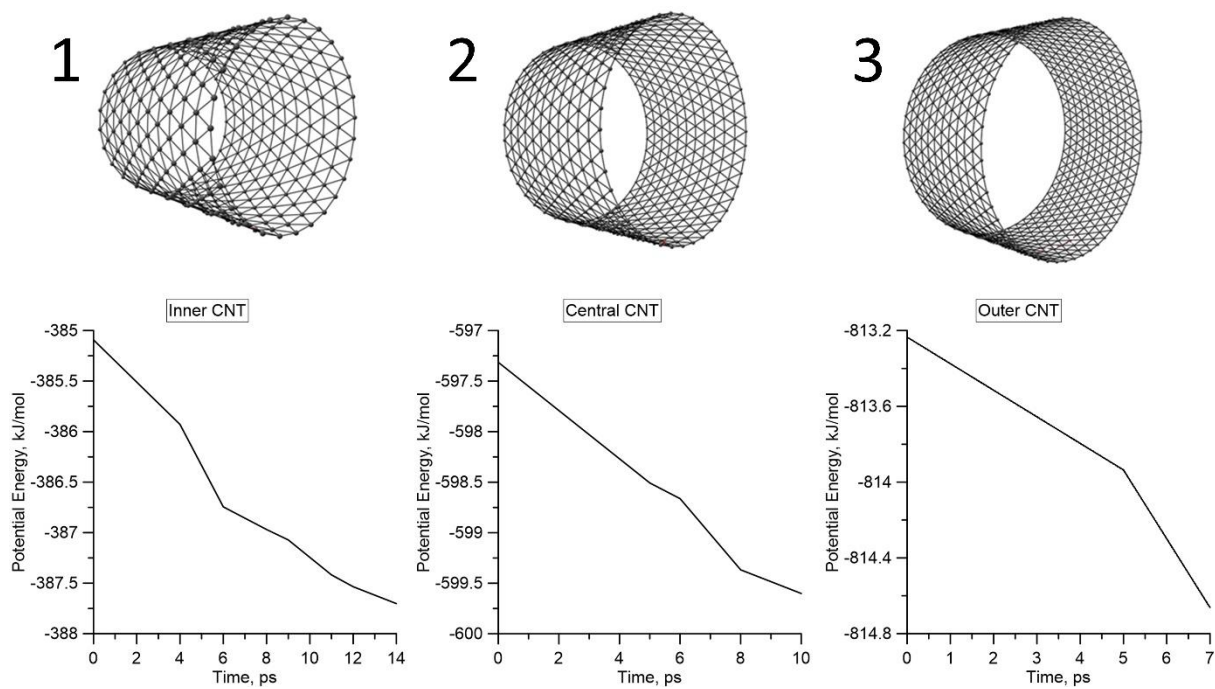


Рис.5. Модели УНТ и графики изменения энергии во времени:
1 – внутренняя УНТ, 2 – центральная УНТ, 3 – внешняя УНТ

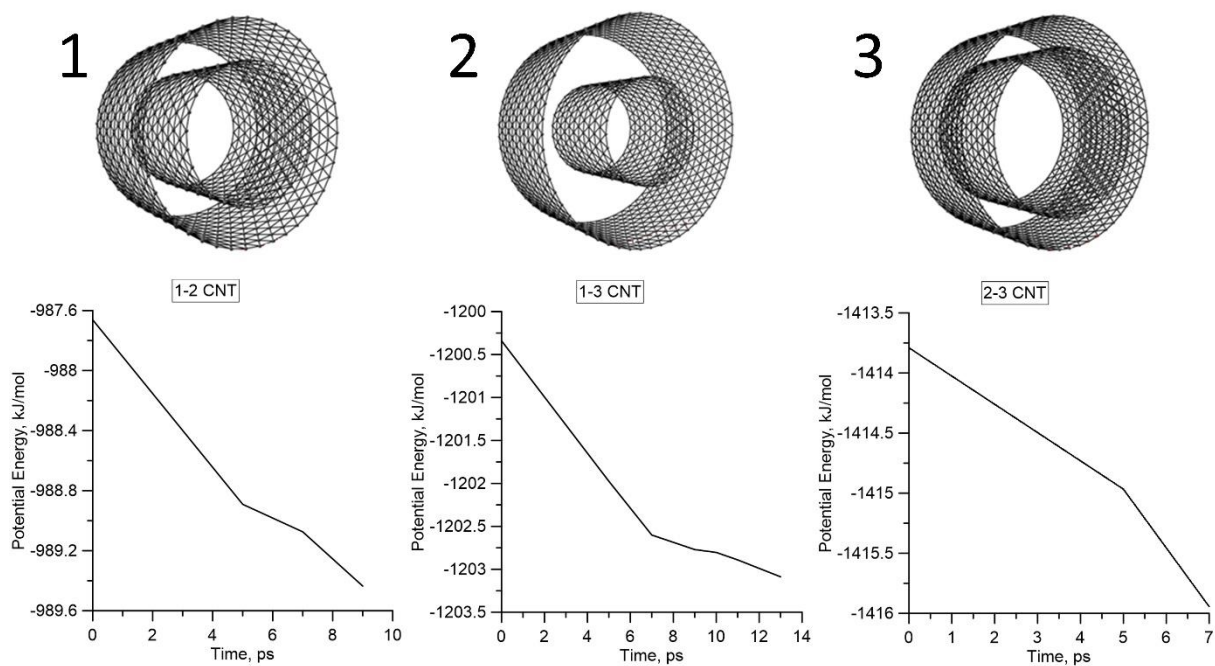


Рис.6. Модели УНТ и графики изменения энергии во времени:
1 – внутренняя и центральная УНТ, 2 – внутренняя и внешняя УНТ, 3 – центральная и внешняя УНТ

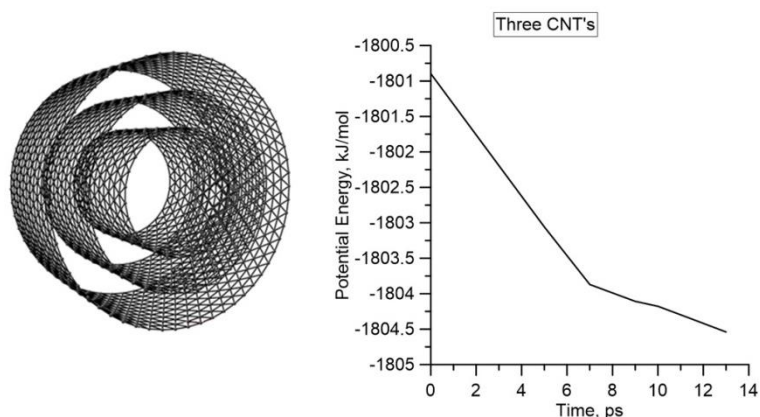


Рис.7. Модель МУНТ и график изменения энергии во времени

Заключение

Область крупнозернистого описания структур и динамики биомолекулярных систем стремительно развивается как в теоретическом плане, так и в расширении спектра приложений, и существенно продвинулась вперёд со времени основополагающей работы Левитта и Варшела [11]. Прочную теоретическую основу для этого подхода предоставляет теория проекционного оператора Мори–Цванцига [15, 28, 29], с помощью которой могут быть выведены эффективные уравнения движения для грубозернистых степеней свободы [16–18, 30] (см. (1)). Благодаря этому выводу становится ясно, что потенциал средней силы (ПСС) системы следует рассматривать в качестве потенциальной энергии в уравнениях движения, что открыло путь к физически обоснованной систематической разработке крупнозернистых силовых полей аналогично приближению Борна–Оппенгеймера, позволяющему выразить потенциальную энергетическую поверхность системы исключительно через координаты ядер [6]. Используя разложение ПСС на множители [25, 26] можно разделить его на компоненты, интерпретируемые как специфические энергетические члены, переносимые между различными системами.

Сегодня доступно множество достаточно эффективно работающих крупнозернистых силовых полей, включая наиболее популярное силовое поле MARTINI, которое может применяться

практически ко всем биологически важным системам [43, 44–47], а также к фуллеренам и углеродным нанотрубкам [58–62].

Ещё один крайне важный вопрос в крупнозернистой динамике – это соотношение между крупнозернистым временным масштабом и реальным физическим временем. Уравнение (1) даёт теоретическую основу для этого соотношения, учитывая наличие сил трения и случайных сил. Оба этих члена содержат полную историю динамики системы и, следовательно, чрезвычайно сложны для строгого аналитического описания, хотя исследования в этом направлении существуют [17, 18].

Благодаря указанным особенностям аппарата крупнозернистого моделирования и силового поля MARTINI, а также их приложению к углеродным наноструктурам, удалось составить крупнозернистые модели исследуемых УНТ в составе МУНТ. Подобная замена существенно снижает вычислительные затраты ввиду уменьшения моделируемых частиц в 6 раз, что позволяет исследовать структуры, состоящие из десятков тысяч атомов, заменяя их на зёрна, число которых меньше на порядок.

Создание крупнозернистой модели МУНТ ранее не проводилось. Представленные в данной работе модели, как было показано, являются физически достоверными и стабильными. Полученные результаты открывают новые возможности в прогностическом моделировании методами МД физических свойств различных материалов на основе углеродных структур.

Библиографический список

1. Alder B. J., Wainwright B. E. Molecular dynamics by electronic computers // Prigogine I., ed. Proceedings of the International Symposium on Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. New York: Wiley, 1958. P. 97–131.
2. van Gunsteren W. F. Molecular dynamics and stochastic dynamics: A primer // van Gunsteren W.F., Weiner P.K., Wilkinson A.J., eds. Computer Simulation of Biomolecular Systems. Leiden : ESCOM. 1993. P. 3–36.
3. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Amsterdam : Elsevier Science, 2012. 679 p.
4. Scheraga H. A., Khalili M., Liwo A. Protein-folding dynamics: Overview of molecular simulation techniques // Annu. Rev. Phys. Chem. 2007. Vol. 58. P. 57–83. <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.58.032806.104614>
5. Durrant J. D., McCammon J. A. Molecular dynamics simulations and drug discovery // BMC Biol. 2011. Vol. 9. Art. 71. <https://doi.org/10.1186/1741-7007-9-71>
6. Atkins P., Friedman R. Molecular Quantum Mechanics. 5th ed. Oxford : Oxford University Press, 2010. 560 p.
7. Leach A. R. Molecular Modeling: Principles and Applications. 2nd ed. Harlow: Pearson Education, 2001. 797 p.
8. Shaw D. E., Deneroff M. M., Dror R. O., Kuskin J. S., Larson R. H., Salmon J. K., Young C., Batson B., Bowers K. J., Chao J. C., Eastwood M.P., Gagliardo J., Grossman J. P., Ho Chian-min R., Ierardi D. J., Kolossváry I., Klepeis J. L., Layman T., McLeavey C., Moraes M. A., Mueller R., Priest E. C., Shan Y., Spengler J., Theobald M., Towles B., Wang S. Anton, a special-purpose machine for molecular dynamics simulation // Commun. ACM. 2008. Vol. 51. P. 91–97. <https://doi.org/10.1145/1364782.1364802>
9. Lindorff-Larsen K., Trbovic N., Maragakis P., Piana S., Shaw D. E. Structure and dynamics of an unfolded protein examined by molecular dynamics simulation // J. Am. Chem. Soc. 2012. Vol. 134, iss. 8. P. 3787–3791. <https://doi.org/10.1021/ja209931w>
10. Larsson D. S. D., Liljas L., van der Spoel D. Virus capsid dissolution studied by microsecond molecular dynamics simulations // PLoS Comput. Biol. 2012. Vol. 8, iss. 5. Art. e1002502. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1002502>
11. Levitt M., Warshell A. Computer simulation of protein folding // Nature. 1975. Vol. 253. P. 694–698. <https://doi.org/10.1038/253694a0>
12. Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems / Voth G., ed. Boca Raton : CRC Press, 2008. 456 p.
13. Kolinski A. Multiscale Approaches to Protein Folding. New York : Springer, 2011. 355 p.
14. Papoian G.A. Coarse-Grained Modeling of Biomolecules. Boca Raton : CRC Press, 2017. 458 p.
15. Zwanzig R. Nonequilibrium Statistical Mechanics. Oxford : Oxford University Press, 2001. Ch. 8.
16. Kinjo T., Hyodo S. Equation of motion for coarse-grained simulation based on microscopic description // Phys. Rev. E. 2007. Vol. 75. Art. 051109. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.051109>
17. Klippenstein V., Tripathy M., Jung G., Schmid F., van der Vegt N. F. A. Introducing memory in coarse-grained molecular simulations // J. Phys. Chem. B. 2021. Vol. 125, iss. 19. P. 4931–4954. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c01120>
18. Han Y., Jin J., Voth G. A. Constructing many-body dissipative particle dynamics models of fluids from bottom-up coarse-graining // J. Chem. Phys. 2021. Vol. 154, iss. 8. Art. 084122. <https://doi.org/10.1063/5.0035184>
19. Rudnicki W. R., Bakalarski G., Lesyng B. A mesoscopic model of nucleic acids. Part 1. Lagrangian and quaternion molecular dynamics // J. Biomol. Struct. Dyn. 2000. Vol. 17, iss. 6. P. 1097–1108. <https://doi.org/10.1080/07391102.2000.10506595>
20. Alvarado C., Kazerounian K. On the rotational operators in protein structure simulations // Prot. Eng. 2003. Vol. 16, no. 10. P. 717–720. <https://doi.org/10.1093/protein/gzg092>
21. Khalili M., Liwo A., Rakowski F., Grochowski P., Scheraga H. A. Molecular dynamics with the united-residue (UNRES) model of polypeptide chains. I. Lagrange equations of motion and tests of numerical stability in the microcanonical mode // J. Phys. Chem. B. 2005. Vol. 109, iss. 28. P. 13785–13797. <https://doi.org/10.1021/jp058008o>
22. Tozzini V. Coarse-grained models for proteins // Curr. Opin. Struct. Biol. 2005, Vol. 15, iss. 2. P. 144–150. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2005.02.005>
23. Tozzini V. Minimalist models for proteins: A comparative analysis // Quart. Rev. Biophys. 2010. Vol. 43, iss. 3. P. 333–371. <https://doi.org/10.1017/S0033583510000132>
24. Liwo A., Czaplowski C., Pillardy J., Scheraga H. A. Cumulant-based expressions for the multibody terms for the correlation between local and electrostatic interactions in the united-residue force field // J. Chem. Phys. 2001. Vol. 115, iss. 5. P. 2323–2347. <https://doi.org/10.1063/1.1383989>
25. Sieradzan A. K., Makowski M., Augustynowicz A., Liwo A. A general method for the derivation of the functional forms of the effective energy terms in coarse-grained energy functions of polymers. I. Backbone potentials of coarse-grained polypeptide chains // J. Chem. Phys. 2017. Vol. 146, iss. 12. Art. 124106. <https://doi.org/10.1063/1.4978680>
26. Liwo A., Czaplowski C., Sieradzan A. K., Lubecka E. A., Lipska A. G., Golon L., Karczyńska A., Krupa P., Mozolewska M. A., Makowski M., Ganzynkiewicz R., Gieldoń A., Maciejczyk M. Scale-consistent approach to the derivation of coarse-grained force fields for simulating structure, dynamics, and thermodynamics of biopolymers //

