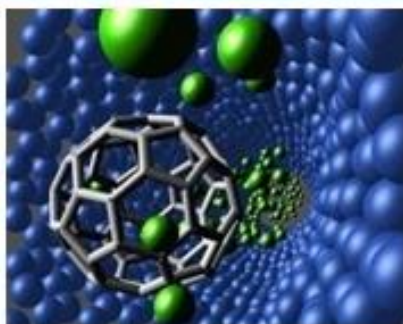




НАНО- И БИМЕДИЦИНСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ.

УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ. ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ.

Сборник научных статей



Саратов, 2016



**НАНО- И БИОМЕДИЦИНСКИЕ
ТЕХНОЛОГИИ.
УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ.
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ.**

Сборник научных статей



Саратовский национальный исследовательский государственный
университет имени. Н.Г.Чернышевского

**НАНО- И БИОМЕДИЦИНСКИЕ
ТЕХНОЛОГИИ.
УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ.
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ.**

*Посвящается 80-летию Саратовской области,
10-летию факультета нано- и биомедицинских технологий*

Сборник научных статей

Под редакцией профессора С.Б.Венига

Саратов, 2016

УДК [620.3+61:57] (082)

ББК 30я43 + 5я43

Н 25

ISBN 978-5-9908612-1-3

Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы. Сборник научных статей./ редакторы: О.Ю.Кондратьева, Д.В.Терин, Е.М.Ревзина; отв. ред. д.ф.-м.н. проф. С.Б.Вениг. – Саратов, СГУ 2016 - 160 с.: ил

В сборнике представлены материалы, отражающие различные научно-практические, методические направления деятельности, преподавателей, сотрудников и студентов факультета нано- и биомедицинских технологий Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского: физика, электроника и наноэлектроника, материаловедение и технологии материалов, биотехнические системы и технологии, управление качеством, инноватика.

Обобщается десятилетний опыт синтезирования инноваций в науке, технике и образовании Саратовского региона.

Сборник будет полезен для научных, инженерно-технических работников предприятий и научно-исследовательских организаций, а также аспирантов и студентов старших курсов соответствующих направлений подготовки.

Р е д а к ц и о н н а я к о л л е г и я:

доктор физико-математических наук, профессор С.Б.Вениг (отв. редактор),
редакторы - О.Ю.Кондратьева, к.ф.-м.н., доцент Д.В.Терин,
к.ф.-м.н. Е.М.Ревзина,

© 2016, СГУ

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	7
<i>Роках А.Г.</i>	8
ВСТУПЛЕНИЕ	
<i>Асташина А. М., Ревзина Е.М.</i>	9
ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ ИНТЕГРИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ МЕНЕДЖМЕНТА НА ПРЕДПРИЯТИИ АО «НЕФТЕМАШ»-САПКОН <i>Биленко Д.И., Терин Д.В., Белобровая О.Я., Галушка И.В., Жаркова Э.А., Полянская В.П., Сидоров В.И., Ягудин И.Т.</i>	15
ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МАЛЫХ ДОЗ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ <i>Вениг С.Б., Ворошилов С.А., Федоров В.Г.</i>	20
СТРАНЕ НУЖНЫ НОВЫЕ ДУБОВИКОВЫ! <i>Вениг С.Б., Чернова Р.К., Сержантов В.Г., Сплюхин В.П., Переспелова М.А., Селифонова Е.И., Наумова Г.Н., Щербакова Н.Н.</i>	26
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИИ ИОНОВ АМБРОКСОЛА ГЛАУКОНИТОМ <i>Иноземцева О.А., Яценок А.М., Стецюра И.Ю., Браташов Д.Н., Горин Д.А.</i>	30
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ И МИКРОКАПСУ- ЛЫ – ТЕХНОЛОГИЯ, СВОЙСТВА, ПРИМЕНЕНИЕ <i>Кожевников И.О., Митин А.В., Михайлов А.И.</i>	33
ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТОКОВУЮ НЕУСТОЙЧИ- ВОСТЬ В ПЛАНАРНО-ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУИЗОЛИРУЮЩЕГО АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ <i>Колесникова А. С., Сафонов Р.А., Мазепа М. М.</i>	41
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА УГЛЕРОДНОГО НАНОКОМПОЗИТА <i>Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М.</i>	47
QUANTUM WISE - МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ НАНОСТРУКТУР <i>Крылов С.Н., Смирнов Д.А., Безручко Б.П.</i>	56
УСИЛЕНИЕ ЭФФЕКТА ЛОЖНЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ ОСЦИЛЛЯТО- РАМИ ПРИ ВЫБОРКЕ С ОСРЕДНЕНИЕМ <i>Ломовцева К.С., Кондратьева Е.В., Кондратьева О.Ю.</i>	63
ПРИМЕНЕНИЕ АССИМЕТРИЧНОЙ КОПУЛЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ГАРАНТИЙНОГО СРОКА СЛУЖБЫ ЛЕГКОВЫХ АВТОМОБИЛЕЙ <i>Матов О. Р., Захаревич А. М., Маскаева С.А.</i>	69
ПРИМЕНЕНИЕ ВАКУУМНОГО НАПЫЛЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ СЛЕДОВ РУК <i>Михайлов А.И., Кабанов В.Ф.</i>	75
ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ПОЛУПРОВОД- НИКОВ ГРУППЫ А2В6 <i>Ревзина Е.М., Кожевников И. О., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В.</i>	86
ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ МЕТОДИКА ПРОЕКТИРОВАНИЯ	

ИНЖЕНЕРНЫХ 3D-моделей В КОМПАС-3D <i>Сказкина В.В., Боровкова Е.И., Шварц В.А.</i>	91
АНАЛИЗ ФАЗОВОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ И СПЕКТРАЛЬНЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ РЕГУЛЯЦИИ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТОЙ СИСТЕМЫ С ПОМОЩЬЮ ДВУХЧАСОВЫХ ЗАПИСЕЙ <i>Смирнов А.В., Галушка В.В., Гребенников А.И., Махди. О. С., Симаков В.В., Синёв И.В., Кисин В.В.</i>	96
МОРФОЛОГИЯ ПОЛИКРИСТАЛ-ЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА, ПОЛУЧЕННЫХ РАСПЫЛЕНИЕМ КОЛЬЦЕВОЙ МИШЕНИ <i>Стецюра С.В., Батищева А.С.</i>	101
КОРРЕЛЯЦИЯ И ВЗАИМОДОПОЛНЯЕМОСТЬ НАУКОМЕТРИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ <i>Стецюра С.В., Харитонова П.Г.</i>	108
ПОВЫШЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК СУЛЬФИДА КАДМИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ <i>Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М</i>	116
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС АТК КАК ИНСТРУМЕНТ РАСЧЕТА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КАРБИДА КРЕМНИЯ <i>Тугушева Г.Р., Кондратьева Е.В., Терин Д.В.</i>	121
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ РИСКОВ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ КОПУЛ <i>Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Мерданов М.К., Пономарев Д.В.</i>	127
НОВЫЕ ТИПЫ СВЧ-УСТРОЙСТВ НА ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ <i>Усанов Д.А., Скрипаль Ан.В., Добдин С.Ю., Кащавцев Е.О., Феклистов В.Б.</i>	138
ЛАЗЕРНАЯ АВТОДИННАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ МИКРО- И НАНОПЕРЕМЕЩЕНИЙ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ В МЕДИЦИНЕ <i>Усачев А.Н., Климова С.А.</i>	150
МЕТОД ЭЛЕКТРОФОРМОВАНИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НЕТКАНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОВОЛОКОН	

ВВЕДЕНИЕ

С каждым годом факультет нано- и биомедицинских технологий Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского становится все более значимой площадкой диалога представителей образования, науки и бизнеса. Без взаимного движения навстречу делового и научного сообществ, заинтересованной позиции государства невозможно реализовывать те смелые планы, которые стоят перед динамично развивающимися отечественными нано- и биомедицинскими технологиями.

Десятилетие факультета – лучшая иллюстрация того, что в России развиваются долгосрочные, стратегически важные проекты: построение наукоемкой инновационной экономики. Нано- и биомедицинские технологии становятся одними из ключевых элементов экономической модернизации – курса, приверженность которому сегодня подтверждает Саратовская область.

Материалы настоящего сборника носят междисциплинарный характер, всецело отражающий всю многогранность, широту и творческую атмосферу факультета, несущую значительный созидательный «заряд».

Сборник будет интересен студентам, обучающимся по направлениям: физика, электроника и наноэлектроника, материаловедение и технологии материалов, биотехнические системы и технологии, управление качеством, инноватика, а также магистрантам, аспирантам, инженерам и научным работникам, специализирующимся в области нано- и биомедицинских технологий.

НАНО – ЭТО НЕ МАЛОСТЬ

Роках А.Г.

Не нано-зарплату, не нано-успехи,
Возможно, что даже не нано-утехи,
Хочу пожелать, чтоб и в нано-объеме
Простор был такой, как на аэродроме.

Древняя восточная мудрость: великое в малом - обрела современное воплощение в создании «нано-факультета». Это древнее изречение поддержал своим прозрением и нобелевский лауреат Ричард Фейнман, который сказал, что там, внизу полным-полно места.

Наш факультет существует уже 10 лет и по-видимому прочно стоит на ногах. В связи с юбилеем уместно вспомнить, что все новое рождается в муках. Не обошлось без этого и здесь. Мы работали на физическом факультете, и нам неплохо там жилось. «Мы» - это 2 кафедры университета: кафедра физики твердого тела и кафедра физики полупроводников. Инициатива и идеология создания нового факультета исходила в основном от КФТТ.

Правда, окружающие говорили нам: у вас нет соответствующего оборудования, что вы будете делать на новом факультете? Ситуация напоминала коллективизацию и создание колхозов из маломощных крестьянских хозяйств. Эта система при всех своих недостатках, о которых сейчас любят говорить, выдержала испытание Великой войной. Многие зависело от отношения руководства. Как известно, советское правительство оснастило колхозы тракторами. Были созданы машинно-тракторные станции.

Аналогичная ситуация имела место и здесь. Первоначально планировалось создать новый факультет на базе мехмата. Но когда сотрудники и руководство факультета поняли, что это не совсем их специфика, организацию нового факультета передали на физфак, а при университете несколько позже был организован образовательно-научный

институт наноструктур и биосистем, давший «средства производства» для научных исследований. Продолжая аналогию, нельзя не заметить, что этот аналог МТС успешно работает и в настоящее время, обеспечивая современным научным оборудованием ученых, аспирантов и студентов университета.

Итак, в основе нового факультета стояли две кафедры. Затем их число возросло до шести, не считая базовых кафедр на предприятиях. Многие вопросы стало проще решать на факультете с более однородной тематикой, хотя и теперь она достаточно широка, хотя бы из-за приставки «био». За нано-изделиями будущее, а нано-наука превратилась в большую науку. Поздравим же нас всех с 10-м днем рождения и пожелаем не останавливаться на достигнутом!

ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТИВНОСТИ ИНТЕГРИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ МЕНЕДЖМЕНТА НА ПРЕДПРИЯТИИ АО «НЕФТЕМАШ»-САПКОН

Асташина А. М., Ревзина Е.М.

Саратовский университет имени Н. Г. Чернышевского

В данной статье проведена оценка результативности интегрированной системы менеджмента на предприятии АО «НЕФТЕМАШ»-САПКОН. Был осуществлен обзор источников по теме: «Интегрированные системы менеджмента», разработаны критерии для каждой системы менеджмента, входящей в ИСМ предприятия. А также были определены отношения между фактическими и плановыми значениями по каждому показателю и их значимость. Рассчитаны результативности для каждой системы и для ИСМ в целом.

Ключевые слова: интегрированная система менеджмента (ИСМ), система менеджмента качества (СМК), система менеджмента окружающей среды (СМОС), результативность, весовые коэффициенты, оценка результативности.

В настоящее время вопрос внедрения интегрированной системы менеджмента (ИСМ) в организации становится все более актуальным для многих российских компаний, столкнувшихся с серьезной конкуренцией со

стороны зарубежных и некоторых отечественных фирм, которые подтвердили свои достижения сертификатами в области качества.

Для повышения эффективности и результативности деятельности организации в целом и обеспечения повышения конкурентоспособности необходимо периодически оценивать результативность ИСМ.

АО "НЕФТЕМАШ" - САПКОН является современным машиностроительным предприятием, которое специализируется в области проектирования, производства и поставки технологического оборудования предприятиям нефтехимии, топливно-энергетического комплекса, чёрной и цветной металлургии и коммунального хозяйства[1-3].

Сегодня на предприятии существует интегрированная система менеджмента (ИСМ), которая отвечает требованиям двух международных стандартов: ISO 9001, ISO 14001, что подтверждено сертификатом TÜV International Certification. Впервые ИСМ была внедрена на предприятии в 2005 году, в 2008 году была проведена ресертификация. Для оценки результативности ИСМ на предприятии использовалась методика В.В. Колочевой[1].

Прежде чем перейти к рассмотрению методики, необходимо определить, что же такое результативность. По стандарту результативность – это степень реализации запланированной деятельности и достижения запланированных результатов[4-6].

На первом этапе для каждой системы менеджмента, входящей в интегрированную систему менеджмента, были разработаны критерии на основе требований стандартов. Для системы менеджмента качества (СМК) было разработано 16 критериев (Таблица 1), а для системы менеджмента окружающей среды (СМОС) – 10 критериев (Таблица 2).

Таблица 1

Критерии для оценки результативности СМК

№	Критерии	α (%)
1	Степень выполнения целей в области качества	100

2	Степень компетентности персонала в СМК	45,2
3	Уровень обеспечения необходимыми материальными ресурсами	100
4	Уровень обеспечения производственными помещениями	100
5	Уровень соответствия закупленной продукции установленным требованиям к закупкам	92,8
6	Степень выполнения плана закупок	100
7	Степень выполнения плана модернизации оборудования	100
8	Уровень обеспечения устройствами для мониторинга и измерений	100
9	Уровень соответствия средств измерений и испытательного оборудования технологическим требованиям	100
10	Степень выполнения плана производства в срок	99,1
11	Уровень соответствия изготовленной продукции требованиям нормативных документов	99,3
12	Уровень соответствия продукции обязательным требованиям	100
13	Уровень выполнения договоров поставки	100
14	Уровень выполнения программы внутренних аудитов	100
15	Степень выполнения корректирующих действий по результатам внутреннего аудита	100
16	Степень выполнения предупреждающих действий по результатам внутреннего аудита	100

Таблица 2

Критерии для оценки результативности СМОС

№	Критерии	α (%)
1	Степень выполнения целей в области экологии	100
2	Степень компетентности персонала в СМОС	45,2
3	Уровень обеспечения необходимыми материальными ресурсами	100
4	Степень соответствия продукции нормативно-правовым требованиям	100
5	Уровень соответствия выбросов нормам ПДК	100
6	Уровень выполнения программы внутренних аудитов	100
7	Степень выполнения корректирующих действий по результатам внутреннего аудита	100

8	Степень выполнения предупреждающих действий по результатам внутреннего аудита	100
9	Уровень безопасности продукции для окружающей среды	100
10	Степень готовности организации к ЧС	100

На втором этапе на основе данных, полученных от начальника отдела управления качеством (ОУК) предприятия, были определены показатели по каждому критерию (α), которые вычисляются как отношение между фактическими и плановыми значениями.

На третьем этапе, используя метод анализа иерархий Т. Саати и специальную шкалу оценки критериев, была определена значимость показателей. В шкале значимости 1 - одинаковая важность, 3, 5, 7, 9 – незначительное, значительное, явное и высшее превосходство соответственно, а 2,4,6,8 – промежуточные значения.

На основе метода парных сравнений была построена матрица для показателей СМОС (Таблица 3). Матрица для СМК была построена аналогичным образом.

При заполнении матрицы использовалось свойство обратной симметрии, т.е симметричные клетки заполнялись обратными величинами.

Таблица 3

Матрица для показателей СМОС

К	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	5	3	1/3	1/3	3	3	3	1/5	1/7
2	1/5	1	1/3	1/7	1/7	1/3	1/3	1/3	1/7	1/7
3	1/3	3	1	1/7	1/7	1/3	1/3	1/3	1/7	1/7
4	3	7	7	1	1/3	5	5	5	1/3	1/5
5	3	7	7	3	1	7	7	7	1/3	1/5
6	1/3	3	3	1/5	1/7	1	3	3	1/7	1/7
7	1/3	3	3	1/5	1/7	1/3	1	1	1/7	1/7
8	1/3	1/3	3	1/5	1/7	1/3	1	1	1/7	1/7
9	5	7	7	3	3	7	7	7	1	1/3

10	7	7	7	5	5	7	7	7	3	1
----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Далее был произведен расчет весовых коэффициентов для каждой системы, который состоит из следующих шагов:

1 шаг – определение суммы по строке для каждого критерия;

2 шаг – определение общей суммы по строкам;

3 шаг – нахождение нормированного значения, как отношение между значениями «сумма по строке» и «общая сумма по строкам».

Таблица 4

Весовые коэффициенты для показателей СМОС

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Вес	0,08	0,01	0,02	0,14	0,18	0,07	0,04	0,04	0,19	0,23

Таблица 5

Весовые коэффициенты для показателей СМК

№	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Вес	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	0,1	0,0	0,0	0,0
с	9	1	4	1	4	1	3	3	4	9	4	5	3	7	6	6

На четвертом этапе была рассчитана результативность каждой системы менеджмента $I_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \beta_i$ где α_i - единичный относительный i-й показатель, β_i - весовой коэффициент, n – количество показателей.

В результате расчетов результативности СМК и СМОС получились следующие 0,9898 и 0,9945 соответственно.

После того, как определили результативности всех систем менеджмента, входящих в ИСМ, была рассчитана результативность ИСМ $I = \sum_{i=1}^n k_i I_i$ где I_i - результативность i-й системы менеджмента, k_i - весовой коэффициент системы, n – количество показателей.

Весовые коэффициенты для систем менеджмента было решено взять по 0,5. В результате результативность ИСМ предприятия составила 0,992.

После определения результативности ИСМ, была проведена её оценка по шкале значимости Харрингтона.

На шестом этапе принимается решение по управлению интегрированной системой менеджмента.

Таким образом, информация, полученная при оценки результативности интегрированной системы менеджмента качества предприятия АО «НЕФТЕМАШ»-САПКОН, которая равна 0,992, говорит о том, что за текущий год при данных условиях система функционировала результативно и не требовала каких-либо существенных изменений. Но это не означает, что система всегда будет находиться на достаточно высоком уровне, поэтому необходимо ежегодно проводить оценку результативности, чтобы вовремя обнаружить колебания системы и предпринять соответствующие действия. А также данная информация может служить основой для анализа и совершенствования ИСМ со стороны руководства[7-10].

Библиографический список

1. Колочева В.В., Титова В.А., Ткаченко С.Ф., Очков В.В. Оценки результативности ИСМ на примере предприятия металлургической отрасли промышленности / // Методы менеджмента качества. – 2009. № 12. С. 14-18.
2. Игнатов А.С., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М. Вероятностный подход для моделирования динамики изменения диагностических признаков // В сб.: Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине - 2015 Саратов С. 135-138.
3. Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Терин Д.В., Кондратьева Е.В., Вениг С.Б. ПК «Система сегментирования, анализа и маркетинга наукоемкой информации «КВРТ-1Г»» Св-во о гос.регист. №2015661026
4. Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Вениг С.Б., Галушка В.В., Жаркова Э.А., Мельникова Т.Е., Мысенко И.Б., Полянская В.И., Сагайдачный А.А., Смирнов А.И., Терин Д.В., Хасина Е.И. Методы и средства контроля процессов и структур in situ// уч.пос. в 2-х частях - Саратов, 2014.
5. Абашеев А.В., Терин Д.В. Применение современных математических и компьютерных методов для обработки и анализа результатов исследования устойчивости // Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. 2014. № 12 (70). С. 46-49.
6. Абашеев А.В., Терин Д.В. Развитие современных методов обработки и анализа статокинезиограмм// Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. 2013. № 13-1 (59). С. 124-125.
7. Терин Д.В., Климаев Ю.В., Монахова О.А. Проблемы организации самостоятельной работы студентов в рамках преподавания естественно-научных дисциплин в техническом вузе// Инженерное образование. 2012. № 11. С. 133-135.
8. Вениг С.Б., Мурашев Д.А., Терин Д.В., Ставский Д.В. Индивидуальные образовательные траектории и реализация компетентностного подхода при совместном использовании клипатов и виртуальных информационных образовательных систем // Инженерное образование. 2012. № 11. С. 149-151.
9. Абашеев А.В., Терин Д.В., Мурашев Д.А. Разработка компонента для формирования библиографии и перекрестных ссылок в msword // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2012. № 8. С. 482-487.
10. Кац А.М., Ставский Ю.В., Терин Д.В. Информационное обеспечение и научно-методические аспекты создания эффективного многоуровневого сопровождения лекционных курсов учебных дисциплин// Вестник Саратовского государственного технического университета. 2007. Т. 2. № 2. С. 142.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МАЛЫХ ДОЗ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

*Биленко Д.И., Терин Д.В., Белобровая О.Я., Галушка И.В.,
Жаркова Э.А., Полянская В.П., Сидоров В.И., Ягудин И.Т.*

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

lab32@mail.ru

OPTICAL PROPERTIES OF POROUS SILICON TRANSFORMABLE BY LOW DOSES OF GAMMA RADIATION

*Bilenko D.I., Terin D.V., Belobrovaya O.Ya., Galushka I.V., Zharkova E.A.,
Polyanskaya V.P., Sidorov V.I., Yagudin I.T.*

Saratov State University

lab32@mail.ru

The possibilities of modifying the IR spectra of porous silicon under irradiation by low doses of gamma - quanta of radioisotope source of ^{226}Ra and bremsstrahlung radiation are investigated.

Воздействие малых доз $D=10^3-10^5$ Р ионизирующих излучений, в частности, γ -излучения, изменяет электрические и оптические свойства полупроводников. В основе этого эффекта, лежит предположение об усиливающемся влиянии исходной дефектности кристалла. При этом предполагается, что на первом этапе воздействия преобладают преобразования точечных дефектов, результатом которых является снижение исходной дефектности. На последующем этапе радиационного воздействия идет увеличение концентрации радиационных дефектов и, как следствие, их преобладающее влияние на свойства полупроводника [1,2]. Из опубликованных работ известно, что практически все экспериментальные исследования влияния γ -излучения на свойства пористого кремния (ПК), обладающего фотолюминесценцией (ФЛ) в видимой области спектра, проводились с помощью радиоизотопного источника ^{60}Co , испускающего гамма-кванты с энергиями 1.17 МэВ и 1.33 МэВ [3-5]. Поэтому, представляет интерес исследование влияние малых доз облучения радиоизотопным

источником ^{226}Ra и на пучке γ -квантов тормозного излучения в более широкой энергетической области на трансформацию ИК спектров.

Пористый кремний получался методом электрохимического травления [6-12]. Полученные образцы пористого кремния были разделены на 2 группы: группа А - ПК на облученной подложке, группа В - облученный слой ПК. Для сравнения исходным считался образец ПК на необлученной подложке и без облучения слоя. Радиационная обработка образцов осуществлялась двумя источниками: радиоизотопным источником ^{226}Ra (линейчатый спектр, $E_{\gamma\text{max}}=2.43$ МэВ) в специальной камере и тормозным γ -излучением ускорителя электронов - бетатрона СГУ при максимальной энергии $E_{\gamma\text{max}}=25$ МэВ [12]. Образцы помещались в центре пучка на расстоянии 75 см от платиновой тормозной мишени. Облучение проводилось на воздухе при температуре $\leq 35^\circ\text{C}$. В качестве подложек для получения ПК использовались образцы кремния различного уровня легирования (КДБ-10<111> для образца группы А при облучении подложки дозой 15 кР, КДБ-4.5<100> для остальных образцов). Все образцы облучались тормозным γ -излучением, кроме образца группы А-радиоизотопным источником ^{226}Ra дозой 38.4 кР.

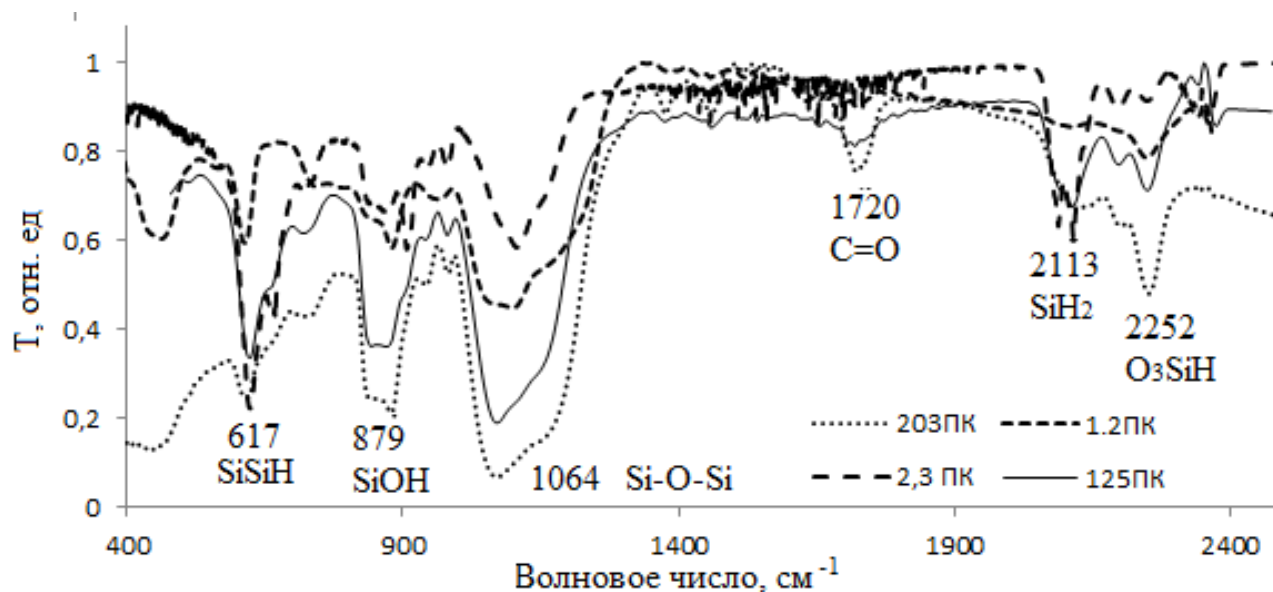


Рисунок 1 ИК спектры образцов группы А.

Для выяснения механизма воздействия γ -облучения на свойства пористого кремния исследовались спектры пропускания на

быстродействующем Фурье спектрофотометре FTIR-840051 Shimadzu в диапазоне частот 350 до 7800 см^{-1} с разрешением 0.5 см^{-1} . Проведены измерения ИК спектров серии образцов группы А, В и облученных и необлученных подложек кремния[12].

Спектры ИК поглощения образцов групп А и В отличаются друг от друга, рис.1,2. Согласно идентификации полос поглощения, представленных в работах [13-18] наблюдаемые полосы указанных связей, рис. 1, 2, смещены в ту или другую сторону для всех образцов, что по видимому связано с перестройкой поверхностных состояний. Отличие основных полос поглощения группы от исходного связано с состоянием подложки после облучения и дальнейшим ростом нанокристаллитов. Облучение образцов происходило на воздухе. При этом под действием γ -квантов создается агрессивная среда, влияющая на развитую поверхность ПК. Наиболее значительным, согласно имеющимся литературным данным [3], является процесс окисления (полосы в районе частот 1000-1200 см^{-1}).

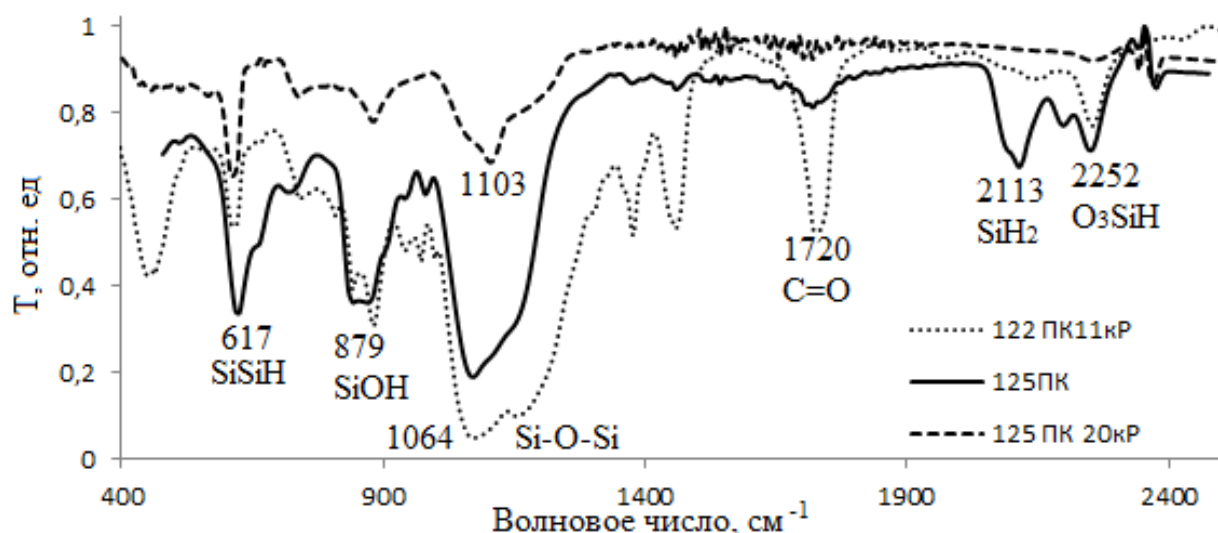


Рисунок 2 ИК спектры образцов группы В.

Для образцов группы А рост кислородных полос по сравнению с исходным ПК наблюдается у образца, полученного на КДБ10. В образцах ПК, облученных ^{226}Ra источником и на пучке тормозного излучения бетатрона дозами 38кР и 38.4 кР, соответственно, интенсивность поглощения кислородных полос падает. Кремниевоводородные полосы (617 и 2113 см^{-1})

больше при облучении на тормозном спектре. Их величина практически мало отличается от исходного ПК. Интенсивность основной кислородной полосы у образцов группы В зависит от дозы. При дозе 11 кР полоса SiOSi существенно превышает аналогичную в исходном ПК, рис.2. При дозе 20 кР интенсивность всех полос резко падает и при частоте большей 1400 см^{-1} полосы исчезают, что совпадает с результатами работы [3].

Использование источников излучения с существенно большей энергией приводит к распаду кислородных осцилляторов при существенно меньших экспозиционных дозах. Интенсивность водородных полос поглощения падает с увеличением дозы облучения. Аналогично данным работы [3] при 1720 см^{-1} наблюдается полоса для 122 ПК - образца группы В. Возможно эта полоса является артефактом облучения с появлением углеродных групп. Проведенные исследования влияния малых доз облучения радиоизотопным источником ^{226}Ra и на пучке γ -квантов тормозного излучения в более широкой энергетической области на трансформацию ИК спектров ПК показали: положение полос основных связей кремния с кислородом и водородом при модификации подложки определяется её состоянием и дефектностью, что подтверждается контролем процесса получения ПК *in situ*; наблюдается дозовая зависимость положения и интенсивности водородных и кислородных полос при модификации слоя ПК.

*Работа подготовлена в рамках базовой части государственного задания
Министерства образования и науки РФ, проект №3468*

Библиографический список

1. *Мамонтов А.П., Чернов И.П.* Эффект малых доз ионизирующего излучения// Томск: Дельтаплан, 2009. 286 с.
2. *Комарь В.К., Сулима С.В., Чугай О.Н.* Влияние ультрамалых доз ионизирующего излучения на диэлектрические свойства кристаллов CdZnTe с аномально высокой поляризуемостью //Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37, вып.13. С.1.
3. *Астрова Е.В., Витман Р.Ф., Емцев В.В.* Влияние γ -облучения на свойства пористого кремния//ФТП. 1996. Т. 30, вып. 3.С. 507.
4. *Астрова Е.В., Емцев В.В., Лебелев А.А., Полозкин Д.И., Ременюк А.Д., Рудь Ю.В., Харциев В.Е.*//ФТП. 1995. Т.29, вып. 7. С.1301.
5. *I.Kh.Abbas, L.Ah.Najam, Abd Ul. AuobSulaiman* The effect of gamma irradiation on the structural properties of porous silicon// International Journal of Physics. 2015. V.3, No1. P.1.

6. *Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Жаркова Э.А., Терин Д.В., Хасина Е.И.* Свойства структур на основе окисленного пористого кремния при воздействии освещения и газовых сред// *Физика и техника полупроводников.* - 2005. - Т.39, № 7. - С. 834-838.
7. *Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Терин Д.В.* [и др.] Методы и средства контроля процессов и структур in situ /под общ. ред. Д.И. Биленко и С.Б. Венига: в 2 ч. - Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2014. - Ч. 1. - 200 с.
8. *Биленко Д.И., Вениг С.Б., Терин Д.В.* [и др.]. Многопараметровая диагностика микро- и наноструктур/ Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2015. - 136 с.
9. *Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Жаркова Э.А., Терин Д.В., Хасина Е.И.* Влияние давления атмосферного воздуха на токоперенос в структурах с окисленным пористым кремнием// *Физика и техника полупроводников.* 2007. Т.41, №8. С.945-949.
10. *Белобровая О.Я., Биленко Д.И., Галушка В.В., Жаркова Э.А., Терин Д.В., Хасина Е.И.* Влияние адсорбции на емкостные свойства нанопористого кремния// *Нано- и микросистемная техника.* 2009. № 10. С.15-18.
11. *Биленко Д.И., Белобровая О.Я., Галушка В.В., Карсакова Я.Д., Мельникова Т.Е., Мысенко И.Б., Полянская В.П., Терин Д.В.* // *ФТП.* 2015. Т.49. вып 3. С.336.
12. *Galushka V.V., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Kondratyeva O.Yu., Kozhevnikov I.O.* Controlled Investigation of Mass Transfer in Nanostructures AgI-Ag // *BioNanoScience.* 2015. № 5. P. 227-232.
13. *В.А. Юзова, А.А. Левницкий, П.А. Харлашин* Развитие технологии получения и исследования пористого кремния// *Журнал сибирского федерального университета.* 2011. Т.4, №1. С. 102.
14. *А.С. Леньшин, В.М. Кашкаров, П.В. Середин, Ю.М. Спивак, В.А. Мошников* Исследование электронного строения и химического состава пористого кремния, полученного на подложках n- и p-типа, методами XANES и ИК спектроскопии// *ФТП.* 2011. С. 1231-1233.
15. *А.В. Васин, П.Н. Охлин, И.Н. Веровский, А.Н. Назаров, В.С. Лысенко, В.П. Бондаренко* Исследование процесса карбонизации и окисления пористого кремния методами спектроскопии комбинационного рассеивания света и ИК-спектроскопии// *ФТП.* 2010. С. 361-363.
16. *А.С. Леньшин, В.М. Кашкаров, П.В. Середин, Б.Л. Агапов, Д.А. Минаков, В.Н. Ципенюк, Э.П. Домашевская* Оптические характеристики различных структур пористого кремния// *ФТП.* 2013. С. 71-74.
17. *Писаренко Г.А., Берлова Е.В., Латухина Н.В., Жукова В.А.* Спектральные исследования нанокмполитов на основе пористого кремния// *Журн. Вестник СамГУ.* 2013. С. 79-83.
18. *Кашкаров В.М., Леньшин А.С., Агапов Б.Л., Турищев С.Ю., Домашевская Э.П.* Получение нанокмполитов пористого кремния с железом и кобальтом и исследование их электронного строения методами рентгеновской спектроскопии // *Письма в ЖТФ.* 2009. Т.35, вып.17. С.89-96.