- Strodel B., Barz B., eds. *Progress in Molecular Biology and Translational Science. Computational Approaches for Understanding Dynamical Systems: Protein Folding and Assembly*. London : Academic Press, 2020. Vol. 170. Ch. 2. P. 73–122.
27. Ayton G. S., Noid W. G., Voth G. A. Multiscale modeling of biomolecular systems: In serial and in parallel // *Curr. Opin. Struct. Biol.* 2007. Vol. 17, iss. 2. P. 192–198. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2007.03.004>
 28. Zwanzig R. Memory effects in irreversible thermodynamics // *Phys. Rev.* 1961. Vol. 124. P. 983–992. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.983>
 29. Mori H. Transport, collective motion and Brownian motion // *Prog. Theor. Phys.* 1965. Vol. 33. P. 423–455. <https://doi.org/10.1143/PTP.33.423>
 30. Rudzinski J. F. Recent progress towards chemically-specific coarse-grained simulation models with consistent dynamical properties // *Computation*. 2019. Vol. 7. Art. 42. <https://doi.org/10.3390/computation7030042>
 31. Lemons D. S., Gythiel A. Paul Langevin's 1908 paper «On the Theory of Brownian Motion» [«Sur le théorie du mouvement brownien», *C. R. Acad. Sci. (Paris)* 146, 530–533 (1908)] // *Am. J. Phys.* 1997. Vol. 65, no. 11. P. 1079 – 1081. <https://doi.org/10.1119/1.18725>
 32. Liwo A., Khalili M., Scheraga H. A. *Ab initio* simulations of protein-folding pathways by molecular dynamics with the united-residue model of polypeptide chains // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2005. Vol. 102, no. 7. P. 2362–2367. <https://doi.org/10.1073/pnas.0408885102>
 33. Khalili M., Liwo A., Jagielska A., Scheraga H. A. Molecular dynamics with the united-residue (UNRES) model of polypeptide chains. II. Langevin and Berendsen-bath dynamics and tests on model α -helical systems // *J. Phys. Chem. B*. 2005. Vol. 109, iss. 28. P. 13798–13810. <https://doi.org/10.1021/jp058007w>
 34. Murarka R. K., Liwo A., Scheraga H. A. Separation of time scale and coupling in the motion governed by the coarse-grained and fine degrees of freedom in a polypeptide backbone // *J. Chem. Phys.* 2007. Vol. 127, iss. 15. Art. 155103. <https://doi.org/10.1063/1.2784200>
 35. Saunders M. G., Voth G. A. Coarse-graining methods for computational biology // *Annu. Rev. Biophys.* 2013. Vol. 42. P. 73–93. <https://doi.org/10.1146/annurev-biophys-083012-130348>
 36. Frembgen-Kesner T., Elcock A. H. Striking effects of hydrodynamic interactions on the simulated diffusion and folding of proteins // *J. Chem. Theory Comput.* 2009. Vol. 5, iss. 2. P. 242–256. <https://doi.org/10.1021/ct800499p>
 37. Cieplak M., Niewieczerzał S. Hydrodynamic interactions in protein folding // *J. Chem. Phys.* 2009. Vol. 130, iss. 12. Art. 124906. <https://doi.org/10.1063/1.3050103>
 38. Lipska A. G., Seidman S. R., Sieradzan A. K., Gieldoń A., Liwo A., Scheraga H. A. Molecular dynamics of protein A and a WW domain with a united-residue model including hydrodynamic interaction // *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 144, iss. 18. Art. 184110. <https://doi.org/10.1063/1.4948710>
 39. Rotne J., Prager S. Variational treatment of hydrodynamic interaction in polymers // *J. Chem. Phys.* 1969. Vol. 50, iss. 11. P. 4831–4837. <https://doi.org/10.1063/1.1670977>
 40. Levy R. M., Karplus M., McCammon J. A. Diffusive Langevin dynamics of model alkanes // *Chem. Phys. Lett.* 1979. Vol. 65, iss. 1. P. 4–11. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(79\)80114-1](https://doi.org/10.1016/0009-2614(79)80114-1)
 41. Kleinerman D. S., Czaplewski C., Liwo A., Scheraga H. A. Implementations of Nosé – Hoover and Nosé – Poincaré thermostats in mesoscopic dynamic simulations with the united-residue model of a polypeptide chain // *J. Chem. Phys.* 2008. Vol. 128, iss. 24. Art. 245103. <https://doi.org/10.1063/1.2943146>
 42. Paterlini M. G., Ferguson D. M. Constant temperature simulations using the Langevin equation with velocity Verlet integration // *Chem. Phys.* 1998. Vol. 236. P. 243–252. [https://doi.org/10.1016/S0301-0104\(98\)00214-6](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(98)00214-6)
 43. Marrink S. J., Tieleman D. P. Perspective on the martini model // *Chem. Soc. Rev.* 2013. Vol. 42, iss. 16. P. 6801 – 6822. <https://doi.org/10.1039/C3CS60093A>
 44. Marrink S. J., Risselada H. J., Yefimov S., Tieleman D. P., de Vries A. H. The MARTINI force field: Coarse Grained model for biomolecular simulations // *J. Phys. Chem. B*. 2007. Vol. 111, iss. 27. P. 7812–7824. <https://doi.org/10.1021/jp071097f>
 45. Monticelli L., Kandasamy S. K., Periole X., Larson R. G., Tieleman D. P., Marrink S. J. The MARTINI coarse-grained force field: Extension to Proteins // *J. Chem. Theory Comput.* 2008. Vol. 4, iss. 5. P. 819–834. <https://doi.org/10.1021/ct700324x>
 46. Lopez C. A., Rzepiela A., de Vries A. H., Dijkhuizen L., Hunenberger P. H., Marrink S. J. Martini coarse-grained force field: Extension to carbohydrates // *J. Chem. Theory Comput.* 2009. Vol. 5, iss. 12. P. 3195–3210. <https://doi.org/10.1021/ct900313w>
 47. Uusitalo J. J., Ingólfsson H. I., Akhshi P., Tieleman D. P., Marrink S. J. Martini coarse-grained force field: Extension to DNA // *J. Chem. Theory Comput.* 2015. Vol. 11, iss. 8. P. 3932–3945. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00286>
 48. Kolinski A., Godzik A., Skolnick J. A general method for the prediction of the three-dimensional structure and folding pathway of globular proteins: Application to designed helical proteins // *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 98, iss. 9. P. 7420–7433. <https://doi.org/10.1063/1.464706>
 49. Stark A. C., Andrews C. T., Elcock A. H. Toward optimized potential functions for protein-protein interactions in aqueous solutions: Osmotic second virial coefficient calculations using the MARTINI coarse-grained force field // *J. Chem. Theory Comput.* 2013. Vol. 9, iss. 9. P. 4176–4185. <https://doi.org/10.1021/ct400008p>

50. Schmalhorst P. S., Deluweit F., Scherrers R., Heisenberg C. P., Sikora M. J. Overcoming the limitations of the MARTINI force field in simulations of polysaccharides // *J. Chem. Theory Comput.* 2017. Vol. 13, iss. 10. P. 5039–5053. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00374>
51. Fornasier F., de Souza L., Souza F., Reynaud F., Pimentel A. The lipophilicity of coarse-grained cholesterol models // *J. Chem. Inf. Model.* 2020. Vol. 60, iss. 2. P. 569–577. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00830>
52. Souza L. M. P., Souza F. R., Reynaud F., Pimentel A. S. Tuning the hydrophobicity of a coarse grained model of 1,2-dipalmitoyl-Sn-glycero-3-phosphatidylcholine using the experimental octanol-water partition coefficient // *J. Mol. Liq.* 2020. Vol. 319. Art. 114132. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114132>
53. Souza F. R., Souza L. M. P., Pimentel A. S. Recent open issues in coarse grained force fields // *J. Chem. Inf. Model.* 2020. Vol. 60, iss. 12. P. 5881–5884. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c01265>
54. Alessandrini R., Souza P. C. T., Thallmair S., Melo M. N., de Vries A. H., Marrink S. J. Pitfalls of the Martini model // *J. Chem. Theory Comput.* 2019, Vol.15, iss. 10. P.5448–5460. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00473>
55. Souza P. C. T., Alessandri R., Barnoud J., Thallmair S., Faustino I., Grünewald F., Patmanidis I., Abdizadeh H., Bruininks B.M.H., Wassenaar T.A., Kroon P.C., Melcr J., Nieto V., Corradi V., Khan H. M., Domański J., Javanainen M., Martinez-Seara H., Reuter N., Best R. B., Vattulainen I., Monticelli L., Periolo X., Tieleman D. P., H. de Vries H. A., Marrink S. J. Martini 3: A general purpose force field for coarse-grained molecular dynamics // *Nat. Methods.* 2021, Vol. 18. P. 382–388. <https://doi.org/10.1038/s41592-021-01098-3>
56. Wong-Ekkabut J.; Baoukina S.; Triampo W.; Tang I. M.; Tieleman D. P.; Monticelli L. Computer simulation study of fullerene translocation through lipid membranes // *Nature Nanotechnology.* 2008. Vol. 3. P. 363-368. <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.130>
57. Monticelli L. On atomistic and coarse-grained models of C60 fullerene // *J. Chem. Theor. Comput.* 2012. Vol. 8, iss. 4. P. 1370 – 1378. <https://doi.org/10.1021/ct3000102>
58. Vögele M., Köfinger J., Hummer G. Simulations of carbon nanotube porins in lipid bilayers // *Faraday Discuss.* 2018. Vol. 209. P. 341–358. <https://doi.org/10.1039/C8FD00011E>
59. Bhaskara R. M., Linker S. M., Vögele M., Köfinger J., Hummer G. Carbon nanotubes mediate fusion of lipid vesicles // *ACS Nano.* 2017. Vol 11, iss. 2. P 1273–1280. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.6b05434>
60. Vögele M., Hummer G. Divergent diffusion coefficients in simulations of fluids and lipid membranes // *J. Phys. Chem. B.* 2016. Vol. 120, iss. 33. P. 8722–8732. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b05102>
61. Baoukina S., Monticelli L., Tieleman D. P. Interaction of pristine and functionalized carbon nanotubes with lipid membranes // *J. Phys. Chem. B.* 2013. Vol. 117, iss. 40. P. 12113–12123. <https://doi.org/10.1021/jp405732k>
62. Monticelli L. On atomistic and coarse-grained models for C60 fullerene // *J. Chem. Theory Comput.* 2012. Vol. 8, iss. 4. P. 1370–1378. <https://doi.org/10.1021/ct3000102>

COARSE-GRAINED MODELS: ANALYSIS, METHODOLOGY, MODELING

O. E. Glukhova, P. A. Kolesnichenko

Abstract. A methodology for constructing coarse-grained models of multi-walled carbon nanotubes based on the MARTINI force field has been developed. The aim of this development is to reduce computational costs while preserving key geometric characteristics of nanotubes for modeling their interactions with biological systems. The effectiveness of the proposed approach is demonstrated using a three-layer multi-walled carbon nanotube: a six-fold reduction in the number of particles is achieved while adequately reproducing the inner diameter, inter-wall spacing (3.4 Å), and unit cell length (11.273 Å). The resulting model opens up opportunities for large-scale simulations of nanotubes and their complexes with biomembranes within the framework of coarse-grained molecular dynamics.

Keywords: molecular dynamics, Coarse-Grained models, multi-walled carbon nanotubes

Сведения об авторах

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент Академии инженерных наук имени А. М. Прохорова, заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, старший научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий Первого Московского государственного медицинского университета имени И. М. Сеченова. E-mail: glukhova@e.sgu.ru

Колесниченко Павел Андреевич, аспирант, ассистент кафедры радиотехники и электродинамики института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского. E-mail: kolesnichenkopa@list.ru

МЕТОДИКА

УДК 001.89(075.8)

МЕТОДИЧЕСКИЙ «НАВИГАТОР» ДЛЯ СОИСКАТЕЛЕЙ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

М. М. Слепченков

Аннотация. В статье приводится краткий обзор публикаций, посвященных методике представления результатов научных исследований в форме диссертаций. Они содержат рекомендации по корректной формулировке аспектных характеристик работы, включая название, актуальность, целеполагание, объект и предмет исследования, научную и практическую значимость, достоверность, защищаемые научные положения, выводы и т.д. В ряде публикаций характеризуются главные компоненты отзывов научного руководителя, официальных оппонентов и ведущей организации. Названы публикации, знакомящие с историей диссертационных защит. Приводятся публикации, в которых рассматривается проблема развития научной одаренности, возникновения и формирования интереса к научным исследованиям, а также роль научных школ в этом процессе.

Ключевые слова: диссертация, формулировка аспектных характеристик, процедура защиты

Деятельность диссертационного совета на базе Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского по физико-математическим наукам (радиофизика, физическая электроника, электронная компонентная база микро- и нанoeлектроники, квантовых устройств) успешно проходит в течение 35 лет. Этому способствуют высокий профессиональный уровень членов диссертационного совета, высокая планка требований к защищаемым работам, заданная первым председателем совета профессором Д. А. Усановым [1], а также методическое сопровождение соискателей на различных этапах подготовки диссертаций. Так, в учебные рабочие планы бакалавриата, магистратуры и аспирантуры включены специальные дисциплины [2–7], содержание которых помогают студентам и аспирантам освоить общий методологический «алгоритм» подготовки научных работ. Общее представление о современной физической тематике формирует дисциплина «Современные проблемы физики» [8] с конкретным наполнением проблематикой, в частности в области операторного исследования нелинейно-динамических систем [9–13]. По итогам этих учебных курсов со слушателями проводятся собеседования по материалам их собственных исследований. И, конечно, все процедуры диссертационных защит проводятся в строгом соответствии с регламентациями Высшей аттестационной комиссии при Министерстве

науки и высшего образования Российской Федерации при слаженной работе руководства совета – председателя, его заместителей и ученого секретаря.

Здесь мы остановимся на краткой характеристике изданных в последние годы методических материалов (книг, статей, выступлений), которые адресованы студентам, аспирантам и соискателям ученых степеней.

С 2013 г. издательством ИНФРА-М (г. Москва) переиздается брошюра «Диссертация в зеркале автореферата» [14], содержание которой составляют не только рекомендательные материалы к написанию автореферата, но и оригинальные высказывания выдающихся ученых и мыслителей прошлого о значимости научной деятельности, а также исторический сюжет о защите диссертации А. Эйнштейном в 1905 г.

Другие методические пособия также способны привлечь к себе внимание уже своими «нестандартными» названиями: «Диссертация: грани творчества и ...», [15] «Диссертация: реквизит, действующие лица и исполнители» [16], «Диссертациеведение: пролегомены» [16], «Диссертанту о диссертации: семантический аспект» [17]. Все они комплексно отражают вопросы диссертациеведения.

Конкретные вопросы методик представления диссертационных работ также подробно рассматривались в статьях и конференционных выступлениях.

Методические работы сгруппированы по следующим важным и взаимосвязанным тематикам.

1. Проблемы развития научной одаренности, возникновения и формирования интереса к научным исследованиям [19–32].

2. Роль научных школ в формировании научных кадров [33–36].

3. История диссертационных защит [37–40].

4. Общая структура диссертации и автореферата и их контент [41–44].

5. Методология представления результатов научной работы [45–56].

6. Научная экспертиза и защита диссертации [57–61].

В приводимой литературе рассмотрены не только специфические вопросы

подготовки и защиты диссертационных работ. В совокупности содержание названных публикаций формирует понятие одного из разделов науковедения – *диссертациеведения* («науки о диссертациях»).

Объектом диссертациеведения является собственно диссертация как научный текст, а его предметом – совокупность различных ракурсов, под которыми диссертация может рассматриваться – структура и методика изложения содержания, самоанализ и внешняя экспертиза, научная среда, историографический и библиографический компоненты и т.д.

Следование сложившимся канонам диссертациеведения при выполнении и представлении диссертационной работы является основой для успешной защиты.

Библиографический список

Общие вопросы

1. Усанов Д. А., Аникин В. М. Университетская подготовка конкурентоспособных специалистов // Известия Саратовского университета. Новая серия Серия: Физика. 2018. Т. 18, вып. 4. С. 313–320. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2018-18-4-313-320> EDN: VQLCXQ

2. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Эпистемологические упражнения магистранта: формулировка и оценка научных положений в своей диссертации // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55, № 8/3. С. 213–214. EDN: PFCBGP

3. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Провокация магистранта на вербализацию защищаемого научного положения как прием когнитивного менеджмента // Вестник Томского государственного университета. Философия. Социология. Политология. 2013. № 2. С. 15 – 20. EDN: QBKZMF

4. Аникин В.М., Измайлов И.В., Пойзнер Б.Н. Курс методологии научных исследований как средство когнитивного развития обучаемых // Современное образование: повышение конкурентоспособности университетов: материалы международной научно-методической конф., 28–29 января 2021 г., г. Томск, Россия. В 2 ч. / отв. ред. В. М. Рулевский. Томск : Издательство Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, 2021. Ч. 1. С. 247–255. EDN: MHAZGG

5. Аникин В.М., Измайлов И.В., Пойзнер Б.Н. Потенциальный стимул к творчеству при обучении методологии исследований // Современное образование: интеграция образования, науки, бизнеса и власти : материалы междунар. науч.-метод. конф., 27–28 января 2022 г., Томск, Россия. В 2 ч. / отв. ред. В. М. Рулевский. Томск : Издательство Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, 2022. Ч. 1. С. 187–194. EDN: WCJGSN

6. Пойзнер Б. Н., Аникин В. М., Изсайлов И. В. Приобщение магистрантов и аспирантов к научному дискурсу при обучении методологии исследований // Актуальные проблемы радиофизики: сб. трудов IX международной научно-практической конференции АПР – 2021. Томск, 20 – 22 октября 2021 г. Томск : Издательство Национального исследовательского Томского государственного университета, 2021. С. 286–291. EDN: AIRAKA.

7. Аникин В.М., Измайлов И.В., Лячин А.В., Пойзнер Б.Н. Как учить магистрантов и аспирантов рефлексировать над диссертацией? // Актуальные проблемы радиофизики: VIII Международная научно-практическая конференция. Томск, 1–4 октября 2019 г. Томск: Издательский дом ТГУ, 2019. С. 447–451. EDN: VBGQYE

8. Аникин В. М. Дисциплина «Современные проблемы физики» в магистратуре физического факультета Саратовского государственного университета // Научно-методические проблемы инновационного педагогического образования : сборник научных трудов. В 2 частях. Саратов : Издательство СРОО «Центр «Просвещение»», 2018. Ч. 1. С. 3 – 6. EDN: XSNRGX

9. Аникин В.М., Ремизов А.С., Аркадакский С.С. Собственные функции и числа оператора Перрона-Фробениуса кусочно-линейных хаотических отображений // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2007. Т. 15. № 2. С. 62 – 75. EDN: IBFCRB
10. Аникин В.М., Аркадакский С.С., Ремизов А.С. Аналитическое решение спектральной задачи для оператора Перрона-Фробениуса кусочно-линейных хаотических отображений // Известия вузов – Прикладная нелинейная динамика. 2006. Т. 14, № 2. С. 16–34. EDN: НТВНЛJ
11. Аникин В.М. Спектральные задачи для оператора Перрона-Фробениуса // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2009. Т. 17, № 4. С. 61 – 74. EDN: KWFCMN
12. Golubentsev A.F., Anikin V.M. The Explicit Solutions of Frobenius – Perron Equation for the Chaotic Infinite Maps // International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering. 1998. Vol. 8, no. № 4-5. P. 1049 – 1051. EDN: BFLYEJ
13. Голубенцев А.Ф., Аникин В.М. Инвариантные функциональные подпространства линейных эволюционных операторов хаотических отображений // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2005. Т. 13. № 1 – 2. С. 3–17. EDN: НТGFKR
14. Аникин В. М., Усанов Д. А. Диссертация в зеркале автореферата: методическое пособие для аспирантов и соискателей ученой степени естественнонаучных специальностей. М. : ИНФРА-М, 2013. 128 с. (Менеджмент в науке). EDN: TVASWT
15. Аникин В.М., Пойзнер Б. Н. Диссертация: грани творчества и ... Сер. "След вдохновений и трудов упорных...". Вып. 8 / Под ред. и с предисл. Д. И. Трубецкова. Саратов: РИО журнала "Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика"; ООО ИЦ "Наука", 2017. 142 с. EDN: ZSTEAD
16. Аникин В. М. Пойзнер Б. Н. Диссертация: реквизит, действующие лица и исполнители: учебно-методическое пособие для магистрантов и аспирантов. Саратов: Издательство Саратовского университета, 2018. 100 с. EDN: ZUQXQL
17. Аникин В. М. Пойзнер Б. Н. Диссертациеведение: пролегомены: учебно-методическое пособие для аспирантов и магистрантов. Саратов: Издательство Саратовского университета, 2019. 108 с. EDN: TAVKMW
18. Аникин В. М., Пойзнер Б. Н. Диссертанту о диссертации: семантический аспект: учебное пособие. М. : ИНФРА-М, 2024. 225 с. (Высшее образование. Аспирантура). <https://doi.org/10.12737/1909143>

Проблемы развития научной одаренности

19. Аникин В.М. Н. Н. Семёнов: кого считать научно одаренным // Инновационные стратегии развития педагогического образования : Матер. XIII межд. научно-методической очно-заочной конф.: В 2 ч. Саратов : Изд-во СРОО «Центр «Просвещение»», 2017. Ч. 1. С. 7–9. EDN: ZBDPFF
20. Аникин В.М. Наши первые учителя: страницы биографий П. Н. Лебедева и Н. Н. Семёнова // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2016. Т. 24, № 1. С. 75-83. <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2016-24-1-75-8>, EDN: WBLZEV
21. Аникин В.М. Н.Н. Семёнов: воспоминания о годах ученичества // Химия в школе. 2021. № 1. С. 51–56. EDN: DFKHXX
22. Аникин В.М. Физик-инноватор, земляк, учитель и друг Н. Н. Семёнова Владимир Иванович Кармилов // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16, вып. 1. С. 44–54. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-1-44-54>, EDN: VSKUUZ
23. Шашкина М. Н., Аникин В. М. Саратовские годы Олега Антонова: конструктор планеров и студент университета // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 1. С. 113–128. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-1-113-128>, EDN: XOMSF5
24. Аникин В. М., Гнеденко Д. Б., Федорова М. А. Саратовские годы братьев Бориса и Глеба Гнеденко // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т. 23, вып. 1. С. 68–98. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-1-68-98>, EDN: WJJAUS
25. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Какова природа интересного, или дефиниции науки и научности – эпистемологический компонент профессиональной компетенции (радио)физика как инженера исследователя // Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 10/3. С. 118 – 120. EDN: SBHCLF
26. Аникин В. М., Гнеденко Д. Б. Как приходит интерес к знаниям и науке // Физик: ученый, педагог, наставник: Сборник научных трудов. Саратов : Издательство «Саратовский источник», 2023. С. 39 – 47. EDN: NKXOS27. W
27. Аникин В. М. Секрет успеха великих людей. Исторические примеры воплощения природной одаренности // Развитие одаренности в контексте больших вызовов: методология, проекты, технологии: сборник научных статей IV Международной научно-практической конференции. Саратов 15–16 ноября 2023 г. Саратов: ИЦ «Наука», 2023. С. 19 – 24. EDN: BLJALQ

28. Аникин В. М. Учитель и ученик: судьбоносные встречи // Физическое образование: от прошлого к будущему : материалы Всероссийской научно-методической конференции с международным участием памяти проф. Н.М. Кожевникова. С.-Петербург, 20–21 апреля 2017 г. / отв. ред. М.А. Бабаева. СПб. : Издательство Политехнического университета, 2017. С. 46–54. EDN: YQFCOD

29. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Как диагностировать реальные когнитивные и мотивационные качества будущих магистрантов? // Проблемы оптической физики и биофотоники SFM-2015 : Материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2015 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов : Издательство «Новый ветер», 2015. С. 140–142. EDN: XYQPWN

30. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Магистранту – об идеалах научности и формуле интересного // Конференция «Оптика и образование – 2014», Санкт-Петербург, 23–24 октября 2014 г. : сб. трудов /под ред. проф. А. А. Шехонина. – СПб : НИУ ИТМО, 2014, С. 68 – 69. EDN: VKRCWZ

31. Аникин В. М., Пойзнер Б.Н., Соснин Э.А., Шувалов А.В. Феномен научной школы: история, типология получения и передачи знаний, психология коммуникаций / под общ. ред. В. М. Аникина. Саратов : Издательство33. Саратовского университета, 2015. 232 с. EDN: WYZXMX

32. Усанов Д.А., Аникин В.М. Саратовские научные и педагогические школы по физике (к 80-летию образования Саратовской области) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2016. Т. 16, вып. 3. С. 178–190. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-3-178-190>, EDN: WWMBCZ

Роль научных школ в формировании научных кадров

33. Аникин В. М. Школа Петра Николаевича Лебедева: принципы научной и образовательной деятельности // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2021. Т. 21, вып. 2. С. 188–201. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-1-188-201>, EDN: LXZGTT

34. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Научное руководство аспирантами: «внутренние» и «внешние» регуляторы // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2015. Т. 15, вып. 1. С. 83–88. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2015-15-1-83-88>, EDN: VXAAUF

35. Аникин В. М. Дмитрий Александрович Усанов как воспитатель научной смены // Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами: Сб. статей десятой Всероссийской научной школы-семинара / под ред. проф. Ал. В. Скрипаля. Саратов : Саратовский источник, 2023. С. 46–54. EDN: DGZPGV

36. Гнеденко Д. Б., Аникин В. М. Научная школа Б. В. Гнеденко: принципы деятельности // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2022 : материалы 10-го Международного симпозиума и 26-й Молодежной научной школы Saratov Fall Meeting – 2022. Саратов, 26 – 30 сентября 2022 г. / под ред. Г. В. Симоненко и В. В. Тучина. Саратов : Саратовский источник, 2022. С. 56–62. EDN: FWUOTG

История диссертационных защит

37. Аникин В.М. Альберт Эйнштейн и Питирим Сорокин: истории диссертационных защит // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2011. Т. 19. № 3. С. 52–76. <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2011-19-3-62-78>, EDN: OEDWFB

38. Аникин В. М. Первый декан физмата // Очерки истории физико-математического образования в Саратовском университете / под общей ред. В. М. Аникина. Саратов : Издательство Саратовского университета, 2019. С. 13–33. EDN: ONCDHP

39. Аникин В. М. Профессор, декан, ректор Саратовского университета Владимир Васильевич Голубев. 2. «Двенадцатилетнее пребывание в Саратове сыграло в моей жизни исключительное значение» // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2022. Т. 22, вып. 2. С. 170–188. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2022-22-2-170-188>, EDN: REJCGJ

40. Аникин В. М. К истории физико-математического научно-исследовательского института Саратовского университета // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 2. С. 255–261. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-2-255-261>, EDN: DPYGUD

Структура и содержание диссертации и автореферата

41. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н., Усанов Д.А. Схема поаспектной характеристики диссертации: правила, рекомендации, примеры // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2009. Т.17, № 3 (97). С. 137–150. DOI: 10.18500/0869-6632-2009-17-3-137-150, EDN: KPNRTZ

42. Аникин В.М., Усанов Д.А. Автореферат диссертации: функции, структура, значимость // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2008. Т. 8. Сер. Физика. Вып. 2. С. 61–73. EDN: IWLZLJ

43. Аникин В.М., Поизнер Б.Н. Коммуникативная функция автореферата и уровень лингво-дисциплинарной компетенции диссертанта // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2013. Серия: Физика. Т. 13, вып. 1. С. 80–86. EDN: QBDVAVN

44. Аникин В.М., Измайлов И.В., Поизнер Б.Н. Критерии научности диссертации // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2014: материалы межд. симпозиума Saratov Fall Meeting 2014 «Оптика и биофотоника - II» / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов : Издательство «Новый ветер», 2014. С. 155–160.

Представление результатов научной работы

45. Аникин В.М., Поизнер Б.Н. Государственная итоговая аттестация аспиранта: от формальности к превентиве // Alma Mater (Вестник высшей школы). 2015. № 11. С. 17 – 21. EDN: UYGHXT

46. Аникин В.М., Измайлов И.В., Поизнер Б.Н., Соснин Э.А. Защищаемое положение в диссертации как трансдисциплинарный научный жанр // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58, № 8/3. С. 300–303. EDN: VUBYLR

47. Аникин В. М., Измайлов И. В., Лячин А. В., Поизнер Б. Н. Диссертация как научный нарратив // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2019. Т. 19, вып. 4. С. 317–326. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2019-19-4-317-326>. EDN: BNBNTP

48. Anikin VM, Poizner B. N., Sosnin E. A. Pythagorus Μάθημα, Heraclitus Λόγος та, Plato’s εἶδος and a statement proposed in Thesis // The influence of Hellenism on contemporary science, culture and education : Selected Papers of the International Multidisciplinary Conference. October 5–8, Tomsk, Russia; October 20–24, 2016. Moscow, Russia. Ed. T.P. Minchenko. London : Red Square Scientific, 2019. P. 10 – 21. EDN: VJCFIV

49. Аникин В. М., Поизнер Б. Н., Соснин Э. А. «Научная объективность» и «рациональность» в диссертации: педагогический аспект // Высшее образование в России. 2017. № 10. С. 125–133. EDN: ZOWUJT

50. Аникин В.М., Поизнер Б.Н. Как диссертанту аргументировать достоверность научных положений и результатов, выносимых на защиту // Известия вузов. Физика. 2011. Т. 54. № 6. С. 105–108. EDN: OPCBFH

51. Аникин В.М., Поизнер Б.Н. Коммуникативная функция автореферата и уровень лингво-дисциплинарной компетенции диссертанта // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2013. Сер. Физика. Т. 13, вып. 1. С. 80 – 86. EDN: QBDVAVN

52. Черкасова О. А., Чурочкина С. В. Характеристики выпускной квалификационной работы бакалавра, магистранта и аспиранта // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 243 – 247. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-4-243-247>, EDN: XTCXXJ

53. Аникин В.М., Поизнер Б. Н., Соснин Э. А. Место научного положения в контексте объекта и предмета исследования // Актуальные проблемы радиофизики: Сборник трудов VII Международной научно-практической конференции. г. Томск, 18-22 сентября 2017 г. Томск : Издательство СТТ, 2017. С. 276 – 280. EDN: YWPYRQ

54. Аникин В. М., Измайлов И. В., Лячин А. В., Поизнер Б. Н. Положение, выносимое на защиту в магистерской диссертации: структура и аспекты оценки // Современное образование: качество образования и актуальные проблемы современной высшей школы: материалы международной научно-методической конференции. Томск, 31 января–1 февраля 2019 года /отв. ред. А.А. Шелупанов. Томск: Издательство Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, 2019. EDN: AORGFU

55. Аникин В. М., Измайлов И. В., Лячин А. В., Поизнер Б. Н. Нарратологический компонент социогуманитарной культуры диссертанта // Современные тенденции развития непрерывного образования: вызовы цифровой экономики: материалы международной научно-методической конференции, 30 – 31 января 2020 г., Россия, Томск. Томск: Издательство Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, 2020. С. 230–231. EDN: ZUQXQL

56. Слепченко М. М. Что должен избегать аспирант в своей выпускной работе и диссертации // Инновации и рискологическая компетентность педагога: сб. научных трудов Шестнадцатой международной заочной научно-методической конференции. Саратов, 13 марта 2019 г. В 2 частях. Саратов : Издательство «Саратовский источник», 2020. Ч. 2. С. 207 – 212. EDN: LVBLDQ

Научная экспертиза и защита диссертации

57. Аникин В.М., Поизнер Б.Н. «Предзащита» диссертации: формальные требования и традиции // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2014. Т. 22, № 2. С. 95–102. DOI: 10.18500/0869-6632-2014-22-2-95-102, EDN: SWKEPF

58. Аникин В.М., Измайлов И.В., Поизнер Б.Н. Диссертанту о воспринимаемости, числовой оценке и защите научных результатов // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2014. Т. 22, № 6. С. 25–34. DOI: 10.18500/0869-6632-2014-22-6-25-34, EDN: TNZILN

59. Аникин В. М., Поизнер Б. Н. Оппонирование диссертации: через букву нормы – к принципам объективной оценки // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2017. Т. 25. № 6. С. 79-98. DOI: 10/18500/0869-6632-2017-25-6-79-98, EDN: VUBYLR

60. Аникин В. М., Поизнер Б. Н. О принципах объективной экспертизы диссертации // Научно-методические проблемы инновационного педагогического образования : сборник научных трудов. В 2 частях. Саратов : Изд-во СРОО «Центр «Просвещение»», 2018. Ч. 1. С. 6 – 10. EDN: XSNRHF

61. Аникин В.М., Поизнер Б. Н. Официальный оппонент в системе целеустремлённой научной деятельности // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2017: материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2017 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. Саратов : Издательство «Новый ветер», 2017. С. 109 – 114. EDN: UYVBAG

A METHODOLOGICAL NAVIGATOR FOR APPLICANTS OF ACADEMIC DEGREE

M. M. Slepchenkov

Abstract. This article provides a brief overview of publications devoted to the methodology of presenting scientific research results in dissertations. They contain recommendations for the correct formulation of the work's aspect characteristics, including the title, relevance, purpose, object and subject of the study, scientific and practical significance, reliability, defended scientific theses, conclusions, etc. Several publications characterize the key components of reviews from the supervisor, official opponents, and the leading organization. Publications introducing the history of dissertation defenses are also mentioned. The article presents publications that examine the problem of developing scientific talent, the emergence and formation of interest in scientific research, as well as the role of scientific schools in this process.