СТРАНЕ НУЖНЫ НОВЫЕ ДУБОВИКОВЫ!

Вениг С.Б., Ворошилов С.А., Федоров В.Г.

Представлены исторические аспекты жизненного пути Б.А. Дубовикова и созданной им Саратовской системы бездефектного труда. Показан вклад Саратовского университета имени Н.Г. Чернышевского в становление системы управления качеством в регионе.

Все гениальное просто. Гениальной простотой отличается система бездефектного труда (СБТ), родившаяся на Саратовском авиационном заводе в 1955 году. Элементы система бездефектного труда или Саратовской системы качества легли среди прочих в основу систем управления качеством международных стандартов ISO серии 9000 [1-3].

Ее автор, Борис Александрович Дубовиков, окончил Ленинградский политехнический институт и уже в 28 лет стал главным инженером механического за-вода на Балхаше (на строительство Карагандинского медеплавильного комбината – одного из гигантов первых пятилеток), далее три года работал главным инженером на авиационном заводе в Хабаровске. В предвоенный 1940 год Борис Александрович назначается заместителем главного инженера Подольского завода Министерства авиационной промышленности. Этому предприятию он отдал 12 лет жизни. С начала войны стал его главным инженером, а с 1946 г. по 1952 г. был его директором. С 1954-го года его судьба связана с Саратовом, где он начал свою деятельность директором завода №306 (ныне – ООО «Саратовское электроагрегатное производственное объединение – СЭПО-ЗЭМ»). Именно в этот период завод начал выпускать холодильники «Саратов», ставшие визитной карточкой города. Завод впервые под его руководством выполнил план, коллектив получил премию. Люди поверили новому руководителю. Началось строительство жилья.

В июле 1955 года в возрасте 49 лет Б.А. Дубовиков был назначен директором Саратовского авиационного завода. В то время на заводе создалась критическая ситуация – сложность осваиваемой продукции росла,

а методы управления устарели, за качество продукции отвечал контролер, а производитель – за количество. Порой самолеты собирались из дефектных деталей и узлов, а на финише был цех «доводки», где работали лучшие специалисты. Но и усилия этих специалистов не всегда давали результат и завод нес колоссальные экономические потери. В этой ситуации Б.А. Дубовиков принимает единственно возможное решение – провозгласить принцип «бездефектности». Применение этого принципа позволило сфокусировать внимание на конкретном исполнителе, что послужило стимулом к совершенствованию индивидуального мастерства. Через месяц после назначения директором саратовского авиационного завода Б.А. Дубовиков издал приказ, в котором главными были всего два пункта:

- 1) отделу технического контроля прекращать приемку партии изделий после обнаружения первого найденного дефекта и возвращать всю партию предъявителю;
- 2) работникам, сдающим продукцию с первого предъявления, платить премию в размере 50% от основной заработной платы.

Такое революционное решение мог принять только человек, имеющий за плечами колоссальный опыт организации производства, понимающий, что на заводе он ответственный за все, что провозглашение принципа бездефектности труда – это не лозунг, а грандиозная задача (и в первую очередь – директора) по реализации этого принципа. Мало призвать работать бездефектно, надо разработать и внедрить систему управления, создающую условия для бездефектного труда. И в этом он видел свою главную задачу, задачу лидера на заводе. Но один в поле не воин, а искусство управления состоит в умении создать коллектив единомышленников. Два года ничтожно малый срок. Но он сумел совершить революцию в управлении. Он сумел сделать своими сторонниками и соратниками главных специалистов завода и непосредственных исполнителей на рабочих местах. Сколько для этого потребовалось силы воли, настойчивости, убежденности, организаторского

таланта, энергии, энтузиазма! Человек-искра, человек-твердыня. Таким его воспринимали. Таким он и был.

Внедрение саратовской системы бездефектного труда стало делом жизни Б.А. Дубовикова. Получив назначение в 1957 году на должность заместителя председателя Приволжского совнархоза, Б.А. Дубовиков инициировал внедрение СБТ на предприятиях Саратовской, Ульяновской и Пензенской областей. В 1966 году он назначается на должность заместителя Председателя комитета стандартов, мер и измерительных приборов при Совете Министров СССР. На этой должности он начал работу по распространению СБТ по всей стране. В деле популяризации системы ему помогал Яков Михайлович Сорин, председатель Комитета надежности Всесоюзного совета научно-технических обществ. Союзником Б.А. Дубовикова в этой работе был адмирал-инженер, заместитель министра обороны СССР, академик, руководитель Межведомственного научного Совета по качеству и надежности Аксель Иванович Берг.

В результате в 1967 году было принято Постановление ЦК партии и Совета Министров СССР о повсеместном внедрении Саратовской системы бездефектного труда. Внедрению СБТ способствовало и создание в Политехническом музее в Москве кабинета качества.

В создании условий внедрения СБТ в Саратове ключевую роль сыграл Лев Алексеевич Комаров, заведующий промышленным отделом обкома партии. Именно при нём был установлен единый для Саратовской области регламент проведения на саратовских предприятиях Дней качества по четвергам в 10 ч. 30 мин. Обязательным условием было проведение Дня качества лично директором предприятия, чем воспитывался и обеспечивался принцип лидерства высшего руководства в вопросах управления качеством, ставший впоследствии одним из основополагающих принципов в комплексе стандартов ИСО 9000.

Дни качества также регулярно проводились в подразделениях, цехах и производственных участках. Что очень важно, на днях качества

рассматривались не только порядок реализации и результаты бездефектного труда, но и совершенствовалась система морального и материального поощрения.

При обкоме партии был создан научно-методический совет по вопросам качества продукции под руководством Л.А. Комарова. Лев Алексеевич уделял особое внимание пропаганде и совершенствованию Саратовской системы. Им написаны четыре книги, обобщающие опыт саратовских предприятий по внедрению и совершенствованию СБТ.

Внедрению СБТ в Саратове успешно способствовали руководители Саратовских предприятий, сторонники и последователи Б.А. Дубовикова, такие как: Н.С. Денисов, Н.В. Лазарев, О.Н. Звонарёв, А.А. Фетюхин, В.С. Житников, Б.Н. Комраков, Г.А. Умнов, В.Ф. Фёдоров, Ф.Г. Крошнев, А.К. Ваницкий, В.С. Кузнецов, Д.Б. Литвак, К.А. Грачёв, Б.И. Горфинкель, И.А. Яшкин, О.М. Радюк, М.Н. Опольнов, А.А. Дерюгин, Ю.И. Сычёв, Б.В. Спицын, В.Г. Павлюков, В.М. Захаров, Е.Г. Екимов и многие другие.

Немаловажную роль играли обмен опытом, обучение и пропаганда. В Саратове ежегодно проводились областные конференции по качеству с обязательным участием первого секретаря обкома партии, директоров предприятий, главных контролёров, ведущих специалистов. В результате эффективно распространялся опыт внедрения и совершенствования системы. Ежегодные конференции по качеству проводились также на уровне районов города и непосредственно на предприятиях.

На базе дома научно-технической пропаганды (директор Галина Яковлевна Дорофеева) был организован народный университет по проблемам эффективности и качества. Университет подготовил и выпустил более 700 специалистов в области качества.

Особое внимание уделялось воспитанию добросовестного отношения к работе населения г. Саратова. Каждый житель города знал, что «рабочая совесть – лучший контролёр». Такие лозунги встречались людям и при входе на предприятие, и в каждом вагоне общественного транспорта. Одним из

наиболее эффективных методов поощрения в СБТ было внедрение личных клейм исполнителей, что являлось одновременно как моральным, так и материальным видом поощрения, вызывало чувство гордости за свой труд.

К сожалению, период перестройки в стране отрицательно сказался на состоянии промышленных предприятий и, в первую очередь, нанёс сокрушительный удар службам качества. Возник дефицит специалистов, были утеряны многие традиции Саратовской системы качества [4].

Становление экономики новой России, интеграция в мировое экономическое пространство вызвали новый виток интереса к системам управления качеством в организации производства и услуг и их внедрению на основе стандартов ИСО 9000, что требовало, в первую очередь, подготовки специалистов в этой области.

В 1998 году в нашей стране впервые был утвержден государственный образовательный стандарт высшего профессионального образования «Управление качеством» и началась подготовка соответствующих специалистов. Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского (СГУ) лицензировал в 2000 году право на подготовку специалистов по специальности «Управление качеством» и в 2001 году осуществил первый набор на очную форму обучения по этой специальности.

С 2005 года подготовка специалистов в области качества в СГУ осуществляется на факультете nano- и биомедицинских технологий и организует ее кафедра материаловедения, технологии и управления качеством. С 2009 года начато обучение по заочной форме. В 2014 году лицензирована подготовка магистров по направлению «Управление качеством» и в 2015 году осуществлен первый набор на это направление. Всего с 2006 года выпущено 187 человек по очной форме обучения и 34 – по заочной. Выпускники-специалисты в области качества составили основу университетского центра менеджмента качества и Саратовский университет одним из первых вузов Саратова сертифицировал свою систему менеджмента качества [5].

В 2015 году можно отметить несколько знаменательных дат, связанных с подготовкой специалистов в области качества:

- 10 лет факультету нано- и биомедицинских технологий СГУ;
- 15 лет подготовки в СГУ по специальности/направлению «Управление качеством»;
- 10-й выпуск специалистов/бакалавров по специальности/направлению «Управление качеством».

Позже подготовку специалистов по качеству начали вести другие вузы Саратова. В 2009 году началась подготовка специалистов по управлению качеством в СГАУ имени Н.И. Вавилова, но, к величайшему сожалению, в 2015 году это направление в СГАУ закрыто. С 2013 года СГТУ имени Ю.А. Гагарина также стал готовить специалистов по качеству.

В память о Б.А. Дубовикове его дети и внуки (под руководством скульптора Александра Сергеевича Тумандейкина) изготовили и подарили Саратову его бюст. Сегодня этот бюст установлен в Саратовском центре стандартизации и метрологии имени Б.А. Дубовикова. Также его именем названа одна из улиц города.

Хранить память – это прекрасно, но далеко недостаточно. Для процветания города Саратова и области нужно возрождать эффективную деятельность в области качества. Следует возобновить проведение конкурса «Премий Правительства Саратовской области имени Б.А. Дубовикова «За достижения в области качества» (Постановление Губернатора Саратовской области от 01.06.98 г. № 345), создать музей Саратовской системы качества, организовать систематическое обучение руководителей всех уровней современным методам управления.

Саратовская система качества является гордостью города, его визитной карточкой и, как сейчас принято называть, брендом г. Саратова. Для её возрождения и поддержания необходимо вырастить и воспитать новых «ДУБОВИКОВЫХ», способных приводить к успеху других.

Библиографический список

1. *Берг А. И.* Системе бездефектного труда – силу закона / А. И. Берг // Стандарты и качество. – 2005. – № 8. – С. 52–53.
2. *Дубовиков Б.А.* Основы научной организации управления качеством (опыт применения и теоретического обоснования системы организации бездефектного труда). – М.: Экономика, 1966. – 320 с.
3. *Комаров Л.А.* Качество – решающий показатель. – М.: Издательство стандартов, 1969. – 92 с.;
4. *Комаров Л.А.* Качество туда – залог успеха. К 25-летию саратовской системы организации бездефектного изготовления продукции и сдачи её с первого предъявления. – Саратов: Приволж. кн. изд., 1980 – 136 с.
5. *Конарева Л.А.* Качество без слёз и потерь // Век качества – 2012, № 1/2 – С.70-72.
6. *Чумаченко А.Н., Вениг С.Б., Ворошилов С.А., Елина Е.Г., Захарова Т.Г.* В центре внимания СМК: опыт Саратовского государственного университета // Стандарты и качество, 2015, № 11(941), С.40-41.

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИИ ИОНОВ АМБРОКСОЛА ГЛАУКОНИТОМ

*Вениг С.Б., Чернова Р.К., Сержантов В.Г., Сплюхин В.П.,
Переспелова М.А., Селифонова Е.И., Наумова Г.Н., Щербакова Н.Н.*

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Разработан способ получения обогащенного глауконита на основе природного минерала Белоозёрского месторождения Саратовской области. Приведены результаты изучения удельной площади поверхности и общей пористости. В статических условиях изучена сорбция ионов амброксола обогащённым глауконитом, построена изотерма сорбции. Степень извлечения ионов амброксола из водных растворов составила порядка 90 %.
Ключевые слова: глауконит, сорбция, амброксола гидрохлорид, очистка воды, фармполлютанты.

В последние годы для очистки сточных вод всё больший интерес представляют природные сорбенты, к которым относится глауконит. Существенными достоинствами этого минерала являются: широкое распространение, дешевизна, доступность, зернистая структура, термостойкость, хорошие ионообменные и фильтрационные свойства (Вениг, 2014). Особенности глауконита Белоозёрского месторождения Саратовской области исследованы крайне мало, хотя оно относится к одному из самых перспективных. Запасы по категориям А+В+С1 составляют 5,5 млн. тонн, при содержании глауконита более 30 % (Левченко, 2008).

Загрязнения окружающей среды фармацевтическими веществами (фармполлютантами) – одна из актуальных экологических проблем. Фармполлютанты обнаруживаются в почве, донных отложениях, поверхностных, сточных, грунтовых водах и даже в питьевой воде. Одной из основных причин загрязнения природных экосистем отходами фармацевтических предприятий является несовершенство существующих методов (хлорирование, озонирование, сорбирование углём и др.) очистки сточных вод этих предприятий от фармполлютантов, и прежде всего их дороговизной (Чернова, 2014). Недостаточная изученность сорбционных свойств природного глауконита Белоозёрского месторождения по отношению к фармполлютантам ограничивает возможность его применения в водоочистных системах. С этой целью проведено исследование сорбционных свойств по отношению к органическому фармпрепарату – амброксолу гидрохлориду.

В качестве сорбента использовали обогащённый глауконит Белозерского месторождения, который получали из исходной глауконитовой руды методом магнитной сепарации от диоксида кремния (Сержантов, 2011). Сорбатом выступал фармпрепарат – амброксол (4-[(2-амино-3,5-дибромфенил) метиламино] циклогексан-1-ол) в форме гидрохлорида. Для исследования сорбции ионов амброксола в статических условиях 0,5 г образца сорбента заливали 25 мл исходного раствора сорбата с концентрацией $4,344 \cdot 10^{-4}$ моль/л, тщательно перемешивали в заданном интервале времени ($t_{\text{сорб}}$) при $T=20-25$ °С до состояния равновесия. Величина рН исходного раствора составляла 6-6.5. Остаточную концентрацию сорбата ($C_{\text{ост}}$) определяли на спектрофотометре Shimadzu UV-2550 (при $\lambda=307$ нм), используя предварительно построенный градуировочный график, по результатам трёх параллельных опытов. Относительная погрешность определения не превышала 3 %.

Для установления адсорбционных характеристик глауконита, проводили измерение удельной площади поверхности, общей пористости и

распределения пор по радиусам методом измерения удельной поверхности сорбентов (БЭТ) (рис. 1).

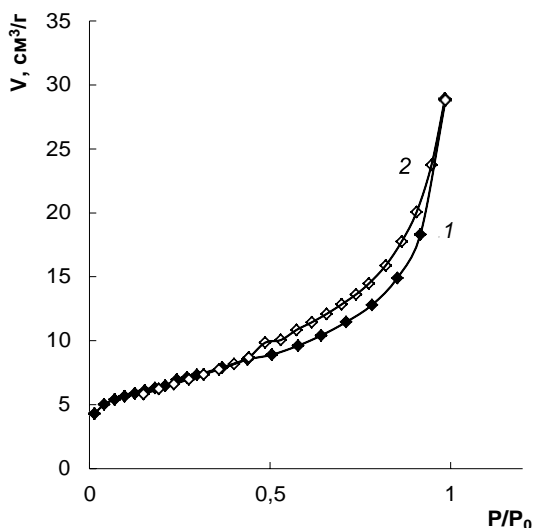


Рисунок. 1. Изотермы адсорбции(1)-десорбции(2) азота при 77 К на обогащённом глауконите

Полученные изотермы адсорбции-десорбции азота на исследуемых образцах по IUPAC-классификации относятся к изотермам IV типа, которые характеризуется наличием петли капиллярно-конденсационного гистерезиса, что является признаком наличия мезопор, размером от 2 до 50 нм. Удельная поверхность по БЭТ (м²/г) и общий объём пор (см³/г), полученные из адсорбционной и десорбционной ветвей изотерм, равны соответственно 21,06 и 0,037.

Сорбция веществ глауконитом – сложный процесс, описывающийся несколькими механизмами и сильно зависит от пористости сорбента, которая обусловлена размерами пор и контактирующих частиц. Глауконит характеризуется наличием обширной внешней адсорбирующей поверхности.

На основании полученных результатов рассчитывали ёмкость сорбента по определяемому катиону (моль·г⁻¹) по формуле:

$$CE = \frac{(C_{исх} - C_{ост}) \cdot V}{m},$$

где $C_{исх}$, $C_{ост}$ – исходная и остаточная концентрации органического катиона (моль/л); V – объём раствора (мл); m – навеска сорбента (г).

Полученные данные сорбционной ёмкости использовали для построения изотермы сорбции (рис. 2).

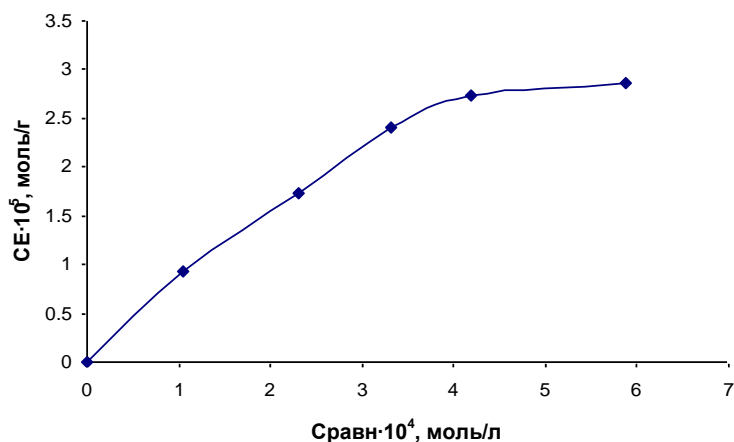


Рисунок 2 Изотерма сорбции амброксола обогащённым глауконитом ($m_{\text{сорб}}=0,5$ г, $V=25$ мл, $pH=6,5$, $t=120$ мин)

Как видно из рис. 2, изотерму сорбции амброксола на используемом сорбенте можно отнести к изотерме Ленгмюра, выражаемой зависимостью:

$$CE = CE_{\infty} \cdot \frac{Kл \cdot C_{\text{равн}}}{Kл \cdot C_{\text{равн}} + 1}, \text{ где}$$

CE_{∞} - максимальная ёмкость сорбента; $C_{\text{равн}}$ - равновесная концентрация сорбата в растворе, моль/л; $Kл$ - константа сорбции по уравнению Ленгмюра.

Исследуемый обогащённый глауконит обеспечивает достаточно полную сорбцию ионов амброксола в водных растворах исходной концентрации равной $4,344 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Так степень извлечения при максимальном времени (120 мин) составила порядка 90 %. При этом основной сорбционный процесс протекает в течение первых 5 минут.

Проведённые исследования открывают перспективы использования глауконита, в качестве компонента фильтрующей загрузки, при очистке сточных вод фармацевтических предприятий от таких веществ, как амброксола гидрохлорид.

Библиографический список

1. Вениг С.Б., Сержантов В.Г., Чернова Р.К., Доронин С.Ю., Селифонова Е.И., Захаревич А.М., Солдатенко Е.М. Глауконит Саратовской области. Свойства, композиты на его основе, области применения // Бутлеровские сообщения, 2014. № 8. С.17-26.

2. Левченко М.Л. Минеральные ресурсы России. Экономика и управление. 2008. Вып. 2. С. 18.
3. Сержантов В.Г. Пат. РФ 2462305 (Опубл. 2011.). Способ получения гранулированного сорбента.
4. Чернова Р.К., Вениг С.Б., Сержантов В.Г., Наумова Г.Н., Переспелова М.А., Селифонова Е.И. Сорбция глауконитом некоторых лекарственных средств// Химическая наука: современные достижения и историческая перспектива / Сб. статей по материалам II Всеросс. научн. интернет-конфер. с межд. участием. Казань. 2014. С.169-172.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ И МИКРОКАПСУЛЫ – ТЕХНОЛОГИЯ, СВОЙСТВА, ПРИМЕНЕНИЕ

*Иноземцева О.А., Яценюк А.М., Стецюра И.Ю., Браташов Д.Н.,
Горин Д.А.*

Наноинженерные многофункциональные структуры, обладающие требуемым сочетанием структуры и свойств, представляют особый интерес благодаря их мультифункциональности и потенциальным применениям в качестве новых коллоидных структур в различных областях. Среди доступных методов изготовления многослойных пленок на коллоидных частицах с последующим селективным удалением темплата, метод последовательной адсорбции полиэлектролитов (Layer by Layer assembly) привлекает большое внимание из-за его преимуществ, таких как точный контроль размера, формы, состава, толщины стенок и набора функций полученных микрокапсул [1-3]. Наиболее важным свойством этих структур, определяющим их применение, является проницаемость их оболочек, которая зависит от многих факторов – ее состава, толщины, заряда диффундирующих соединений, условий микроокружения, а также от используемого материала темплата. Управлять проницаемостью нефункционализированных полиэлектролитных оболочек можно с помощью изменения различных физико-химических параметров среды, таких как величина рН, полярность растворителя, ионная сила, температура.

Потенциал метода последовательной адсорбции значителен и лежит, главным образом, в медико-биологических областях, таких как доставка лекарственных средств, сенсорные приложения, катализ и создание

микробиореакторов. Без сомнения, основная ставка делается на потенциальное использование полиэлектролитных капсул в качестве средств доставки лекарств и, в частности, на методы инкапсулирования и высвобождения молекул из капсул. Направленная доставка имеет огромное значение в медицинских и фармацевтических областях, где очень важно сделать минимальную дозировку максимально терапевтически эффективной, что позволяет снизить токсичность препарата наряду с повышением его эффективности. В связи с этим особую актуальность приобретает реализация возможности дистанционного управления проницаемостью оболочек микрокапсул с целью контролируемого высвобождения их содержимого.

Это может быть осуществлено, используя различные внешние воздействия (магнитное поле, лазерное излучение, ультразвук). Задача управляемого высвобождения вещества из микрокапсул тесно связана с созданием нанокompозитных микроконтейнеров, комбинирующих в себе свойства полиэлектролитных оболочек и неорганического материала. Таким образом, для обеспечения чувствительности оболочек микрокапсул к перечисленным внешним воздействиям необходимо ввести в состав их оболочек нанобъекты, чувствительные к тому или иному внешнему воздействию. Для этой цели существуют подходы к созданию композитных микрокапсул, а также структур «ядро-оболочка», путем включения в состав оболочки нанобъектов, чувствительных к различным внешним воздействиям. Многообразие веществ, способных выступать в роли компонентов оболочек капсул, дает возможность настраивать свойства формируемых оболочек в очень широких пределах. Так, действие лазерного излучения основано на нагреве металлических наночастиц, встроенных в оболочку капсул, которое дистанционно изменяет проницаемость оболочки или полностью разрушает ее [4,5]. Микрокапсулы могут быть также функционализированы с помощью магнитных наночастиц [6] для расширения терапевтических применений и обеспечения управления их локализацией и концентрированием. Внедрение наночастиц в оболочку

микрокапсул также позволяет придать ей чувствительность к ультразвуковому излучению. Так, была продемонстрирована чувствительность к ультразвуку композитных капсул, содержащих наночастицы оксида цинка [7,8]. Авторами [9] были получены структуры «ядро-оболочка» и микрокапсулы, содержащие одностенные углеродные нанотрубки и плазмонно-резонансные наночастицы, и была продемонстрирована эффективность полученных структур для визуализации методом фотоакустической спектроскопии. Полученные структуры проявляют multifunctionality, так как могут быть использованы также в качестве сенсорных платформ для детектирования гигантского комбинационного рассеяния, управляемых оптическим пинцетом [10]. Кроме того, было показано, что раман-чувствительные структуры «ядро-оболочка», содержащие углеродные нанотрубки и золотые наночастицы, могут быть использованы в качестве сенсоров для определения температуры [11,12].

Таким образом, метод последовательной адсорбции полиэлектролитов находит широкое применение для создания различных нанотехнологических объектов – планарных слоев, микрокапсул, композитов и структур «ядро-оболочка». На наш взгляд дальнейшие перспективы развития данного метода связаны с созданием наноконструктивных систем, совмещающих в себе различные функции – возможность инкапсуляции биологически активных веществ, визуализации, управления перемещением, сенсорные свойства. Такие системы позволяют совмещать диагностические и терапевтические возможности в одной наноструктуре и станут основными инструментами нового направления биомедицины, получившего название тераностики.

Библиографический список

1. G. Ibarz, L. Dähne, E. Donath, H. Möhwald Smart Micro- and Nanocontainers for Storage, Transport, and Release // *Adv. Mater.* 2001. V. 13. P. 1324-1327,
2. Сергеев С.А., Иноземцева О.А., Браташов Д.Н., Герман С.В., Воронин Д.В., Ломова М.В., Горин Д.А. Физика и химия коллоидных систем. Учебное пособие для студентов факультета нано- и биомедицинских технологий / Саратов, 2016,
3. Marchenko I., Bukreeva T., Yashchenok A., German S., Inozemtseva O., Gorin D., Möhwald H., Skirtach A. Polyelectrolytes: influence on evaporative self-assembly of particles and assembly of multilayers with polymers, nanoparticles and carbon nanotubes *Polymers*. 2010. T. 2. № 4. С. 690-708.

4. Metwally H., Parakhonskiy B., Skaptsov A., Zakharevich A., Inozemtseva O., Shtykov S., Gorin D., Venig S.B Synthesis of the calcium carbonate particles with various phase, size and shape by the controlling reagent concentration during crystallization process // Сб. Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Саратов. 2015. С. 15.

5. Gorin D.A., Portnov S.A., Inozemtseva O.A., Luklinska Z., Yashchenok A.M., Pavlov A.M., Skirtach A.G., Moehwald H., Sukhorukov G.B. Magnetic/gold nanoparticle functionalized biocompatible microcapsules with sensitivity to laser irradiation. PCCP, 2008, 10, 6899–6905.

6. Яценко А.М., Иноземцева О.А., Горин Д.А. Нанокompозитные микрокапсулы, содержащие наночастицы коллоидного золота и магнетита: формирование и характеристика. Российские нанотехнологии. 2009. Т. 4. № 5-6. С. 121.

7. Герман С.В., Иноземцева О.А., Маркин А.В., Метвалли Х., Хомутов Г.Б., Горин Д.А. Синтез гидрозолей магнетита в инертной атмосфере. Коллоидный журнал. 2013. Т. 75. № 4. С. 534.

8. V.F. Korolovych, O.A. Grishina, O.A. Inozemtseva, A.V. Selifonov, D.N. Bratashov, S.G. Suchkov, L.A. Bulavin, O.E. Clukhova, G.B. Sukhorukov and D.A. Gorin Impact of high-frequency ultrasound on nanocomposite microcapsules: in silico and in situ visualization Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, 18, pp. 2389 – 2397.

9. T.A. Kolesnikova, D.A. Gorin, P. Fernandes, S. Kessel, G.B. Khomutov, A. Fery, D.G. Shchukin, H. M?hwald, Nanocomposite microcontainers with high ultrasound sensitivity Advanced Functional Materials, 20, p. 1189–1195 (2010)).

10. A.M. Yashchenok, J. Jose, P. Trochet, G.B. Sukhorukov, D.A. Gorin Multifunctional polyelectrolyte microcapsules as a contrast agent for photoacoustic imaging in blood Journal of BIOPHOTONICS 1-8, 2016, DOI: 10.1002/jbio.201500293.

11. I.Y. Stetsiura, A. Yashchenok, A.Masic, E.V. Lyubin, O.A. Inozemtseva, M.G. Drozdova, E. A. Markvichova, B.N. Khlebtsov, A.A. Fedyanin, G.B. Sukhorukov, Dmitry A. Gorin, and Dmitry Volodkin Composite SERS-based satellites navigated by optical tweezers for single cell analysis Analyst, May 2015, 140(15), 4981-4986.

12. Yashchenok A., M?hwald H., Masic A., Gorin D., Inozemtseva O., Shim B.S., Kotov N., Skirtach A. Optical heating and temperature determination of core-shell gold nanoparticles and single walled carbon nanotube microparticles. Small. 2015. Т. 11. № 11. С. 1320-1327.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ТОКОВУЮ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В ПЛАНАРНО-ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУИЗОЛИРУЮЩЕГО АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ

И.О. Кожевников, А.В. Митин, А.И. Михайлов

Приведены результаты экспериментального исследования влияния магнитного поля на рекомбинационную неустойчивость тока, возникающую в фоточувствительных резисторных меза-структурах на основе полуизолирующего *n*-GaAs. Установлено, что частота токовых автоколебаний в структуре возрастает по экспоненциальному закону с ростом магнитной индукции. Построена корреляционная зависимость экспериментальных данных частоты токовых колебаний и среднего тока через структуру от величины магнитной индукции. В соответствии с полученными экспериментальными данными сделан вывод о том, что при слабых магнитных полях (менее 0,05 Тл) превалирует магниторезистивный эффект, приводящий к уменьшению протекающего через структуру тока, а при сильных – эффект Холла, приводящий к изменению распределения

электрического поля в межконтактной области и его увеличению, и последующему росту частоты токовых колебаний вследствие увеличения темпа захвата электронов глубокими центрами.

Ключевые слова: полуизолирующий арсенид галлия, рекомбинационная неустойчивость, эффект Холла.

MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON THE CURRENT INSTABILITY IN THE SEMI-INSULATING GALLIUM ARSENIDE PLANAR-EPITAXIAL STRUCTURES

I.O. Kozhevnikov, A.V. Mitin, A.I. Mikhailov

National Research Saratov State University

The results of an experimental study of the magnetic field influence on the recombination current instability arising in the photo-resistor mesa structures based on semi-insulating *n*-GaAs. It is found that the frequency of self-oscillations in the structure increases exponentially with increasing magnetic induction. The correlation of experimental data according to the current oscillation frequency and the average current through the structure from the magnetic induction was built. It is concluded that at low magnetic fields (less than 0.05 T) prevails magnetoresistive effect leading to a decrease in the current flowing through the structure, and at strong magnetic fields prevails Hall effect, leading to a change and gain the electric field distribution of a contact area, and increasing in the frequency of the current oscillations due to the increase of the electron capture rate of deep centers.

Keywords: semi-insulating gallium arsenide, recombination instability, Hall effect.

Как известно, полуизолирующий арсенид галлия является материалом, в котором наблюдаются магниторезистивный эффект – изменение электрического сопротивления материала в магнитном поле, и эффект Холла – возникновение поперечного электрического поля в проводнике или полупроводнике с током при помещении его в магнитное поле [1,2]. Кроме того, арсенид галлия известен как материал с высокой подвижностью электронов, в котором проявляется известный эффект Ганна вследствие междолинного переноса электронов, сопровождающийся токовыми колебаниями сверхвысокой (СВЧ) и крайне высокой частоты (КВЧ), а также менее известная рекомбинационная неустойчивость тока, связанная с захватом электронов глубокими примесными центрами в сильных электрических полях в компенсированном материале [3,4], что делает его перспективным материалом для функциональной электроники.

В работах [5-8] было установлено, что в мезапланарных фоторезисторных структурах на основе высокоомного арсенида галлия при значении приложенного напряжения, соответствующем участку области дифференциального сопротивления (ОДС) на N-образной вольт-амперной характеристике, возможно образование динамической неустойчивости тока, сопровождающейся соответствующими токовыми колебаниями во внешней электрической цепи. Исходя из характерных частот наблюдаемых колебаний, не зависящих от расстояния между контактными площадками мезаструктуры, и возрастающих до 10 раз при воздействии внешней засветки видимого и ИК излучения, было сделано предположение, что наблюдаемые колебания возникают вследствие электронного захвата глубокими центрами, которыми в подложках исходных эпитаксиальных пластин марки САГ-2БК могут служить компенсирующие примеси меди и хрома. Данный класс неустойчивостей относится к рекомбинационным неустойчивостям и был частично исследован в кремнии [9], однако предложенная авторами теоретическая модель неоднозначно соответствует экспериментальным результатам, полученным для исследуемых структур. В связи с этим, исследование рекомбинационной неустойчивости тока в мезапланарных фоторезисторных структурах на основе высокоомного арсенида галлия является актуальным, поскольку открывает перспективы создания разнообразных устройств преобразования и обработки сложных информационных сигналов как в инфракрасном (ИК) и оптическом, так и в СВЧ и КВЧ диапазонах.

В [7] показано, что характер зависимости частоты токовых колебаний от интенсивности засветки повторяет характер зависимости среднего тока через структуру от мощности лазерного излучения (680 нм) в исследуемом диапазоне, что можно объяснить вкладом фототока. В данной работе исследовалось влияние магнитного поля на частоту токовых автоколебаний, возникающих в аналогичных [5-8] высокоомных планарных структурах *n*-GaAs.

Исследуемые образцы были изготовлены на основе эпитаксиальных пластин САГ-2БК с применением фотолитографии и представляли собой два прямоугольных омических контакта к высокоомной подложке на расстоянии 60 мкм. С помощью фотошаблона формировались мезоструктуры из чередующихся слоев металла на основе AuGe/Ni/Au, контактного n^+ -слоя, n -слоя, а также буферного слоя. Металлический слой вжигался при температуре 460 °С в атмосфере азота.