Keywords: dissertation, formulation of aspect characteristics, defense procedure

Сведения об авторе

Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского (СГУ имени Н. Г. Чернышевского), ученый секретарь диссертационного совета 24.2.392.01 на базе СГУ имени Н. Г. Чернышевского по специальностям 1.3.4.Радиофизика, 1.3.5. Физическая электроника, 2.2.2. Электронная компонентная база микро- и нанoeлектроники, квантовых устройств (физико-математические науки). E-mail: slepchenkovm@mail.ru

ДЕФЕКТ ДВОЙНОЙ ВАКАНСИИ В ГРАФЕНЕ

В. А. Третьяк, М. М. Слепченко

Аннотация. Статья посвящена обзору научных исследований графеновых наноструктур с дефектом двойной вакансии типа 5-8-5 (локальная конфигурация «пятиугольник-восьмиугольник-пятиугольник»). Дефект подобного типа формируется в атомной сетке графена при термическом и радиационном воздействии, оказывая существенное влияние на его свойства.

Ключевые слова. Нанозлектроника, углеродные структуры, графен, дефект двойной вакансии 5-8-5.

Введение

В настоящее время различные аллотропные формы углерода являются объектом исследований ученых-физиков и имеют весьма серьезные перспективы использования в практической сфере. Одной из таких аллотропных форм является графен, представляющий собой одиночный слой атомов углерода, расположенных в виде гексагональной решетки. Впервые графен был синтезирован в 2004 г. А. К. Геймом и К. С. Новоселовым (с соавторами) [1, 2]. Особые оптические, электрические, механические и тепловые свойства обуславливают возможность широкого применения этого углеродного материала [3]. Среди наиболее привлекательных свойств графена можно отметить высокую подвижность зарядов, одно из самых низких удельных сопротивлений среди проводников, высокие механическая прочность и теплопроводимость [3, 4].

Графен широко востребован в микроэлектронике при создании квантовых компьютеров и некремниевых транзисторов, в солнечной энергетике, для фильтрации воды, в нефте- и газодобыче, медицине и биотехнологиях.

Несмотря на то, что графен характеризуется высокой структурной стабильностью, при его синтезе могут возникать различного рода дефекты [5]. Они могут появляться на стадии роста или очистки наноматериала, в результате ионной бомбардировки, под влиянием радиации и высоких температур и могут коренным образом изменять характеристики

графена в сравнении со свойствами идеальных бездефектных структур [6].

Физические особенности графеновых наноструктур с дефектом двойной вакансии

Объектом исследования в данной работе стал дефект двойной вакансии типа 5-8-5 в атомной сетке графена. Этот дефект представляет особый интерес для исследователей, поскольку является одним из наиболее энергетически стабильных дефектов в графене и может быть использован для целенаправленной модификации свойств материала.

Учеными из Омского научного центра Сибирского отделения РАН изучены влияние дефекта двойной вакансии на свойства графена и полученная зонная структура графена с дефектами [7].

Для дефекта двойной вакансии характерны:

1. Специфическая последовательность координационных чисел атомов:

- два атома имеют координационное число 5 (пентагоны);
- один атом имеет координационное число 8 (октагон);
- все остальные атомы сохраняют координационное число 3 (правильная структура графена).

2. Изменение длин связей и их перестраивание.

Двойная вакансия создает локальную конфигурацию «пятиугольник – восьмиугольник – пятиугольник» в гексагональной кристаллической решетке графена [7], как показано на рис. 1.

Изображенная на рисунке атомная структура была получена из фрагмента листа графена, состоящего из 60 атомов, в котором удалены два атома для получения дефекта. Представленный фрагмент представлял собой двухмерную (2D) периодическую ячейку. В работе проводилась оптимизация положения всех атомов углерода с целью нахождения минимальной энергии. Оптимизация проводилась путем численных расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП).

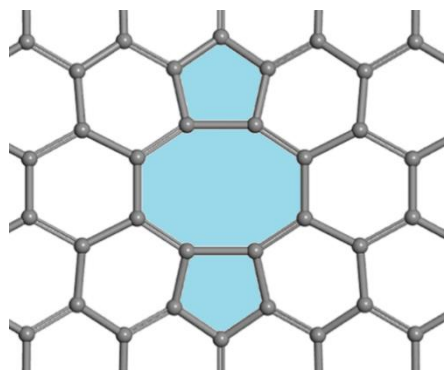


Рис. 1. Единичный дефект двойной вакансии графена типа 5-8-5 [7]

Из рис. 1 видно, что в результате оптимизации геометрических параметров структуры атомы углерода графеновой решетки меняют свое положение таким образом, чтобы максимальное число атомов имело по три ковалентных связи. Максимальная удельная энергия связи сохраняется в идеальной графеновой решетки, которая состоит из правильных шестиугольников. Следовательно, наличие в оптимизированной структуре графена с вакансионным дефектом неравносторонних шестиугольников и пятиугольников свидетельствует об уменьшении удельной энергии связи в структуре. Поэтому при оптимизации геометрических параметров структуры имеет место два конкурирующих механизма: минимизация оборванных связей и минимизация деформации идеальной структуры графеновой решетки. Также исследователи выяснили, что для дефекта двойной вакансии удельная энергия связи составляет 9.26 эВ. Кроме того, в работе [7] было показано, что при наличии

дефекта типа 5-8-5 в зонной структуре графена формируется запрещенная зона, а на поверхности Ферми присутствует минимум плотности электронных состояний.

Влияние деформации на структуру с дефектом типа 5-8-5 было изучено учеными А. С. Кочневым, И. А. Овидько и Б.Н. Семеновым из Санкт-Петербургского государственного университета и Политехнического университета Петра Великого. Они изучали влияние данного дефекта на прочность листа графена. Исследование проводилось учеными с помощью компьютерного моделирования методами молекулярной динамики, для расчётов использовался пакет LAMMPS [8]. В ходе исследования проводилось моделирование растяжения образца при температуре 300 К. Скорость растяжения составляла 0.0005 фс^{-1} . Моделирование проводилось путём ввода в эксперимент случайных колебаний атомов, соответствующих установленной температуре, для чего использовалась термостатическая модель Нозе–Гувера (Nose–Hoover thermostat). Для моделирования межатомных взаимодействий применялся потенциал AIREBO с параметром разрыва (cutoff), равным 2.0. При молекулярно-динамических расчётах использовались периодические граничные условия. При наличии единственного дефекта разрушение атомной сетки всегда начиналось в той области, где была нарушена идеальная гексагональная форма. На первом этапе происходило объединение ячейки дефекта с соседними гексагональными ячейками. В этот момент образовывалась одна или несколько более крупных ячеек, состоящих из 8–15 атомов. Дальнейшее разрастание таких дефектов приводило к образованию трещины, а затем к полному разрушению структуры. Характерным являлось образование углеродных нитей, которые на начальном этапе служили границами между объединёнными дефектами. В процессе образования трещин эти границы не разрушались и образовывали нити толщиной всего в один атом углерода, объединявшие уже фактически разделённые

полуплоскости исходного графенового листа. Данный процесс показан на рис. 2.

В другой своей статье А. С. Кочнев, И. А. Овидько и Б. Н. Семенов более подробно изучили дефект двойной вакансии в листе графена [9]. Ими были использованы те же методы моделирования, что и в работе [8], но изучалось растяжение не только графенового листа, содержащего дефект 5-8-5, но и бездефектного листа графена, показанного на рис. 3. В дальнейшем ими было проведено сравнение поведения структур при одинаковых условиях деформации углеродных цепочек, которые соединяют эти части, как показано на рис. 4.

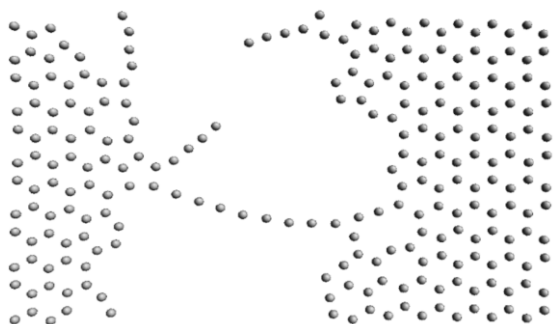


Рис. 2. Разрушение листа графена с единичным дефектом типа 5-8-5 [8]

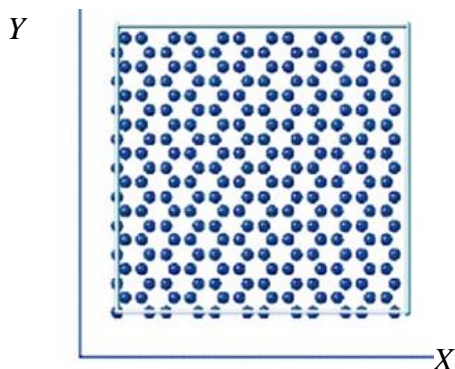


Рис. 3. Бездефектный лист графена: ячейка с атомами углерода расположена в идеальной гексагональной решетке графена. Направления «зигзаг» и «кресло» ориентированы вдоль осей Y и X декартовой системы координат соответственно [9]

При моделировании растяжения первоначального графенового листа разрушения атомной сетки происходили одновременно в нескольких местах. В этих областях разрываются ковалентные связи в гексагонах решетки графена. После

разделения листа на две части в ячейке образуются несколько моноатомных

Подобные изменения в атомной сетке графенового листа при растяжении ученые так же наблюдали и в случае дефекта 5-8-5 [8, 9], однако в случае с дефектом разрывы связи в первую очередь происходили в той области, где был встроен дефект. Тем не менее, при дальнейшем увеличении степени растяжения появляется моноатомная цепочка (рис. 5), также как и в случае с листом графена без дефекта. В конечном итоге цепочка разрывается, и разрушение графенового листа становится полным.

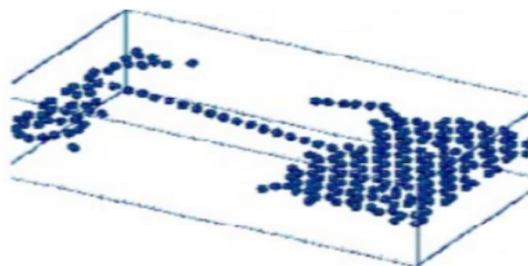


Рис. 4. Растяжение бездефектного графенового листа в направлении «кресло» гексагональной кристаллической решётки [9]

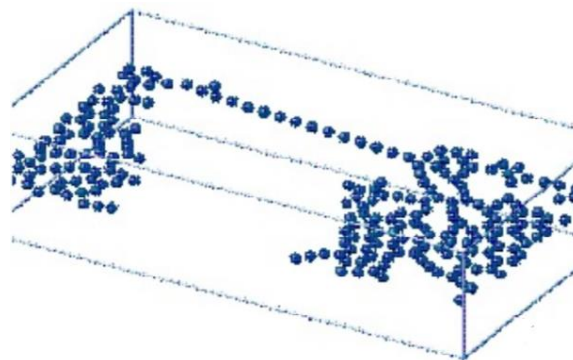


Рис. 5. Растяжение графенового листа с имеющимся дефектом 5-8-5 в направлении «кресло» гексагональной кристаллической решётки [9]

В обоих случаях растяжения процесс деформации и в дальнейшем разрыва атомной сетки листов графена имел многостадийный характер. При этом было выявлено, что значения предельной прочности у бездефектного листа графена значительно выше, чем у листа графена с дефектом. Следовательно, наличие дефектов 5-8-5 в графеновых листах приводит к резкому снижению прочности при

растяжении по сравнению с их прочностью при растяжении в отсутствие дефектов [9].

Заключение

На основании проведенного обзора установлено, что наличие в атомной сетке графена дефектов вакансионного типа приводит к снижению его прочностных свойств при деформации растяжении. В тоже время благодаря появлению дефектов данного типа, графен становится

материалом, обладающим ненулевой запрещенной зоной, что важно для его применения в устройствах нанoeлектроники, в частности в транзисторах. В связи с этим в настоящее время разрабатываются технологии как по предотвращению образования таких дефектов, так и по целенаправленному введению в структуру графена, для получения материалов с заданными свойствами и последующего применения в конкретных приложениях.

Библиографический список

1. *Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A.* Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. Vol. 306, iss. 5696. P. 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
2. *Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V., Geim A. K.* Two-dimensional atomic crystals // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2005. V.102, iss. 30. P.10451–10453. <https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>
3. *Morozov S. V., Novoselov K. S., Katsnelson M. I., Schedin F., Elias D. C., Jaszczak J. A., Geim A. K.* Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. Art. 016602. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.016602>
4. *Balandin A. A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau Ch. N.* Superior thermal conductivity of single-layer graphene // *Nano Lett.* 2008. Vol 8, iss. 3. P. 902–907. <https://doi.org/10.1021/nl0731872>
5. *Скрипник Ю. В., Локтев В. М.* Электронные свойства графена с точечными дефектами (Обзор) // *Физика низких температур*. 2018. Т. 44, № 11. С. 1417–1455. EDN YLSKMH [Скрыпник Ю.В., Локтев В.М. Electronic properties of graphene with point defects // *Low Temperature Physics*. 2019. Vol. 45, iss. 12. P. 1310–1342. <https://doi.org/10.1063/10.0000565>].
6. *Квашин А.Г., Сорокин П. Б., Квашин Д. Г.* Теоретическое исследование механических свойств графеновых мембран методом молекулярной механики // *Журнал Сибирского федерального университета. Серия «Математика и физика»*. 2009. Т. 2, вып. 4. С.426–431. EDN: KXNQVB
7. *Сачков В. А.* Объединение дефектов типа вакансии в графеновой плоскости в кластеры и влияние вакансионных кластеров на морфологию и электронные свойства структуры // *Омский научный вестник*. 2020. № 5 (173). С. 114–118. <https://doi.org/10.25206/1813-8225-2020-173-114-118>
8. *Кочнев А. С., Овидько И. А., Семенов Б. Н.* Прочностные характеристики графена с дефектами решётки // *XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики*. Казань, 20 – 24 августа 2015 г. : сборник докладов / Отв. редакторы Д. А. Губайдуллин, А. И. Елизаров, Е. К. Липачев. Казань : Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета, 2015. С. 2044–2046. EDN: UXGCEJ
9. *Kochnev A. S., Ovid'ko I. A., Semenov B. N.* Tensile strength of graphene containing 5-8-5 defects // *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2014. V. 37, no. 1/2. P. 105 – 110. URL: https://www.ipme.ru/e-journals/RAMS/no_13714/contents.html (дата обращения: 03 января 2026)

THE DOUBLE VACANCY DEFECT IN GRAPHENE

V. A. Tretyak, M. M. Slepchenkov

Abstract. The article is devoted to the review of scientific research in the field of graphene double vacancy defect of 5-8-5 type (local configuration ‘pentagon-ectagon-pentagon’). This type of defect forms in the graphene atomic lattice under thermal and radiation exposure, significantly affecting its properties.