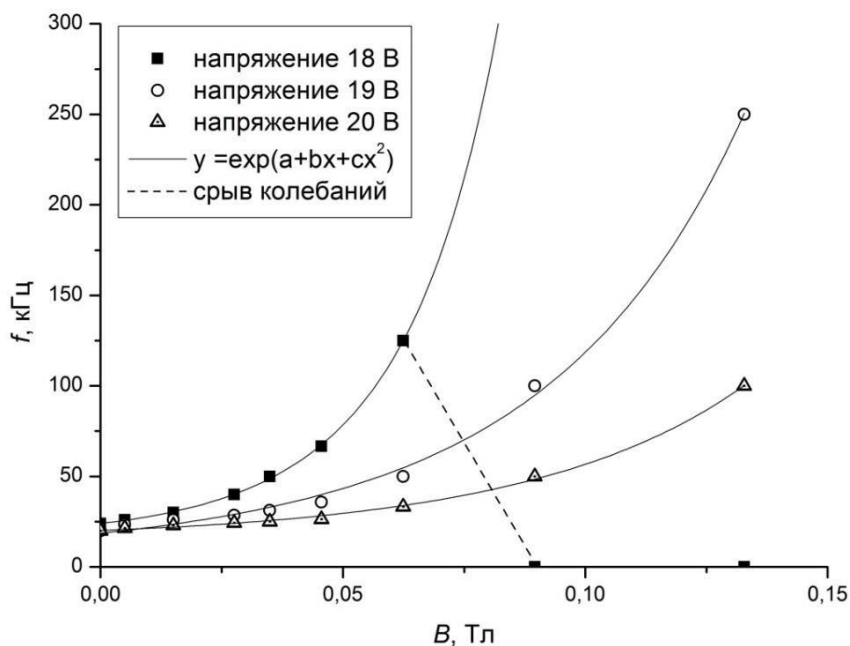


Рисунок 1. Семейство характеристик зависимости частоты токовых колебаний от величины магнитной индукции при различном напряжении, приложенном к структуре

Для исследования использовалось два варианта источника магнитного поля: постоянный магнит в форме прямоугольного параллелепипеда с размерами сторон 10×6×4 мм, и электромагнит в виде двух встречных катушек индуктивности с металлическими магнитопроводами. В первом случае постоянный магнит фиксировался на подвижном столике с микрометрическими подвижками, после чего с помощью датчика Холла ДХК-0,5А осуществлялась градуировка величины магнитной индукции от расстояния до поверхности магнита по паспортному значению магнитной чувствительности датчика (280 мВ/Тл). Затем вместо датчика Холла устанавливался держатель с исследуемой структурой, подключенной к цепи питания последовательно с нагрузочным резистором сопротивлением 100 Ом

и амперметром. Периодические токовые колебания релаксационной формы, возникающие при пороговом напряжении 18 В, регистрировались в виде изменения во времени напряжения на нагрузочном резисторе с помощью осциллографа. При перемещении постоянного магнита перпендикулярно плоскости структуры регистрировалось изменение частоты колебаний.

На рисунке 1 представлены экспериментальные зависимости частоты токовых колебаний от величины магнитной индукции при изменении приложенного к структуре напряжения. Как видно из представленных зависимостей, с увеличением магнитной индукции частота токовых колебаний в структуре возрастает по сложному экспоненциальному закону. При этом увеличение приложенного напряжения приводит к снижению частоты и коэффициента частотной модуляции, что согласуется с результатами, полученными при исследовании оптического воздействия на аналогичные структуры [5-8]. На приведенной зависимости можно видеть участок срыва колебаний, также наблюдаемый при высоких интенсивностях оптической засветки при напряжениях, близких к пороговым значениям [5].

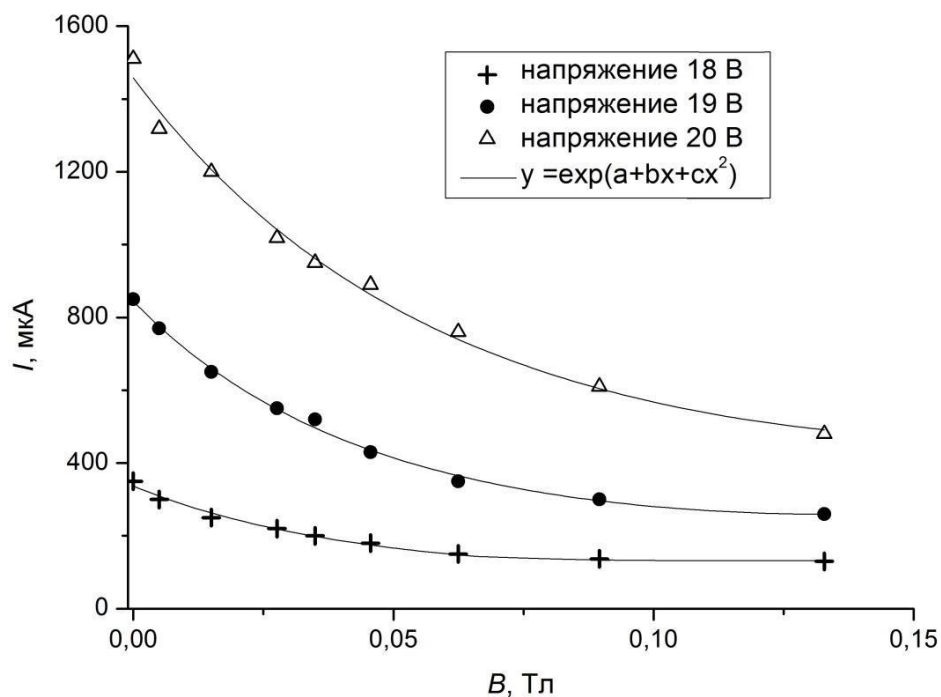


Рисунок 2. Семейство характеристик зависимости среднего тока через структуру от величины магнитной индукции при различном напряжении, приложенном к структуре

Экспериментальные зависимости среднего тока через структуру от величины магнитной индукции при изменении приложенного к структуре напряжения представлены на рисунке 2. Согласно представленным зависимостям, с увеличением магнитной индукции средний ток через структуру спадает также по экспоненциальному закону, что можно объяснить уменьшением проводимости вдоль направления протекания тока в результате возникающего магниторезистивного эффекта. При этом ростом частоты колебаний вероятнее всего связан с изменением распределения электрического поля и его ростом в межконтактной области, вызванном полем Холла, и соответствующим ростом темпа захвата электронов глубокими центрами.

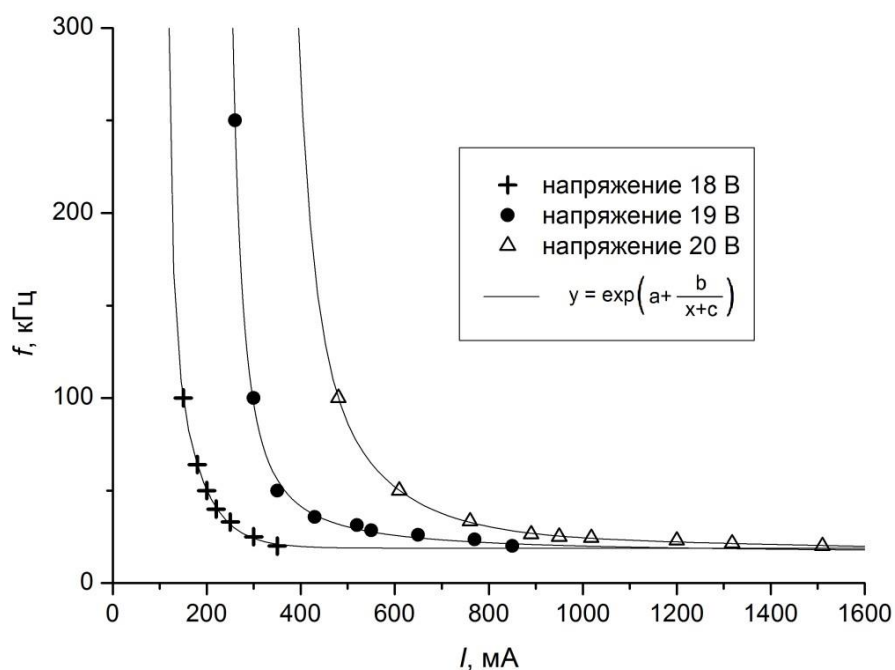


Рисунок 3. Корреляция экспериментальных данных частоты токовых колебаний и среднего тока через структуру при изменении магнитной индукции

Для оценки связи частоты токовых колебаний и среднего тока через структуру построены корреляционные зависимости, представленные на рисунке 3. Из данных зависимостей следует, что частота токовых колебаний и средний ток через структуру связаны не линейным законом, а экспоненциальным, а вид зависимости говорит о том, что оба эффекта в исследуемой структуре проявляются не одновременно. При слабых

магнитных полях (менее 0,05 Тл, см. рис. 1 и 2.) превалирует магниторезистивный эффект, приводящий к уменьшению протекающего через структуру тока, а при сильных – эффект Холла, приводящий к изменению распределения электрического поля в межконтактной области, либо его увеличению, и последующему росту частоты токовых колебаний.

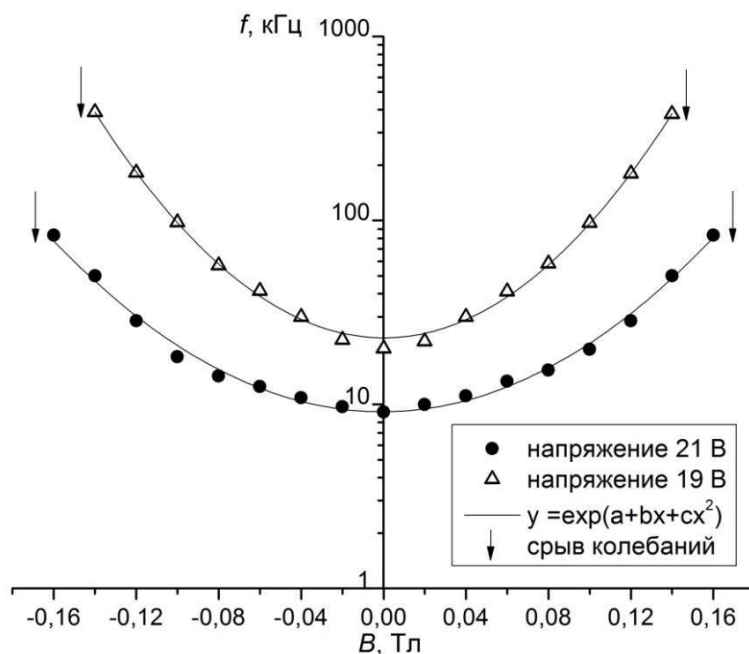


Рисунок 4. Семейство характеристик зависимости частоты токовых колебаний от величины магнитной индукции и направления магнитного поля при различном напряжении, приложенном к структуре

С целью получения более однородного магнитного поля, использовался электромагнит с двумя соосно расположенными стальными магнитопроводами. Градуировка магнитной индукции электромагнита осуществлялась также с помощью датчика Холла ДХК-0,5А, который помещался в зазор магнитопроводов. Затем вместо датчика устанавливался и фиксировался держатель со структурой таким образом, что плоскость планарной структуры находилась перпендикулярно оси магнитопроводов. Полученные зависимости частоты токовых колебаний от величины магнитной индукции и направления магнитного поля приведены на рисунке 4. Как видно из данных зависимостей, экспериментальные данные хорошо укладываются в ту же экспоненциальную аппроксимацию, что и данные, полученные в эксперименте с постоянным магнитом. Также из зависимостей

на рисунке 4 следует, что частота токовых колебаний возрастает независимо от направления магнитного поля, перпендикулярного плоскости структуры, что подтверждает вклад возникающего поперечного поля Холла в увеличение напряженности поля в межконтактной области структуры. Участки срыва колебаний, обозначенные стрелками на рисунке 4, как и в случае с засветкой, смещаются при изменении приложенного к структуре напряжения.

Таким образом, в ходе проведенного исследования установлено, что при помещении фоточувствительных планарно-эпитаксиальных резисторных мезоструктур на основе высокоомного арсенида галлия *n*-типа с участком ОДС на *N*-образной вольт-амперной характеристике в магнитное поле частота токовых колебаний возрастает независимо от направления магнитного поля, приложенного перпендикулярного плоскости структуры в результате возникающего поперечного поля Холла и последующего изменения распределения напряженности электрического поля в межконтактной области структуры. Полученные результаты имеют практическую значимость, поскольку открывают перспективы реализации нового прибора функциональной электроники – генератора токовых колебаний с возможностью бесконтактного управления как с помощью магнитного поля, так и с помощью оптического воздействия, как это было показано в обзоре [10], посвященном магниточувствительным транзисторам.

Библиографический список

1. *Кобус А., Тушинский Я.* Датчики Холла и магниторезисторы / Пер. с польск. В.И. Тихонова и К.Б. Макидонский, под ред. О.К. Хомерики. М.: Энергия, 1971. 352 с.
2. *Бабаев Р.М., Тихонов В.И., Портной Г.Я.* Датчики Холла на основе эпитаксиальных пленочных структур арсенида галлия // Приборы и системы управления, 1976, № 3, С. 42-44.
3. *Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г.* Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М.: Изд-во «Наука», 1972. 416 с.
4. *Neumann A.* Slow domains in semi-insulating GaAs / A. Neumann // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 90. № 1. P. 1-26.
5. *Михайлов А. И., Митин А. В., Кожевников И. О.* Функциональный однокристалльный преобразователь свет-частота на основе высокоомного *n*-GaAs // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2014. Т. 17. № 4. С. 64-69.
6. *Михайлов А.И., Митин А.В., Кожевников И.О.* Особенности возникновения устойчивых колебаний тока большой амплитуды в длинных высокоомных планарно-

эпитаксиальных структурах на основе арсенида галлия // Известия вузов. Радиоэлектроника, 2015. Том 58, № 4, С. 59-64.

7. Михайлов А.И., Кожеевников И.О. Оптические характеристики однокристалльного функционального генератора на основе высокоомного n-GaAs // III Всероссийская конференция «Электроника и микроэлектроника СВЧ»: Сборник трудов конференции (электронная версия). СПб.: СПбГЭТУ, 2014.

URL: <http://mwelectronics.ru/2014/oral.html> (дата обращения: 05.07.16)

8. Кожеевников И.О., Михайлов А.И., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю. Высокоэффективный микроразмерный датчик инфракрасного излучения // Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине – 2015: материалы Всероссийской молодежной конференции/ под ред. проф. Д.А. Усанова. – Саратов: Изд-во Саратовский источник, 2015. С. 86-88.

9. Муравский Б.С., Куликов О.Н., Черный В.Н. Рекомбинационная неустойчивость тока в эпитаксиальных p^+ - n -структурах с локально введенными в n -область примесными атомами и определение параметров глубоких центров на ее основе // ФТП. 2003. Т. 37, Вып. 4. С. 393-397.

10. Викулин И.М., Викулина Л.Ф., Стафеев В.И. Магниточувствительные транзисторы. Обзор // ФТП, 2001, Т. 35, Вып. 1. С. 3-9.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА УГЛЕРОДНОГО НАНОКОМПОЗИТА

Колесникова А. С., Сафонов Р.А., Мазена М. М.

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Представлены результаты исследования модуля Юнга и коэффициента Пуассона композита, основанного на графеновом листе с присоединенными к нему с помощью химических связей углеродными нанотрубками. Исследована зависимость механических характеристик композита от длины и диаметра нанотрубок в композите. Установлено, что жесткость композитов увеличивается при увеличении длины и диаметра нанотрубок в композите.

Ключевые слова: нанотрубки, графен, композиты, механические свойства

Введение

Углеродные структуры — предмет обсуждения мирового химического, физического и механического сообществ на протяжении последних 3-х десятков лет. Их открытие, а именно открытие фуллеренов, предрекалось еще в 1971 году. Впервые фуллерен C₆₀ был открыт в 1985 году. С тех пор изучение фуллеренов и других каркасных углеродных структур приобретает все большую популярность.

В настоящее время актуальной задачей в области усовершенствования работы устройств нанoeлектроники является создание композитного материала с уникальными свойствами, который будет использоваться в качестве элементной базы этих наноустройств. Новый виток в области развития таких материалов связан с синтезом и исследованием свойств композитных углеродных наноструктур (КУНС) на основе нанотрубок и графена (“УНТ-графен”). Материалы, обладающие высокой прочностью, позволяют существенно понизить разрушающую способность в наноустройствах. Важной особенностью углеродных наноструктур является связь их механических деформаций с электронными характеристиками, что делает наноструктуры уникальными в нанoeлектромеханических системах (электромоторы).

В настоящее время синтезируемые и моделируемые композитные материалы “УНТ-графен” отличаются конфигурацией структурных элементов и способом их соединения [1-7]. Наибольший интерес среди существующих композитных материалов вызывают нанокompозиты, состоящие из графенового листа и присоединенных перпендикулярно к нему с помощью химических связей углеродных нанотрубок со структурным типом “armchair”. Этот интерес обуславливается высокими значениями теплопроводности этих композитов [3]. Настоящая работа посвящена исследованию композитов именно такой структурной формы.

При образовании такого композита края “armchair” УНТ остаются открытыми, а в графеновом листе образуется отверстие, форма и размер которого соответствуют диаметру присоединенных нанотрубок. При образовании КУНС нанотрубки располагаются в шахматном порядке, что подтверждается экспериментальными работами [8,9]. Подобные соединения уже используются в суперконденсаторах в качестве материала для очистки воды и материала для хранения водорода.

Не смотря на активное исследование механических свойств композитных материалов “УНТ-графен” [8,10-12], многие параметры этих

композитов остаются неизвестными. В рамках данной работы впервые осуществлялось исследование модуля Юнга и коэффициента Пуассона композита “УНТ-графен” в зависимости от длины и диаметра “armchair” нанотрубок в композите с помощью молекулярно-механического метода, использующего потенциал Бреннера [13], и с учетом периодических граничных условий. Пространство представляется в виде бесконечно повторяющегося по всем трем направлениям минимального элемента молекулярной системы – “периодического ящика”. В рамках данной работы при задании периодических граничных условий композит не жестко фиксировался по шести направлениям, а осуществлялось нахождение равновесной конфигурации структуры с учетом изменения параметров “периодического ящика”. В работе [11] также используется “периодический ящик” при исследовании механических свойств композитов “УНТ-графен”, но отсутствует информация изменении размеров “периодического ящика” в процессе нахождения равновесной конфигурации композита. В работе [10] осуществлялось исследование механических свойств композитов “УНТ-графен” методом конечных элементов, который не учитывает киральность нанотрубок, в зависимости от расстояния между нанотрубками и их длины. В работе [10] установлено, что при растяжении структуры вдоль трубок модуль Юнга увеличивается с уменьшением расстояния между нанотрубками и с увеличением длины нанотрубок. Экспериментальные исследования [8] растяжения пластины, образованной композитом, состоящим из графена с перпендикулярно ориентированными углеродными нанотрубками, показали, что предел прочности такой пластины достигается при ее растяжении приблизительно на 30-40%. В состав такого композита входят УНТ различного диаметра.

Материалы и методы

Объектом исследования являются композитные материалы, состоящие из графеновых листов и вертикально к ним ориентированными углеродными нанотрубками типа “armchair”. Исследование механических свойств

нанокомпозитов осуществлялось для композитов, содержащих нанотрубки диаметром 0.8 нм и 1.2 нм, длина нанотрубок варьировалась в пределах от 0.5 до 2.2 нм, расстояние между нанотрубками было фиксированным и составляло 3.7 нм. В работе [15] показано, что данные композиты являются энергетически устойчивыми. Минимальное структурное звено представлено на рис. I. При нахождении равновесной конфигурации композита задание периодических граничных условий осуществлялось не путем жесткого фиксирования краев композита по шести направлениям, а путем нахождения равновесной конфигурации структуры с учетом изменения параметров “периодического ящика”. После чего композит растягивался вдоль оси нанотрубок, и параметры периодического ящика фиксировались только на краях углеродных нанотрубок. Исследование модуля Юнга и коэффициента Пуассона композита проводилось с учетом периодических граничных условий при растяжении на 1% композита вдоль оси нанотрубок. При расчете площади поперечного сечения нанотрубок ширина кольца составляла 3.4 ангстрем (расстояние между слоями в графите). Исследования механических свойств композитов осуществляется в рамках молекулярно-механической метода [15], использующего потенциал Бреннера [13]. Вычисления проводились в программном пакете Ring [14]. Апробация реализации потенциала Бреннера в программном пакете Ring представлена в работе [16].

Результаты и их обсуждения

В рамках данной работы установлено, что модуль Юнга и коэффициент Пуассона композита увеличиваются с увеличением длины нанотрубок в композите и с увеличением диаметра нанотрубок. Результаты исследований модуля Юнга представлены на рисунке II, а результаты исследований коэффициента Пуассона представлены в Таблице I. Порядок значений модуля Юнга и коэффициента Пуассона согласуются с результатами, представленными в работе [10].

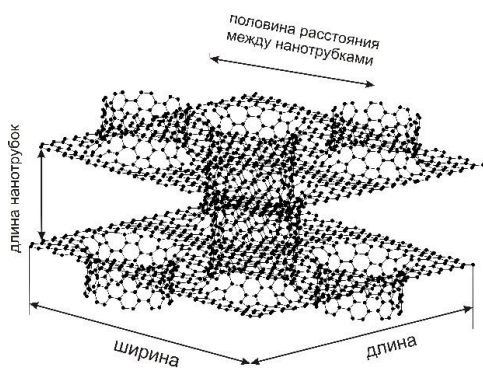


Рисунок I - Минимальное структурное звено композитов “УНТ-графен”

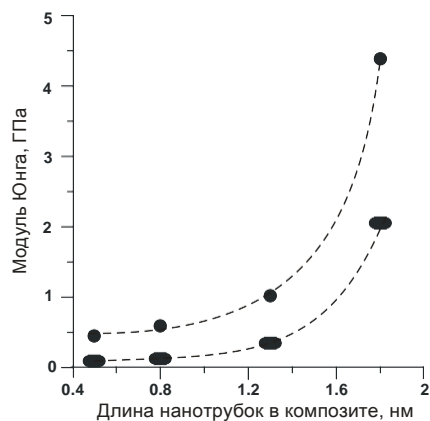


Рисунок II - Зависимость модуля Юнга от длины и диаметра нанотрубок в КУНС: линия с кругами – композит с диаметром нанотрубок 1.2 нм; линия с квадратами – композит с диаметром нанотрубок 0,8 нм

Таблица - I Коэффициент Пуассона

Диаметр нанотрубок, нм	Длина нанотрубок, нм	Коэффициент Пуассона по осям XZ	Коэффициент Пуассона по осям YZ
1.2	0.5	0.063	0.104
1.2	0.8	0.087	0.106
1.2	1.3	0.125	0.107
1.2	1.8	0.134	0.11
0.8	0.5	0.028	0.13
0.8	0.8	0.041	0.13
0.8	1.3	0.064	0.14
0.8	1.8	0.081	0.15

Выводы

С помощью методов компьютерного моделирования в данной работе впервые осуществлялось теоретическое исследование модуля Юнга и коэффициента Пуассона модели трехмерного гибридного углеродного нанотрубно-графенового наноматериала, содержащего нанотрубки типа armchair. Результаты прогностического моделирования показали, что жесткость композитов увеличивается при увеличении длины и диаметра нанотрубок в композите.

Учитывая существующие технологии успешного получения композитных материалов на основе углеродных нанотрубок и графена [8],

можно предположить, что представленные в данной работе композитные наноструктуры будут являться перспективным материалом для наноэлектромеханических устройств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Президентской стипендии 2016-2018 (проект № СП-2502.2016.1).

Библиографический список

1. Zhu Y., Li L., Zhang C., Casillas G., Sun Z., Yan Z., Ruan G., Peng Z., Raji A. R. O., Kittrell C., Hauge R. H., Tour J. M. A seamless three-dimensional carbon nano-tube graphene hybrid material // Nature Communications. - 2012. - Vol. 3. - P.1-7.
2. Deng J. H., Wang F. J., Cheng L., Yu B., Li G.-Z., Hou X.-G., Li D.-J., Cheng G.-A. Improved field emission of few-layer graphene-carbon nanotube composites by high-temperature processing // Materials Letters. 2014. Vol.124. P.15-17.
3. Varshney V., Patnaik S. S., Roy A. K., Froudakis G., Farmer B. L. Modeling of thermal transport in pillared-graphene architectures // ACS Nano. 2010. Vol. 4. N. 2. P. 1153-1161
4. Pop E., Varshney V., Roy A. K. Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications // MRS Bull. Materials Research Society. 2012. Vol. 37. P. 1273-1281.
5. Gong J., Yang P. Investigation on field emission properties of graphene-carbon nanotube composites // RSC Adv. 2014. Vol. 4. P. 19622 -19628.
6. Чернозатонский Л. А. Графен-нанотрубные структуры: строение и энергетика образования // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 89. С. 412-417.
7. Wu Y., Zhang T., Zhang F., Wang Y., Ma Y., Huang Y., Liu Y., Chen Y. In situ synthesis of graphene/single-walled carbon nanotube hybrid material by arc-discharge and its application in super capacitors // Nano Energy. - 2012. - Vol.1. - P. 820- 827
8. Lee D. H. , Kim J. E., Han T. H., Hwang J. W., Jeon S., Choi S. Y., Hong S. H., Lee W. J., Ruoff R. S., Kim S. O. Versatile Carbon Hybrid Films Composed of Vertical Carbon Nanotubes Grown on Mechanically Compliant Graphene Films // Adv. Mater. - 2010. -Vol. 22. - P. 1247-1252.
9. Du F., Yu D., Dai L., Ganguli S., Varshney V., Roy A. K. Preparation of Tunable 3D Pillared Carbon Nanotube Graphene Networks for High-Performance Capacitance // Chem. Mater. 2011. Vol. 23. P. 4810-4816.
10. Sihn S, Varshney V., Roy A. K., Farmer B. L. Prediction of 3D elastic moduli and Poisson's ratios of pillared graphene nanostructures // Carbon. - 2012. - Vol. 50. - P. 603 -611 - ISSN 0008-6223
11. Klochko A.V., Starikovskaia S.M., Xiong Zh., Kushner M. J. Investigation of capillary nanosecond discharges in air at moderate pressure: comparison of experiments and 2D numerical modeling // J. Phys. D: Appl. Phys. 2014. Vol. 47. P. 405302-1-405302-8.
12. Shahsavari R., Sakhavand N. Junction configuration-induced mechanisms govern elastic and inelastic deformations in hybrid carbon nanomaterials // Carbon 95 (2015) 699-709
13. Brenner D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulationg the chemical vapor deposition of diamond films // Phys. Rev. B., 1990, V.42, N.15, P.9458-9471.
14. Глухова О. Е., Терентьев О. А. ПП "Программа для моделирования наноструктур (Ring)". // Св-во о гос. рег. программ для ЭВМ №2010612881. 2010.
15. Safonov R., Glukhova O., Bulgakova K., Savostyanov G., Kondrateva O. GPU parallel computing in molecular dynamics calculations // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 38.

15. Глухова О.Е., Колесникова А.С., Слепченков М.М., Шмыгин Д.С. Атомная структура энергетически устойчивых композитов углеродные нанотрубки/графен // Физика твердого тела, 2015, том 57, вып. 5 С.994-998.

16. Глухова О.Е., Колесникова А.С. Эмпирическое моделирование продольного растяжения и сжатия графеновых наночастиц и нанолент// Физика твердого тела, 2011, том 53, вып. 9 С. 1855- 1860

QUANTUM WISE - МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ НАНОСТРУКТУР

Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М.

Саратовский государственный университет

В настоящий момент компьютерным моделированием оптических свойств различных наноструктурированных объектов занимаются несколько исследовательских групп как в России, так и за рубежом. В России можно выделить проекты nanoModel 2.9 ФГБУН Центра фотохимии РАН, а также HPC-NASIS II разработанный НИУ ИТМО. Среди мировых аналогов можно назвать программу Atomistix ToolKit фирмы QuantumWise или пакет NWChem, разработанный Pacific Northwest National Laboratory. В основе технологии расчета всех этих программных продуктов лежат первопринципные методы, что позволяет моделировать изолированные нанообъекты содержащие до нескольких тысяч атомов. Однако реальные структуры содержат миллионы нанокластеров, каждое из которых, в свою очередь, также состоит из сотен и тысяч атомов. В идеале, суть всех этих программных комплексов доподлинно научиться рассчитывать систему из миллионов взаимодействующих нанокристаллов[1,5].

Atomistix ToolKit (АТК) позволяет исследователям сосредоточиться на соответствующих пунктах для своих проектов, а именно - исследование электрических свойств новых приборных структур без затрат времени на написание своих квантово-механических кодов для моделирования и визуализации результатов.

Наиболее заметной возможностью в АТК является транспортный модуль, который может вычислить ток в наноразмерных структурах и

устройствах, посредством использования функции Грина. Одновременно этот программный пакет позволяет получить точное описание электронной структуры, так как содержит соответствующие методы. По сути, ATK состоит из двух составляющих: теории функционала плотности и расширения Хюккеля. Кроме того, Atomistix Toolkit включает в себя модуль с классическими потенциалами для оптимизации геометрии и молекулярной динамики. Таким образом, программный продукт фирмы QuantumWise является мощным универсальным двигателем для электронных структур и транспортных расчетов по многим видам атомных систем.

В Atomistix Toolkit в настоящее время используется большое количество промышленных и академических исследований в широком спектре областей, таких как:

- молекулярная электроника ;
- спинтроники ;
- электроника углерода (графен, нанотрубки) ;
- нанопроволоки ;
- металл / полупроводник .

ATK способен рассчитывать широкий спектр нанотрубок (и связанные с ними) геометрии:

- идеальная нанотрубка ;
- усеченные или пробирочные нанотрубки ;
- трубки гетеропереходов ;
- Металл-труба-металл контакты (т.е. часть нанотрубки между двумя металлическими поверхностями, металлы могут быть разными) ;
- Металл-трубки перехода (т.е. нанотрубки прикреплены к металлической поверхности) ;
- труба-молекулы-трубка переходах ;
- скрещенные трубки ;
- одна стена или многослойные трубки ;

- фуллерены ;
- развернутые трубы, т.е. графеновые листы ;
- трубки с дефектами и примесями; и другие.

Рассмотрим расчет характеристик графенового листа.

Графен является двумерным [кристаллом](#). Состоит из одиночного слоя атомов углерода, собранных в [гексагональную решётку](#). Так как из графена можно собрать трёхмерный кристалл [графита](#), [то](#) теоретические исследования этого кристалла начались задолго до получения реальных образцов материала. Графен является базой для построения теории этого кристалла.

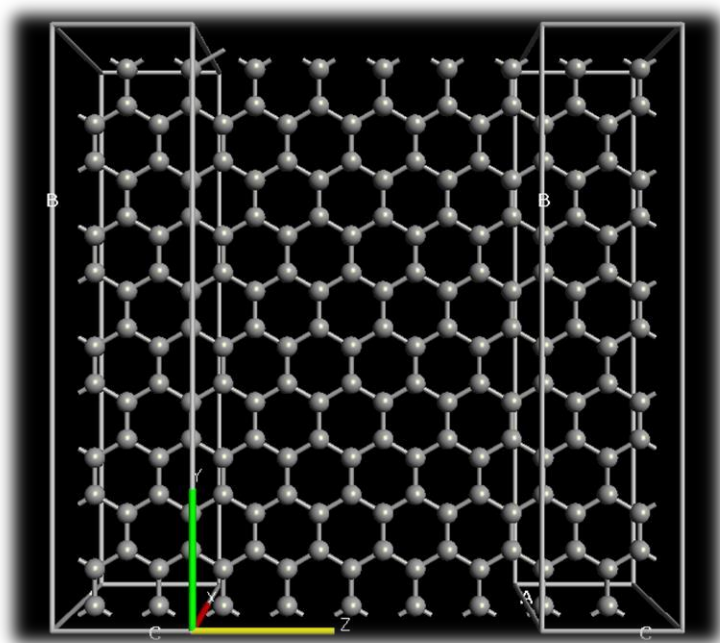


Рисунок 1. Кристаллическая решётка графена

[Кристаллическая решётка](#) графена (рис.1) состоит из правильных шестиугольников и её можно представить как аналог пчелиных сот, что эквивалентно двумерной гексагональной решётке с атомами углерода расположенными в узлах кристалла.

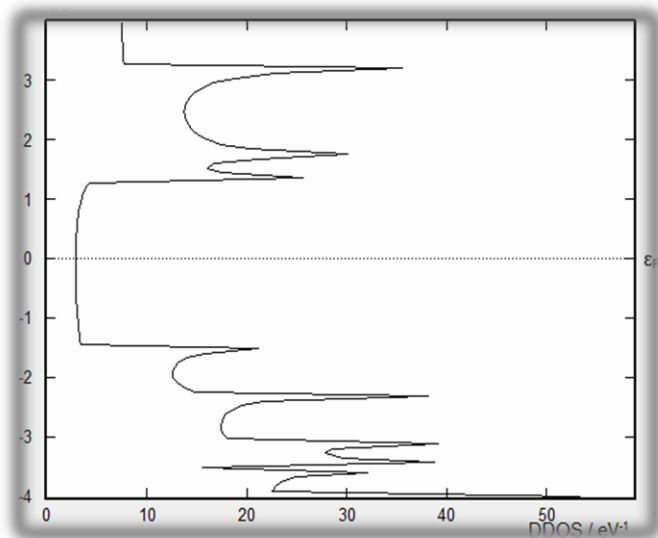


Рисунок 2. Зависимость плотности состояний

Расстояние между ближайшими атомами углерода в шестиугольниках составляет 0,142 нм. Это расстояние занимает промежуточное место между двойной связью (длина C = C 0.135 нм) и одинарной (длина C-C 0.147 нм).

Постоянную решётки (a_0) можно получить из геометрических соображений, она равна $a_0 = \sqrt{3a_c}$, то есть 0,246 нм. Площадь элементарной ячейки составляет 0,051 нм² и концентрация атомов $3,9 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$.

В графене зависимость плотности состояний от энергии линейна (рис. 2). В этом состоит его отличие от обычных двумерных систем с параболическим законом дисперсии, где плотность состояний не зависит от энергии. Плотность состояний в графене задаётся стандартным способом:

$$N = \frac{g_s g_v}{(2\pi)^2} \int \frac{2\pi k dk}{2\hbar v_F} = \frac{g_s g_v |E|}{F}$$

Выражение под интегралом и есть искомая плотность состояний (на единицу площади):

$$n(E) = \frac{g_s g_v}{2\pi \hbar^2 v_F^2} |E| ,$$

где g_s и g_v — спиновое и долинное вырождение соответственно, а модуль энергии нужен для того, чтобы описать электроны и дырки одной формулой.

Отсюда видно, что при нулевой энергии плотность состояний равна нулю, то есть при нулевой температуре отсутствуют носители.