Keywords. Nanoelectronics, carbon structures, graphene, double vacancy defect 5-8-5

Сведения об авторах

Третьяк Виталия Александровна, студент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского. Email: ann55677@yandex.ru

Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского. E-mail: slepchenkovm@mail.ru

МИКРОПОЛОСКОВЫЕ ПОЛОСНО-ПРОПУСКАЮЩИЕ ФИЛЬТРЫ: ПЕРСПЕКТИВЫ ВНЕДРЕНИЯ В ПРАКТИКУМ ПО ТЕХНИКЕ СВЧ

А. М. Федоров, П. В. Барков, К.А. Саяпин

Аннотация. Микрополосковые полосно-пропускающие фильтры являются одним из наиболее востребованных типов современных СВЧ-устройств, сочетающих в себе приемлемые частотные характеристики и малые габариты. В этой связи становится перспективной актуализации существующих практикумов по технике СВЧ, в которых до настоящего времени микрополосковым устройствам не уделялось должного внимания. В данной работе, в контексте создания современного практикума по технике СВЧ, рассмотрены конструкции и особенности разработки микрополосковых фильтров.

Ключевые слова: микрополосковый фильтр, полосно-пропускающий фильтр, СВЧ фильтр, связанные резонаторы, проектирование фильтров, электромагнитное моделирование, полоса пропускания

Введение

Полосно-пропускающие фильтры (ППФ) на основе микрополосковой линии передачи (МЛП) предназначены для частотной селекции радиосигналов СВЧ-диапазона [1-2]. Благодаря простоте, малым габаритам и низкой стоимости такие устройства находят широкое применение в различной современной радиоэлектронной аппаратуре: системах наземной и спутниковой связи, радиолокации, контрольно-измерительной аппаратуре. Можно отметить, что несмотря на чрезвычайно большое количество известных топологий, создание микрополосковых ППФ с более совершенными эксплуатационными параметрами продолжает оставаться актуальным. Подтверждением этому служит значительное число работ по данной тематике, опубликованных за последние годы в мировых высокорейтинговых научных журналах [4-6].

На этом фоне становится необходимой актуализация существующих практикумов, посвящённых изучению микроволновых устройств и процессам распространения электромагнитных волн в них.

Микрополосковый ППФ на полуволновых резонаторах

Существует значительное число разнообразных топологий микрополосковых ППФ. Одни из самых распространённые –

фильтры на связанных полуволновых резонаторах (рис. 1). Такие ППФ образованы несколькими разомкнутыми отрезками МЛП с боковой вязью. Чем ближе резонаторы друг к другу (меньше зазор между отрезками МЛП), тем сильнее электромагнитная связь между ними, и, следовательно, шире полоса пропускания. К преимуществам таких ППФ можно отнести простоту синтеза, а к недостаткам – сложность реализации малых зазоров между связанными МЛП.

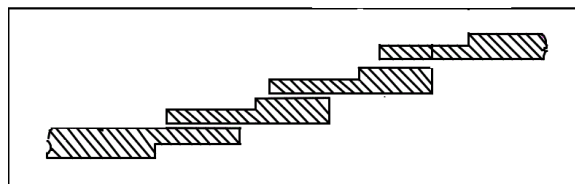


Рис. 1. Топология фильтра на связанных полуволновых разомкнутых резонаторах

Конструкция

Основой для ППФ на полуволновых разомкнутых резонаторах служит МЛП, представляющая собой диэлектрическую подложку, металлизированную с двух сторон. При этом одна сторона металлизации используется как экран, а на другой сформирована топология фильтра [6].

Исходя из заданных требований, в числе которых центральная частота диапазона, ширина полосы пропускания, затухание в полосах подавления, а также с учётом параметров используемой подложки, производится расчёт необходимого числа резонаторов и их геометрических размеров.

На первом этапе проектирования производится аналитический расчёт прототипа и строится схемотехническая модель в программе Qucs Studio. Полученные электрические параметры переводятся в физические размеры: длину и ширину резонаторов, а также расстояния между ними, которые влияют на связь. Ширина отрезков МПЛ определяет их волновое сопротивление.

Затем, получив оптимальную схемотехническую модель ППФ, целесообразно проверить правильность расчётов в пакете электромагнитного моделирования: например, в ANSYS HFSS и CST. Это позволяет учесть различные паразитные эффекты, учесть которые крайне сложно во время схемотехнического моделирования. Стоит отметить перспективу применения для этих целей отечественного программного пакета «Гамма».

Если частотные характеристики электромагнитной модели ППФ соответствуют заданным требованиям, то можно перейти к практической реализации устройства.

Изготовление и экспериментальное исследование ППФ

Фильтр изготавливается по стандартным технологиям, аналогичным используемым при создании печатных плат

(рис. 2). Реализация фильтров с широкой полосой пропускания не требует высокой точности изготовления, а зазоры между МПЛ становятся достаточно большими. Это делает доступным практическую реализацию ППФ даже студентами в ходе практикума по технике СВЧ, с учётом наличия необходимого оборудования.

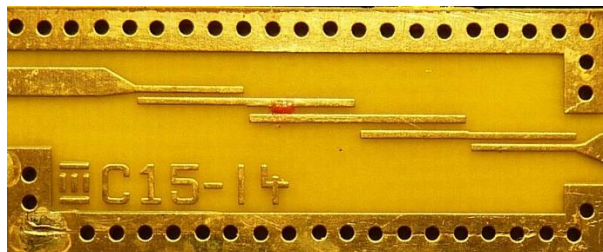


Рис. 2. Пример макета полосно-пропускающего фильтра на МПЛ

Выводы

Микрополосковые полосно-пропускающие широко используются в современной радиоэлектронике, в связи с чем становится актуальным знакомство с принципами их работы и построения в ходе практикума по технике СВЧ. Использование топологии широкополосных фильтров на основе полуволновых разомкнуты резонаторов делает возможным изготовлением макетов при минимально возможных усилиях и затратах даже в условиях учебной лаборатории.

Библиографический список

1. Тюрнев В. В. Теория цепей СВЧ : учебное пособие. Красноярск : Издательство Красноярского государственного технического университета, 2003. 194 с.
2. Фельдштейн А. Л., Явич Л. Р. Синтез четырехполюсников и восьмиполусников на СВЧ. 2-е изд., перераб. и доп. М. : Связь, 1971. 388 с.
3. Волгов В. А. Детали и узлы радиоэлектронной аппаратуры. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Энергия, 1977. 655 с.
4. Hong S., Chang K. A parallel-coupled microstrip bandpass filter with suppression of both the 2nd and the 3rd harmonic responses // Proceedings of the IEEE MTT-S International Microwave Symposium (IMS). — 2006. — P. 1–4. — DOI: 10.1109/MWSYM.2006.249545.
5. Chen D., Li J., Jiao L., Wei Y., Feng W., Shi X.-W. Compact bandpass filter based on parallel-coupled lines and quasi-lumped structure // Frequenz. — 2015. — Vol. 70, No. 1–2. — P. 69–73. — DOI: 10.1515/freq-2015-0056.
6. Al-Areqi N. N., Seman N., Rahman T. A. Design of microstrip parallel-coupled line bandpass filters for fifth-generation wireless communication // Journal of Telecommunications and Electronics. — 2017. — Vol. 6, No. 8. — P. 13–16. — DOI: 10.5120/cae2017652532.

Microstrip Bandpass Filters: Prospects For Implementation In Microwave Technology
A.M. Fedorov, P.V. Barkov, K.A. Sayain

Abstract: Microstrip bandpass filters are among the most in-demand types of modern microwave devices. Therefore, updating existing microwave engineering tutorials, which have so far neglected microstrip devices, is promising. This paper examines the design and development features of microstrip filters in the context of creating a modern microwave engineering tutorial.

Keywords: microstrip filter, bandpass filter, microwave filter, coupled resonators, filter design, electromagnetic modeling, passband.

Сведения об авторах

Федоров Александр Михайлович – магистрант кафедры радиотехники и электродинамики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. E-mail: sasha.fyf@gmail.com

Барков Павел Валерьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского; e-mail: barkovssu@mail.ru

Саяпин Кирилл Александрович, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры радиотехники и электродинамики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. E-mail: sayapin.k.a@mail.ru

ИЗ ИСТОРИИ ФИЗИКИ

УДК 539.2:92

ВСПОМИНАЯ РАУФА ЗАГИДОВИЧА БАХТИЗИНА

Т. И. Шарипов, В. М. Аникин

Аннотация. Воспоминания посвящены профессору Башкирского государственного университета (ныне – Уфимский университет науки и технологий), доктору физико-математических наук Рауфу Загидовичу Бахтизину, ушедшему из жизни 10 сентября 2025 г. на 83-м году жизни. Он был выдающимся ученым-физиком, специалистом мирового уровня в области автоэмиссионной электроники и физики поверхностных наноструктур. Его отличала высокая научная активность, и его хорошо знали в России и в различных странах мира. В первой части статьи представлены основные вехи биографии Р. З. Бахтизина, связанные с его вхождением в высокую науку и с профессиональной преподавательской, научной и организационной деятельностью. Во второй части публикации иллюстрируются эпизоды его дружеского и научного общения с саратовскими учеными.

Ключевые слова: Бахтизин Рауф Загидович, Башкирский государственный университет, Уфимский университет науки и технологий, Саратовский государственный университет

Профессор Р.З. Бахтизин: очерк жизни и профессионального пути

Т. И. Шарипов

Родители Р. З. Бахтизина, Загид Имамутдинович Бахтизин и Факия Малиховна Салимова (впоследствии заслуженный учитель РСФСР), получили высшее образование в Казанском педагогическом институте. Перед этим, в 1925–1929 гг., Загид Имамутдинович учительствовал в Казаккуловской начальной школе Тамьян-Катайского кантона Башкирской АССР. В 1933 г., после окончания педагогического института, молодая семейная пара осталась работать в Казани. В 1937 г. Загид Имамутдинович как преподаватель математики и Факия Малиховна как преподаватель химии и биологии были направлены с. Кочки-Пожарки Красно-Октябрьского района Горьковской области, где в тот год открылось новое большое здание Татарского педагогического училища. Здесь 20 января 1943 г. и родился будущий профессор Рауф Загидович Бахтизин. Теплые воспоминания о З. И. Бахтизине как директоре педучилища и его супруге оставил А. Х. Абубакиров, преподававший в училище русский язык и литературу [1].

В 1942 г. З. И. Бахтизин был призван в ряды Красной армии. Получил контузию. Завершал войну уже на Дальнем Востоке. Награжден тремя орденами – Красного

Знамени (1943), Красной Звезды (1944), Отечественной войны II степени (1975).

До конца войны Рауф Загидович с мамой и старшей сестрой оставались в Горьковской области. Семья Бахтизиных вернулась в Уфу в 1946 г. Главу семьи назначили директором создаваемого Нефтяного техникума. Интересно, что в числе первых студентов техникума был первый Президент Республики Башкортостан Муртаза Губайдуллович Рахимов.

В 1950-е годы в стране велась активная пропаганда отечественных научных достижений. Благодаря этому многие школьники тех лет проникались интересом к научному творчеству. В их числе был и Рауф Бахтизин. Учился он в обычной школе № 11 (ныне № 61) г. Черниковска, присоединенного к Уфе в 1956 г. Любил участвовать в математических олимпиадах. Школу окончил с серебряной медалью.

В 1960 г. Р. З. Бахтизин поступил на отделение физики физико-математического факультета молодого Башкирского университета, открывшегося в 1957 г. Но все время мечтал учиться в столичном вузе с солидной репутацией и, проучившись в Уфе три года, перевелся в Ленинградский государственный университет (ЛГУ) на третий курс физического факультета, где был закреплен за кафедрой электрофизики. Учиться поначалу было трудно – чувствовалась разница в уровне преподавания математики и радиотехники. Рауф Бахтизин своей творческой энергией

обратил на себя внимание одного из ведущих ученых СССР в области катодной электроники Георгия Николаевича Фурсея, который предложил ему тему научно-исследовательской работы по взрывной эмиссии, открывателем (совместно с Г. А. Месяцем) и исследователем которой он был. Ближе к окончанию обучения объектом исследований у Р. Бахтизина стала автоэлектронная эмиссия с поверхности полупроводников (германий, кремний и др.). Были опубликованы совместные работы с Г. Н. Фурсеем:

Фурсей Г. Н., Бахтизин Р. З. Нелинейные вольтамперные характеристики р-типа Ge // Вестник ЛГУ. Сер. физ. и хим. 1970. Вып. 4, № 22. С. 26–32; Физика твердого тела. 1969. Т. 11. С. 3672–3678.

Первыми зарубежными публикациями Р. З. Бахтизина стали статьи в журналах *Surface Science* и *Physica Status Solidi (A)*:

Mileshkina N. V., Bakhtizin R. Z. Oxygen adsorption on atomically clean surface of Germanium field emitter // *Surface Science*. 1972. Vol. 29. P. 644–652; *Sokolskaya I. L., Mileshkina N. V., Bakhtizin R. Z.* Gold adsorption on clean Germanium field emitters // *Physica Status Solidi (A): Applied Research*. 1972. Vol. 14, no 2. P. 417 – 422.

В аспирантуре Ленинградского университета Рауф Загидович продолжил изучать автоэмиссионные свойства полупроводников, опубликовал ряд статей в ведущих научных журналах страны.

Позже он рассказывал своим сотрудникам: «В те годы у меня сформировалось такое правило, которого я всегда придерживался: если взялся за дело, то сначала должен досконально изучить научную литературу (отечественную и зарубежную), чтобы получить представление о том, что сделано в мире по данной тематике другими учеными. С тех пор через всю жизнь я пронес такой подход к научной деятельности».



Р.З. Бахтизин – аспирант ЛГУ среди молодых коллег, вторая половина 1960-х гг.

В 1972 г. Р. З. Бахтизин Загидович успешно защитил кандидатскую диссертацию, посвященную разработке новых вакуумных источников электронов конической формы. В том же 1972 году активный кандидат наук вернулся в Башкирский университет, причем не с пустыми руками. Ему удалось привезти с собой приборную базу для будущих экспериментальных лабораторий. Новые лаборатории были развернуты на базе кафедры общей физики. Оригинальным

научным направлением стала эмиссионная электроника, и в этой области удалось добиться значительных результатов. Ученые группы во главе с Р. З. Бахтизиным проектировали новые электронные приборы, направляли заказы на их производство на заводы, самостоятельно создавала образцы необходимых электровакуумных приборов, одновременно готовили квалифицированных специалистов для отечественной радиоэлектронной промышленности.

В те времена в Советском Союзе предприятия обязывали выделять материальные и финансовые средства на проведение НИОКР. Одним из таких предприятий было НПО «Энергия» в г. Королеве Московской области, и оно выступало заказчиком проведения исследовательских работ. В результате были разработаны приборы для измерения параметров электростатических полей. За некоторые из них группа Р.З. Бахтизина в Москве была отмечена серебряной медалью Выставки достижений народного хозяйства. На прикладных разработках получено множество авторских свидетельств и патентов на изобретения. По инициативе ректора, профессора Р. Н. Гимаева с учетом достижений группы профессора Р. З. Бахтизина в 1980-х гг. при университете

было открыто конструкторское бюро «Заряд» (но от его руководства Рауф Загидович отказался, чтобы больше времени посвящать фундаментальной науке).

В конце 1980-х–начале 1990-х гг. группа Рауфа Загидовича стала региональным лидером по использованию вычислительной техники в научных исследованиях. Запомнилось программное выступление Р. З. Бахтизина по проблемам компьютеризации научной и учебной деятельности, сделанное им, по просьбе проф. Р. Н. Гимаева, на совете ректоров Республики Башкортостан. В начале 1980-х гг. по инициативе Рауфа Загидовича в Башкирском госуниверситете была создана кафедра радиофизики и электроники, которую он возглавлял на протяжении 40 лет.



Доцент Р.З. Бахтизин с учениками и сотрудниками кафедры, середина, 1980-х гг.



Слева направо: сидят – Е. Прокшина, Р.З. Бахтизин, С.С. Гоц; стоят – Б. К. Сушко, Ю. М. Юмагузин, начало 1990-х гг.



Профессора кафедры физической (слева направо): д.т.н. Б.К. Сушко, д.ф.-м.н. С.С. Гоц, д.ф.-м.н. Р. З. Бахтизин, д.т.н. В. М. Сапельников, 2001 г.

В 1990 г. Р. З. Бахтизин защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. В начале 1990-х годов им был определен новый вектор в исследованиях – нанофизика и нанотехнологии. Его научная группа была в числе пионеров в нашей стране по внедрению новых физических методов исследования нанообъектов – методов сканирующей зондовой микроскопии. Благодаря его целенаправленным усилиям, при поддержке руководства университета в Башкирском университете появился Научно-образовательный центр «Нанофизика и нанотехнологии», оснащенный самым передовым на тот момент оборудованием.