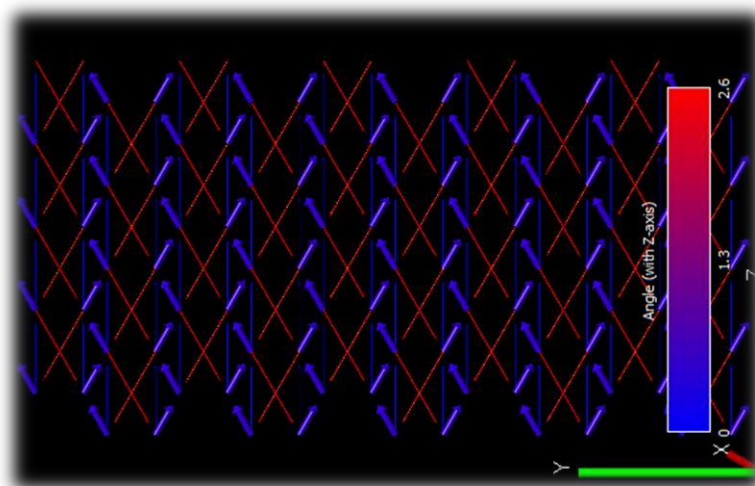


Рисунок 3. Трансмиссионные пути

На рисунке 3 изображены трансмиссионные пути. На рисунке 4 показан спектр пропускания[6-8].

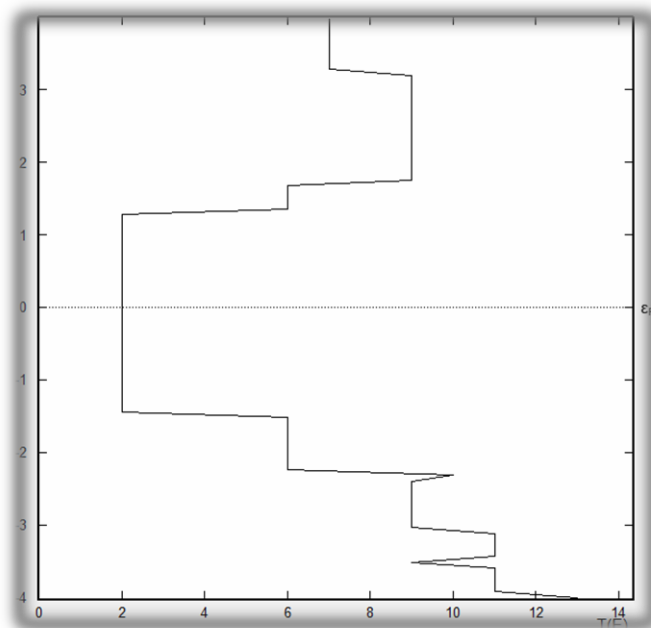


Рисунок 4. Спектр пропускания

На рисунке 5 (a-d) продемонстрированы области перекрытия орбиталей.

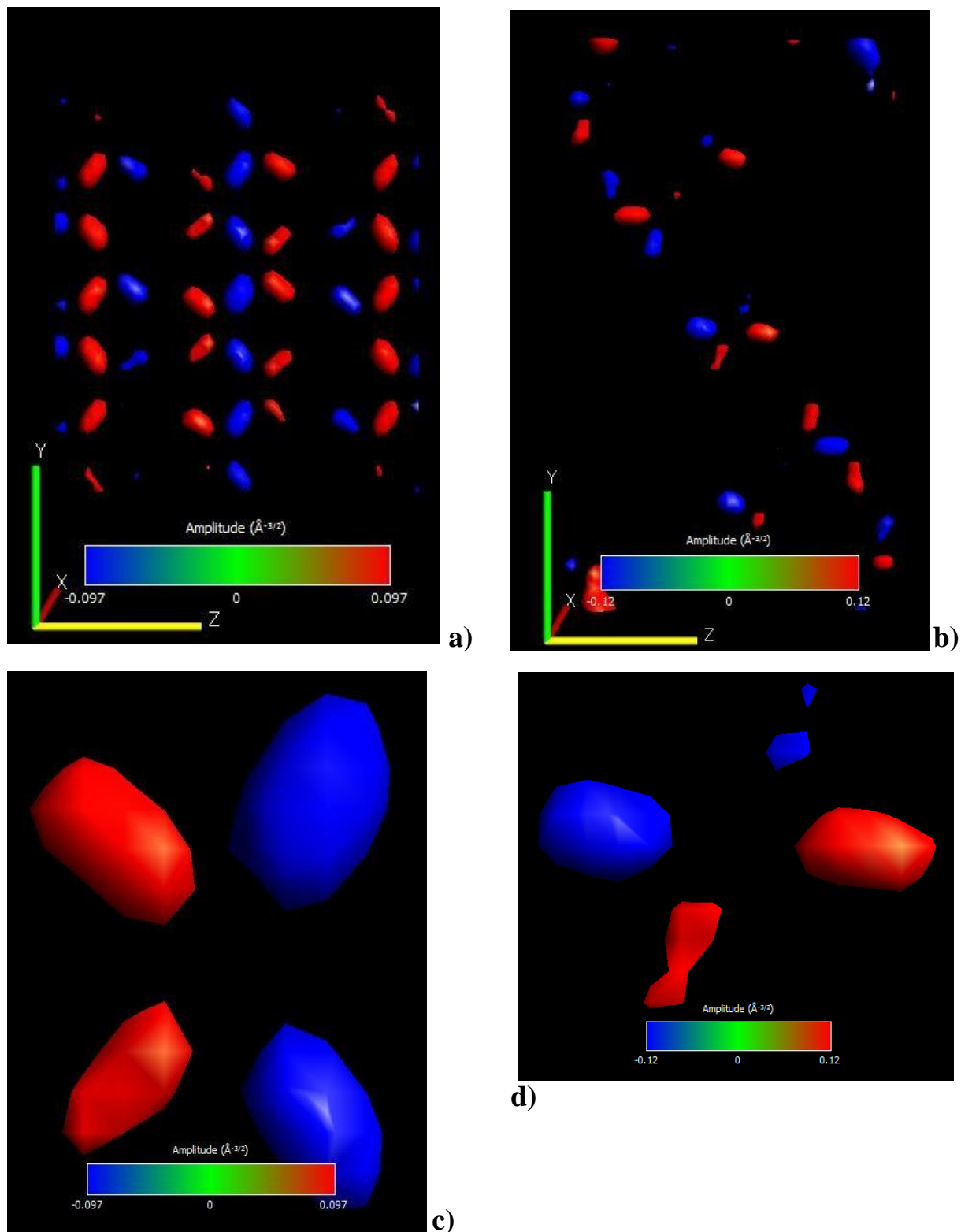


Рисунок 5. Области перекрытия орбиталей

Рассмотрим расчет характеристик графеновой трубки.

Углеродные нанотрубки — это протяжённые цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до

нескольких сантиметров (при этом существуют технологии, позволяющие сплести их в нити неограниченной длины), состоящие из одной или нескольких свёрнутых в трубку гексагональных [графитовых плоскостей](#).

Идеальная нанотрубка представляет собой свёрнутую в цилиндр [графитовую](#) плоскость, то есть поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Результат такой операции зависит от угла ориентации графитовой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации, в свою очередь, задаёт [хиральность](#) нанотрубки, которая определяет, в частности, её электрические характеристики. Как известно, хиральность нанотрубок обозначается набором символов (m, n) , указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

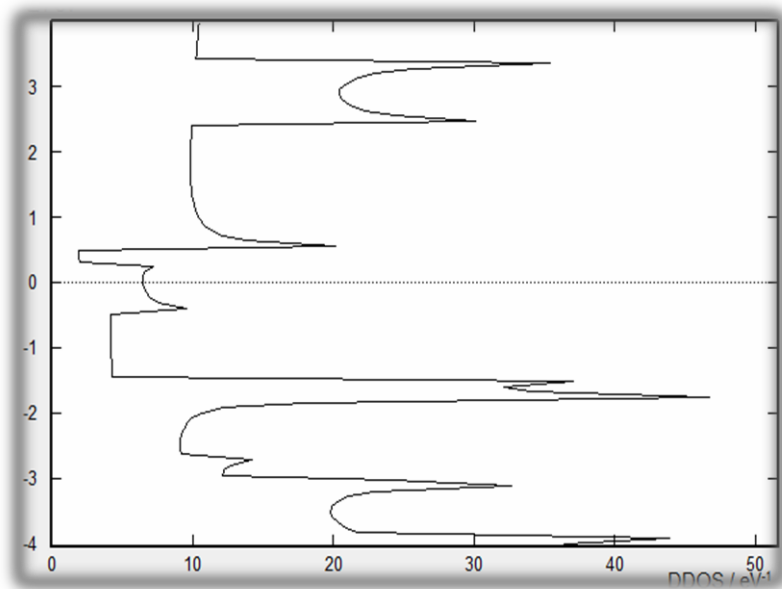


Рисунок 6. Плотность состояний

На рисунке 6 показана плотность состояний. На рисунке 7 представлены пути передач. На рисунке 8 мы видим спектр пропускания[9-12].

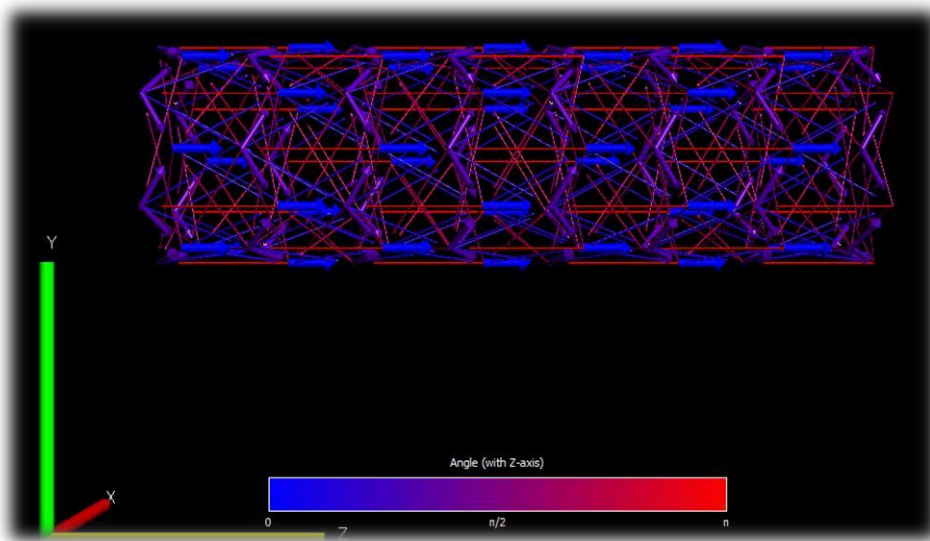


Рисунок 7. Пути передач

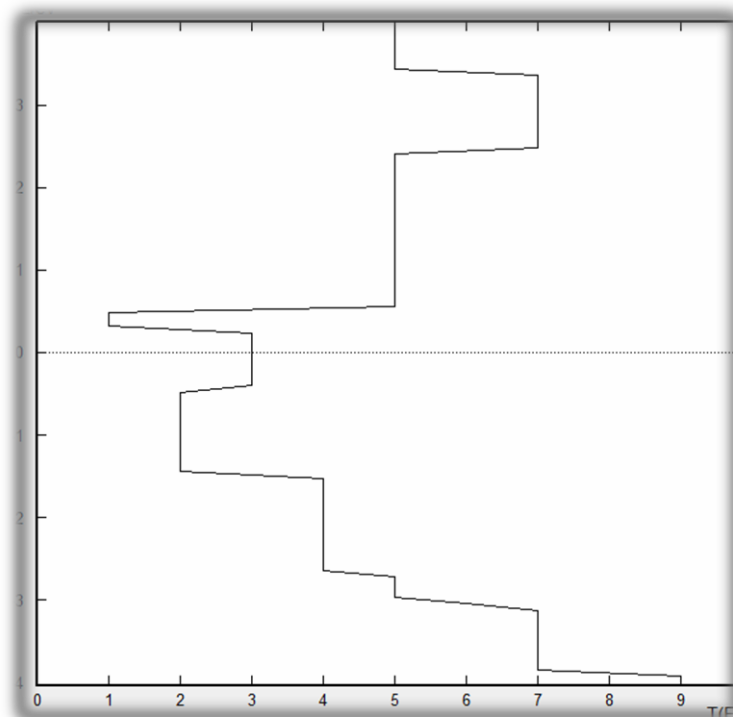


Рисунок 8. Спектр пропускания

В данной работе были показаны полученные нами различные характеристики углеродных наноструктур с помощью лицензионного Программного продукта Atomistix ToolKit фирмы QuantumWise. Также получены и представлены результаты преобразований, их преимущества и

недостатки. В частности было выяснено, что самый простой из множества существующих вариант графенового листа - однослойный, во многом превосходит свои модификации.

Библиографический список

1. *Биленко Д.И., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Вениг С.Б.* Методологические аспекты моделирования и прогнозирование поведения нанокпозиционных материалов в QUANTUMWISE / «Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика», 2014. – №2, С. 46–49 ISSN 1814-733X ISSN 1817-3020.
2. Atomistix Toolkit (ATK) Simulation software for nanoscience URL: <http://quantumwise.com> (дата обращения 11.03.2016 г.)
3. *О.Ю. Кондратьева, Д.В. Терин, Е.М.Ревзина, Р.А. Сафонов* Прогнозирование отказов наносистем// Математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании Сб. научных ст. – Саратовская региональная общественная организация «Центр «Просвещение», 98-101, 2015– 124 с.
4. *V. V. Galushka, D. I. Bilenko, D. V. Terin, E. M. Revzina, O. Yu. Kondrateva, I. O. Kozhevnikov* Controlled investigation of mass transfer in nanostructures AgI-Ag// BioNanoScience, December 2015, Volume 5, Issue 4 , pp. 227-232, Publisher Springer US
5. *О.Ю. Кондратьева, Д.В. Терин, Е.М. Ревзина, Е.В. Кондратьева, С.Б. Вениг* Методология использования и особенности применения atomistix toolkit qw в преподавании основ молекулярной динамики и квантовохимических расчетов// Международная научно-практическая конференция «Информационные технологии в образовании XXI века». Сборник научных трудов. – М.: НИЯУ МИФИ. 2015 – 492 с, 204-208с..
6. *Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V.* Using modern software for modeling of nano-sized materials // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 33-36.
7. *Корчагин С.А., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Романчук С.П.* Многомасштабное моделирование диэлектрических свойств композитов слоистой структуры// Сб.: Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Саратов. 2016. С. 56-59.
8. *Кожевников И.О., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В.* Особенности моделирования динамики процессов в многослойных полупроводниковых структурах при внешних воздействиях // Сб.: Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами. Саратов. 2016. С.38-41.
9. *Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V.* Using modern software for modeling of nano-sized materials // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 33-36.
10. *Safonov R., Glukhova O., Bulgakova K., Savostyanov G., Kondrateva O.* GPU parallel computing in molecular dynamics calculations// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 38.
11. *Смирнов А.В., Аткин В.С., Гребенников А.И., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Синёв И.В.* // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2015. Т. 15. № 4. С. 13-17.
12. *Игнатов А.С., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М.* Вероятностный подход для моделирования динамики изменения диагностических признаков // Сб.: Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине. Саратов. 2015. С. 135-138.

УСИЛЕНИЕ ЭФФЕКТА ЛОЖНЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ ОСЦИЛЛЯТОРАМИ ПРИ ВЫБОРКЕ С ОСРЕДНЕНИЕМ

Крылов С.Н.^{1,2}, Смирнов Д.А.^{1,2}, Безручко Б.П.^{1,2}

¹СФ Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,

²Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,

krylov.sn@nxt.ru

Для выявления связей между колебательными системами по наблюдаемым временным рядам в различных областях исследований и приложений используется метод причинности по Грейнджеру, основанный на оценке точности прогноза авторегрессионных моделей. При этом возможен «эффект ложных связей», состоящий в том, что для однонаправлено связанных систем метод дает ошибочные выводы о двунаправленной связи, если интервал выборки достаточно велик, т.е. временные ряды слишком прореженные. Известны условия проявления этого эффекта при простом прореживании, но остается неясным, насколько он силен в широко распространенном случае выборки с осреднением. В данной работе на эталонной системе связанных осцилляторов показано, что выборка с осреднением в типичном случае усиливает эффект ложных связей по сравнению с ситуацией простого прореживания. Выделены характерные ситуации проявления эффекта ложных связей при различной степени прореживания и взаимной корреляции наблюдаемых сигналов.

Задача выявления и количественной характеристики связей между колебательными системами по наблюдаемым временным рядам возникает в различных областях физических и междисциплинарных исследований [1]. Как в фундаментальном, так и в прикладном плане, во многих ситуациях важен вопрос о том, является ли связь одно- или двунаправленной [2-5]. Для ответа широко используется метод «причинности по Грейнджеру», основанный на расчете улучшения прогноза (УП) совместной авторегрессионной (АР) модели по сравнению с индивидуальной АР моделью. Он предложен в эконометрике [3] и применяется все чаще в физических дисциплинах [4-6]. Однако при достаточно большом интервале выборки (дискретизации данных по времени) могут наблюдаться ненулевые УП в обе стороны и для однонаправленно связанных систем, что может приводить к ошибочным выводам – эффекту ложных связей из-за редкой выборки [6,7]. В работе [6] были найдены количественные условия, при которых эффект значителен и требуются специальные тесты [8] для устранения ошибочных выводов. Однако на практике распространена

ситуация, когда наблюдаемые сигналы не просто прорежены, а осреднены на интервале выборки (например, среднемесячные или среднесезонные значения метеорологических характеристик, существенно инерционные измерительные приборы и т.п.), так что не вся информация между моментами наблюдений просто теряется [9]. При этом заранее не ясно, остается ли эффект ложных связей столь же существенным, и как меняются условия, при которых его нужно учитывать. В данной работе эти вопросы исследуются на эталонной системе связанных осцилляторов.

Причинность по Грейнджеру. Пусть имеются два процесса $X_1(t)$ и $X_2(t)$. Наблюдаются временные ряды $\{x_{1,n}\}$ и $\{x_{2,n}\}$ с шагом Δt по времени, n – целое число. Наблюдаемые переменные совпадают с исходными $x_{k,n} = X_k(n\Delta t)$ (простое прореживание) или представляют их осредненные значения $x_{k,n} = \langle X_k(t) \rangle_{t=(n-1)\Delta t}^{n\Delta t}$ (выборка с осреднением), где $k = 1, 2$, а угловые скобки означают среднее значение по указанному в индексах интервалу времени. При линейной оценке причинности по Грейнджеру сначала рассматривается индивидуальное АР представление наблюдаемых процессов:

$$x_{k,n} = A_{k,0} + \sum_{i=1}^{\infty} A_{k,i} x_{k,n-i} + \xi_{k,n}, \quad k=1,2, \quad (1)$$

где ξ_k – нормальный белый шум. Дисперсию ξ_k , равную среднему квадрату ошибки одношагового прогноза модели (1), обозначим σ_k^2 . Затем рассматривают совместную модель

$$x_{k,n} = a_{k,0} + \sum_{i=1}^{\infty} a_{k,i} x_{k,n-i} + \sum_{i=1}^{\infty} b_{k,i} x_{j,n-i} + \eta_{k,n}, \quad k,j=1,2, j \neq k, \quad (2)$$

где (η_1, η_2) – двумерный нормальный белый шум. Дисперсию шума η_k обозначим $\sigma_{k/j}^2$. Нормированная величина УП $G_{j \rightarrow k} = (\sigma_k^2 - \sigma_{k/j}^2) / \sigma_k^2$ характеризует воздействие $j \rightarrow k$ и может принимать значения от 0 до 1. Для оценки теоретических характеристик $G_{j \rightarrow k}$ по временным рядам строят модели (1) и (2) конечного порядка d , их коэффициенты определяют методом наименьших квадратов [3,10]. На практике вывод о наличии воздействия $j \rightarrow k$ обычно делают при $G_{j \rightarrow k} > 0$. Однако уже при простом прореживании

обнаружены ситуации, когда связь однонаправленная $j \rightarrow k$, а УП «в ложную сторону» $G_{k \rightarrow j}$ положительно и достаточно велико [6,7]. Ниже исследуются условия проявления эффекта ложных связей в случае выборки с осреднением.

Методика исследований. Аналогично работе [6], использовалась система диссипативных осцилляторов, заданных стохастическими разностными уравнениями:

$$\begin{aligned} X_1(t) &= a_1 X_1(t-1) + b_1 X_1(t-2) + \zeta_1(t), \\ X_2(t) &= a_2 X_2(t-1) + b_2 X_2(t-2) + \zeta_2(t) + cX_1(t-1), \end{aligned} \quad (3)$$

где t – дискретное время, c – коэффициент связи, $a_k = 2\cos(2\pi/T_k)\exp(-1/\tau_k)$, $b_k = -\exp(-2/\tau_k)$, T_k – собственные периоды колебаний, τ_k – времена релаксации, ζ_k – гауссовы взаимно некоррелированные белые шумы с дисперсиями σ_k^2 , $k = 1, 2$. Наблюдаются величины x_1 и x_2 с интервалом выборки $\Delta t > 1$ при простом прореживании или прореживании с осреднением. Эта простая и достаточно общая модель колебательных процессов позволяет провести точный расчет УП через матрицы ковариаций [6,11,12]. Расчет ковариационных функций (КФ) для этого проводится ниже для временных сдвигов в диапазоне $[-10\Delta t, 10\Delta t]$, содержащем максимальные значения КФ и достаточном для получения теоретических значений $G_{k \rightarrow j}$ с высокой точностью. Этот диапазон соответствует $d = 10$ при статистическом оценивании $G_{k \rightarrow j}$ (основанном на подгонке эмпирических АР моделей) и дает более высокую точность, чем «усеченный» вариант с $d = 2$, использованный в [6].

Значения УП в ложную сторону найдены ниже при различных значениях параметров осцилляторов. Интервал выборки принят $\Delta t = 11$, при его вариации до сколь угодно больших значений результаты не меняются, что обосновано в [6] и соответствует ситуации, когда единичный временной шаг в динамике (3) мал по сравнению с характерными масштабами колебаний. Для оценки роли осреднения рассчитывается относительное изменение УП $r = (G'_{2 \rightarrow 1} - G_{2 \rightarrow 1}) / G_{2 \rightarrow 1}$, где УП при наличии осреднения обозначено $G'_{2 \rightarrow 1}$, а при

простом прореживании – $G_{2 \rightarrow 1}$. Положительное значение r означает усиление эффекта ложных связей при наличии осреднения. Сильным эффектом ложных связей будем считать такую ситуацию, когда УП «в ложную сторону» превышает 0.01, т.к. такое значение уверенно выявляется по ряду умеренной длины – порядка 100 характерных периодов, аналогично обсуждению в [6]. Особый интерес представляет возможность ситуаций, когда эффект ложных связей силен при относительно слабой взаимной корреляции процессов (т.к. проблемы с выявлением направленных связей при существенной степени синхронности колебаний встречаются часто). Для проверки этого условия ниже рассчитаны значения квадрата взаимной корреляционной функции ρ^2 (коэффициента детерминации), максимальные по всем временным сдвигам, а не только при нулевом сдвиге, как в [6]. Будем считать корреляцию слабой при $\rho^2 < 0.25$, соответствующем коэффициенту корреляции менее 0.5.

Результаты численных исследований.

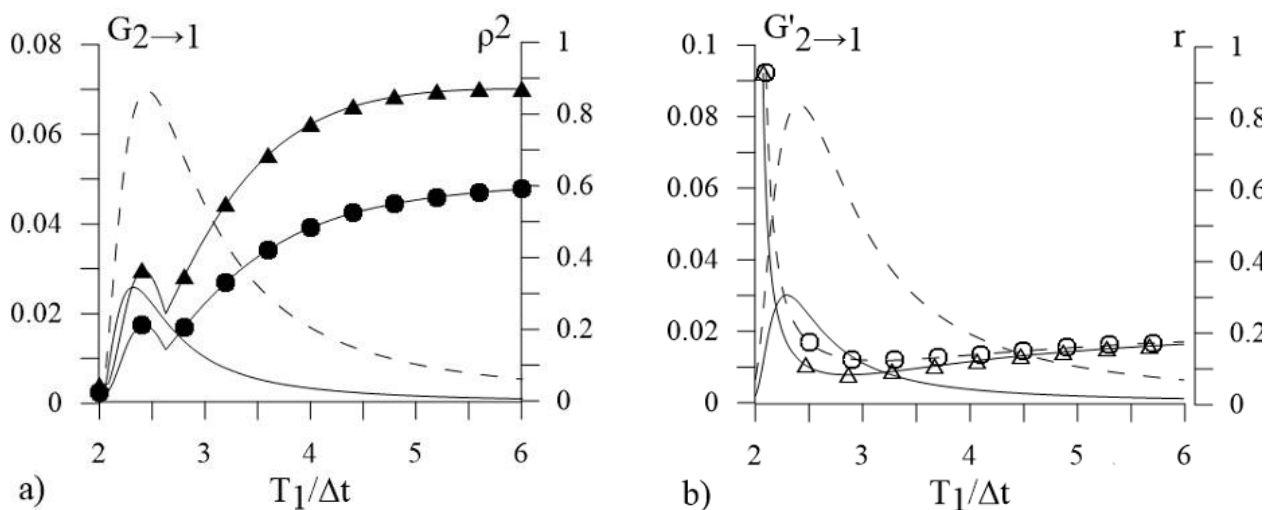


Рис. 1. Характеристики эффекта ложных связей для системы (3) при $T_1 = T_2$, $\tau_1 = 4$, $\tau_2 = 1$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$: а) величины $G_{2 \rightarrow 1}$ при $\gamma = 0.3$ (сплошная линия) и $\gamma = 0.7$ (штриховая линия) и ρ^2 при $\gamma = 0.3$ (кружки) и $\gamma = 0.7$ (треугольники) для простого прореживания; б) величины $G'_{2 \rightarrow 1}$ при $\gamma = 0.3$ (сплошная линия) и $\gamma = 0.7$ (штриховая линия) для выборки с осреднением, отношение r при $\gamma = 0.3$ (полые треугольники) и $\gamma = 0.7$ (полые кружки).

На рис.1,а представлены значения УП «в ложную сторону» (простые линии) и ρ^2 (линии с кружками и треугольниками) при простом прореживании в зависимости от периода колебаний. Коэффициент связи с

рассчитывается так, чтобы удерживать постоянным относительный вклад слагаемого связи $\gamma = c\sqrt{\langle x_1^2 \rangle} / \sigma_2$ в уравнение (3), т.е. примерно постоянную «силу связи».

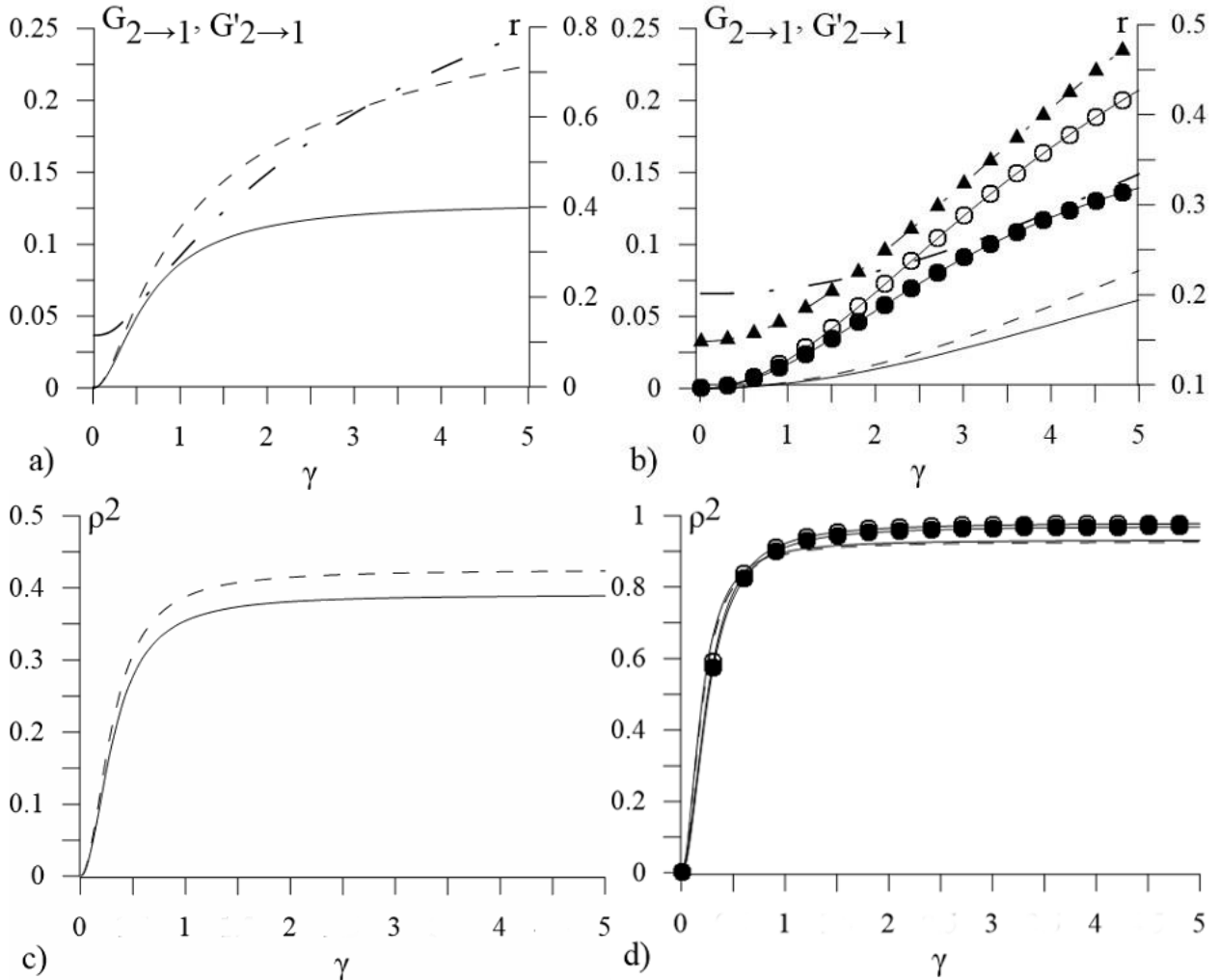


Рисунок 2. Характеристики эффекта ложных связей для системы (3) при $\tau_1 = 4$, $\tau_2 = 1$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$: а) величины $G_{2 \rightarrow 1}$ (сплошная линия), $G'_{2 \rightarrow 1}$ (штриховая линия) и r (штрих-пунктир) при $T_1 = T_2 = 2.37\Delta t$; б) $G_{2 \rightarrow 1}$ (сплошная линия), $G'_{2 \rightarrow 1}$ (штриховая линия) и r (штрих-пунктир) при $T_1 = T_2 = 10\Delta t$, а также $G'_{2 \rightarrow 1}$ (полые кружки), $G_{2 \rightarrow 1}$ (кружки), r (треугольники) при $T_1 = T_2 = 5\Delta t$; в) ρ^2 для простого прореживания (сплошная линия) и осреднения (штриховая линия); д) ρ^2 для простого прореживания и осреднения при $T_1 = T_2 = 10\Delta t$ (сплошная и штриховая линии) и при $T_1 = T_2 = 5\Delta t$ (заполненные и полые кружки).

Выделяются два характерных случая: (i) «очень редкая» выборка с $T_1 / \Delta t \leq 3$, где $G_{2 \rightarrow 1}$ может превышать 0.01 и даже 0.05 при $\rho^2 < 0.25$; (ii) «умеренно» редкая выборка с $T_1 / \Delta t > 3$, где сильный эффект ложных связей возможен лишь при сильной взаимной корреляции. При выборке с осреднением значения УП в ложную сторону также положительны (рис.1,б, простые

линии), причем осреднение обычно приводит к усилению эффекта ложных связей — величина r положительна (за исключением узких областей по Δt , принадлежащих диапазону значений $T_1/\Delta t < 2$, на графике не показаны) и, как правило, превышает 0.1 (рис.1,b, линии с полыми кружками и треугольниками), а иногда становится и существенно больше (в частности, принимает значения порядка сотен тысяч при $T_1/\Delta t = 2.0$). Таким образом, эффект ложных связей при осреднении не только не исчезает, но чаще всего усиливается на десятки процентов.

Рис.2 представляет каждую из выделенных ситуаций отдельно. В случае очень редкой выборки (рис.2,a,c) имеет место рост взаимной корреляции и УП в ложную сторону с ростом силы связи γ . В диапазоне $0.2 < \gamma < 0.5$ имеет место слабая корреляция $\rho^2 < 0.25$ и значительный эффект ложных связей (УП в ложную сторону от 0.01 до 0.05) — это наиболее «опасная» на практике ситуация, впервые показанная здесь. При этом усиление эффекта ложных связей за счет осреднения r составляет 15-20 процентов. С дальнейшим ростом связи взаимная корреляция все же остается умеренной (рис.2,c), тогда как r в рассматриваемом диапазоне значений коэффициента связи почти достигает единицы, т.е. почти двукратного усиления эффекта ложных связей от $G_{2 \rightarrow 1} = 0.12$ до $G'_{2 \rightarrow 1} = 0.2$. В случае «умеренно» редкой выборки (рис.2,b,d) заметный эффект ложных связей проявляется лишь при сильной взаимной корреляции, что было показано в предыдущих работах [6]. Усиление эффекта ложных связей r вновь составляет порядка десятков процентов (от 15 до 50 процентов).

Представленные здесь результаты по влиянию осреднения на величины эффекта ложных связей получены для связанных осцилляторов с идентичными параметрами периода и добротности, однако качественно они остаются теми же и при разных соотношениях параметров (графики не показаны), что только подтверждает типичность обнаруженного усиления эффекта ложных связей при выборке с осреднением. Результаты в значительной степени можно перенести и на нелинейные осцилляторы, где

эффект ложных связей аналогичен [13]. Таким образом, при осреднении эффект ложных связей между осцилляторами не только не исчезает, но и заметно усиливается, что особенно важно для применения на практике. В таких случаях целесообразным становится применение соответствующих тестов на двунаправленность связи [8] (при тех же условиях, что были получены ранее для случая простого прореживания [6]). Стоит особо отметить, что новый результат данной работы состоит также в том, что эффект ложных связей особенно силен при очень редкой выборке (около трех и менее значений наблюдаемой переменной на характерном периоде), когда он может проявляться при значениях взаимной корреляционной функции, существенно меньших единицы. При большей частоте выборки эффект заметно проявляется только при сильной взаимной корреляции наблюдаемых временных рядов, что наглядно продемонстрировано на приведенных графиках.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-12-00291).

Библиографический список

1. Пиковский А.С., Розенблюм М.Г., Куртс Ю. Синхронизация. Фундаментальное нелинейное явление // М.: Техносфера, 2003.
2. G. Sugihara, R. May, H. Ye, et al // Science. 2012. V. 338. P. 496.
3. C.W.J. Granger // Econometrica. 1969. V. 37. No. 3. P. 424-438.
4. Y.-C. Hung, C.-K. Hu // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. 244102.
5. E. Pereda, R. Quiñan Quiroga, J. Bhattacharya // Progr. Neurobiol. 2005. V. 77. P. 1
6. С.Н. Крылов, Д.А. Смирнов, Г.В. Осипов, Б.П. Безручко // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. Вып. 11. С. 94-102.
7. D.A. Smirnov, B.P. Bezruchko // Europhys. Lett. 2012. V. 100. 10005.
8. Д.А. Смирнов, Б.П. Безручко // Изв. ВУЗов. Радиофизика. 2012. Т. 55. № 10-11. С. 736-749.
9. Д.А. Смирнов, И.И. Мохов // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2013. Т. 49. № 5. С. 530-539.
10. Дж. Бокс, Г. Дженкинс, Анализ временных рядов. Прогноз и управление // М.: Мир, 1974.
11. D.A. Smirnov // Phys. Rev. E, 2013. V. 87. 042917.
12. D.W. Hahs, S.D. Pethel // Entropy. 2013. V. 15. P. 767.
13. Д.А. Смирнов, Б. П. Безручко // Изв. Вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2013. Т. 21. № 2. С. 61-73.

ПРИМЕНЕНИЕ АССИМЕТРИЧНОЙ КОПУЛЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ГАРАНТИЙНОГО СРОКА СЛУЖБЫ ЛЕГКОВЫХ АВТОМОБИЛЕЙ

Ломовцева К.С., Кондратьева Е.В., Кондратьева О.Ю.

Саратовский университет им. Н. Г. Чернышевского

Копула является полезным инструментом в области моделирования зависимости между случайными величинами. Большинство существующих копул являются симметричными, в то время как экспериментальные данные, собранные из реального мира проявляют ассиметричный характер. Это обуславливает необходимость разработки и изучения ассиметричных копул, которые могут смоделировать такие данные. А именно те копулы, которые в состоянии уловить связь между двумерными характеристиками, например, описывающими долговечность изделия (срок службы и эксплуатация)[1-5].

Усиление конкуренции на автомобильном рынке, а также увеличение числа автосборочных производств, выпускающих свою продукцию на территории России, привели к тому, что все чаще востребованными становятся исследования, посвященные сервису автомобилей. Наиболее конфликтным и требующим особого внимания в этой сфере является гарантийное обслуживание автомобилей.

В данной работе исследуется метод расчета оптимальной длительности гарантийного срока автомобилей с помощью ассиметричной копулы. Также обсуждаются свойства симметричных и ассиметричных копул[6,7].

Выделяют несколько основных семейств копул: экстремальные, эллипсообразные и Архимедовы, именно они представляют особый интерес. Свое название архимедовы копулы получили из-за аналогии с архимедовой аксиомой. В ней говорится, что для любых двух целых положительных чисел a и b всегда найдется такое число n , что будет верно соотношение $n \cdot a > b$. Копулы данного семейства являются симметричными и имеют следующий вид:

$$C(X_1, X_2) = \varphi^{-1}[\varphi(X_1) + \varphi(X_2)] \quad , (1)$$

где $X_k (k = 1, 2)$ – это случайная величина, а φ – функция-генератор, которую можно выделить во всех архимедовых копулах. Функция-генератор обладает свойством непрерывности, является строго убывающей и выпуклой.

Подробнее семейство Архимедовых копул описывается в работе [1].

Основное преимущество копул любого семейства заключается в том, что они позволяют рассматривать зависимость между случайными величинами вне контекста их распределений. Семейство архимедовых копул чаще всего применяется в оценке финансовых и страховых рисков, при моделировании природных явлений, в информационных технологиях для защиты данных.

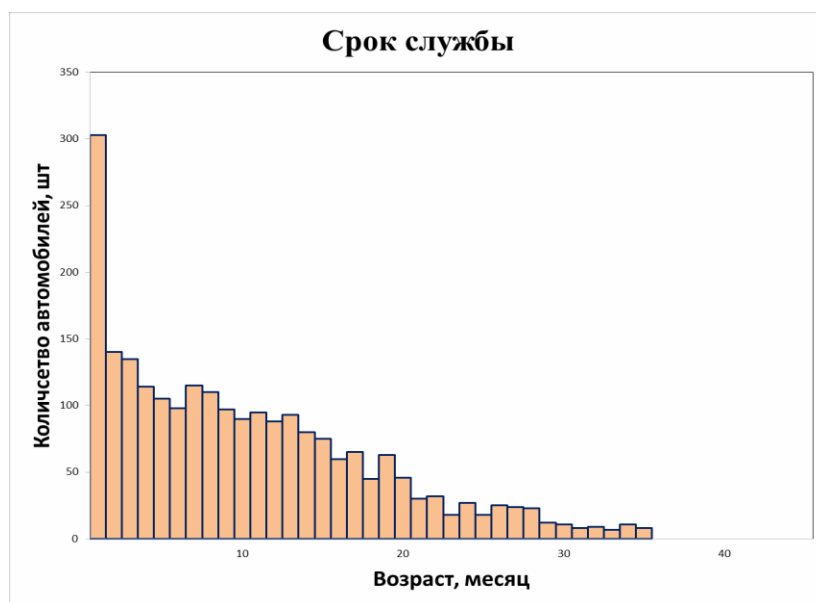


Рисунок 1. Количество автомобилей, чьи владельцы обратились в сервисную службу

Достоинством данного семейства является относительная легкость его генерации, для чего достаточно лишь задать функцию-генератор φ . Но наряду со многими достоинствами симметричных копул существуют и недостатки. Так, при моделирование двумерной надежности данных они:

- не дают реального представления о существующей зависимости между случайными величинами;

- не учитывают связь между двухмерными характеристиками, одна из которых описывается как дискретная случайная величина, а другая как непрерывная случайная величина;
- не учитывают хвостовую зависимость [2].

Они предопределили начало работ по созданию ассиметричных копул.

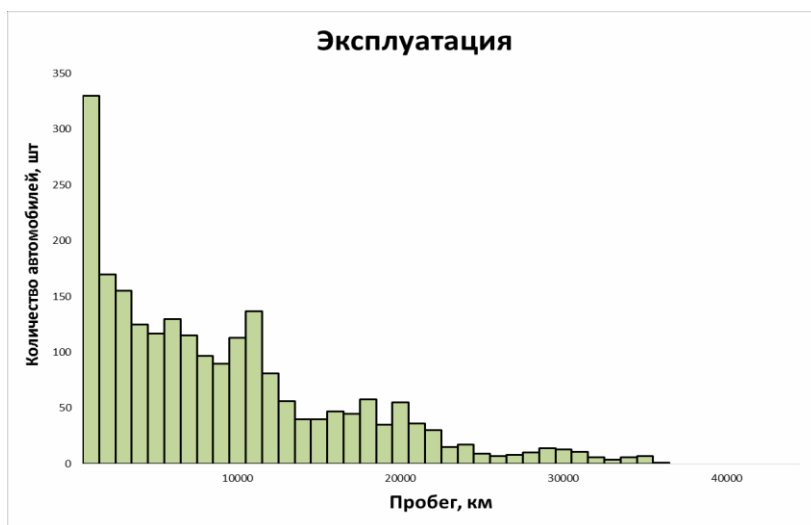


Рисунок 2. Число автомобилей, вышедших из строя, в зависимости от их возраста или пробега

В нашем исследовании, которое основывалось на работе Ч. Ву [2], использовались следующие экспериментальные данные: 3466 автомобиля, гарантийные рекламации которых были собраны у автопроизводителя. В свою очередь, к 2289 автомобилям были предъявлены гарантийные требования в течении 36 месяцев или 30 000 км, а к остальным 1177 автомобилям не было предъявлено требований. На Рисунке 1 представлено количество автомобилей, чьи владельцы обратились в сервисную службу. На Рисунке 2 можем видеть число автомобилей, вышедших из строя, в зависимости от их возраста или пробега

В основе, используемой нами, ассиметричной копулы лежит двумерное распределение времени дожития (продолжительности жизни), а в качестве базовой копулы выступает копула Гумбеля.

$$S(x_1, x_2) = \exp \left\{ - \left[(-\ln(1 - v_1))^\theta + (-\ln(1 - v_2))^\theta \right]^{1/\theta} \right\}, \quad (2)$$

$$v_1 = 1 - \exp \left\{ - \left(\frac{x_1}{\beta_1} \right)^{\alpha_1 \theta} \right\} \text{ и } v_2 = \exp \left\{ - \left(\frac{x_2}{\beta_2} \right)^{\alpha_2 \theta} \right\}, \quad (3)$$

где x_1, x_2 – случайные величины, α_1 – параметр формы распределения, β_1 – параметр разброса, а θ – параметр зависимости между случайными величинами.

В конечном итоге формула расчета двумерной надежности автомобилей выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
 C_I(v_1, v_2) &= p_0 C(v_1, v_2; \theta_1) + p_1 \check{C}(v_1, v_2; \theta_2) \\
 &= p_0(v_1 + v_2 - 1 + C_0(1 - v_1, 1 - v_2; \theta_1)) + p_1(v_1 - C_0(v_1, 1 - v_2; \theta_2)) \\
 &= p_0 \{v_1 + v_2 - 1 + \exp \{- [(-\ln(1 - v_1))^{\theta_1} + (-\ln(1 - v_2))^{\theta_1}]^{1/\theta_1} \}} \\
 &\quad + p_1 \{v_1 - \exp \{- [(-\ln(v_1))^{\theta_2} + (-\ln(1 - v_2))^{\theta_2}]^{1/\theta_2} \}}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

где p_0, p_1 – параметры распределения.

В Таблице 1 и 2 приведены параметры, необходимые для расчета копулы.

Таблица 1 – Параметры распределения

α	α_2	β	β_2	θ_1	θ_2	p_0	p_1
0,81	0,71	25,01	24965,02	3,02	0,48	0,91	0,6

Таблица 2 – Расчетные данные

X₁	303	140	135	114	105	98	115	110	97	90	95	88	93	80	75	60	65	45
X₂	330	170	155	125	117	130	115	97	90	113	137	81	56	40	40	47	45	58
	63	46	30	32	18	27	18	25	24	23	12	11	8	9	7	11	8	1
	35	55	36	30	15	17	9	7	8	10	14	13	11	6	4	6	7	1

Результаты произведенного расчета ассиметричной копулы представлены на Рисунке 3 (а, б).

Вероятность выхода из строя автомобиля велика при долгом его использовании, т.е. при долгом умеренном использовании автомобиль перестанет функционировать слажено, когда ему будет около трех лет. Но при более интенсивной эксплуатации вероятность выхода из строя будет зависеть от проезженных километров. Из этого следует, что гарантийных

требований будет достаточно в случае с интенсивной эксплуатацией, но не для случая умеренного длительного использования.

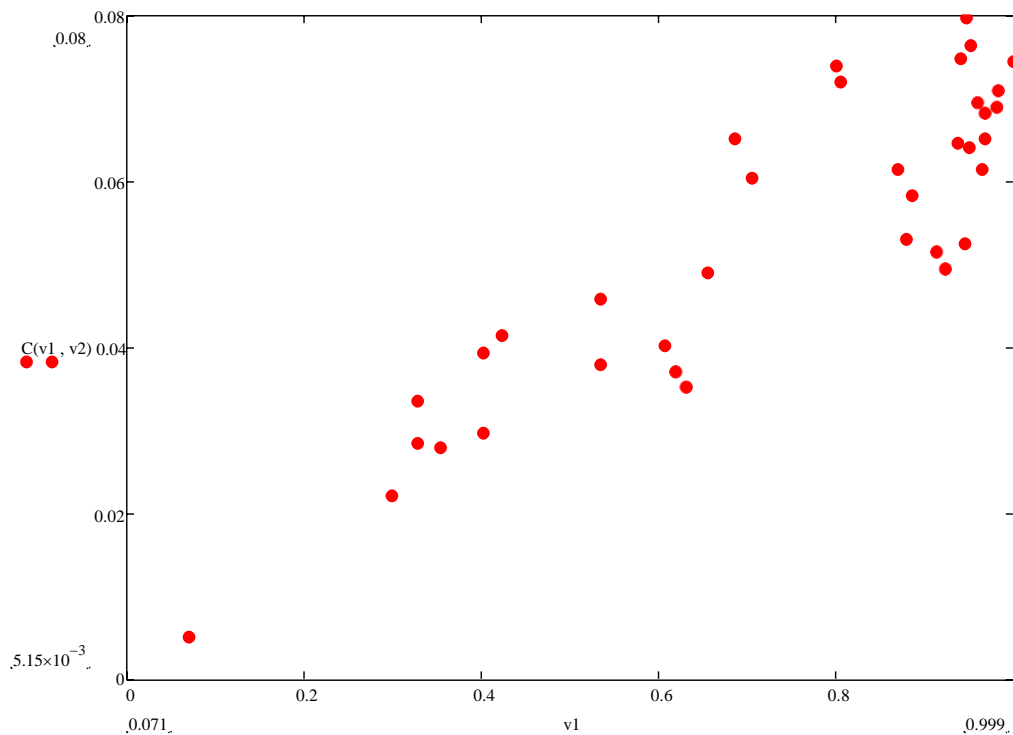


Рисунок 3 (а) Асимметричная копула для расчета надежности (основной характеристикой является срок службы)

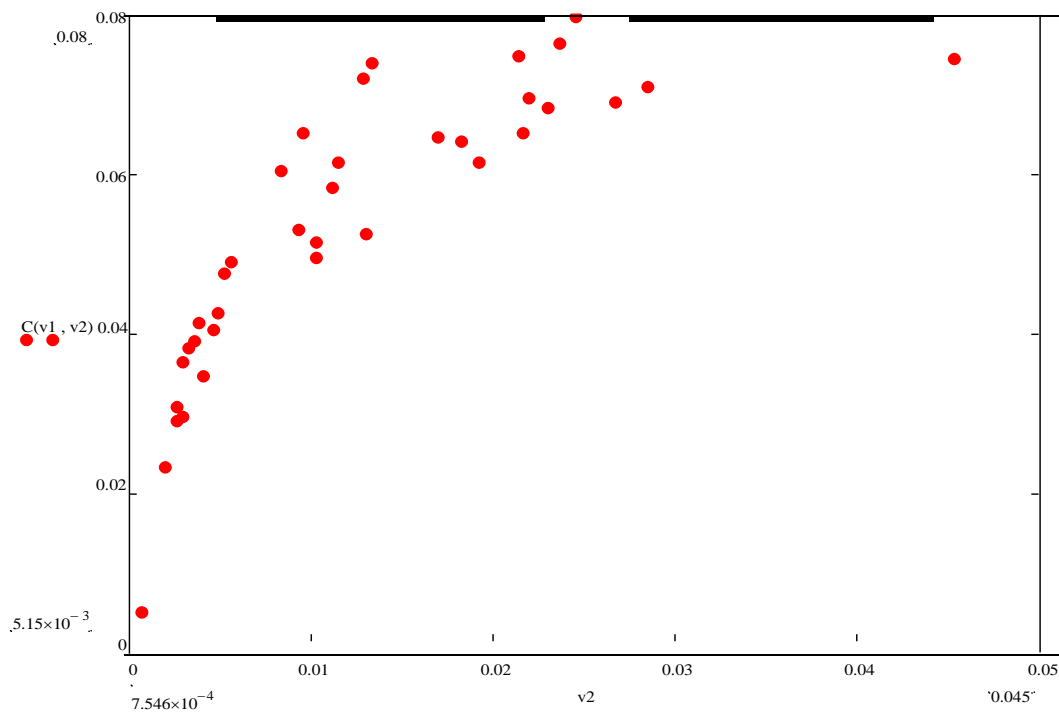


Рисунок 3 (б) Асимметричная копула для расчета надежности (основной характеристикой является эксплуатация)

Применение данного метода позволило смоделировать асимметричную копулу, которая по сравнению с симметричными копулами имеет такие преимущества как:

1. Способность обрабатывать связь. Данная модель асимметричной копулы отличается от других существующих тем, что она создает зависимость между случайными величинами в заданном направлении.
2. Отсутствие ограничений относительно формы маргинальных распределений. С помощью копулы можно выбрать любое из двух распределений и совместить с моделированием надежности данных.
3. Учитывает хвостовую зависимость.

Данное исследование имеет практическую ценность как для производителей, так и для потребителей. Производители смогут более точно оценивать надежность своей продукции и прогнозировать гарантийные требования, необходимые для подготовки планов гарантийных сроков, а также это позволит оптимизировать страховые выплаты клиентам. Они в свою очередь будут оптимально управлять своим бюджетом и выстраивать культуру потребления.

В практическом применении асимметричная копула может служить основой для законодателей в части защиты прав потребителей. В свою очередь, Конгресс США принял несколько законов за последние 100 лет (ОЖК, Закон о гарантиях по потребительским товарам, акт протектора и др.), Европейский Союз принял закон о двухлетней гарантии для всех продуктов, продаваемых в Европе. Асимметричная копула предполагает использование и в других областях, например, в метеорологии, синергии, банковских рисков и др.[8-10].

Библиографический список.

1. *Nelsen, R.* An Introduction to Copulas / R. Nelsen. NY: Springer, 1999. 284 с.
2. *Wu S.*, Construction of asymmetric copulas and its application in two-dimensional reliability modelling // *European Journal of Operational Research*. V. 238(2). P. 476-485.
3. *Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Вениг С.Б.* Оценка надежности нанобиосистем на основе теории копул// В сб.: Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине – 2015. Саратов 2015. С. 182-184.

4. *Kondrateva O.Y., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Safonov R., Lomovtseva K.S., Tugusheva G.R., Venig S.B.* Reliability evaluation of nanostructures using the theory of copulas// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов 2015. С. 26-27.

5. *Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Сафонов Р.А., Ревзина Е.М., Кондратьева Е.В.* К вопросу оценки надежности наноконструктивных элементов с использованием понятия копулы // Сб. Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Саратов. 2015. С. 72-74.

6. *Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V.* Using modern software for modeling of nano-sized materials// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Саратов. 2015. С. 33-36.

6. *Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Сафонов Р.А.* Прогнозирование отказов наносистем// Сб.: Математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании. Саратов, 2015. С. 98-101.

7. *Safonov R., Glukhova O., Bulgakova K., Savostyanov G., Kondrateva O.* Gpu parallel computing in molecular dynamics calculations // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 38.

8. *Абашев А.В., Терин Д.В.* Применение современных математических и компьютерных методов для обработки и анализа результатов исследования устойчивости// Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. 2014. № 12 (70). С. 46-49.

9. *Абашев А.В., Терин Д.В., Мурашев Д.А.* Разработка компонента для формирования библиографии и перекрестных ссылок в msword // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2012. № 8. С. 482-487.

10. *Вениг С.Б., Мурашев Д.А., Терин Д.В., Ставский Д.В.* Индивидуальные образовательные траектории и реализация компетентностного подхода при совместном использовании клипатов и виртуальных информационных образовательных систем // Инженерное образование. 2012. № 11. С. 149-151.

ПРИМЕНЕНИЕ ВАКУУМНОГО НАПЫЛЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ СЛЕДОВ РУК

Матов О. Р. , Захаревич А. М., Маскаева С.А.

oleg.matov@mail.ru

На некоторых поверхностях кожи человека имеются узоры, образованные валиками и бороздками, называемые папиллярными. Их строение строго индивидуально, что позволяет эффективно использовать папиллярные узоры для идентификации личности. Напыление тонких пленок – один из методов выявления следов пальцев рук. В зависимости от вида процесса напыления выделяют термическое испарение, катодное и магнетронное распыление и др. В работе описаны методы выявления потожировых следов путем напыления нанопокровов углерода и золота. Рассмотрены методы резистивного термовакуумного напыления углерода и магнетронного напыления золота для выявления следов рук. Сделаны выводы о преимуществах данных методов и проводится их сравнение.

Ключевые слова: дактилоскопическая идентификация, выявление следов рук, магнетронное напыление, термовакуумное напыление.

APPLICATION OF VACUUM DEPOSITION OF THIN FILM FOR DETECTING FINGERPRINTS

O. R. Matov, A. M. Zacharevich, S. A. Maskaeva

Some human skin surface patterns are formed by ridges and grooves, called papillary. Their structure are strictly individually that allowing you to effectively use the fingerprint for identification. Deposition of thin films is one of the methods for detecting fingerprints. Depending on the type of spraying process emit thermal evaporation, evaporation technique and magnetron deposition and others. In the work developed new methods for detecting sweat and grease deposits by depositing nanocoating. We consider the methods of resistive evaporation technique carbon and magnetron deposition gold for detecting fingerprints. We made the conclusions about the benefits of these methods and compares them.

Key words: fingerprinted identification, detecting fingerprints, magnetron deposition, evaporation technique.

Многообразие предметов, обнаруживаемых на месте происшествия и несущих потожировые следы подозреваемых лиц, позволяет использовать эти следы в качестве доказательств. Производство дактилоскопических исследований непосредственно зависит от правильных действий экспертов-криминалистов, связанных с обнаружением, фиксацией и изъятием этих следов при проведении осмотра места происшествия. Результаты дактилоскопической экспертизы имеют важное, а часто решающее значение для уличения преступника, поскольку устанавливается факт пребывания конкретного лица на месте происшествия и его непосредственный контакт с предметом.

Замечательное свойство кожи пальцев и ладоней рук заключается в способности отпечатываться на тех предметах, к которым прикасались руки человека. Причем образование следов происходит независимо от желания и воли человека, что обусловлено физиологическими свойствами кожи – тем, что поверхность кожи всегда покрыта выделениями пота и жира. Переходя при прикосновении на предмет, они образуют на нем следы, копирующие папиллярные узоры. С точки зрения физики, перенос потожирового вещества локально меняет свойства поверхности, что является основой выявления следов пальцев рук.

Одним из методов выявления следов пальцев рук является использование селективного нанесения нанопокровов. Процесс напыления представляет собой нанесение покрытия на поверхность предмета с помощью струи, содержащей атомы или частицы напыляемого материала, осаждающиеся на основном материале при ударном столкновении с его поверхностью [1].

Метод селективного нанесения нанопокровов на поверхности пригоден для выявления потожировых следов практически на любых предметах. Высокая чувствительность данного метода к количеству потожирового вещества позволяет выявлять следы большой давности [2].

В данной работе рассмотрены методы выявления следов пальцев, основанные на напылении тонких пленок: метод резистивного термовакуумного напыления углерода и магнетронного напыления золота.

Принцип магнетронного напыления основан на явлении физического распыления катода (материала мишени) ускоренными ионами рабочего газа, которые бомбардируют поверхность мишени под действием приложенного отрицательного потенциала.

Характерной особенностью магнетронов является использование специальной магнитной системы, которая создает над распыляемой мишенью замкнутое по контуру туннелеобразное магнитное поле. Благодаря этому полю создаются условия для получения локализованной плазмы высокой плотности и, соответственно, высокой плотности ионных токов, распыляемых мишенью.

В отличие от других способов нанесения тонкопленочных покрытий, способ магнетронного распыления позволяет достаточно тонко регулировать толщину металлического слоя, а значит и высокая повторяемость процесса, что практически исключает риск «перепроявления» следов [1].

Суть процесса термовакуумного испарения состоит в переводе осаждаемого материала с помощью нагрева в парогазовую фазу.

Образующийся при этом парогазовый поток в высоком вакууме распространяется прямолинейно, т.к. отсутствует соударение с молекулами остаточного газа — длина свободного пробега молекул в остаточном газе на порядок превышает расстояние от источника до подложки; газ попадает на подложку, поверхность которой холоднее источника пара; при этом происходит конденсация и образование пленки [1].

Рабочей установкой является установка EMITECH K450X, предназначенная для термического распыления углерода с целью напыления углеродного наноразмерного покрытия. Опциональный модуль K350 предназначен для магнетронного распыления золота.

Магнетронное напыление золота происходит в вакууме. После напуска в камеру рабочего газа (аргона) и до установления равновесного состояния, зажигается плазма, которая распыляет золотую мишень. Вылетевшие атомы золота осаждаются на поверхность образца. Толщина покрытия контролируется током плазмы и временем напыления.

Исследуемые образцы: прозрачная и белая пластиковая пластина, белая и зеленая глянцевая бумага, латунная пластина и образец из нержавеющей стали с потожировыми следами рук, переносятся в камеру вакуумного катодного напылителя.

Напыление проводится при давлении $1 \times 10^{-1} - 9 \times 10^{-2}$ мбар в течение одной минуты при токе ~ 20 мА. Толщина создаваемого слоя составляет примерно 100-150 Å. После напуска атмосферы в камеру напылителя образцы извлекаются.

На образце из нержавеющей стали и прозрачной пластмассы выявленные потожировые следы представляют собой островковый рост пленки без отобразившихся признаков строения папиллярного узора. Результаты эксперимента дают основание для вывода о том, что напыление золотого нанопокрyтия позволяет выявлять потожировые следы человека на пластмассе, глянцевой бумаге, латуни, но не подходят для нержавеющей стали (см. рис. 1 – 3).

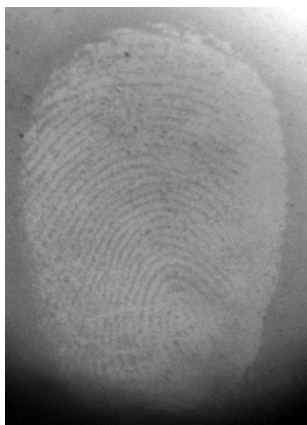


Рисунок 1. Фотография следа пальца руки, выявленного на белом пластиковом образце



Рисунок 2. Фотографии следов пальцев рук, выявленных на глянцевой бумаге (слева – глянцевая бумага белого цвета, справа – зеленого)

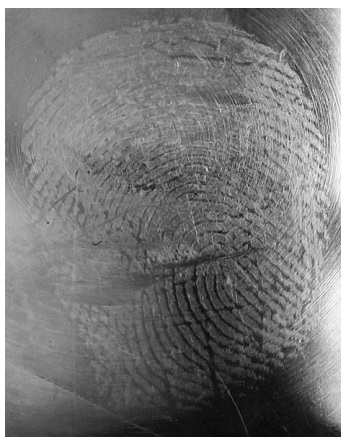


Рисунок 3. Фотография следа пальца руки, выявленного на образце из латуни

Напыление углеродного покрытия также происходит в вакууме порядка $1 \times 10^{-1} - 9 \times 10^{-2}$ мбар при пропускании тока сквозь углеродную нить, что приводит к ее взрывному испарению. Выбирая толщину нити, можно регулировать толщину получаемого покрытия.

Исследуемые образцы: образец из нержавеющей стали, белая матовая бумага, белая пластиковая пластина, зеленая и белая глянцевая бумага с потожировыми следами рук, переносятся в камеру вакуумного термического напылителя. В качестве напыляемого материала используется графитовая нить. Напыление проводится при давлении $1 \times 10^{-1} - 9 \times 10^{-2}$ мбар в течение одной минуты при токе ~ 20 мА. После напуска атмосферного воздуха в камеру образцы извлекаются.

На образце из нержавеющей стали и белой матовой бумаге выявленные потожировые следы представляют собой пятна без отобразившихся признаков строения папиллярного узора. Результаты эксперимента дают основание для вывода о том, что напыление углеродного нанопокртия позволяет выявлять потожировые следы человека на пластике и глянцевой бумаге, но не подходит для матовой бумаги и нержавеющей стали (см. рис. 4 – 5).



Рисунок 4. Фотография следа пальца руки, выявленного на белой пластиковой пластине



Рисунок 5. Фотографии следов пальцев рук, выявленных на глянцевой бумаге (слева – глянцевая бумага белого цвета, справа – зеленого)

По результатам исследования можно сделать заключение, что напыление золотого покрытия наиболее универсально, поскольку полученная пленка обладает высокой адгезией с поверхностью большинства образцов. Недостатком такого способа считается высокая стоимость напыляемого материала, а при напылении очень тонких слоев золота возможен островковый рост пленки, то есть получение неоднородного покрытия, что уменьшает качество получаемых результатов.

Напыление углеродного покрытия является доступным методом выявления потожировых следов рук, поскольку углерод достаточно дешевый материал. Существенным недостатком такого способа считается низкая стойкость полученной пленки. Кроме того, в процессе напыления нет возможности контроля толщины получаемого нанопокрyтия.

Библиографический список

1. *Азаренков Н. А.* Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии. Харьков : ХНУ им. В. Н. Каразина, 2009. 209 с.
2. *Матов О. Р.* Выявление следов рук эфирами цианакриловой кислоты и методом термовакuumного напыления. Ленинградская область : СЗИПК ФСКН России, 2011. 40 с.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ПОЛУПРОВОДНИКОВ ГРУППЫ A^2B^6

Михайлов А.И., Кабанов В.Ф.

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

В работе проведено экспериментальное и теоретическое исследование особенностей электронного спектра квантовых точек состава $CdSe/CdS/ZnS$. Анализ исследуемых образцов позволил оценить положение первых трех уровней электронного спектра квантового объекта. Получено хорошее качественное и количественное согласование экспериментальных результатов с теоретической оценкой. Показано, что механизм наблюдавшегося тока автоэлектронной эмиссии через квантовую точку удовлетворительно описывается теорией Моргулиса–Стрэттона в условиях эксперимента. **Ключевые слова:** квантово-размерный эффект, квантовая точка, электронный спектр, полупроводниковые материалы группы A^2B^6 , туннельные ВАХ, автоэлектронная эмиссия.

В настоящее время исследование полупроводниковых структур с квантово-размерными эффектами является одними из наиболее актуальных и перспективных направлений физики, техники и технологии

полупроводников, поскольку напрямую связано с разработкой физических и технологических основ создания и совершенствования приборов и устройств наноэлектроники и оптоэлектроники. Наличие «размерного» квантования энергетического спектра электронов и дырок в таких структурах при определенных условиях может существенным образом повлиять на физические свойства макрообъектов – полупроводниковых образцов, содержащих такие квантово-размерные структуры, приводя к ряду уникальных свойств, отличных от свойств, наблюдающихся в объемных полупроводниках.

В том случае, когда размеры элементов этих структур в каком-либо направлении становятся сравнимы с длиной волны де Бройля электрона, согласно законам квантовой механики происходит изменение энергетического спектра носителей заряда (спектр становится дискретным для движения носителей вдоль оси, по которой оно ограничено). Такие структуры принято называть квантово-размерными.

Реальные полупроводниковые образцы, используемые в дискретных твердотельных электронных приборах, могут содержать такие либо одиночные, либо многочисленные и определенным образом упорядоченные квантово-размерные объекты. К наиболее известным квантово-размерным объектам относятся структуры с двумерным электронным газом – эпитаксиальные пленки, МДП-структуры, полупроводниковые гетероструктуры и ряд других; структуры с одномерным газом – квантовые нити или проволоки; структуры с нульмерным электронным газом – квантовые точки (КТ). КТ являются одними из наиболее интересных квантово-размерных структур с точки зрения применения в оптоэлектронных системах (светоизлучающие диоды, лазеры, ячейки солнечных батарей и фотоэлектрических преобразователей).

К числу наиболее перспективных и интересных с практической точки зрения полупроводниковых материалов уже многие годы относятся полупроводники из групп A^3B^5 и A^2B^6 . При определении перспектив

конкретных полупроводниковых материалов с нужными электрофизическими характеристиками для формирования квантово-размерных объектов и структур целесообразно проводить предварительные оценки и расчеты, базирующиеся на фундаментальных физических принципах и обладающие высоким уровнем предсказательной способности. Анализ результатов таких оценок и расчетов позволяет предсказать и в первом приближении интерпретировать многие особенности изучаемых объектов и существенно сузить круг поиска перспективных и новых материалов с требуемыми свойствами. Это дает возможность значительно сократить затраты на подготовительные технологические операции и трудоемкие эксперименты.

Достаточно перспективными материалами в этом плане представляются полупроводниковые соединения A^3B^5 , что обусловлено особенностями их энергетического спектра и экстремально малыми значениями эффективной массы электронов проводимости. Последнее обеспечивает значение длины волны де Бройля электронов проводимости, исчисляемое десятками нанометров. В связи с этим специфические явления, связанные с размерным квантованием энергетического спектра электронов, могут проявляться в сравнительно больших по размерам структурах, например, на частях выступов шероховатой поверхности полупроводниковых образцов *InSb*, которые по сути представляют собой квантово-размерные объекты [1].

Получение КТ соединений A^3B^5 сопряжено с определенными технологическими трудностями, поэтому предварительный анализ проводился при исследовании квантовых точек полупроводниковых материалов группы A^2B^6 (в частности, соединения *CdSe*), технология получения которых более отработана и доступна. Материалы группы A^2B^6 имеют высокий квантовый выход люминесценции, фотостабильность и широко используются в оптоэлектронике. Перспективными для получения макрообъектов – полупроводниковых образцов, включающих упорядоченные

структуры из квантовых точек, являются технологии, которые используют в своей основе эффекты самоорганизации, когда структуры определенных размеров формируются сами, под влиянием внутренних сил, действующих в процессе роста. К числу таких технологий относится технология Ленгмюра-Блоджетт [2].

Значительный интерес представляют гибридные (сочетающие органические неорганические компоненты) структуры, в которых органическая компонента необходимым образом модифицирует свойства основной неорганической компоненты. Чаще всего на поверхности наночастиц создают слой стабилизирующего органического соединения для предотвращения слипания наночастиц в конгломераты.

В работе были получены и исследованы монослои квантовых точек состава $CdSe/CdS/ZnS$, сформированные на поверхности водной субфазы и перенесенные на твердые подложки с проводящим слоем индий-оловянного оксида (ИТО) по технологии Ленгмюра-Блоджетт. Сами квантовые точки были синтезированы по методике, описанной в работах [3. 4]. КТ имели следующую структуру: основная часть – ядро из $CdSe$ и два внешних изолирующих слоя (оболочки) из CdS/ZnS - материалов со схожим типом кристаллической решетки, но с большей шириной запрещенной зоны. Оболочки использовались для более эффективной пассивации поверхности и увеличения квантового выхода при флуоресценции квантовых точек.

Для формирования монослойной структуры КТ в исходный коллоидный раствор гидрофобных квантовых точек $CdSe/CdS/ZnS$, стабилизированных олеиновой кислотой, был добавлен хлороформ с концентрацией порядка $(5\div 6)\times 10^{-6}$ М. Исходный коллоидный раствор КТ предварительно подвергался очистке от избыточного количества олеиновой кислоты, не связанной с КТ, путем фильтрации с использованием полиэтилена высокой плотности в качестве мембраны.

Полученные пленочные образцы были исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), сканирующей

туннельной микроскопии (СТМ). Размеры КТ, оцененные с использованием ПЭМ полученных монослоев, оказались следующими: диаметр ядра 8 нм, толщина оболочки порядка 1 нм (рис. 1). Оценка длины волны де Бройля электрона для *CdSe* показала величину порядка $11\div 12$ нм. Это позволило сделать вывод, что наночастицы *CdSe/CdS/ZnS* являются квантовыми точками - квантово-размерными объектами и должны обладать соответствующими особенностями в электрофизических свойствах.