В авторитетных зарубежных и отечественных научных журналах им опубликовано более 300 научных работ, издано 5 монографий и получено более 30 патентов. Глубокий уровень его познаний отражают научные обзоры, которые он публиковал в соавторстве в журнале «Успехи физических наук» [2–4]. Интересное применение результаты Р. З. Бахтизина нашли в учебнике по экологии «Nanotechnology in Environmental Science», для которого он сделал вклад во вторую главу «Атомно-масштабные исследования адсорбции молекул фторированных фуллеренов на поверхности полупроводников» [5].

Рауфа Загидовича отличали широкие научные контакты с иностранными учеными, зарубежными научными и образовательными центрами.

В годы Великой Отечественной войны Уфа была тыловым городом, сюда перебрасывали людей с Европейской части СССР, в том числе из Крыма, что проявилось в интернациональном характере Уфы. Это повлияло и на мировоззрение Рауфа Загидовича: он впоследствии легко завязывал контакты с учеными разных стран.

Он неоднократно выезжал за рубеж в качестве приглашенного лектора и для проведения совместных экспериментов в ведущих университетских центрах Японии, США, Франции, Китая, Швеции, Германии, Великобритании, Южной Кореи, Польши.

Думается, особенно памятной для него была встреча со швейцарским физиком Генрихом Рорером (Heinrich Rohrer), получившим в 1986 г. Нобелевскую премию за изобретение сканирующего туннельного микроскопа.

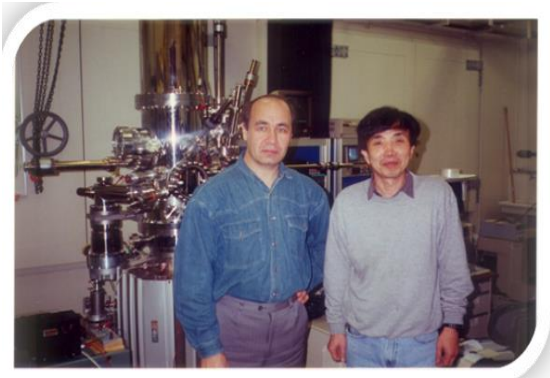


Г. Рорер и Р. З. Бахтизин, Швейцария, 2000-е гг.

Как специалиста высокого уровня в своей научной области, профессора Бахтизина постоянно приглашали для экспертной оценки научно-исследовательских результатов. Он являлся членом редколлегии высокорейтинговых международных научных журналов (Journal of Micromechanics & Microengineering, Nanotechnology & Advanced Microscopy, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials и др.), членом руководящих комитетов Международного общества по полевой эмиссии IFES и Международного общества по вакуумным электронным источникам IVESC, Сопредседателем 43-го Международного симпозиума по полевой эмиссии (Москва, июль 1996) и 4-й Международной конференции по вакуумным электронным источникам (Саратов, июль 2002 г.).



Проф. Р.З. Бахтизин (в центре) – приглашенный лектор в Институте электроники (Пекин)



Проф. Р.З. Бахтизин – исследователь в университете Тохоку, Япония



Всероссийская конференция «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники». Президиум (слева направо): д.т.н. проф. В. А. Быков, д.т.н. проф. В. А. Сергеев, д.ф.-м.н. проф. Р. А. Якшибаев, д.ф.-м.н. проф. Р. З. Бахтизин, д.ф.-м.н., проф. А. А. Бухараев (Уфа, 1916 г.)



Всероссийская конференция с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники». Встреча приглашенных лекторов с руководством Башкирского государственного университета, Уфа, 2018 г.

Труд Рауфа Загидовича по достоинству оценен в республике и стране. Он является заслуженным работником высшей школы Российской Федерации, заслуженным деятелем науки, лауреатом Государственной премии Республики Башкортостан в области науки и техники.

Награжден серебряной медалью ВДНХ СССР, почетным знаком «Изобретатель СССР», Почетной грамотой Минобрнауки РФ, дипломами Федерального агентства по науке и инновациям.



На церемонии награждения Государственной премией Республики Башкортостан в области науки и техники, 2006 г.



Профессор Р.З. Бахтизин, доцент Т. И. Шарипов и аспиранты Евразийского национального университета им. Л. Н. Гумилева (Казахстан) Т. Алибай и Г. Байрбаева, проходящие стажировку на кафедре физической электроники и нанofизики Уфимского университета науки и технологий, 2022 г.

Время движется, а история остается. Трудно переоценить значительный научный и педагогический вклад Рауфа Загидовича Бахтизина, уважаемого и известного ученого, организатора и популяризатора науки и радиофизического образования в России.

В памяти своих друзей, коллег и учеников он останется как улыбчивый, доброжелательный, справедливый, добросовестный и приятный человек, преданный своему делу, целеустремленный и компетентный исследователь.

Р. З. Бахтизин – друг и коллега саратовских физиков

В. М. Аникин

Период моего знакомства с Рауфом Загидовичем Бахтизиным сложился из нескольких этапов. Содержание первого этапа составило в 1980-х гг. знакомство с его научными публикациями в области исследования шумовых свойств полупроводниковых автоэммиттеров. В нашей монографии «Статистические модели квазирегулярных радиофизических и оптических структур» 1991 г. [6], изданной вслед за защитой кандидатской диссертации, была глава «Спектрально-корреляционный анализ структуры, эмиссионных и шумовых свойств автоэлектронных катодов», которая содержала ссылки на результаты Р. З. Бахтизина и С. С. Гоца, полученные при изучении фликкер-шума в полупроводниковых автокатадах.

С течением времени, по мере развития тематики, я знакомился с другими работами Рауфа Загидовича. Они вызвали восхищение высоким современным экспериментальным уровнем исследований, проводившихся им и его сотрудниками-учениками в Башкирском университете, а также наличием содержательной базы для моих собственных работ. Развитие тематики в области флуктуационных и надежности свойств автоэлектронных катодов отразилось впоследствии, в частности, на значительном увеличении количества ссылок на работы Р. З. Бахтизина в моей докторской диссертации.

Это была своего рода «латентная» фаза знакомства с выдающимся физиком.

К 1990-м годам Р. З. Бахтизин приобрел статус крупного ученого в области туннельной микроскопии и спектроскопии атомных структур на поверхности металлов и полупроводников, был участником крупнейших международных научных конференций по микроэлектронике. Тогда он познакомился с профессором Николаем Ивановичем Сеницыным, который руководящую научную деятельность в Саратовском филиале Института

радиотехники и электроники (ныне им. В. А. Котельникова) РАН совмещал с работой в Саратовском государственном университете. Николай Иванович рассказывал о Рауфе Загидовиче в самых превосходных тонах – и как об ученом, и как о человеке.

На едином научно-информационном поле (вторая фаза знакомства) я «встретился» с Рауфом Загидовичем в 1994 г. на Седьмой международной конференции по вакуумной микроэлектронике (Гренобль, Франция) [7]. На этой конференции был представлен сенсационный доклад из России, открывший эру углеродных автоэмиссионных эмиттеров на основе тонкопленочных углеродных наноструктур. Видимо, это обстоятельство, наряду с другими резонансными пионерскими докладами сотрудников Института радиотехники и электроники РАН и его филиала в Саратове на конференциях по микроэлектронике ранее, в конце 1980-х гг. [8], привели к идее о проведении представительной научной конференции по электронике в Саратове. В 1988–1989 гг. на Первой и Второй международных конференциях по вакуумной микроэлектронике, проходивших в США и Англии, Н. И. Сеницын представил результаты разработки принципиально нового класса миниатюрных низковольтных источников СВЧ колебаний на базе ламп обратной волны, способных работать в экстремальных условиях сильного радиационного излучения, сильных СВЧ электромагнитных полей, высоких и низких температур и одновременно не уступающих по уровню миниатюризации полупроводниковым устройствам аналогичного назначения. Эти приборы нашли широчайшее применение. К примеру, с их использованием впервые была осуществлена «мягкая» посадка космического аппарата на Луну, проводилась стыковка космических кораблей.

Вскоре из серии международных конференций по микроэлектронике выделилась специальная серия международных конференций по вакуумным источникам электронов – International Vacuum Sources Conference (IVESC) под эгидой IEEE (Institute of

Electrical and Electronics Engineers). Первая из них прошла в 1996 г. в Эйндховене (Нидерланды). Были созданы американская, азиатская и европейская секции международного иницирующего комитета (International Steering Committee). Идея проведения конференции IVESC именно в Саратове была оглашена на Второй конференции IVESC в Японии (Цукуба) в 1998 г. Окончательное решение о месте проведения конференции оставалось за международным инициативным комитетом, которое принималось на очередной конференции IVESC летом 2000 г. в США. Однако основным участникам конференции от России, в том числе члену Президиума РАН Ю. В. Гуляеву, профессору Саратовского государственного университета Н. И. Синицыну и профессору Башкирского университета Р. З. Бахтизину в выдаче виз было отказано.

«Прорвавшийся» на конференцию в США профессор МФТИ Е. П. Шешин срочно запросил рекламные материалы по Саратову. Соответствующие тексты и фотографии в разгар конференции нами были отправлены по электронной почте и удовлетворили Steering Committee, который соответствующее решение о проведении конференции в Саратове направил в IEEE.

История организации и проведения конференции IVESC в Саратове 15–19 июля 2002 г. описана в статье «IVESC в Саратове» [6]. Конференция, по всеобщему признанию, прошла успешно. Подтверждением этого служит, например, письмо участника из США.

July 25, 2002

**Dear Academician Gulyaev,
Professors Bakhtizin, Sinitsyn, Anikin,**

I would like to take this opportunity to thank you for organizing a **superconference**. The technical content was of very high quality, and the social program gave me an appreciation for Russian culture. It was a pleasure to meet and talk to you and many of your colleagues who have not attended the previous IVESC conferences. I found the people of Saratov to be very friendly and helpful. I hope that someday I can visit Saratov again.

I would like to give special thanks to Dr. Anikin, without whose help I would not have been able to attend. I would also like to thank Dr. Lazerson once again for translation and explaining many aspects of Russian culture to me. My congratulations to you all and everyone else involved in making IVESC2002 a successful conference, and a fantastic experience.

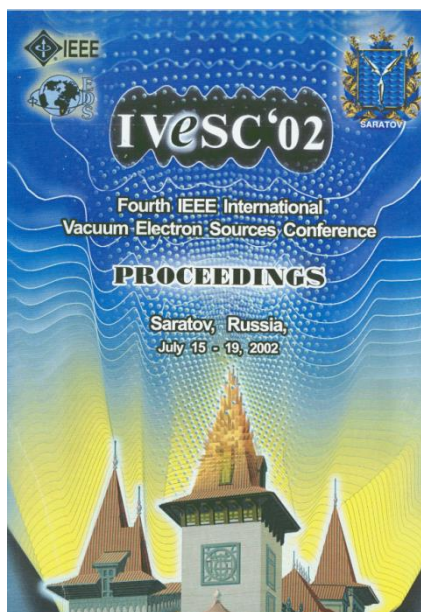
Best Regards,

Roy Justice,

Technology Service Corporation,
Bloomington, IN, USA

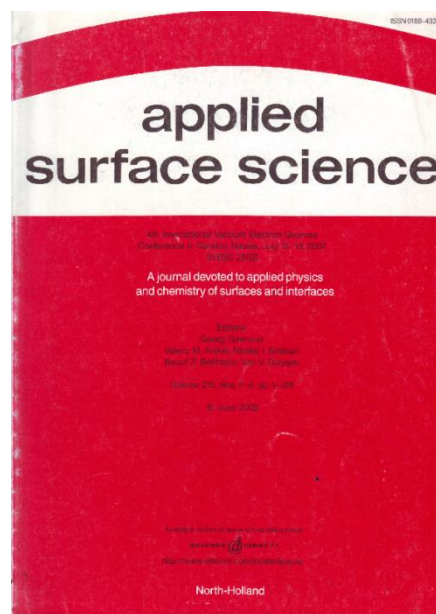


Члены Национального организационного комитета IVESC'02
В. М. Аникин, секретарь конференции, и Р. З. Бахтизин,
председатель Европейской секции Steering Committee IVESC



Титульный лист сборника тезисов докладов IVEESC'02. Художник Д. В. Соколов шпиль здания Саратовской консерватории стилизовал под острыйные автоэммитеры

А теперь можно рассказать о выдающейся роли Р. З. Бахтизина в организации в Саратове конференции IVEESC'02. В разгар лета 2001 г. в Саратов пришло письмо из IEEE с просьбой подтвердить возможность проведения международной конференции. В тот момент я как предполагаемый ученый секретарь конференции не брался сам решать такой вопрос. К счастью, я смог связаться с Рауфом Загидовичем, отправив ему письмо по электронной почте. Я спрашивал, что нужно отвечать: беремся ли мы проводить конференцию или по каким-то причинам сделать это не сможем. Рауф Загидович ответил: конференцию проводить, она дважды одобрена на заседаниях IVEESC, у нас нет причин, чтобы не проводить. Таким образом, Р. З. Бахтизин принял ключевое решение (по существу – взял на себя ответственность) и немедленно развил информационную деятельность, воспользовавшись своими обширными международными связями... Чуть позже Н. И. Сеницын на всех необходимых уровнях решил весь пласт вопросов (финансовые, юридические, транспортные, технические, выпуск сувениров, культурная программа и др.), связанные с проведением



Специальный выпуск журнала «Applied Surface Science» со статьями участников конференции IVEESC'02

крупной *международной* конференции. Достаточно сказать, что ее заседания проходили в Доме правительства Саратовской области.

В процессе работы конференции Рауф Загидович играл одну из главных ролей. Символически это отражено на итоговой фотографии: он стоит в центре первого ряда, рядом с академиком Ю.В. Гуляевым и профессором Н. И. Сеницыным. Здесь же и активный участник и организатор конференции немецкий физик Георг Гэртнер, обеспечивший редактирование и издание трудов конференции в международном журнале «Applied Surface Science» в 2003 г. [9] Имя Р. З. Бахтизина – на обложке этого журнала. Информация о других отечественных и зарубежных участниках конференции помещена в [10].

Так начался период нашего очного знакомства с Рауфом Загидовичем. Его контакты с саратовскими исследователями не прерывались все последующее время. В диссертационном совете по физико-математическим наукам он выступил в роли официального оппонента по двум докторским диссертациям и нескольким кандидатским работам. Состоялась защита диссертации его учеником в Саратове.



Участники 4-й Международной конференции по вакуумным источникам электронов.
Дом Правительства Саратовской области, 19 июля 2002 г.

Рауф Загидовича заботила проблема научной преемственности, и он приглашал на организовавшиеся им молодежные научные конференции в Уфе сотрудников и студентов Саратовского университета. Вот одно из таких приглашений, которое характеризует и подвижническую деятельность Рауфа Загидовича:

Тема: V Всероссийская конференция по микро- и нанoeлектронике

От: "Rauf Bakhtizin" <raouf@bsunet.ru>

Дата: Вт, 27 Фев 2018, 08:24

Кому: АНИКИН Валерий Михайлович

AnikinVM@info.sgu.ru

Уважаемый Валерий Михайлович!

Сообщаю, что я опять выиграл грант РФФИ на организацию и проведение V Всероссийской молодежной конференции по микро- и нанoeлектронике с международным участием (предыдущие четыре были с успехом проведены мною же в Уфе). Извещение о конференции прилагается к данному письму в виде pdf-view файла.

Настоятельно рекомендую направить для участие в её работе свою талантливую молодежь, в частности, Ваших студентов-магистрантов и участников Вашей магистерской программы. Им это будет очень полезно, так как ведущими лекторами приглашены крупные ученые: Prof. H. Shigekawa (Tsukuba University, Japan), академик РАН К.М. Салихов (Казань) и др. В любом случае тезисы ваших докладов будут приняты и опубликованы, и ваши ребята смогут включать их в список своих публикаций, а также ссылаться на них в авторефератах диссертаций.