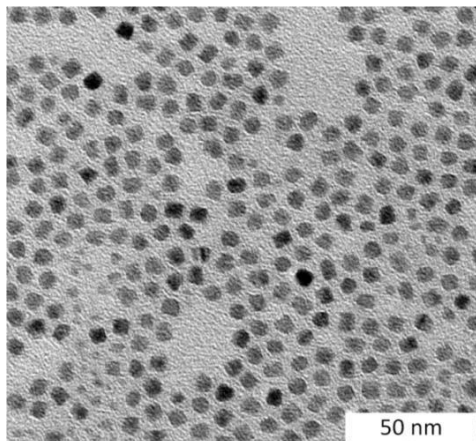


Рисунок 1. ПЭМ - изображение монослоя КТ *CdSe*

Электронные и оптические свойства полупроводниковых наночастиц (или КТ) и их содержащих полупроводниковых макрообъектов (в частности, ширина запрещенной зоны, длина волны излучения и поглощения, коэффициент экстинкции) будут зависеть от размеров полупроводниковых наночастиц [5].

Электрон в КТ ведет себя как в трехмерной потенциальной «яме». В этом случае электронный спектр энергий представляется набором уровней для электронов и дырок с интервалом между ними, пропорциональным $1/a^2$, где a – характерный геометрический размер квантовой точки. Изменяя размеры квантовой точки можно управлять частотами межуровневых переходов или длиной волны поглощения и испускания.

Известно, что большинство электрических и оптических свойств полупроводников зависят от концентрации свободных носителей заряда. Равновесная концентрация электронов проводимости n , энергия которых

лежит в интервале от \mathcal{E}_{\min} до \mathcal{E}_{\max} , при заданной температуре и уровне легирования определяется функцией распределения и плотностью состояний $g(\mathcal{E})$:

$$n = \int_{\mathcal{E}_{\min}}^{\mathcal{E}_{\max}} f_{F-D}(\mathcal{E}) g(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad , \quad (1)$$

где $f_{F-D}(\mathcal{E})$ - равновесная функция Ферми-Дирака, \mathcal{E}_{\min} - минимальная энергия, которую могут иметь электроны, участвующие в проводимости. Под \mathcal{E}_{\max} можно понимать максимальную энергию электронов в зоне проводимости.

В случае квантовых точек энергетический спектр носит дискретный характер, а $g(\mathcal{E})$ описывается с помощью δ -функции Дирака и представляет собой теоретически совокупность бесконечно узких и высоких пиков [6]:

$$g(\mathcal{E}) = \sum_{l, m, n} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{l, m, n}) \quad . \quad (2)$$

При использовании упрощенной модели КТ кубической формы с ребром a

$$\mathcal{E}_{l, m, n} = \frac{(\pi \hbar)^2}{2 m^*} \cdot \frac{1}{a^2} \cdot \left(l^2 + m^2 + n^2 \right) \quad , \quad (3)$$

где $l, m, n = 1, 2, 3, \dots$ – положительные числа; m^* – эффективная масса электрона.

Наличие рассеяния носителей приводит к уширению энергетических уровней и ограничению высоты пиков. Такое уширение в реальной КТ за счет конечного времени жизни носителей заряда вследствие спонтанного излучения, взаимодействия с фононами, а также ряда других процессов может достигать 10 и более процентов для первых трёх уровней КТ [7].

Туннелирование электронов из электрода ИТО в зонд туннельного микроскопа (ТМ) происходит через дискретные уровни квантово-размерного объекта. Модельные представления этого процесса отображены на рис. 2 а, b при приложенных напряжениях V_1 и V_2 , соответствующих туннелированию через 1-й и 2-й электронные энергетические уровни дискретного спектра КТ.

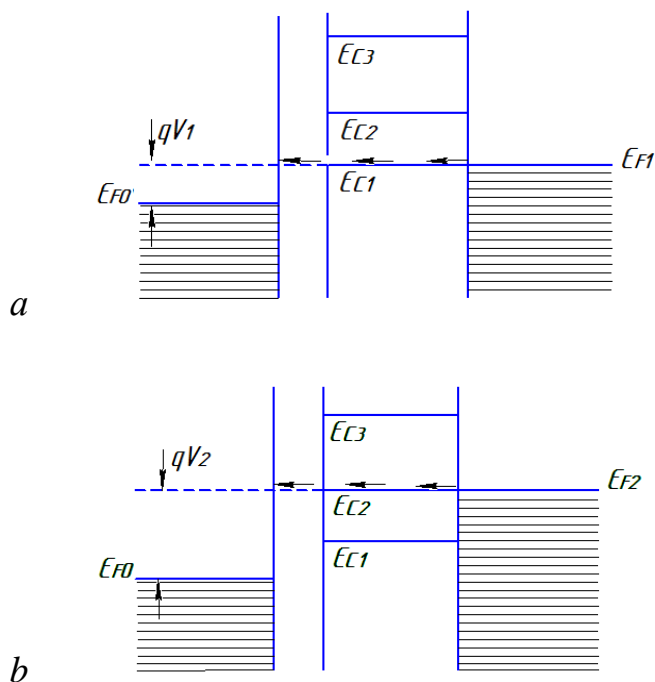


Рисунок 2. Туннелирование электронов через квантовую точку

Расчетные значения энергии электрона для первых четырех разрешенных уровней в соответствии с (3) для *CdSe* представлены на рис. 3. В расчетах использовалось значение эффективной массы электронов в зоне проводимости *CdSe* $m^* = 0,13 m_0$, где m_0 - масса свободного электрона.

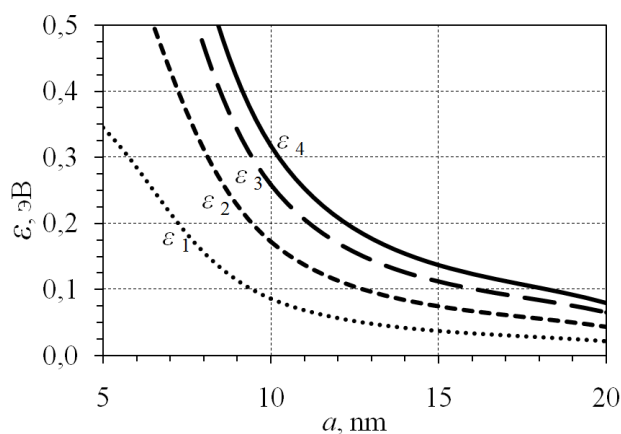


Рисунок 3. Значения энергии электрона для четырех первых разрешенных уровней в зависимости от характерного размера нанообъекта *a*

Методы ПЭМ и оптической спектроскопии не всегда могут обеспечить однозначную интерпретацию экспериментальных данных в случаях, когда квантовая частица не является однородной по структуре или несколько частиц образуют конгломерат. В связи с этим, для более полного анализа особенностей электрофизических свойств полученных пленочных образцов с

КТ, в частности электронного спектра, в данной работе использован метод СТМ. Исследования проводились с помощью сканирующего зондового микроскопа СЗМ НАНОЭДЬЮКАТОР-I по известным методикам [8].

Локализованные энергетические уровни, связанные со свойствами квантово-размерного объекта, проявляются на нормированных на статическую проводимость дифференциальных туннельных ВАХ в виде отдельных пиков. Для анализа экспериментальных туннельных ВАХ аналогично подходам, изложенным в работах [1, 9], использовалась зависимость $(dI/dV)/(I/V)$ от напряжения V , типичный вид которой представлен на рис. 4.

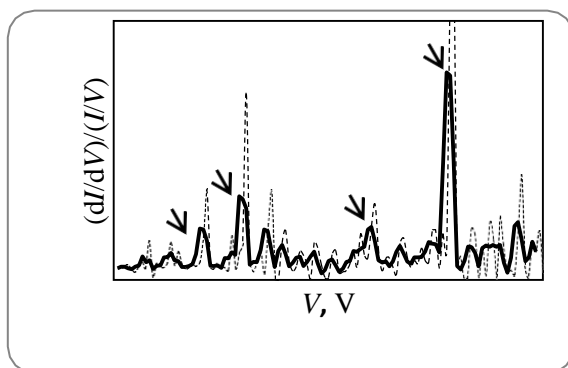


Рисунок 4. Нормированные дифференциальные ВАХ КТ *CdSe*
(Утолщенная линия – линия тренда)

В данной работе рассматривались нормированные дифференциальные туннельные ВАХ при отрицательном потенциале смещения на подложке (рис. 4). В этом случае туннелирование электронов из квантово-размерного объекта в зонд туннельного микроскопа (ТМ) происходит с дискретных уровней квантово-размерного объекта. Дискретный спектр электронов проводимости квантово-размерного объекта обуславливает пики на нормированных дифференциальных ВАХ (на рис. 4 указаны стрелками). В соответствии с этими физическими модельными представлениями можно качественно объяснить основные особенности и закономерности, получаемые при экспериментальных исследованиях туннельных ВАХ, и

провести некоторые оценочные расчеты характеристик квантово-размерного объекта.

Расчетные значения энергии электрона для первых трёх разрешенных уровней в соответствии с (3) для исследуемых квантовых точек *CdSe* равнялись (0,10 ÷ 0,12) эВ; (0,20 ÷ 0,24) эВ и (0,36 ÷ 0,40) эВ соответственно при погрешности не меньше $kT = 0,026$ эВ ($T = 300$ К). Оценка значений энергии первых трёх уровней при анализе экспериментальных туннельных ВАХ с учетом усреднении по ряду исследуемых образцов дала величины (0,12 ÷ 0,14) эВ; (0,24 ÷ 0,26) эВ; (0,44 ÷ 0,48) эВ, что хорошо согласуется с расчетными значениями.

Важным для понимания электронных процессов в самих рассматриваемых КТ, а также туннелирования электронов через уровни КТ является анализ модельных представлений автоэлектронной эмиссии. Полагая, что плотность тока автоэлектронной эмиссии описывается формулой [10]:

$$j_s = q n \left(\frac{k T}{2\pi m_0} \right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{8\pi\sqrt{2m_0} A_s^3 \cdot \theta}{3hqE}}, \quad (4)$$

можно сделать некоторые дополнительные оценки и уточнения этих представлений. В формуле (4): q , m_0 – модуль заряда и масса электрона; θ – значения функции Нордгейма; A_s – работа выхода электронов из полупроводника; E – локальная напряженность электрического поля; остальные обозначения в (4) стандартные.

Типичные экспериментальные данные для различных образцов представлены на рис. 5. Линейная ВАХ, полученная в координатах $(\ln I - V^{-1})$, позволяет сделать вывод, что механизм наблюдавшегося тока автоэлектронной эмиссии из исследуемых образцов удовлетворительно описывается теорией Моргулиса–Стрэттона в диапазоне значений напряженности электрического поля, соответствующем условиям экспериментов.

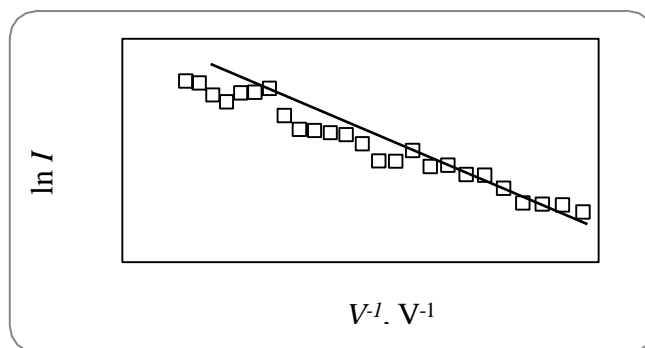


Рисунок 5. ВАХ КТ *CdSe* в координатах $\ln I$ от V^{-1}

Для проведения численной оценки значений плотности тока локальная напряженность электрического поля определялась как $E = \beta V$, где V – приложенное напряжение; β - коэффициент пропорциональности, который зависит от формы и размеров системы катод – анод [8, 11].

Величина работы выхода электронов для *CdSe* выбиралась равной 5,6 эВ, размер зазора между зондом и КТ - 1 нм. Использование рассчитанных и известных литературных данных позволило провести оценку θ – величины функции Нордгейма, учитывающей понижение потенциального барьера. Для КТ *CdSe* она оказалась порядка 10^{-3} , что существенно меньше, чем значение функции θ при эмиссии электронов из металла ($0,7 \div 0,9$), и является характерным значением для эмиссии из полупроводников [1]. Анализ расчетных и экспериментальных данных позволил предположить, что полупроводниковая КТ в некотором смысле выполняет такую же функцию, как и область пространственного заряда в приповерхностной области объемного полупроводника при автоэлектронной эмиссии. Это в итоге приводит к ослаблению напряженности локального электрического поля вблизи эмитирующей поверхности.

Таким образом, в данной работе на основе анализа нормированных дифференциальных туннельных ВАХ проведено экспериментальное исследование и теоретическая оценка особенностей электронного спектра квантовых точек состава *CdSe/CdS/ZnS*. Анализ квантовых объектов исследуемых образцов позволил оценить положение первых трех уровней

электронного спектра квантового объекта. Получено хорошее качественное и количественное согласование экспериментальных результатов с теоретической оценкой, что подтверждает правомерность сформулированных модельных представлений. Показано, что механизм наблюдавшегося тока автоэлектронной эмиссии через квантовую точку удовлетворительно описывается теорией Моргулиса–Стрэттона в диапазоне значений напряженности электрического поля, соответствующем условиям экспериментов.

Авторы выражают благодарность профессору Горячевой И.Ю. за предоставленные образцы с квантовыми точками и заведующему лабораторией Глуховскому Е.Г. за помощь при проведении измерений.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 16-07-00093/16 и № 16-07-00185/16.

Библиографический список

1. Михайлов А.И., Кабанов В.Ф., Жуков Н.Д. Особенности автоэлектронной эмиссии из субмикронных выступов шероховатой поверхности антимионда индия // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. В. 12. С. 8 – 14.
2. Янклович А.И. Регулярные мономолекулярные структуры ПАВ – плёнки Ленгмюра-Блоджетт / в кн. Успехи коллоидной химии. Л.: Химия. 1991. С. 262-291.
3. Reiss P., Protie`re M., Li L. Core/Shell semiconductor nanocrystals // SMALL. 2009. V. 5. N. 2. P. 154–168.
4. Speranskaya E.S. , Beloglazova N.V., Lenain P., De Saeger S, Wang Z., Zhang S., Hens Z., Knopp D., Potapkin D.V., Goryacheva I.Y. Polymer-coated fluorescent CdSe-based quantum dots for application in immunoassay // Biosensors and Bioelectronics. 2014. V. 53. P. 225-231.
5. Yu W.W. Semiconductor quantum dots: synthesis and water-solubilization for biomedical applications // Expert Opin. Biol. Ther. 2008. V. 8. P. 1571 – 1581.
6. Шик А.Я. и др. Физика низкоразмерных систем / СПб.: Наука, 2001. 160 с.
7. Королев Н.В, Стародубцев С.Е., Бормонтов Е.Н., Клиских А.Ф. Особенности электронного спектра открытой сферической квантовой точки с дельта-потенциалом // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13. № 1. С. 67-71.
8. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии / М.: Техносфера, 2009. 144 с.
9. Михайлов А.И., Кабанов В.Ф., Жуков Н.Д. Проявление размерного квантования на выступах шероховатой поверхности полупроводников АЗВ5 // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. В. 21. С. 88-94.
10. Егоров Н.В., Шешин Е.П. Электронная эмиссия / М.: Интеллект, 2011. 703 с.
11. Кузьменко А.П., Кузько А.Е., Тимаков Д.И. Влияние на зарядообразование электрических полей на поверхностях наноструктурированных электродов // ЖТФ. 2013. Т. 83. В. 2. С. 91-96.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ МЕТОДИКА ПРОЕКТИРОВАНИЯ ИНЖЕНЕРНЫХ 3D-МОДЕЛЕЙ В КОМПАС-3D

Ревзина Е.М., Кожевников И. О., Кондратьева О.Ю., Терин Д.В.

Роль информационных технологий в учебном процессе и научной деятельности постоянно растет. Возможности средств компьютерной техники в плане обучения будущих специалистов, а также количество разработок в этой области увеличиваются, а методики обучения постоянно совершенствуются [1]. Непрерывно растет число программных комплексов для моделирования 3D-объектов, в том числе конструкторских CAD/CAE/CAM пакетов, предполагающих создание моделей деталей и конструкций, их расчёт и последующее формирование программ для станков ЧПУ и 3D-принтеров[2,3].

Наиболее известный российский программный продукт КОМПАС-3D компании АСКОН – это система автоматизированного проектирования на основе математического ядра С3D и параметрических технологий с возможностью оформления документации в соответствии со стандартами серии ЕСКД и СПДС [4]. Применяется он в различных областях деятельности (строительстве, архитектуре, машиностроении и др.) для проектирования и подготовки конструкторско-технологической документации с 1989 года, и остается востребованным в настоящее время. В качестве достоинств, обеспечивающих популярность КОМПАС-3D среди пользователей, следует отметить возможность построение изображений ассоциативных моделей, полностью отвечающих требованиям стандартов, поддержку большинства распространенных форматов данных, высокое качество графического представления и эргономичность[5].

Программный продукт КОМПАС-3D внедрен в учебный процесс направлений подготовки «Электроника и микроэлектроника», «Электроника и наноэлектроника», «Биотехнические системы и технологии», «Физика»,

«Материаловедение и технологии материалов» в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского». Авторами подготовлены и внедрены в учебный процесс методические материалы для обучения работе в системе автоматизированного проектирования КОМПАС-3D [6].

С целью эффективного обучения работе с системой КОМПАС-3D разработан методический комплекс, который содержит несколько методических указаний, реализующих построение изображений и чертежей. Методический комплекс используется при проведении лабораторных, практических занятий и для организации самостоятельной работы студентов. Для обучения студентов в рассматриваемом методическом комплексе предложена методика поэтапной разработки модели детали и ее чертежа. Данная методика применяется для проектирования вариантов графических работ, выполняемых в учебном процессе дисциплин «Инженерная графика», «Инженерная и компьютерная графика» [7-9].

При обучении созданию 3D-модели студентам показывается набор основных последовательных действий и команд в графическом редакторе – алгоритм создания модели, который в дальнейшем используются ими при самостоятельном создании более сложных инженерных моделей. В процессе обучения работе в КОМПАС-3D студенты вычерчивают простую деталь по заданным размерам. На примере простой детали студентам показывается, что модель в системе КОМПАС-3D – «тело» – создается на основе плоской фигуры – «эскиза» – с последующим поэтапным формообразующим перемещением эскиза в трехмерной системе координат – «операцией». Последовательность вызовов операций совпадает с последовательностью вычерчивания элементов чертежа детали. Элементы чертежа детали вычерчиваются при помощи определенным образом сформированной функции, значения аргументов которой записываются в дерево построения

модели в той последовательности, в которой выполнялись соответствующие команды в редакторе. Процесс проектирования 3D-модели детали сводится к процессу пошагового формирования функций и последовательности их вызовов. Таким образом, в процессе обучения студенты должны получить представление о том, что деталь любой формы можно представить как совокупность отдельных геометрических тел, и научившись строить отдельные геометрические тела, можно с помощью булевых операций (объединения, вычитания и пересечения) над объемными элементами (сферами, призмами, цилиндрами, конусами, пирамидами) построить деталь любой сложности[10,11].

Создаваемые чертежи используются в учебном процессе дисциплин «Инженерная графика», «Инженерная и компьютерная графика» в качестве вариантов индивидуальных заданий графической работы «Построение изображений», например, по двум заданным видам детали построить 3D-модель и рабочий чертеж детали. Рассмотрим этапы создания 3D-модели.

1. Выбор рабочего пространства: создается файл КОМПАС-3D по шаблону Деталь, содержащему необходимые слои и стили (можно осуществить из программы).

2. Задание области основы детали: выбирается плоскость, на которой создается основной эскиз.

3. Создание основы детали: с помощью одноименной команды на выбранной плоскости создается эскиз основы детали, который далее с помощью операций вращения или выдавливания перемещается вокруг выбранной оси, либо вдоль выбранного направления, заполняя весь объем позади себя.

4. Создание конструктивных элементов: выбирается рабочая плоскость и создаются эскизы дополнительных элементов детали, которые аналогичным формообразующим образом перемещаются относительно основы.

5. Редактирование элементов детали: выполняемые операции последовательно записываются в дерево построения и становятся зависимыми от предыдущих, таким образом, что редактирование элементов дерева (эскизов и соответствующих им операций) приводит к изменению последующих.

6. Проверка изделия: проводится визуальный сравнительный анализ правильности созданной трехмерной модели детали и всех размеров с помощью команды изменения вида или вращения и манипулятора.

7. Создание ассоциативного чертежа построенной модели детали: в автоматическом или полуавтоматическом режиме с помощью команды «Ассоциативные виды» создается чертеж модели, состоящий из одного или нескольких стандартных ассоциативных видов. После выбора необходимых видов и удаления лишних в редакторе программы расставляются недостающие элементы чертежа: главные размеры, осевые линии, линии разрезов и секущих плоскостей, штриховки.

При прохождении студентами производственной практики предоставляется возможность распечатать макет созданной ими ранее 3D-модели на 3D-принтере. Таким образом, осуществляется полный цикл обучения будущих специалистов – от мысленного образа к готовому изделию[12].

Данная методика позволяет оптимизировать процесс обучения проектированию трехмерных ассоциативных моделей типовых деталей и отдельных единиц. Выполнение индивидуальных заданий в учебном процессе с помощью представленной методики позволяет студентам формировать навыки самостоятельной работы и развивать пространственное восприятие, конструктивно-геометрическое мышление, способности к анализу и синтезу пространственных форм и отношений на основе графических моделей пространства, практически реализуемых в виде чертежей конкретных пространственных объектов.

Библиографический список

1. *Юрин В. Н.* Компьютерный инжиниринг в инженерном образовании: этапы развития // Новые материалы и технологии – НМТ-2012: материалы Всерос. науч.-техн. конференции. – М.: МАТИ, 2012. – С. 378–380.
2. *Клинаев Ю.В., Терин Д.В.* Методы и технологии компьютерных вычислений в математическом моделировании// уч. пос.; М-во образования и науки РФ, СГТУ. Саратов, 2010.
3. *Биленко Д.И., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Вениг С.Б.* Методологические аспекты моделирования и прогнозирование поведения нанокпозиционных материалов в quantumwise// Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2014. Т. 14. № 2. С. 46-49.
4. *Слепова С. В., Шахина М. А.* Система автоматизированного проектирования Компас-3D (мультимедийный курс лекций) // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2014. № 3–2. С. 207–208.
5. *Ревзина Е. М., Кондратьева О. Ю.* Освоение системы автоматизированного проектирования «Компас» Методические указания к выполнению лабораторных работ по дисциплине «Инженерная и компьютерная графика» – Lambert, 2014. – 72 с. ISBN 978-3-659-33024-7
6. *Терин Д.В., Клинаев Ю.В., Монахова О.А.* Проблемы организации самостоятельной работы студентов в рамках преподавания естественно-научных дисциплин в техническом вузе// Инженерное образование. 2012. № 11. С. 133-135.
7. *Корчагин С.А., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Романчук С.П.* Многомасштабное моделирование диэлектрических свойств композитов слоистой структуры // Сб.: Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами . Саратов. 2016. С. 56-59.
8. *Корчагин С.А., Клинаев Ю.В., Терин Д.В., Романчук С.П.* Вычислительный эксперимент с моделями фрактальных наноккомпозитных структур// Вестник СГТУ . 2015. Т. 3. № 1 (80). С. 33-40.
9. *Кальдин Д.А., Мурашев Д.А., Клинаев Ю.В., Терин Д.В.* Оптимизация алгоритмов компьютерного моделирования трехмерного физического пространства// Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2012. № 8. С. 751-755.
10. *Романчук С.П., Терин Д.В.* Математическое моделирование композитных сред// Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2012. № 8. С. 781-785.
11. *Романчук С.П., Терин Д.В., Кац А.М., Клинаев Ю.В.* Математическое моделирование структур и процессов взаимодействия электромагнитного излучения с core-shell нанообъектами// Вестник СГТУ. 2011. Т. 4. № 2 (60). С. 98-102.
12. *Кац А.М., Ставский Ю.В., Терин Д.В.* Информационное обеспечение и научно-методические аспекты создания эффективного многоуровневого сопровождения лекционных курсов учебных дисциплин// Вестник СГТУ. 2007. Т. 2. № 2. С. 142.

AN ASSESSMENT OF THE PHASE SYNCHRONIZATION AND THE SPECTRAL INDICES OF CARDIOVASCULAR CONTROL USING TWO-HOUR RECORDS

Skazkina V. V.¹, Borovkova E. I.¹, Shvartz V.A.²

¹ *National Research Saratov State University*

² *Bakulev Scientific Center for Cardiovascular Surgery*

The study of phase synchronization and of the spectral indices of various oscillatory processes using many-hour records is an important task that can give fundamental information about the structure and interaction of regulatory subsystems of the cardiovascular. In this work we made a step in the study of long records and research of fluctuations of the phase synchronization and the spectral indices of various oscillatory processes using two-hour records of healthy people.

Keywords: photoplethysmogram, heart rate variability, low-frequency oscillations, healthy subjects, earlobe, finger

АНАЛИЗ ФАЗОВОЙ СИНХРОНИЗАЦИИ И СПЕКТРАЛЬНЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ РЕГУЛЯЦИИ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТОЙ СИСТЕМЫ С ПОМОЩЬЮ ДВУХЧАСОВЫХ ЗАПИСЕЙ

Сказкина В.В.¹, Боровкова Е.И.¹, Шварц В.А.²

¹ *Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского*

² *Научный центр сердечно-сосудистой хирургии им. А.Н. Бакулева*

Исследование фазовой синхронизации и спектральных составляющих различных колебательных процессов с помощью многочасовых записей является важной задачей, которая может дать фундаментальную информацию о структуре и взаимодействии регуляторных процессов сердечно-сосудистой системы. В этой работе мы сделали шаг в изучении длинных записей и исследований флуктуаций фазовой синхронизации и спектральных составляющих различных колебательных процессов с помощью двухчасовых записей здоровых людей.

Ключевые слова: фотоплетизмограмма, вариабельность сердечного ритма, медленные колебания, здоровые испытуемые, мочка уха, палец

The study of biological signals is currently an actual direction of advancement of medicine. An achievement in this area can be used in the development of new diagnostic methods. The study of individual body systems and the quality of their functional interactions are of particular interest for researchers in recent years. Notably, an increased interest is the study of phase synchronization of various oscillatory processes [1-5]. The proposed measure S characterizing the total percentage of phase synchronization between the oscillatory processes in the heart rhythm regulation and microcirculatory regulation with the frequencies of

about 0.1 Hz, can be extensively used in medical research and clinical practice for diagnostics of human health [1,5-10]. As it has been shown in previous works, healthy subjects have high degree of synchronization of regulatory processes [1-3,7-9]. The study of the spectral indices of photoplethysmogram variability is of interest for assessment of cardiovascular control.

A detailed analysis of the dynamics of interaction between subsystems was not conducted. Now the most of the conducted research in this area used short records of about ten minutes long. This can be explained by the high complexity of the experiment, which requires many hours of experimental data registration. In addition, analysis of biological signals demands special approaches of nonlinear dynamics and statistics. Another difficulty is the development of peculiar methods for the analysis of long time series.

However, the study of phase synchronization of various oscillatory processes using many-hour records is an important task that can give fundamental information about the structure and interaction of regulatory subsystems of the cardiovascular system and can be applied in medicine. Therefore, in this work we made a step in the study of long records and research of fluctuations of the phase synchronization of various oscillatory processes and the spectral indices of photoplethysmogram variability using two-hour records of healthy people.

As an index of phase synchronization we used the quantitative measure of the total percentage of phase timing (S), proposed in [1,5-14]. For the analysis of dynamics of fluctuations in the measures of synchronization 0.1 Hz-rhythms we used the long two-hour records of cardiointervalogram (CIG) and the photoplethysmogram (PPG). The measure S was calculated in moving window (length 300 seconds) with a shift of the window (one second). We evaluated the measures S using special software [15]. As the spectral indices of photoplethysmogram variability we used the total spectral power (TP), high-frequency (HF) and low-frequency (LF) ranges of TP in percents (HF% and LF%), LF/HF ratio.

We have 2 experiments with 2 people, aged 20 years. The people did not have any acute chronic diseases. The subject during the study was in a sitting position and his breath was arbitrary. Channels of photoplethysmograms were recorded from the left ear lobe of the person, the distal phalanx of the ring finger of the left hand and the finger of the right leg. The duration of each recording was 120 minutes. Sampling frequency of recording was 250 Hz.

Then, for the oscillations with the frequency of about 0.1 Hz in PPG and CIG, the measure S was calculated in the moving window (with the length being equal to 300 seconds) with a shift of the window for one second. The spectral indices of photoplethysmogram variability were also calculated in moving window (length 300 seconds) with a shift of the window (one second).

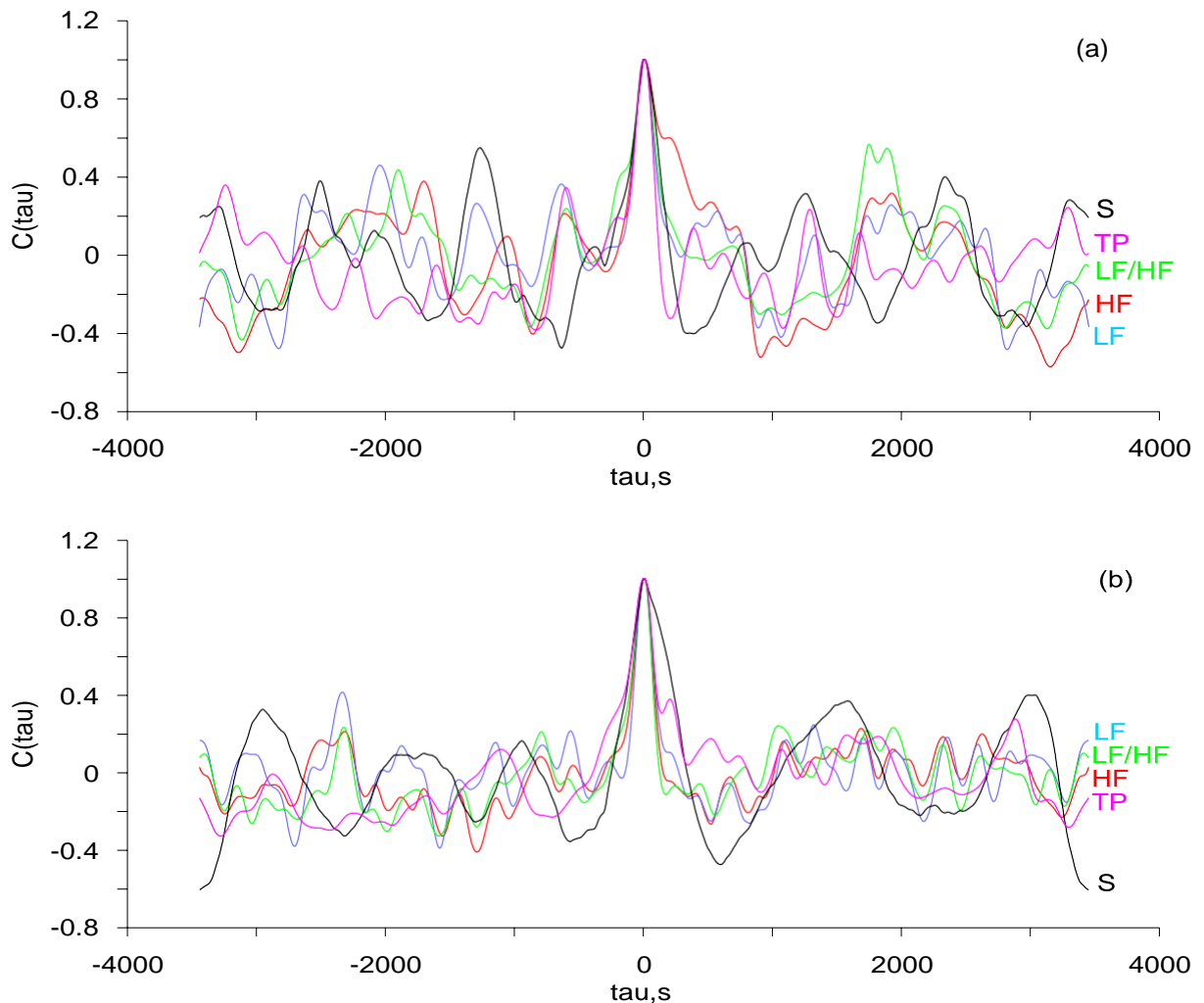


Fig. 1 Illustration of the autocorrelation function of fluctuations of the phase synchronization index and the spectral indices for the first (a) and second (b) experiments. Evaluation of the autocorrelation function was carried out using a moving window with a length of 1000 seconds

For determining the period of oscillation we determined the autocorrelation function of this signal in the moving window with the length equal to the 1000 seconds.

In Figs. 1, we can notice the variation of the index of phase synchronization and spectral indices. The period of these oscillations is about hundreds of seconds. The appearance of such periodic changes in the value of synchronization and spectral indices has a particular interest because the period of these oscillations characterizes the humoral regulation processes.

In summary, we conducted the research of slow fluctuations of the phase synchronization index between 0.1 Hz subsystems of regulation of microcirculation and heart rate using two-hour records. We also analyzed the movement of the spectral indices of photoplethysmogram variability. The dynamics of fluctuations for the autonomic regulation of cardiovascular system exhibits little-studied slow oscillations.

The main limitation of our study is a small number of included subjects. The further studies in subjects of different age will be desirable. Then we want to analyze the result using difference statistic methods.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, Grant No. 15-02-03061, and by the President of the Russian Federation, Grant No. MD-4368.2015.7.

References

1. Боровкова Е.И., Караваев А.С., Киселев А.Р., Шварц В.А., Миронов С.А., Пономаренко В.И., Прохоров М.Д. Метод диагностики синхронизованности 0,1 Гц ритмов вегетативной регуляции сердечно-сосудистой системы в реальном времени // *Анналы аритмологии*. - 2014. -Т. 11 -№2. - Р.129-136.
2. Нейфельд И.В., Киселев А.Р., Караваев А.С., Прохоров М.Д., Бобылева И.В., Гриднев В.И., Киричук В.Ф., Рогожина И.Е. Особенности показателей вегетативной регуляции кровообращения и variability сердечного ритма у женщин в перименопаузе // *Анналы аритмологии*. -2014. -Т. 11. -№2. -С.98-108.
3. Киселев А.Р., Гриднев В.И., Караваев А.С., Посненкова О.М., Пономаренко В.И., Прохоров М.Д., Безручко Б.П. Сравнительная оценка влияния фозиноприла и ателолола на синхронизацию колебаний с частотой около 0,1 Гц в ритме сердца и микроциркуляции крови у больных артериальной гипертонией // *Рациональная Фармакотерапия в Кардиологии*. -2010. -Т.6. -№6. -С. 803-811.