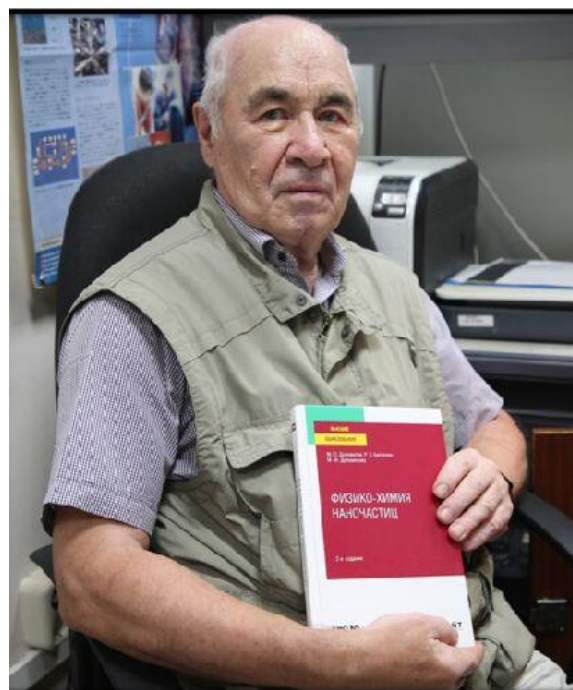
С искренним уважением и надеждой видеть Вас в Уфе,

Р. Бахтизин

PS. В расписании есть удобный скорый поезд Саратов – Уфа.

Параллельно уфимским конференциям в Саратове (в Саратовском филиале Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН) организовывались научные конференции для молодых ученых по актуальным проблемам микро- и нанoeлектроники. Р. З. Бахтизин неоднократно приезжал на эти конференции и делал доклады о методах

сканирующей туннельной микроскопии поверхностных физико-химических свойств полупроводников.



Р. З. Бахтизин со своей книгой «Физико-химия наночастиц», переизданной в 2025 г.

Благодаря Р. З. Бахтизину между университетами и научными организациями Уфы и Саратова и Уфы установились научные и дружеские связи. Рауф Загидович регулярно встречался с сотрудниками Саратовского филиала Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН и Саратовского государственного университета, постоянно созванивался и обменивался с ними информационными письмами и праздничными поздравлениями.

Рауф Загидович Бахтизин был не только высокопрофессиональным ученым и педагогом. В его характере подкупали выдержанность, доброжелательность, уважительность, а также человеческая надежность, смелость брать на себя ответственность в критические моменты. Его обаяние не могло не вызвать искренних симпатии и уважения знавших его людей.

Таким он и остается в памяти...

Библиографический список

1. *Абубакиров А. Х.* Из истории татарского педагогического училища // Записки краеведов: очерки, статьи, воспоминания, документы, хроника. Горький: Волго-Вятское книжное издательство, 1985. Вып.7. С. 67 – 79.
2. *Бахтизин Р. З., Хашишуме Т., Вонг Ш., Сакурай Т.* Сканирующая туннельная микроскопия фуллеренов на поверхности металлов и полупроводников // УФН. 1997. Т.167. № 3. С. 289–307. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199703e.0289>
3. *Бахтизин Р. З., Хашишуме Т., Шуе Ч.-К., Сакурай Т.* Атомные структуры на поверхности GaAs(001), выращенной методами молекулярно-лучевой эпитаксии // УФН. 1997, Т.167, № 11. С.1227–1241. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199711f.1227>
4. *Бахтизин Р. З., Шуе Ч.-Ж., Шуе Ч.-К., Ву К.-Х., Сакурай Т.* Сканирующая туннельная микроскопия гетероэпитаксиального роста пленок III-нитридов // УФН. 2004. Т.174, № 4. С. 383–405. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0174.200404d.0383>
5. *Bakhtizin R. Z., Oreshkin A. I.* Atomic Scale Study of Fullerene Molecules on Semiconductor Surfaces // Nanotechnology in Environmental Science / Hussain Ch. M., Mishra A. K., eds. Weinheim : Wiley-VCH, 2018. Ch. 2. P. 19 – 38.
6. *Голубенцев А. Ф., Аникин В. М., Клименко В. Г.* «Статистические модели квазирегулярных радиофизических и оптических структур». Саратов : Издательство Саратовского университета, 1991.116 с.
7. *Goloubentsev A.F., Anikin V.M.* Markov models of emission distortions for matrix cathodes // Proceedings of the 7th International Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'94, Grenoble, 1994. Revue "Le Vide, les Couches Minces," Supplement au No. 271, Mars-Avril, 1994, p. 147 – 150.
8. *Gulyaev Yu. V., Chermozatonskii L. A., Kosakovskaya Z. Ya., Sinitsyn N. I. et al.* // Proceedings of the 7th International Vacuum Microelectronics Conference, IVMC'94, Grenoble, 1994, Revue "Le Vide, les Couches Minces," Supplement au No. 271, Mars-Avril, 1994, p. 322.
9. 4th International Vacuum Electron Sources Conference in Saratov, Russia, July 15 – 19, 2002 (IVESC 2002) / Georg Gärtner, Valery M. Anikin, Nikolai I. Sinitsyn, Raouf Z. Bakhtizin, Yuri V. Gulyaev, eds. // Applied Surface Science. 2003. Vol. 215. Nos. 1–4. P. 1–318.
10. *Аникин В. М.* IVESC в Саратове // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2007. Т. 7, вып. 1. С. 75 – 80. EDN: JVJPZF

REMEMBERING RAUF Z. BAKHTIZIN

T. I. Sharipov, V. M. Anikin

Abstract. These memoirs are dedicated to Rauf Zagidovich Bakhtizin, a professor at Bashkir State University and Doctor of Physical and Mathematical Sciences, who passed away on September 10, 2025, at the age of 82. He was an outstanding physicist, a world-class specialist in the fields of field-emission electronics and the physics of surface nanostructures. He was distinguished by his high scientific activity and was well known in Russia and throughout the world. The first part of the article (by T. Sharipov) presents the main milestones in R. Z. Bakhtizin's biography, relating to his entry into high-level science and his professional teaching, research, and organizational activities. The second part of the publication (by V. Anikin) illustrates episodes of his friendly and scholarly interactions with Saratov scientists.

Keywords: Rauf Z. Bakhtizin, Bashkir State University, Ufa University of Science and Technology, Saratov State University

Сведения об авторах

Шарипов Талгат Ишмухамедович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры электроники и физики наноструктур Уфимского университета науки и технологий; e-mail: sha-t@ya.ru

Аникин Валерий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный работник высшей школы РФ, профессор кафедры радиотехники и электродинамики Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского; e-mail: AnikinVM@yandex.ru

PERSONALIA

К 75-летию профессора М. В. Давидовича

18 февраля 2025 г. профессору кафедры радиотехники и электродинамики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, доктору физико-математических наук Михаилу Владимировичу Давидовичу исполнилось 75 лет. По случаю этого юбилея в сборнике «Вопросы прикладной физики» публикуется авторский обзор его научных работ – как индивидуальных, так и в рамках научных коллективов.

Редакционная коллегия сборника «Вопросы прикладной физики»



М. В. Давидович

РАБОТЫ В ОБЛАСТИ ФИЗИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ, ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ, ПЛАЗМОНИКИ И ФОТОНИКИ

М. В. Давидович

Аннотация. В статье кратко обсуждаются работы автора в области физической электроники, электродинамики, плазмоники и фотоники и анализируются полученные результаты за последние несколько лет.

Ключевые слова: полевая эмиссия, эмиссионная электроника, уравнение Шредингера, уравнения Пуассона, баллистический транспорт, перенос тепла, плазмон, дисперсионные силы, нанoeлектроника

Термополевая эмиссия в наноструктурах [1–16]

В последнее время актуальными материалами электронной техники становятся квантовые гетероструктуры в виде чередования наноразмерных квантовых ям и барьеров. Они позволяют получать весьма большие плотности тока полевой эмиссии [1–9], перспективны для использования в устройствах термополевой эмиссии [2, 3] и для создания нанoeлектронных устройств на квантовых ямах. В наших работах рассмотрены эффекты резонансного туннелирования, когда для некоторых энергий электронов барьер для них полностью прозрачен. Предложен итерационный метод определения квазистационарных уровней энергии. Основные полученные результаты заключаются в следующем.

1. Теоретически показано, что в квантовых резонансно-туннельных гетероструктурах (КРТГС) возможно достижение плотностей тока порядка 10^{13} – 10^{14} А/м² [1–8]. Рассмотрены одноямные и двухъямные КРТГС. Физическими причинами, ограничивающими величину тока, являются разогрев структур до расплавления и пространственный заряд. Снять проблему разогрева можно, используя низкие криогенные температуры (например, жидкий гелий) и сверхпроводящие электроды. Задача о разогреве при комнатной температуре решается с учетом теплоотвода [2–7]. При этом начальная комнатная температура электродов повышается за счет большого туннельного тока, и они разогреваются от нескольких сотен до двух тысяч градусов К. Возникает термополевая эмиссия. Дальнейшее повышение напряжения и тока может привести к взрывной эмиссии. Задача теплоотвода решается с использованием массивного термостата при размерах структуры порядка нескольких нм. Решена задача подбора размеров структуры с учетом баланса тепла и ограничением на температуры электродов. Рассмотрен баллистический фононный перенос тепла и диффузионно-баллистический перенос.

Решена задача о влиянии пространственного заряда на эмиссию на основе уравнения Пуассона. Показано, что при плотности тока 10^{12} А/м² пространственный заряд повышает барьер на доли эВ, что можно компенсировать увеличением напряжения. При больших плотностях тока пространственный заряд повышает барьер на несколько эВ и является ограничителем тока. Вопросы нагрева и теплоотвода снимаются при использовании низких температур.

2. Рассмотрены эффекты проникновения поля в катод при его покрытии полупроводниковыми и алмазографитовыми пленками (структурами). На основе этого объяснено явление низкопороговой эмиссии [9,10]. Наиболее хорошими и технологическими являются покрытия из CVD-алмаза. Возможны структуры в виде слоев графена и углеродных нанотрубок (УНТ). Малая концентрация зарядов в пленке полупроводника на катоде приводит к длине экранирования Дебая, сравнимой с толщиной пленки. В этом случае поле проникает в пленки на катоде. Проникновение поля приводит к ускорению набегающих на барьер электронов. Они приобретают энергию порядка 1 эВ, что эквивалентно снижению барьера и повышению его прозрачности. Для диэлектрических и полупроводниковых пленок получено решение уравнения Пуассона, определено проникающее поле и снижение барьера.

3. Предложены новые автоэмиссионные структуры, покрытые с двух сторон алмазографитовой пленкой, для формирования в электронных приборах интенсивного ленточного электронного пучка [11]. Эти структуры в виде длинных и широких катодов с двусторонней эмиссией, имеют с двух сторон диэлектрическую пленку в виде барьера и сетку. Электроны туннелируют сквозь сетку и поворачиваются на 90 градусов в электрическом поле в направлении вытянутого катода к аноду. Эмиссия с двух сторон складывается в ленточный электронный пучок.

4. Решен вопрос о времени туннелирования электронов и фотонов через

структуры с потенциальными барьерами [12–14]. Получено строгое решение на основе уравнения Шредингера. Решение задачи получено путем разложения волновой функции в ряд с использованием зависящих от времени коэффициентов. Аналогичная задача для нелинейного туннелирования электромагнитной волны через слой плазмы решена в [13]. Показано, что нелинейное туннелирование увеличивает задержку волны по сравнению с линейным случаем. Аналогичная задача о нестационарном резонансном туннелировании в диодной двухбарьерной структуре решена в работе [15] на основе пропагаторной функции Грина квантовой механики и решения интегрального уравнения. Метод позволяет моделировать резонансно-туннельные диоды.

5. Найдено точное решение уравнения Шредингера для задачи туннелирования в диоде с линейным потенциалом [16]. Задача решена с использованием функций Бесселя, функций Эйри, введенных специальных функций, что позволяет сократить вычисления для MID-диодов (среднего инфракрасного диапазона) при больших анодных напряжениях, когда потенциал почти треугольный.

6. Получены новые интегральные уравнения для нестационарной задачи на основе нестационарного уравнения Шредингера [15].

2. Электродинамика, плазмоника и фотоника [17–41]

В течение последних нескольких лет автор (совместно с аспирантами К. А. Саяпиным, Р. Э. Манукяном, И. А. Корневым) традиционно работал в области электродинамики. Ряд направлений исследования освещен в обзоре [17], посвященном методу объемных интегродифференциальных уравнений. Рассмотрены задачи дифракции, задачи на собственные значения (колебания резонаторов, волны в волноводах, направляющих или волноведущих структурах, плазмоны). Рассмотрены задачи о локализованных плазмонах, включая фуллерены, о собственных колебаниях

резонаторов, получены и решены дисперсионные уравнения для поверхностных плазмонов в графене, фуллеренах, гиперболических метаматериалах, тонких пленках в магнитном поле [17–33]. Решен ряд нелинейных прикладных задач, в том числе по фильтрации помех электротранспорта [34–36]. Получены условия подавления прохождения ИК излучения через оконные стекла при выполнении на них структур из метаматериалов (при этом стекла прозрачны в видимом свете) [27, 37]. Рассмотрены и развиты методы гомогенизации периодических метаматериалов [38–40]. Гомогенизация осуществлена на основе строгого решения интегральных уравнений с периодическими функциями Грина, вычислением усредненных полей, индукций и векторов поляризации. Показано, что магнитный отклик метаматериалов в виде колечек, спиралек и других проволочных структур с током всегда нелокальный. Причем на низких частотах он диамагнитный с положительной магнитной проницаемостью, близкой к единице. Показана ограниченность гиперболической дисперсии потерями, нелокальностью и пространственной дисперсией, что не позволяет получать очень большие по модулю волновые векторы. Рассмотрено давление света в метаматериалах [41]. Показано, что давление на любое тело (частицу) всегда положительное, т.е. направлено от источника поля, что опровергает утверждение В. Г. Веселаго об отрицательном давлении. Однако давление на слой метаматериала может быть как положительным, так и отрицательным. Найдены условия этого.

Получены следующие результаты.

1. Сформулированы дисперсионные уравнения дисперсии и рассчитаны характеристики поверхностных и локализованных плазмонов в графене, фуллеренах, гиперболических метаматериалах, тонких пленках в магнитном поле [17–33].

2. Развиты модели гомогенизации метаматериалов на основе интегральных уравнений и формул смешения [28–33].

3. Определены условия отрицательного давления света в метаматериалах [34].

3. Работы в области флуктуационной электродинамики [42-47]

В работах по флуктуационной электродинамике рассматривались структуры типа графена, УНТ, диэлектрических пластин конечной толщины. В монографии [42] и работе [43] предприняты попытки рассмотреть дисперсионное взаимодействие с общих позиций для произвольных тел. Получены следующие результаты.

Развита теория сил Казимира-Лифшица на основе принципа аргумента по модели Ван-Кампена – Шрамма [44]. Показано, что эти результаты соответствуют формуле Лифшица и обобщают ее на произвольные слоистые структуры.

Результаты расчетов взаимодействия графеновых слоев приведены в [44]. Во всех случаях при малых расстояниях сила (давление)

стремиться к постоянному значению. При больших расстояниях сила убывает как $1/d^4$.

Рассчитаны тепловое излучение графена, его корреляционные соотношения [45], дисперсионные силы и радиационная передача тепла между двумя углеродными нанотрубками [46, 47].

Заключение

В статье охарактеризованы основные направления исследований автора, в том числе в рамках творческих коллективов, и сформулированы основные полученные результаты. Список публикаций охватывает все основные работы за рассмотренный период, хотя и не является полным.

Работы выполнялись при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий, в частности государственного задания № FSRR-2023-0008.