4. Киселев А.Р., Караваев А.С., Гриднев В.И., Посненкова О.М., Шварц В.А., Пономаренко В.И., Прохоров М.Д., Безручко Б.П. Сравнение динамики показателей вегетативной регуляции сердечно-сосудистой системы на фоне лечения эналаприлом и метопрололом у больных артериальной гипертонией // Саратовский научно-медицинский журнал. -2010. – Т. 6. -№ 1. –С. 061-072.
5. Караваев А.С., Пономаренко В.И., Прохоров М.Д., Гриднев В.И., Киселев А.Р., Безручко Б.П., Посненкова О.М., Струнина А.Н., Шварц В.А. Методика реконструкции модели системы симпатической барорефлекторной регуляции артериального давления по экспериментальным временным рядам // Технологии живых систем. -2007.-Т.4. -№4. –С. 34-41.
6. Флейшман А.Н. Вариабельность ритма сердца и медленные колебания гемодинамики: нелинейные феномены в клинической практике. Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика 2011; 19 (3): 179–183. (Fleishman AN. Heart rate variability and slow hemodynamic oscillations: Nonlinear phenomena in clinical practice. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Prikladnaya Nelineynaya Dinamika 2011; 19 (3): 179–183. Russian)
7. Karavaev A. S., Kiselev A. R., Gridnev V. I., Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Posnenkova O. M., Ponomarenko V. I., Bezruchko B. P., Shvartz V. A. Phase and Frequency Locking of 0.1 Hz Oscillations in Heart Rate and Baroreflex Control of Blood Pressure by Breathing of Linearly Varying Frequency as Determined in Healthy Subjects // ISSN 0362-1197. Human Physiology. - 2013. -V. 39. -No. 4. -P. 416-425.
8. Kiselev A.R., Gridnev V.I., Karavaev A.S., Posnenkova O.M., Prokhorov M.D., Ponomarenko V.I., Bezruchko B.P. The dynamics of 0.1 Hz oscillations synchronization in cardiovascular system during the treatment of acute myocardial infarction patients // Applied Medical Informatics. -2011. –V. 28. –No. 1. –P. 1-8.
9. Kiselev A.R., Gridnev V.I., Prokhorov M.D., Karavaev A.S., Posnenkova O.M., Ponomarenko V.I., Bezruchko B.P. Selection of optimal dose of beta-blocker treatment in myocardial infarction patients basing on changes in synchronization between 0.1 Hz oscillations in heart rate and peripheral microcirculation // Journal of Cardiovascular Medicine. -2012. –V. 13. –Iss. 8. – P.491-498.
10. Rosenblum MG, Pikovsky AS, Kurths J, et al. Phase synchronization: from theory to data analysis. Handbook of Biological Physics 2001; 4: 279–321
11. Kiselev A.R., Gridnev V.I., Prokhorov M.D., Karavaev A.S., Posnenkova O.M., Ponomarenko V.I., Bezruchko B.P., Shvartz V.A. Evaluation of 5-year risk of cardiovascular events in patients after acute myocardial infarction using synchronization of 0.1-Hz rhythms in cardiovascular system // Annals of Noninvasive Electrocardiology. 2012. V.17. P.204–213.
12. Schäfer C., Rosenblum M.G., Kurths J., and Abel H.-H. Heartbeat synchronized with ventilation. Nature 1998; 392: 239-240
13. Kiselev A.R., Gridnev V.I., Prokhorov M.D., Karavaev A.S., Posnenkova O.M., Ponomarenko V.I., Bezruchko B.P. "Effects of antihypertensive treatment on cardiovascular autonomic control: a prospective study", Anatolian Journal of Cardiology, 2014, V.14, N.8, P.701–710.
14. Kiselev A.R., Gridnev V.I., Posnenkova O.M., Shvartz V.A., Khorev V.S., Karavaev A.S., Bezruchko B.P., Prokhorov M.D., Ponomarenko V.I. Interaction of 0.1-Hz oscillations in heartrate variability and distal blood flow variability // Human Physiology. 2012. Т. 38. № 3. С. 303-309.
15. Безручко Б.П., Гриднев В.И., Караваев А.С., Киселев А.Р., Пономаренко В.И., Прохоров М.Д., Рубан Е.И. Св-во о гос. рег. программы для ЭВМ «Программа для выделения последовательности RR-интервалов электрокардиограммы и построения эквидистантной кардиоинтервалограммы (Extracor)» №2010611339. Зарег.16.02.2010.

МОРФОЛОГИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА, ПОЛУЧЕННЫХ РАСПЫЛЕНИЕМ КОЛЬЦЕВОЙ МИШЕНИ

*Смирнов А.В., Галушка В.В., Гребенников А.И., Махди. О. С.,
Симаков В.В., Синёв И.В., Кисин В.В.*

Саратовский государственный университет имени Н.Г.Чернышевского

e-mail: kisin@sgu.ru

В работе исследуется влияние геометрии распыления кольцевой мишени на морфологию осаждаемых при этом поликристаллических пленок диоксида олова. Идентифицированы три стадии роста зёрен пленки. На первом этапе скорость роста в каждой точке поверхности зерна зависит от направления на источник распыленных атомов. На второй стадии роста в области зерна, прилегающей к подложке, образуются зоны, в которые не попадает прямой поток распыленных атомов. Наконец, на третьей стадии роста соседние кристаллиты начинают препятствовать поступлению атомов на боковые поверхности зерен. Результаты проведенного моделирования согласуются с микрофотографиями скола пленок диоксида олова.

Ключевые слова: морфология поликристаллических пленок, диоксид олова, радиочастотное магнетронное распыление.

Морфология поверхности контролирует многие физические и химические свойства пленки. Морфология зависит от метода формирования пленки, рабочих параметров процесса осаждения, легирующих добавок [1-4]. Геометрия системы осаждения пленки также влияет на формирование зёрен [5,6]. Целью данной работы было исследование вклада геометрического фактора в формирование морфологии поликристаллической пленки диоксида олова при магнетронном высокочастотном (ВЧ) распылении.

Плётки были получены методом реактивного распыления мишени из диоксида олова в ВЧ разряде магнетронного распылительного узла установки типа ORION 400 (Vac-Tec, Республика Корея). Распыление проводилось в атмосфере аргона и кислорода при соотношении потоков газов, поступающих в камеру установки, равном 3:1. В качестве подложек использовался монокристаллический кремний.

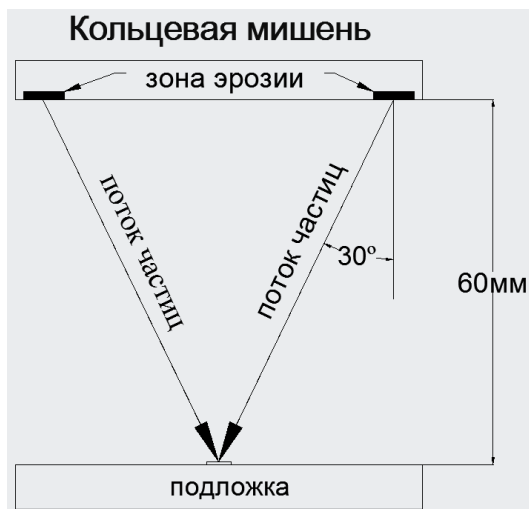


Рисунок 1. Поперечное сечение распылительной системы плоскостью, проведённой через её диаметр.

Подложка располагалась напротив центра мишени на расстоянии диаметра зоны эрозии мишени. Исследовалась область пленки, для которой угол между нормалью к поверхности подложки и направлением на зону эрозии составлял 30° (Рисунок 1). Микрофотография скола плёнки получалась с помощью электронного растрового микроскопа типа Mira II

LMU (Tescan, Чешская Республика).

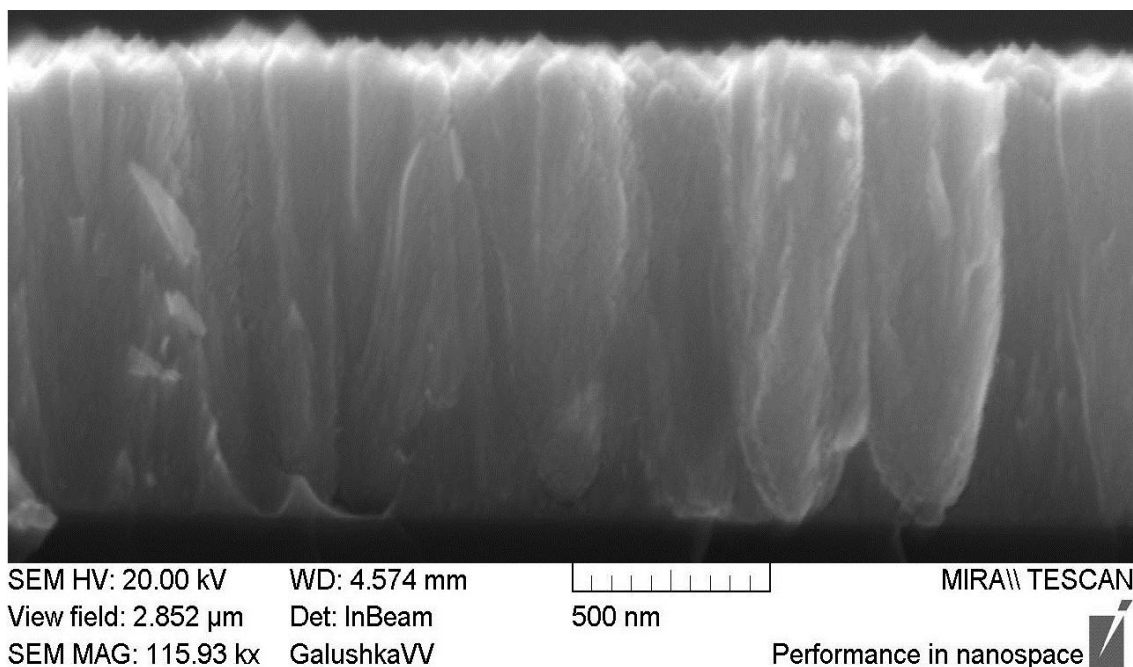


Рисунок 2. Микрофотография скола плёнки

На рисунке 2 представлена микрофотография скола плёнки. На ней видно, что плёнка состоит из зёрен, ориентированных перпендикулярно подложке.

Рассмотрим формирование зерна плёнки из трехмерного зародыша в форме полусферы. Для упрощения будем считать, что зёрна

осесимметричны. Скорость роста зародыша в каждой точке его поверхности зависит от величины потока материала на единицу площади поверхности, которая пропорциональна косинусу угла между поверхностью роста и направлением пучка падающих атомов. Общий поток атомов на единичную поверхность является суммой всех потоков на эту поверхность. Рассмотрим формирование сечения зерна, проведённого через его ось симметрии перпендикулярно подложке. К боковым поверхностям зерна вещество поступает только из одного источника, так как второй источник затеняется телом зародыша (рисунок 3а). Поэтому скорость роста в направлении 1 превышает скорость роста в направлениях 2 примерно в 3 раза. Предположим, что за единицу времени в направлениях 2 размер зародыша увеличился на толщину Δ , а в направлении 1 - на 3Δ . Центр новой поверхности сместится вдоль оси, перпендикулярной подложке на некоторую величину. Скорость роста вдоль подложки, т.е. в направлениях 2, станет меньше, чем Δ . В точке 2 она станет равной Δ (рисунок 3б). У каждого следующего слоя толщина вблизи поверхности будет уменьшаться. Уменьшение будет продолжаться до тех пор, пока угол между направлением потока вещества и нормалью в точке падения не станет равным 90° . В этом случае зерно станет затенять само себя. Поток вещества не сможет попасть в точку, где поверхность зерна соприкасается с подложкой. Рост вдоль подложки прекращается. В каждый следующий момент времени поверхность зерна, которая оказывается в тени, перестаёт расти, как показано на рисунке 3(в). Рост зёрен будет продолжаться до тех пор, пока соседние зёрна не начнут затенять боковые поверхности друг друга. Скорость роста вдоль поверхности подложки изменится, что окажет влияние на профиль зерна (рисунок 3г).

Таким образом, рост зерна можно разделить на три этапа. На первом этапе скорость роста в каждой точке поверхности зерна изменяется в зависимости от направления на источник распыленных атомов. На втором этапе в области подложки, прилегающей к зерну, начинают образовываться

теневые зоны, куда невозможен приток распыленных атомов. Наконец, соседние кристаллиты начинают затенять друг друга и препятствовать потокам атомов на боковые грани.

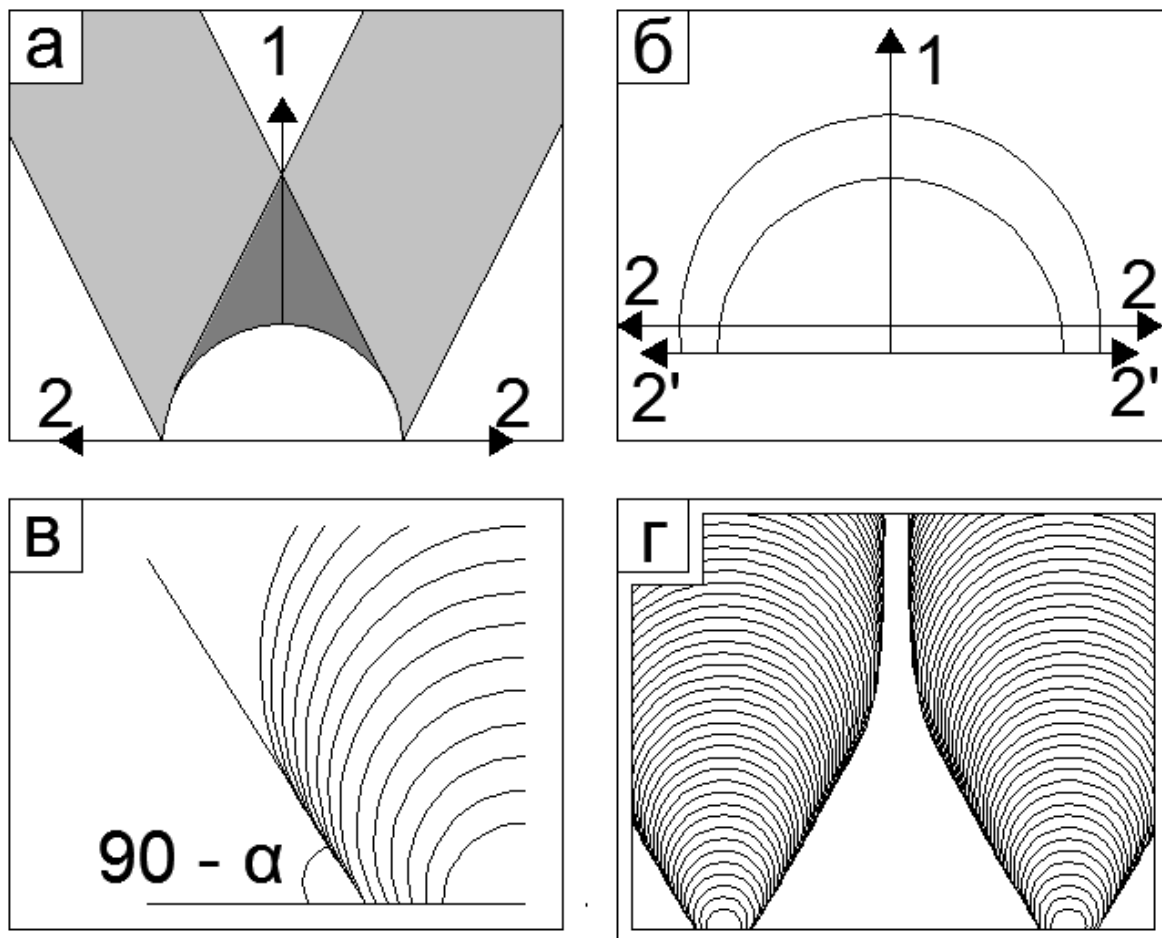


Рисунок 3 Стадии роста кристаллитов

Используя среду программирования LabView, был смоделирован рост зерна плёнки. Результат показан на рисунке 4. Полученный профиль хорошо повторяет форму реальных зёрен. Плотность образующихся на подложке зародышей и особенности роста вершины зёрен не объясняются с точки зрения геометрии процесса напыления и, видимо, связаны с кристаллическими свойствами диоксида олова.

Таким образом показано, что форма сечения зерна поликристаллической плёнки, полученной из кольцевого источника, может быть объяснена геометрией осаждения плёнки. Однако геометрия не

объясняет экспериментально наблюдаемых особенностей строения вершины зерен, а также величины плотности зерен на подложке.

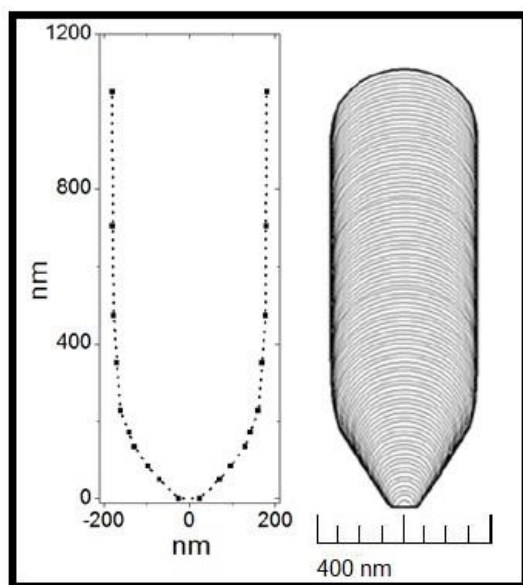


Рисунок 4. Сравнение реального бокового профиля зерна(слева) и смоделированного (справа).

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 16-07-00821-а, 16-07-00818-а, 16-38-00633 мол_а, совместной программы «Михаил Ломоносов» Министерства образования и науки РФ и Немецкой службы академических обменов № 16.708.2016/ ДААД (персональный номер 91604516) и Совета по грантам Президента РФ (СП-677.2015.4).

Библиографический список

1. *Dejun L., Tianmo L., Hejing Z. et al.* Gas sensing mechanism and properties of Ce-doped SnO₂ sensors for volatile organic compounds // *Materials Science in Semiconductor Processing.*-2012.- Vol. 15.- Is. 4.- P. 438–444;
2. *Смирнов А.В., Аткин В.С., Гребенников А.И., Ревзина Е.М., Кондратьева О.Ю., Синёв И.В.* Получение сферических микрочастиц вольфрама в поле ультразвуковой волны в присутствии активатора// *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика.* 2015. Т. 15. № 4. С. 13-17.
3. *Симаков, В.В. и др.* Формирование пленок диоксида олова с вертикально ориентированными нанопорами // *Нанотехника.* – 2011. - № 3. – С. 45-46.
4. *Feng H.T., Zhuo R.F., Chen J.T. et al.* Axial periodical nanostructures of Sb – doped SnO₂ grown by chemical vapor deposition // *Physica E.*-2009.- Vol. 41.- P. 1640–1644;
5. *Sibirev N. V., Tchernycheva M., Timofeeva M. A. et al.* Influence of shadow effect on the growth and shape of InAs nanowires // *Journal of Applied Physics.*-2012.- №111, 104317.- doi: 10.1063/1.4718434;
6. *Karabacak T.* Thin-film growth dynamics with shadowing and re-emission effects // *Journal of Nanophotonics.*- 2011.- Vol. 5.- 052501-2.

КОРРЕЛЯЦИЯ И ВЗАИМОДОПОЛНЯЕМОСТЬ НАУКОМЕТРИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

Стецюра С.В., Батищева А.С.

В статье рассмотрен вопрос эффективности комплексного использования наукометрических показателей, таких как количество публикаций, индекс цитирования, индекс Хирша и импакт-фактор и других при оценке эффективности научной деятельности отдельного ученого или научной организации.

Ключевые слова: Российский индекс научного цитирования, наукометрия, оценка эффективности научной деятельности, индекс Хирша, импакт-фактор, наукометрические показатели.

THE CORRELATION AND COMPLEMENTARITY OF SCIENTOMETRIC

S.V. Stetsyura, A.S. Batishcheva

Saratov State University

The article is concerned with the analysis of efficiency of complex use of scientific research impact indicators such as the quantity of publications, citing index, Hirsch index, the impact-factor and other in the evaluation of scientific activity of individual scientist or scientific organization.

Keywords: The Russian index of scientific citing, scientometrics, evaluation of scientific activity's efficiency, Hirsch index, citing, the impact-factor, scientometric indicators.

В настоящее время проблема оценивания результативности научной деятельности с помощью наукометрических показателей приобрела особую актуальность, поскольку данные индикаторы совместно с экспертными заключениями стали использоваться на всех уровнях и этапах процесса управления наукой (Третьякова, 2013). Но очень большое число различных показателей и отсутствие методики их совместного анализа может привести к неправильным выводам при использовании произвольного (необоснованного) набора этих показателей.

В связи с этим целью работы является анализ корреляции значений наукометрических показателей и определение групп показателей, взаимодополняющих друг друга и описывающих научную деятельность организации или отдельного ученого наиболее полно.

На наш взгляд для выполнения поставленной цели эффективно использовать инструменты управления качеством, которые по своей сути

являются методами анализа и визуального представления статистических данных, то есть для проведения анализа требуется большой объем данных, имеющийся, например, в базе Российского индекса научного цитирования. Поэтому были поставлены следующие задачи: определение групп наукометрических показателей для анализа результативности научной деятельности, формирование репрезентативной выборки с использованием базы РИНЦ, применение гистограммы для определения однородности выборки и соответствия значений распределению Гаусса, и использование диаграммы разброса для определения корреляции значений показателей.

Выборка включала сведения о научной деятельности по 100 русскоязычным респондентам, зарегистрированным в РИНЦ, которые попали в выборку случайным образом, имели публикации в разных областях знаний, разный «возраст» первой публикации и т.д.

Для оценивания результативности научной деятельности были выбраны следующие наукометрические показатели: область научной деятельности, число публикаций автора в РИНЦ; число цитирований публикаций автора в РИНЦ; суммарное число цитирований автора; среднее число цитирований в расчете на 1 публикацию; индекс Хирша; число публикаций в зарубежных журналах, число публикаций в зарубежных журналах в российских переводных журналах; средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы и процитированы статьи; число публикаций за последние 5 лет; число цитирований работ автора, опубликованных за последние 5 лет. Показатели для проведения анализа были разделены на группы, в которые входили показатели, предполагающие, исходя из их определений, достаточно высокую взаимную корреляцию.

Затем, были построены более 20 различных диаграмм разброса и гистограмм, но лишь некоторые из них демонстрировали наличие высокой корреляционной зависимости и нормальное распределение значений.

На рис. 1 показана гистограмма, показывающая распределение числа публикаций автора в РИНЦ от количества авторов, имеющих заданное

количество публикаций.

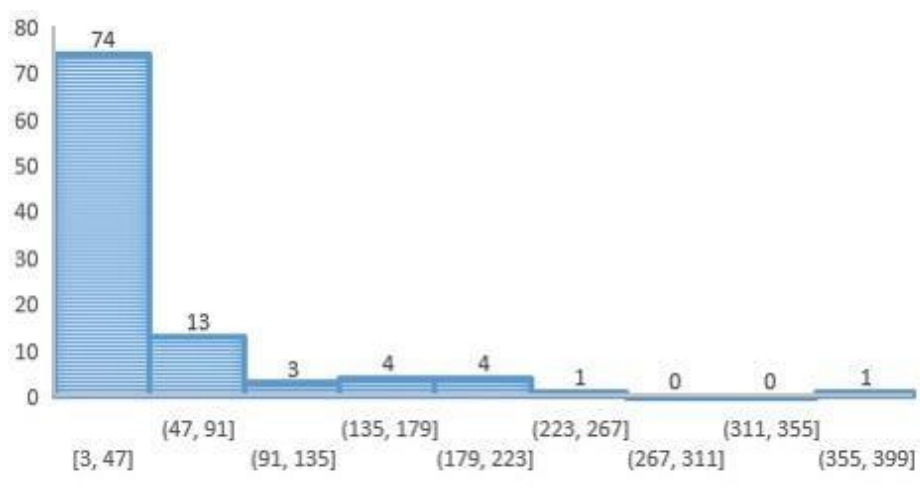


Рисунок 1 – Гистограмма, показывающая количество авторов, зарегистрированных в РИНЦ, имеющих число публикаций в интервалах чисел, заданных на гистограмме

Исходя из гистограммы видно, что большое количество респондентов имеет малое количество публикаций, а большое количество публикаций имеет единичное количество респондентов.

Поскольку гистограмма весьма несимметрична (ограничена слева), то есть не соответствует нормальному распределению, была построена следующая диаграмма по значениям, входящим в первый интервал значений (3 – 47 публикаций), т.к. они составляют 74 % всей выборки. Она представлена на рисунке 2.

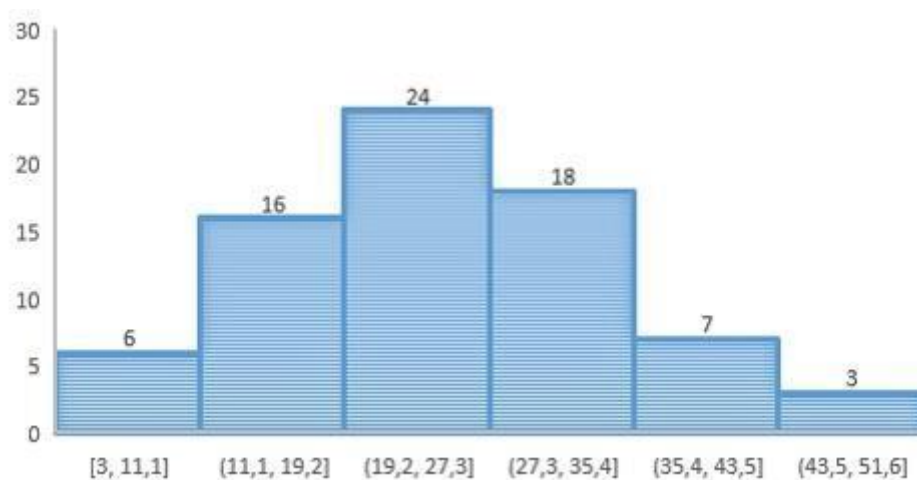


Рисунок 2 - Гистограмма, показывающая количество авторов, зарегистрированных в РИНЦ, имеющих число публикаций, входящих в 1-й интервал значений, показанный на рис. 1

Построенная гистограмма получилась более симметричной относительно первой. Это означает, что мы получили распределение, приближенное к нормальному только для авторов, имеющих количество публикаций не более 50. То есть количество публикаций в интервале от 0 до 50 публикаций является типичным для большинства российских авторов, занесенных в РИНЦ, выборка из авторов, имеющих до 50 публикаций, является вполне однородной, а авторы с числом публикаций более 100 и, тем более, с количеством публикаций, превышающим значение 200, являются, к сожалению, скорее «исключением», требующим изучения индивидуально действующих внешних доминирующих факторов, определяющих эти «выбросы» на общем фоне.

Рассмотрим диаграммы разброса, показавшие наибольшее значение коэффициентов корреляции и детерминации.

А) Зависимость между числом публикаций в зарубежных журналах и суммарным числом цитирований автора, где по оси X - число публикаций в зарубежных журналах, а по оси Y - суммарное число цитирований автора, представлена на рисунке 3.

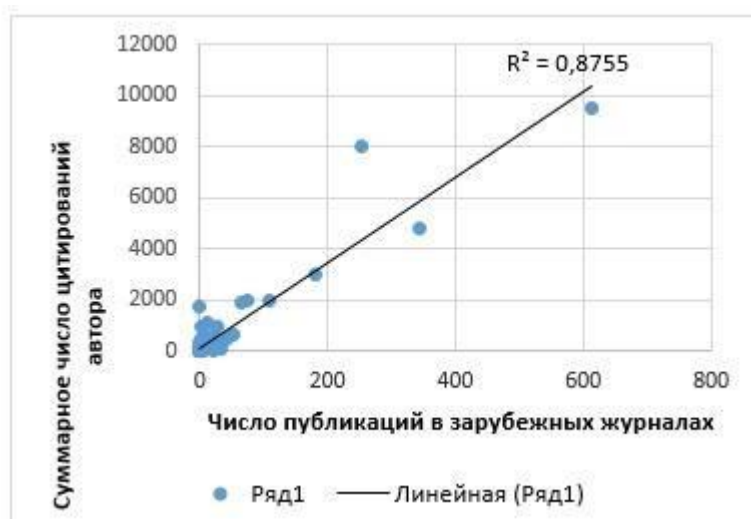


Рисунок 3 - Точечная диаграмма, показывающая зависимость между суммарным числом цитирований автора и числом публикаций в зарубежных журналах по всей выборке

Построив данную зависимость для определения связи между двумя переменными, определяем линейный коэффициент корреляции.

Для расчета коэффициента корреляции воспользуемся формулой:

$$r_{xy} = \frac{\sum(x_i - \bar{x}) * (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum(x_i - \bar{x})^2 * \sum(y_i - \bar{y})^2}}$$

где $x(i)$ и $y(i)$ - сравниваемые количественные признаки.

Значение коэффициента корреляции показателей, представленных на рис.3, составило 0.936, что соответствует **весьма высокой** тесноте связи по шкале Чеддока (Таблица 1) между суммарным числом цитирований автора и числом публикаций в зарубежных журналах, поскольку наше значение входит в интервал от 0,9 - 0,99.

Таблица 1 Шкала Чеддока

Количественная мера тесноты связи $ r_{yx} $	Качественная характеристика силы связи
0,1 - 0,3	Слабая
0,3 - 0,5	Умеренная
0,5 - 0,7	Заметная
0,7 - 0,9	Высокая
0,9 - 0,99	Весьма высокая

Значение детерминации при этом составило 0,8755, что можно предположить уже из визуального анализа расположения точек на рисунке. Это значение коэффициента детерминации означает, что приблизительно на 88% суммарное число цитирований автора зависит от числа его публикаций в зарубежных журналах. При этом такой же высокой корреляции нет при построении диаграммы рассеяния для числа цитирований автора и числом публикаций в российских журналах. Это связано на наш взгляд с практикой, типичной для российских журналов, использовать небольшой список цитируемой литературы к статье (6- 15 публикаций).

Б) Зависимость между индексом Хирша и числом цитирований публикаций автора в РИНЦ, где по оси X - число цитирований публикаций автора в РИНЦ, а по оси Y - индекс Хирша, представлена на рисунке 4.

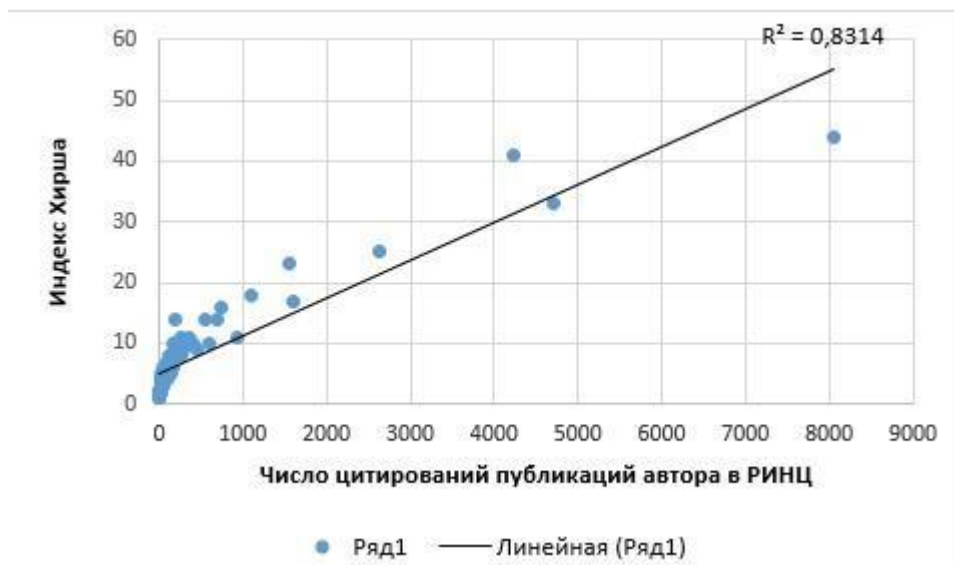


Рисунок 4 - Точечная диаграмма, показывающая зависимость между индексом Хирша и числом цитирований публикаций автора в РИНЦ по всей выборке

Значение коэффициента корреляции для указанных показателей составило 0,912. Данное значение находится на границе **между высокой и весьма высокой** теснотой связи по шкале Чеддока. Расчет значения детерминации определил значение для этих показателей равным 0,831, что также можно предположить уже из визуального анализа расположения точек на рисунке. Таким образом, приблизительно на 83% индекс Хирша автора в РИНЦ зависит от числа цитирований публикаций авторов в РИНЦ.

В заключении данной работы необходимо отметить, что продуктивность научного сотрудника невозможно охарактеризовать единым числом. С помощью статистических методов или инструментов контроля качества, таких как, контрольный листок, гистограмма, диаграммы разброса, были сделаны выводы о том, что лишь некоторые наукометрические показатели имеют высокую и очень высокую взаимную зависимость, такие как:

- Число публикаций в зарубежных журналах и суммарное число цитирований автора;
- Индекс Хирша и число цитирований публикаций автора в РИНЦ;

Эти показатели очень часто используются совместно в различных

отчетах об эффективности научных организаций или отдельных ученых. Но на данный набор наукометрических показателей, благодаря взаимозависимости показателей не может дать полную, действительную оценку деятельности научного сотрудника. Таким образом, выводы, основанные на таких данных, являются объективными только для определенного временного периода.

Однако, набор взаимодополняющих наукометрических показателей, имеющих низкую взаимную корреляцию, уже может давать достаточно адекватную картину об их научной деятельности и ее результативности.

Для того, чтобы определить, с чем связана ситуация, при которой одно и то же количество публикаций у респондентов имеет разное количество цитирований, мы должны обратиться к другим наукометрическим показателям, таким как, импакт-фактор журнала, публикации в зарубежных журналах и количество публикаций в российских журналах.

Для действительной оценки научной деятельности ученых высокого мирового уровня (единичных в анализируемой в статье выборке, но имеющих в достаточно большом количестве в научном сообществе) использование наукометрических показателей и статистических методов исследования является больше вспомогательным материалом, поэтому основным способом анализа качества деятельности ученых такого уровня должна быть экспертная оценка (Кабакова, 2014), которая в первую очередь учитывает научное содержание работы.

Библиографический список

1. Кабакова, Е.А. Использование наукометрических показателей при оценке научной деятельности // Вопросы территориального развития, 2014. № 18. С.1-12;
2. Белевич В.А. Анализ прибыли предприятия на основе математического моделирования // Экономика и социум. 2015. URL: http://www.iupr.ru/domains_data/files/zurnal_15/Belevich%20V.A.%20Osnovnoy%20razdel.pdf (дата обращения: 10. 05. 2016);
3. Третьякова, О. В. Возможности и перспективы использования индексов цитирования в оценке результатов деятельности научного учреждения // Экономические и социальные перемены: факты, тенденции, прогноз, 2013. № 6. С. 189-199.

ПОВЫШЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК СУЛЬФИДА КАДМИЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Стецюра С.В., Харитонова П.Г.