Библиографический список

1. Давидович М. В. Особенности вакуумного резонансного туннелирования на одноямном и двухъямном барьерных потенциалах // ЖТФ, 2022. Т. 92, вып. 9. С. 1387–1401 [*Davidovich M. V. Peculiarities of vacuum resonant tunneling at one- and two-well barrier potentials // Tech. Phys. 2022. Vol. 67. P. 361–375*]. <https://doi.org/10.1134/S1063784222060019>
2. Давидович М. В. Туннелирование и термополевой ток в диодной структуре металл–диэлектрик–металл // ЖТФ. 2025. Т. 95, вып. 6. С. 1073–1086. <https://doi.org/https://doi.org/10.61011/JTF.2025.06.60455.219-24>
3. Давидович М. В. Термополевая эмиссия в наноструктурах с резонансным туннелированием // ЖТФ. 2024. Т. 94, вып. 1. С. 32–47. <https://doi.org/10.61011/JTF.2024.01.56899.170-23>
4. *Davidovich M. V., Nefedov I. S., Glukhova O. E., Slepchenkov M. M., Rubi J. M.* Nanoscale nonlocal thermal transport and thermal field emission in high-current resonant tunnel structures // *Scientific Reports*. 2025. Vol. 15, no. 1. Art. 3521. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-87177-3>
5. *Davidovich M. V.* Maximal field emission current densities in nanostructures // *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025. Vol. 25, iss. 3. P. 266–276. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-3-266-276>
6. *Davidovich M. V., Nefedov I. S., Glukhova O. E., Slepchenkov M. M., Rubi J. M.* Field emission in vacuum resonant tunneling heterostructures with high current densities // *Scientific Reports*. 2023, Vol. 13. Art.19365. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-44900-2>
7. Давидович М. В. Туннелирование и термополевой ток в диодной структуре металл–диэлектрик–металл // ЖТФ. 2025. Т. 95, вып. 6. С. 1073–1086. DOI: <https://doi.org/10.61011/JTF.2025.06.60455.219-24>
8. *Davidovich M. V., Nefedov I. S., Glukhova O. E., Slepchenkov M. M.* Toward the theory of resonant-tunneling triode and tetrode with CNT–graphene grids // *J. Appl. Phys*, 2021. Vol. 130. Art. 204301. <https://doi.org/10.1063/5.0067763>
9. *Davidovich M. V., Nefedov I. S., Yafarov R. K.* Field emission in diode and triode vacuum nanostructures // *J. Appl. Phys*, 2025. Vol. 137, iss.13. Art. 134304. <https://doi.org/10.1063/5.0251401>
10. Давидович М. В., Яфаров Р. К. Импульсные и статические автоэмиссионные ВАХ углеродных нанокластерных структур: эксперимент и его интерпретация // ЖТФ. 2019. Т. 89, вып. 8. С. 1282–1293. <https://doi.org/10.21883/JTF.2019.08.47905.402-18>
11. Давидович М. В. Сильноточная полевая эмиссионная наноструктура с ленточным пучком // Письма в ЖТФ. 2024. Т. 50, вып. 16. С. 22–25. <https://doi.org/10.61011/PJTF.2024.16.58533.19626>

12. Давидович М. В., Нефедов И. С. О временах жизни квазистационарных уровней при туннелировании в резонансно-туннельной структуре // ЖЭТФ. 2025. Т. 167, вып. 1. С. 5–26. <https://doi.org/10.31857/S0044451025010018>
13. Давидович М. В. Нелинейное туннелирование электромагнитной волны через слой плазмы // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2021. Т. 21, вып. 2 С. 116–132. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-2-116-132>
14. Давидович М. В. О временах и скоростях нестационарного квантового и электромагнитного туннелирования // ЖЭТФ. 2020. Т. 157, вып.1. С. 44–62. <https://doi.org/10.31857/S0044451020010058> [Davidovich M. V. On times and speeds of time-dependent quantum and electromagnetic tunneling // JETP. 2020. Vol. 130. P. 35–51. <https://doi.org/10.1134/S1063776119120161>].
15. Давидович М. В. Нестационарное резонансное туннелирование в диодной двухбарьерной структуре // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 110, вып. 7. С. 465 – 473. [Davidovich M. V. Time-dependent resonant tunneling in a double-barrier diode structure // JETP Lett. 2019. Vol. 119, iss. 7. P. 472–480]. <https://doi.org/10.1134/S0370274X19190068>
16. Давидович М. В. Аналитическое решение одномерного уравнения Шредингера с линейным потенциалом // ФТП. 2024. Т. 58, вып. 12. С. 651–661. <https://doi.org/10.61011/FTP.2024.12.59825.6826>
17. Давидович М. В. Объемные интегродифференциальные уравнения в задачах дифракции и в задачах о собственных значениях (обзор) // Оптика и спектроскопия. 2022. Т. 130, вып. 10. С. 1520–1542. <https://doi.org/10.21883/EOS.2022.10.54863.3231-22>
18. Давидович М. В. Влияние пространственной дисперсии на плазмоны вдоль листов графена // ЖТФ. 2024. Т. 94, вып. 3. С. 385–399. <https://doi.org/10.61011/JTF.2024.03.57376.312-23>
19. Давидович М. В. Дифракция плоской волны на слое асимметричного гиперболического метаматериала // Письма в ЖТФ. 2023. Т. 49, вып. 1. С. 9–13. <https://doi.org/10.21883/PJTF.2023.01.54049.19196>
20. Давидович М. В. Комментарии к статье «Плазмоны в волноводных структурах из двух слоев графена» // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109, вып. 11. С. 804–805. <https://doi.org/10.1134/S0370274X19110146>
21. Давидович М. В. Анализ плазмонов и гомогенизация в плоскостойких фотонных кристаллах и гиперболических метаматериалах // ЖЭТФ. 2016. Т. 160, вып. 6. С. 1069–1083. <https://doi.org/10.1134/S106377611611025X>
22. Давидович М. В. Плазмоны в многослойных плоскостойких структурах // Квантовая электроника. 2017. Т. 47, № 6. С. 567–579. <https://doi.org/10.1070/QEL16272>
23. Давидович М. В. К электродинамике полупроводниковых магнитоплазменных волноводов // ФТП. 2024. Т. 58, вып. 6. С. 288–296 [Davidovich M. V. On the electrodynamics of semiconductor magnetoplasmonic waveguides // Semiconductors, 2024, Vol. 58, No. 6, 269 – 276]. <https://doi.org/10.61011/SC.2024.06.59449.6062>
24. Давидович М. В.. Локализованные плазмоны в проводящих наночастицах: метод поверхностного плазмонного резонанса // Оптика и спектроскопия, 2024. Т. 132, № 10. С. 1094–1104. <https://doi.org/10.61011/OS.2024.10.59425.6264-24>
25. Давидович М. В. Влияние пространственной дисперсии на плазмоны вдоль листов графена // ЖТФ. 2024. Т. 94, вып. 3. С. 385–399. <https://doi.org/10.61011/JTF.2024.03.57376.312-23>
26. Давидович М. В. Металлическая пленка на подложке в магнитном поле как магнитоплазменная замедляющая система СВЧ – ТГц диапазонов // Письма в ЖЭТФ, 2024. Т. 119, вып.3. С. 187–200 (2024). DOI: 10.31857/S1234567824030066 [Davidovich M. V. Metal Film on a Substrate in a Magnetic Field as a Microwave–Terahertz Magnetoplasmon Slowing System // JETP Lett. 2024. Vol. 119, iss. 3. P. 186–199. <https://doi.org/10.1134/S0021364023604177>].
27. Давидович М. В. Резонансное туннелирование фотонов в слоистых оптических наноструктурах (метаматериалах) // ЖТФ. 2023. Т. 93, вып. 4. С. 495–504. <https://doi.org/10.21883/JTF.2023.04.55037.275-22>
28. Давидович М. В. Локализованные плазмоны в сфероподобных фуллеренах и наночастицах с проводящей оболочкой: классический электродинамический подход // Квантовая электроника, 2019. Т.49, № 9. С. 868–877. <https://doi.org/10.1070/QEL16950>
29. Давидович М.В. Гиперболические метаматериалы: получение, свойства, применения, перспективы // УФН. 2019, Т. 189, № 12. С. 1250–1284. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2019.08.038643>
30. Давидович М. В. Анализ плазмонов и гомогенизация в плоскостойких фотонных кристаллах и гиперболических метаматериалах // ЖЭТФ. 2016. Т. 160, вып. 6. С. 1069–1083. <https://doi.org/10.1134/S106377611611025X>
31. Давидович М. В. Плазмон-поляритоны вдоль поверхности асимметричного гиперболического метаматериала // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2019. Т. 19, Вып. 4. С. 288–303. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2019-19-4-288-303>
32. Давидович М. В. Колебания, волны и дифракция на двумерных проводящих пленках: поверхностные иммитансные уравнения // Радиотехника. 2019. Т. 83, № 8. С. 15–29. [https://doi.org/10.18127/j00338486-201908\(12\)-03](https://doi.org/10.18127/j00338486-201908(12)-03)
33. Давидович М. В., Кобец А. К., Саяпин К. А. Возбуждение прямоугольного резонатора через окна связи в конвейерной установке СВЧ-нагрева // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2022. Т. 25, № 4. С. 88–99. DOI 10.18469/1810-3189.2022.25.4.88-99

34. Давидович М. В., Корнев И.А. Нелинейные и частотные свойства радиореакторов помехоподавления для электротранспорта // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2019. Т. 22, № 2. С. 30 – 36. <https://doi.org/10.18469/1810-3189.2019.22.2.30-36>
35. Давидович М. В., Тимофеев А. И., Корнев И. А., Явчуновский В. Я. Определение нелинейной индуктивности в статическом и динамическом режимах // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16. № 1. С. 33–43. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2016-16-1-33-43>
36. Давидович М. В., Тимофеев А. И., Корнев И. А. Излучательные свойства радиореакторов электротранспорта // Радиотехника. 2019. Т.83, № 7. С. 112–116. [https://doi.org/10.18127/j00338486-201907\(10\)-17](https://doi.org/10.18127/j00338486-201907(10)-17)
37. Давидович М. В., Корнев И. А. Оптические, ИК- и ТГц-экраны на основе слоистых структур металл–диэлектрик–полупроводник // Компьютерная оптика. 2019. Т. 43, № 5. С. 765– 772. <https://doi.org/10.18287/2412-6179-2019-43-5-765-772>
38. Давидович М. В. Диамагнетизм и парамагнетизм метаматериала из колец с током // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 108, вып. 5. С. 299–326. <https://doi.org/10.1134/S0370274X18170010>. [Davidovich M. V. Diamagnetism and paramagnetism of a metamaterial consisting of rings with a current // JETP Lett. 208. Vol. 108. P. 279–286. <https://doi.org/10.1134/S002136401817006X>].
39. Давидович М. В. Гиперболическая среда из проволочек конечной длины // ЖЭТФ. 2018. Т. 154, вып. 1 (7). С. 5–25. <https://doi.org/10.1134/S0044451018070015> [Davidovich M. V. Hyperbolic medium of finite-length wires. JETP. 2018. Vol. 127. P. 1–19. <https://doi.org/10.1134/S1063776118070178>].
40. Давидович М. В. Возможны ли изотропные метаматериалы и метаматериалы с отрицательными ϵ и μ ? // ЖЭТФ. 2021. Т. 159, вып. 2. С. 195–215. DOI: 10.1134/S1063776121020102.[Davidovich, M.V. Can isotropic negative permittivity ϵ and permeability μ metamaterials exist? // JETP. 2021. Vol. 132. P. 159–176. <https://doi.org/10.1134/S1063776121020102>].
41. Давидович М. В. Об отрицательном давлении света в диспергирующей среде // Оптика и спектроскопия, 2023. Т. 131, вып. 9. С. 1224–1235. <https://doi.org/10.61011/OS.2023.09.56609.3990-23>
42. Давидович М. В., Глухова О. Е. Дисперсионные взаимодействия макроскопических тел и графен-унт кластеров: классический электродинамический подход. М. : Русайнс, 2024. 171 с.
43. Давидович М. В. Дисперсионное взаимодействие тел произвольной формы // Радиотехника и электроника. 2022. Т. 67, № 10. С. 955–963 (К 85-летию Н.И. Синицына) [Davidovich M. V. Dispersion interaction between bodies of an arbitrary shape // JSTE. 2022. Vol. 67, no. 10. P. 1207–1215 (To the 85th Anniversary of N. I. Sinitsyn)]. <https://doi.org/10.1134/S1064226922100011>
44. Davidovich M. V. Dispersion interaction of two graphene sheets // arXiv. 2025. Art. 2508.17999. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2508.17999>
45. Давидович М. В., Глухова О. Е. Корреляционные соотношения для графена и его тепловое излучение // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2023. Т.23, вып. 2. С. 167–178. <https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-2-167-178>
46. Nefedov I. S., Davidovich M. V., Glukhova O. E., Slepchenkov M. M., Rubi J. M. Radiative heat transfer between two carbon nanotubes // Sci. Rep. 2022. Vol. 12. Art. 17930. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-22138-8>
47. Nefedov I. S., Davidovich M. V., Glukhova O. E., Slepchenkov M. M., Rubi J. M. Casimir forces between two carbon nanotubes // Phys. Rev. B. 2021. Vol. 104. Art. 085409. DOI:10.1103/PhysRevB.104.085409

WORK IN PHYSICAL ELECTRONICS, ELECTRODYNAMICS, PLASMONICS, AND PHOTONICS

M. V. Davidovich

Abstract. On February 18, 2025, Mikhail V. Davidovich, a professor in the Department of Radio Engineering and Electrodynamics at Saratov State University, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, turned 75. To mark this Anniversary, review of his research work (both solo and in collaboration with research team) is published.

This article briefly presents Davidovich’s work in physical electronics, electrodynamics, plasmonics, and photonics, obtained over the past several years.

Keywords: field emission, emission electronics, Schrödinger equation, Poisson equations, ballistic transport, heat transfer, plasmon, dispersion forces, nanoelectronics

Сведения об авторе

Давидович Михаил Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электроники Института физики Саратовского национального исследовательского университета имени Н. Г. Чернышевского. E-mail: davidovichmv@sgu.ru

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕРИАЛЫ ВАКУУМНОЙ ЭМИССИОННОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Крачковская Т. М., Якимович Ю. В., Кузнецова Ю. Р., Давыдова Е. А.

Влияние модификации вольфрамового порошка слоистыми нанокуглеродными частицами на его физические свойства и на конструктивные свойства катодной матрицы 3

Крачковская Т. М., Журавлев С. Д., Богачев Р. Ю., Тихомиров Д. А., Соляник В. А.

Исследование металлопористого катода М-типа после наработки методом сканирующей электронной микроскопии 8

Соляник В. А., Мирошниченко А. Ю., Якимович Ю. В.

Исследование распределения толщины пленки металлов, нанесенной с помощью ионно-плазменного метода, на поверхности металлопористого катода 14

НАНОТЕХНОЛОГИИ

Глухова О. Е., Колесниченко П. А.

Крупнозернистые модели: анализ, методика, моделирование 18

МЕТОДИКА

Слепченков М. М.

Методический «навигатор» для соискателей ученой степени 33

ОБРАЗОВАНИЕ

Слепченков М. М., Третьяк В. А.

Дефект двойной вакансии в графене (обзор) 39

Федоров А. М., Барков П. В., Саяпин К. А.

Микрополосковые полосно-пропускающие фильтры: перспективы внедрения в практикум по технике СВЧ 43

ИЗ ИСТОРИИ ФИЗИКИ

Шарипов Т. И., Аникин В. М.

Вспоминая Рауфа Загидовича Бахтизина 46

PERSONALIA. К 75-летию профессора М. В. Давидовича

Давидович М. В.

Работы в области физической электроники, электродинамики, плазмоники и фотоники 57

СОДЕРЖАНИЕ 63

Научное издание

ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ

Межвузовский научный сборник

Выпуск 32

Компьютерная верстка – *В. М. Аникин, О. А. Черкасова*

Изд. лиц. ЛР № 020305 от 19.02.97.
Формат 60 x 84 1/8. Бумага офсетная.
Усл.печ.л. 3,8. Уч.-изд.л. 3,4

Подписано в печать 14.01.2026.
Гарнитура Times. Печать офсетная
Тираж 100. Заказ 79

Издательство Саратовского университета. 410012, Саратов, ул. Астраханская, 83.
Отпечатано с оригинал-макета в издательстве «Саратовский источник»,
410080, г. Саратов, проспект Строителей, 36