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Поликристаллические фоточувствительные пленки на основе полупроводников АПВІ широко используются для создания оптоэлектронных полупроводниковых приборов с улучшенными функциональными характеристиками (Обэйд, 2012). Распространёнными материалами для создания фоторезистивных структур и фотоэлементов являются халькогениды таких металлов, как кадмий, цинк, ртуть. То обстоятельство, что материалы на основе соединений группы АПВІ обладают различными значениями ширины запрещенной зоны и образуют взаимные твердые растворы (Murali, 2008) позволяет изменять оптические и фотоэлектрические свойства в широких пределах, охватывая всю видимую область спектра и ближний ИК диапазон.

Одной из важнейших задач полупроводниковой оптоэлектроники является получение материалов, обладающих одновременно высокой радиационной стойкостью (Попов, 2016) и фоточувствительностью. В частности, исследования (Давидюк, 2008) показали перспективность использования фотопроводящих структур на основе сульфида кадмия (CdS) для нанoeлектроники (Ravichandran, 2016; Lopez-Cabana, 2011). Но при использовании широкозонного полупроводника, каковым является CdS, в электронных приборах и устройствах до сих пор остается нерешенная проблема низкой радиационной стойкости к действию не только высокоэнергетических излучений (ускоренные электроны, γ излучение, рентген), но и к длительному интенсивному оптическому излучению.

Было показано (Роках, 2005; Маляр, 2011), что повысить радиационную стойкость сульфида кадмия можно созданием в объеме полупроводника гетерофазных областей на основе сульфида свинца (PbS), либо свинецсодержащих наноразмерных областей в приповерхностном слое

полупроводника, которые бы обеспечивали сток дефектов в узкозонную фазу. На границе зерен CdS и PbS возможно создать гетеропереход со значительным перепадом энергий, так как ширина запрещенной зоны CdS колеблется в диапазоне 2,4-2,6 эВ, а PbS от 0,37 до 0,41 эВ. Тонкие пленки на основе гетерофазного материала, условно обозначаемого CdS-PbS и состоящего на 90 и более процентов из CdS с включениями наноразмерных частиц PbS, могут работать в условиях повышенного радиационного фона практически без ухудшения основных функциональных свойств и характеристик. Впервые качественное описание модели, объясняющей повышение стабильности фотоэлектрических характеристик CdS при добавлении в него некоторого количества PbS было дано в работе (Роках, 1984) а затем развито в работах (Роках, 1997; Бухаров, 1999; Сердобинцев, 2007; Маляр, 2011; Стецюра, 2015).

Наиболее ярко радиационная стойкость гетерофазных полупроводников проявлялась при облучении их ускоренными электронами средних энергий. В результате облучения электронным потоком с энергией электронов 20 кэВ удельная фоточувствительность CdS без добавления PbS уменьшалась на несколько порядков, а у созданных образцов CdS-PbS изменялась лишь на 7-12%. (Роках, 2005) Предельная поглощенная доза облучения в описанных экспериментах составляла 10^9 рад.

Поскольку электронное излучение относится к ионизирующим видам излучений, то оно вызывает протекание множества процессов, которые влияют на свойства полупроводников и, как следствие, на параметры приборов. Так, например, воздействие электронов даже с «допороговыми» энергиями может привести к образованию точечных дефектов структуры при наличии процессов, приводящих к накоплению энергий отдельных неравновесных электронов. В этом случае факторами, приводящими к повышению радиационной стойкости материала, являются образование потенциального рельефа, способствующего «стоку» энергии возбуждения и радиационных дефектов в узкозонные включения (геттеры), и наличие

существенной разности значений коэффициентов радиационно-стимулированной диффузии точечных дефектов в фоточувствительной матрице и узкозонных включениях. При облучении электронами узкозонные включения PbS выступают как бы в качестве потенциальных ям, при этом в области гетеропереходов CdS-PbS возникает электрическое поле, которое способствует движению положительно заряженных частиц из фоточувствительного объема на стоки. В качестве частиц могут выступать, как заряженные дефекты, так и неравновесные носители заряда. Было показано, что сток заряженных радиационных и технологических дефектов, в частности, междоузельных атомов кадмия Cd^+ приводит к росту радиационной стойкости.

Коэффициенты диффузии зависят от ширины запрещенной зоны полупроводников CdS и PbS. Коэффициент радиационно-стимулированной диффузии Cd^+ для узкозонной фазы PbS составил $D^* = 10^{-29} \text{ м}^2/\text{с}$, а для CdS – $D^* = 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$ (Бухаров, 2003). Из-за значительного различия в значениях коэффициента радиационно-стимулированной диффузии происходит геттерирование радиационных и технологических дефектов областями с меньшим коэффициентом диффузии. Таким образом, при облучении электронами средних энергий эффективное геттерирование дефектов будет происходить, как в результате диффузии, так и под действием внутренних электрических полей.

Как было отмечено выше, фотоэлектрические характеристики широкозонного полупроводника CdS не обладают достаточной стабильностью даже при длительном интенсивном освещении. Изменение характеристик фоторезистивных структур в этом случае характеризуется коэффициентом фотоутомляемости. Исследуемые образцы CdS-PbS могут обладать малым коэффициентом фотоутомляемости (0,85-1,05) (Роках, 2005). Так как коэффициент фотоутомляемости представляет собой отношение фототока после длительной интенсивной засветки к фототоку до засветки, то существование коэффициента больше единицы означает так называемую

«отрицательную» фотоутомляемость, то есть повышение значений фототока при постоянном уровне освещения, поддерживаемом длительное время. Наблюдаемый эффект объясняется тем же потенциальным рельефом, который возникает в структурах CdS-PbS (Роках, 2006)).

Пленки CdS-PbS часто получают методом пульверизации (Maskaeva, 2015) – метод является простым, воспроизводимым и достаточно изученным. Также одной из технологий формирования планарных слоев гетерофазных систем CdS-PbS является широко применяемый метод термического испарения в вакууме шихты, состоящей из смеси полупроводниковых компонентов CdS и PbS (Роках, 1995). Имея не сильно различающиеся температуры и давления возгонки в вакууме, эти компоненты осаждаются на подложку одновременно, но из-за крайне малой взаимной растворимости в твердом состоянии могут образовывать только пленку, представляющую механическую смесь ограниченных твердых растворов CdS в PbS и PbS в CdS. При сенсibiliзирующем отжиге в этой криптокристаллической пленке происходит укрупнение и перекристаллизация зерен CdS (см. Рисунок 1).

Эти процессы необходимы для очувствления (сенсibiliзации) материала, но из-за значительного количества компонента PbS происходит разупорядочивание структуры CdS, и, следовательно, некоторое снижение его фоточувствительности в результате внедрения нано- и микровключений PbS по всему объему образца.

На рис. 1 представлено АСМ-изображение поверхности образца состава CdS-PbS (90-10%) после высокотемпературной обработки, из которого следует, что латеральный размер зерна в такой пленке может достигать значений 0,5 – 1,0 мкм.

Таким образом, оптимальное соотношение фоточувствительности и радиационной стойкости зависит от соотношения компонент CdS и PbS. Как было показано ранее (Роках, 1995; Rokakh, 1999), при термическом испарении удавалось достичь значительных результатов повышения радиационной стойкости только при содержании узкозонной компоненты

PbS от 10 весовых процентов и выше в исходной смеси.

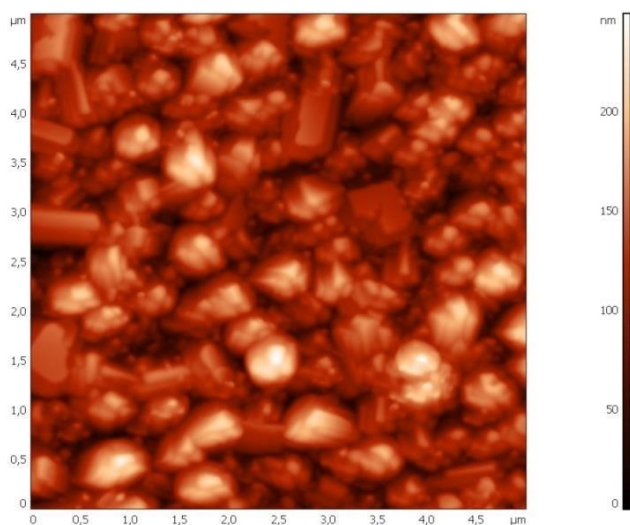


Рисунок 1 АСМ-изображение поверхности отожженного образца состава CdS-PbS (90-10%).

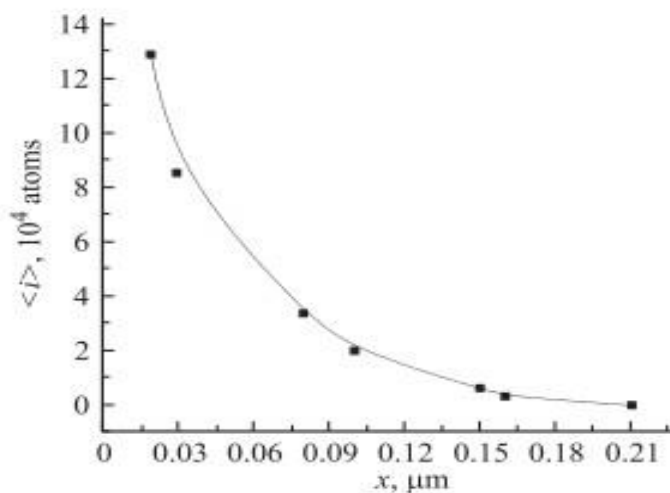


Рисунок 2 - Зависимость среднего числа частиц в узкозонных свинецсодержащих включениях от глубины залегания (Стецюра, 2009)

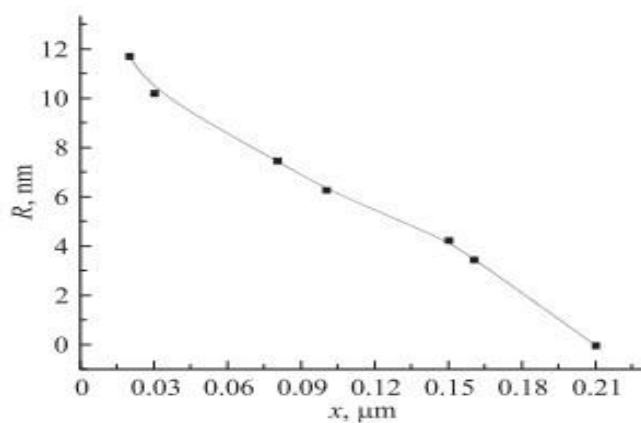


Рисунок 3 - Зависимость среднего радиуса узкозонных свинецсодержащих включений на данной глубине залегания от глубины его залегания (Стецюра, 2015)

Исследование отожженных и не отожженных пленок CdS-PbS методом вторичной ионной масс-спектрометрии показало (Rokakh, 2004; Роках, 2003), что отжиг плёнок CdS-PbS приводит к диффузии свинца к поверхности и образованию наиболее крупных включений PbS в приповерхностном слое, а концентрация свинца у подложки становится при этом весьма незначительной. Проведенная обработка профилей вторичной ионной масс-спектрометрии по свинцу и расчет с использованием теории преципитации (Маляр, 2011) позволили рассчитать размер включений, область их локализации (Рисунки 2 и 3) для обеспечения радиационной стойкости пленочных образцов CdS.

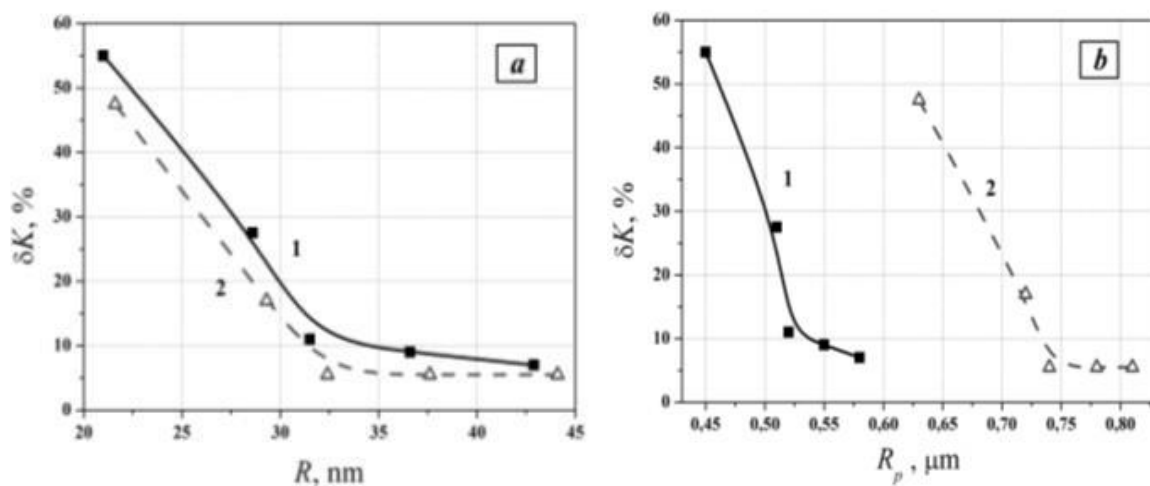


Рисунок 4 - Зависимость потерь кратности фотосопротивления от радиуса преципитатов PbS на поверхности (а) и от максимальной глубины образования преципитатов (б) в пленках CdS с нанесенными слоями арахината свинца, отожженных при температуре $545 \pm 5^\circ\text{C}$ в течение 10 (1) и 20 (2) минут (Стецюра, 2015)

Проведенные эксперименты и расчеты показали, что если изменить технологию и создавать гетерофазный слой определённой толщины только в приповерхностном слое, то можно одновременно увеличить радиационную стойкость и сохранить высокую фоточувствительность плёнки CdS (рис.4).

Исходя из этого, в работе (Стецюра, 2008) был предложен другой способ получения гетерофазного материала CdS-PbS с повышенной радиационной стойкостью, заключающийся в нанесении пленки арахината свинца на чистый CdS. В этом способе CdS получают термическим

испарением в вакууме, а затем на поверхность пленочного образца CdS наносят 10-50 монослоев арахината свинца (в зависимости от толщины исходной пленки CdS, времени и температуры отжига), полученных по технологии Ленгмюра-Блоджетт. В результате высокотемпературного отжига структуры «CdS – арахинат свинца» при температурах около $545\pm 5^\circ\text{C}$ происходит окисление и разложение органики с образованием летучих соединений и диффузия свинца вглубь поликристаллической плёнки. Для структурной организации металла в органическом покрытии, его равномерного распределения в этом методе используются поверхностно - активные вещества (арахиновая кислота). Преимуществом данного метода является уменьшение негативного влияния разупорядочения структуры, вносимое большим количеством PbS в рабочий объём полупроводника CdS, недостатком - наличие высокотемпературного отжига и органической составляющей может привести к неконтролируемому изменению состава и структуры приповерхностной области образца.

В работе (Стецюра, 2015) предложена модификация вышеописанного способа изготовления радиационно-стойких структур CdS-PbS, которая уже не включает высокотемпературный отжиг. В предложенном способе изготовления по методу Ленгмюра-Шеффера на поверхности водного раствора свинецсодержащей соли формируют монослой со свинецсодержащими кластерами в матрице арахиновой кислоты и осуществляют однократный перенос монослоя на поверхность CdS (Вениг, 2009; Stetsyura, 2012). Монослой остается на поверхности и формирует потенциальный рельеф на поверхности CdS, способствующий стоку радиационных дефектов с глубины не меньшей, чем глубина максимальной диссипации энергии ускоренных электронов. Благодаря наноразмерной толщине и кластерному распределению свинца на поверхности покрытие практически не уменьшает поглощение фоточувствительной пленкой оптического излучения (Стецюра, 2015).

Но при данной технологии сохраняется один существенный недостаток

- загрязнение поверхности поверхностно-активными веществами, не несущими функциональной нагрузки в данной структуре.

Поэтому актуальным на данный момент является создание такой технологии получения данных гетерофазных структур CdS-PbS, которая позволит сохранить фоточувствительность при значительном увеличении стойкости к излучениям различной природы, но также исключить загрязнение поверхности структуры органическими соединениями.

Часть исследований выполнена при поддержке РФФИ (проект № 16-08-00524_a).

Библиографический список

1. *Lopez-Cabana et al.* Semiconducting properties of layered cadmium sulphide-based hybrid nanocomposites // *Nanoscale Research Letters*, 2011. 6:523. URL: <http://www.nanoscalereslett.com/content/6/1/523>;
2. *Maskaeva L.N., Forostyanaya N.A., Markov V.F., Voronin V.I.* Synthesis of films of solid solutions $Cd_xPb_{1-x}S$ by the method of ion-exchange substitution // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2015. Т. 60. № 5. С. 552-559;
3. *Murali K.R., Elango P.* Preparation of CdS_xSe_{1-x} films by brush plating technique and their characteristics / В сборнике: ECS Transactions Nanomaterials for Energy Conversion and Storage 212-th Meeting of the Electrochemical Society. Сер. "ECS Transactions - Nanomaterials for Energy Conversion and Storage" Washington, DC, 2008. P. 61-66;
4. *Obaid A.S. et al.* Preparation of chemically deposited thin films of CdS/PbS solar cell // *Superlattices и микроструктур* 52 (2012)816-823;
5. *Ravichandran K., Nisha Banu N., Senthamil Selvi V., et al.* Rectification of sulphur deficiency defect in CdS based films by introducing a novel modification in the SILAR cyclic process // *Journal of Alloys and Compounds*, 2016. V 687. P. 402-412;
6. *Rokakh A.G., Stetsyura S.V., Trofimova N.B., Elagina N.V.* Stabilizing effect of doping with pbs on properties of CdS_xSe_{1-x} wide-gap photoconductors// *Inorganic Materials*. 1999. Т. 35. № 5. С. 452-454;
7. *Rokakh A.G., Zhukov A.G., Stetsura S.V., Serdobintsev A.A.* Secondary-ion mass spectrometry of photosensitive heterophase semiconductor // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2004. Т. 226. № 4. С. 595-600;
8. *Stetsyura S.V., Klimova S.A., Wenig S.B., et al.* Reparation and probe analysis of Langmuir-Blodgett films with metal-containing dendritic and cluster structures // *Applied Physics A: Materials Science & Processing*. 2012. Т. 109. № 3. С. 571-578.
9. Бухаров В.Э., Роках А.Г., Стецюра С.В. Влияние электронного облучения на рекомбинацию и прилипание в пленочных фотопроводниках на основе $A_2B_6-A_4B_6$ // *Письма в Журнал технической физики*. 1999. Т. 25. № 3. С. 66-72.;
10. *Бухаров В.Э., Роках А.Г., Стецюра С.В.* Диффузионная модель деградационной стойкости гетерогенной фотопроводящей системы // *Журнал технической физики*, 2003. Т. 73. № 2. С. 93-98;
11. *Вениг С.Б., Стецюра С.В., Глуховской Е.Г., и др.* Формирование металлических кластеров в органическом монослое, полученном методом Ленгмюра // *Нанотехника*. 2009. № 19. С. 49-54.
12. *Давидюк Г.Е., Божско В.В., Мирончук Г.Л. и др.* Особенности оптических и фотоэлектрических свойств специально не легированных и легированных Си монокристаллов

CdS. // Физика и техника полупроводников, 2008. Т.42. №4. С. 399-403;

13. *Маляр И.В., Стецюра С.В.* Влияние морфологии и состава фаз поверхности на радиационную стойкость гетерофазного материала *CdS-PbS* // Физика и техника полупроводников, 2011. Т.45. Вып.7. С.916-922;

14. *Попов В.Д.* Два этапа поверхностного дефектообразования в МОП структуре при низкоинтенсивном воздействии гамма-излучения // Физика и техника полупроводников, 2016, том 50, вып. 3, С.354;

15. *Роках А.Г.* Варизонная модель полупроводника, стойкого к деградации // Письма в Журнал технической физики. 1984. Т.10. №13. С.820-823;

16. *Роках А.Г., Кумаков А.В., Елагина Н.В.* // Пат. 845685 РФ МПК H01L21/30. Состав для изготовления пленочных фоторезисторов / Оpubл. 20.05.1995. Бюл. №36;

17. *Роках А.Г., Стецюра С.В.* Влияние неоднородностей на фотоэлектрические характеристики гетерофазных пленок системы *CdS_xSe_{1-x}-PbS* // Неорганические материалы. 1997. Т. 33. № 2. С. 198

18. *Роках А.Г., Стецюра С.В., Жуков А.Г., Сердобинцев А.А.* Исследование особенностей ионного травления гетерофазных полупроводников при освещении белым светом // Письма в Журнал технической физики. 2003. Т. 29. № 2. С. 23-29

19. *Роках А.Г., Стецюра С.В., Сердобинцев А.А.* Гетерофазные полупроводники под действием излучений // Известия Саратовского университета, Сер. Физика. 2005. Т.5. Вып. 1. С.92-102;

20. *Роках А.Г., Стецюра С.В., Жуков А.Г., Сердобинцев А.А.* Зависимость скорости ионного распыления от изменения электронной работы выхода, вызванного освещением / Письма в Журнал технической физики. 2006. Т. 32. № 1. С. 58-64.

21. *Сердобинцев А.А., Роках А.Г., Стецюра С.В., Жуков А.Г.* Вторично-ионная масс-спектрометрия фотопроводящих мишеней // Журнал технической физики. 2007. Т. 77. № 11. С. 96-102.;

22. *Стецюра С.В., Глуховской Е.Г., Сердобинцев А.А., Маляр И.В.*// Пат. RU 2328059 С1 МПК H01L 31/18. Способ изготовления фотопроводящих радиационно-стойких пленок / Оpubл. 27.06.08. Бюл. № 18.;

23. *Стецюра С.В., Маляр И.В., Сердобинцев А.А., Климова С.А.* Влияние параметров узкозонных включений на тип и величину вторично-ионного фотоэффекта в гетерофазных фотопроводниках // Физика и техника полупроводников, 2009. Т. 43. В. 8.С. 1102-1108;

24. *Стецюра С.В., Глуховской Е.Г., Козловский А.В., Маляр И.В.* // Создание ультратонкого источника примеси для снижения радиационных потерь фоточувствительных пленок *CdS* / Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 5. С. 116-122.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС АТК КАК ИНСТРУМЕНТ РАСЧЕТА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КАРБИДА КРЕМНИЯ

Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Кондратьева Е.В., Ревзина Е.М

В преподавании целого ряда естественно-научных дисциплин – математики, физики, химии, и т.д. – не обойтись без трехмерной графики. В нашей работе сделано ударение на применение инструментарий трехмерной

графики с внедренными возможностями для моделирования тел вращения и их свойств[1,2].

Программный комплекс Atomistix ToolKit (ATK) от QuantumWise позволяет осуществлять моделирование и исследование разнообразных наноразмерных систем на атомном уровне. Системы могут содержать нанопроволоки, нанотрубки, графен, полупроводники, металлы, и т.д. Расчеты в ATK основаны на использовании проверенных алгоритмов ведущих научных источников, таких как TranSIESTA и McDCal, и осуществляются с использованием следующих методов: теория функционала плотности (DFT), расширенная теория Хюккеля, классические потенциалы, неравновесная функция Грина (NEGF) [3,4,5].

Целью работы является демонстрация возможностей современной библиотеки для 3D моделирования ATK.

В этой работе мы представляем процедуру расчетов зонной структуры карбида кремния SiC с использованием встроенного в ATK графического интерфейса Virtual NanoLab (VNL) [6,7].

VNL интуитивно понятен пользователю и позволяет сосредоточиться на исследовании физических свойств системы, в то время как программа осуществляет все оптимизации численной модели и выполняет заданный пользователем сценарий расчетов.

Вначале определяем тип кристалла. Зонная структура кристалла определяется типом решетки Браве, который зависит от характера межатомной связи[8,9,10]. Потенциал равен отношению потенциальной энергии взаимодействия заряда с полем к величине этого заряда. В VNL все данные о кристаллах хранятся в собственной базе данных. Для расчетов карбида кремния используется база «SiC (fcc)», где fcc – вид решетки, означающий гранецентрированная кубическая (face centred cubic).

Далее настраиваем сценарий расчетов: определяем метод вычисления (ДПФ, полуэмпирический и т.д.), настраиваем его параметры (в основном связанные с точностью), и выбираем физические свойства для вычисления.

В нашем сценарии использовались блоки «Новое вычисление» с параметрами: метод DFT-LDA, корреляция MGGA, k-выборка $5 \times 5 \times 5$; «Зонная структура» с параметрами: 100 точек в сегменте, все зоны выше уровня Ферми, в зоне Бриллюэна все общие точки симметрии для гранецентрированной кубической решетки (маршрут уже включает в себя); «Плотность состояний» с параметрами: k-выборка 11, 11, 11.

После выполнения сценария расчета VNL позволяет проводить анализ полученных результатов в графическом виде[11,12]. На рис. 1 приведено изображение окна анализатора зонной структуры в направлении $\Gamma - X$. При этом в окне отображаются соответствующие значения ΔE и Δk .

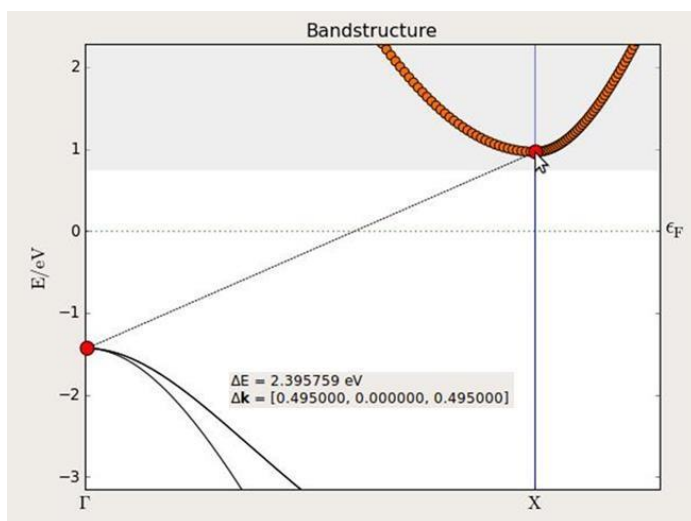


Рисунок 1. Анализ зонной структуры SiC

Рассчитанная энергетическая зона 2.396 eV, вполне совпадает с экспериментальными значениями 2,36eV для SiC (fcc), что говорит о высокой точности MGGA для зонной структуры полупроводников [2,3].

Рассмотрим рассчитанную атомарную геометрию и плотность электронных состояний в трехмерном виде[13].

VNL позволяет совместить эти процедуры. Установив в панели свойств угол поворота Θ_c равным 145 градусов, получаем изображение, приведенное на рис. 2.

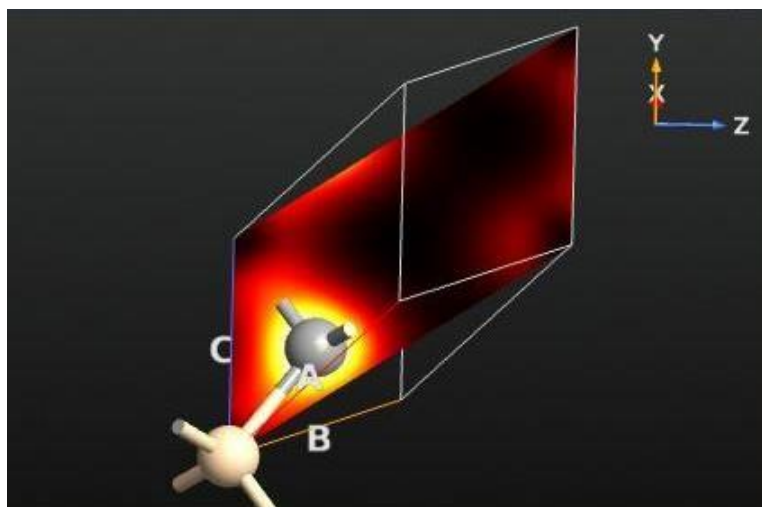


Рисунок 2. Атомарная геометрия и плотность электронных состояний.

VNL также позволяет выполнять дополнительный анализ с полученными результатами: визуализировать электростатическую разность потенциалов вместе с конфигурацией и электронной плотностью, визуализировать 1D проекции 3-мерных объектов, таких как плотность электронов или электростатическую разность потенциалов (рис. 3.), внедрять дополнительные атомы, например углерод, и др[14-17].

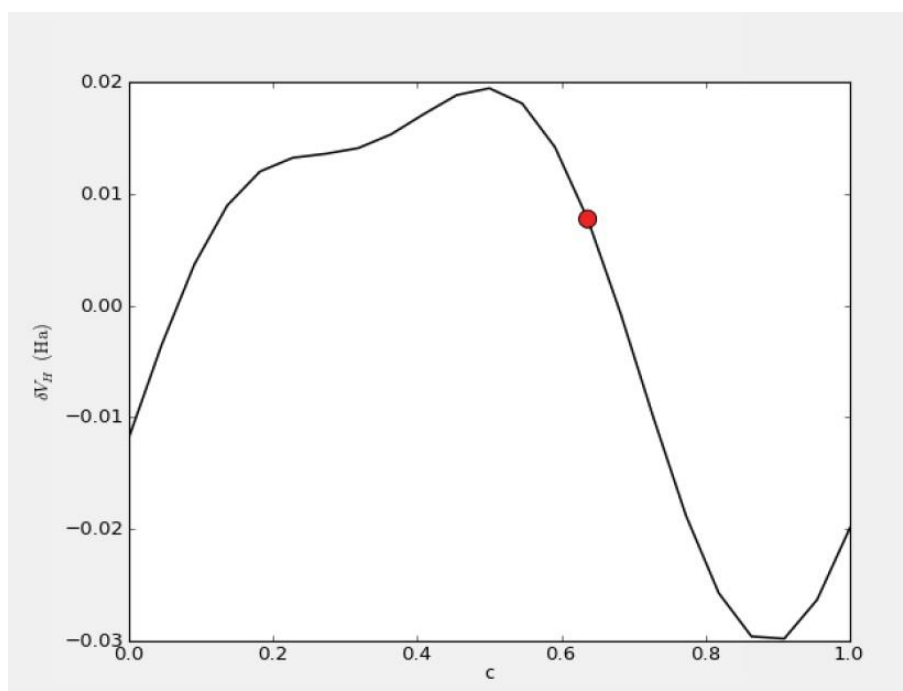


Рисунок 3. 1D проекция электростатической разности потенциалов вдоль направления C, усредненная по АВ-плоскости.

Таким образом, VNL позволяет строить атомные структуры и экспортировать их во все распространенные форматы данных или другой пользовательский формат, так как существует возможность расширения функциональности программного продукта с помощью плагинов.

Для нашей работы мы использовали лицензионный программный комплекс Atomistix ToolKit. С его помощью была решена поставленная задача. Отметим также, что VNL, находится и в свободном доступе для академического использования. Он включает АТК для запуска моделирования молекулярной динамики, вычисления фононных спектров и других тепловых свойств, а также для других расчетов с использованием эмпирических потенциалов.

Таким образом, основной особенностью осуществления моделирования и исследования разнообразных наноразмерных систем на атомном уровне является её практическая направленность.

Библиографический список

1. Абашеев А.В., Терин Д.В. Применение современных математических и компьютерных методов для обработки и анализа результатов исследования устойчивости // Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. 2014. № 12 (70). С. 46-49.
2. Вениг С.Б., Мурашев Д.А., Терин Д.В., Ставский Д.В. Индивидуальные образовательные траектории и реализация компетентностного подхода при совместном использовании клипатов и виртуальных информационных образовательных систем // Инженерное образование. 2012. № 11. С. 149-151.
3. Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab [Электронный ресурс]
URL: <http://quantumwise.com/products/atk> (дата обращения 04.06.2015)
4. Tran F., Blaha P. Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential / Phys. Rev. Lett. 102, 2009. P. 226401.
5. Попов Г. М., Шафрановский И. И. Кристаллография – М.: ВШ, 1972. 353 с.
6. Биленко Д.И., Терин Д.В., Кондратьева О.Ю., Ревзина Е.М., Вениг С.Б. Методологические аспекты моделирования и прогнозирование поведения наноконпозиционных материалов в quantumwise // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2014. Т. 14. № 2. С. 46-49.
7. Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V. Using modern software for modeling of nano-sized materials // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Саратов. 2015. С. 33-36.
8. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Сафонов Р.А. Прогнозирование отказов наносистем // Сб.: Математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании. Саратов, 2015. С. 98-101.
9. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Вениг С.Б. Оценка надежности нанобиосистем на основе теории копул // В сб.: Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине – 2015. Саратов 2015. С. 182-184.

10. *Kondrateva O.Y., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Safonov R., Lomovtseva K.S., Tugusheva G.R., Venig S.B.* Reliability evaluation of nanostructures using the theory of copulas// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов 2015. С. 26-27.
11. *Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Сафонов Р.А., Ревзина Е.М., Кондратьева Е.В.* К вопросу оценки надежности наноконструкций с использованием понятия копулы // Сб. Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Саратов. 2015. С. 72-74.
12. *Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V.* Using modern software for modeling of nano-sized materials// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Саратов. 2015. С. 33-36.
13. *Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Сафонов Р.А.* Прогнозирование отказов наносистем// Сб.: Математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании. Саратов, 2015. С. 98-101.
14. *Safonov R., Glukhova O., Bulgakova K., Savostyanov G., Kondrateva O.* Gpu parallel computing in molecular dynamics calculations // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 38.
15. *Биленко Д.И., Галушка В.В., Жаркова Э.А., Мысенко И.Б., Терин Д.В., Хасина Е.И.* Особенности фотоэлектрических свойств структур на основе мезопористого кремния с наночастицами серебра//Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. № 21. С. 80-87.
16. *Кардаш М.М., Александров Г.В., Тюрин И.А., Терин Д.В.* Способ получения полимерного пресс-материала// патент на изобретение 2471822 05.07.2011
17. *Терин Д.В.* Математическое моделирование микроэлектромеханических систем на основе композитных сред// дисс. на соискание уч. ст. к.ф.-м.н.. Саратов, 2004

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ РИСКОВ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ КОПУЛ

Тугушева Г. Р., Кондратьева Е.В., Терин Д.В.

Саратовский университет имени Н. Г. Чернышевского

В данной работе представлено решение проблемы моделирования зависимостей применительно к управлению рисками. Было рассмотрено управление рисками с помощью копул и, в частности, подход «на основе распределения потерь» (модель LDA). Была изучена и выявлена вероятность возникновения рисков, на примере экологических. Ключевые слова: архимедовы копулы, копула Гумбеля, теорема Склера, тау Кенделла, риски, LDA.

В настоящее время выбор местоположения для строительства предприятия является первой ступенью к созданию организации. Этим обусловлена актуальность выбранной темы.

Существует несколько методов определения возникновения вероятности экологических рисков [1-4]. В данной работе использован метод на основе теории копул и модели LDA [2-6]. Достоинство этого метода заключается в малых финансовых затратах и сроках получения данных.

В настоящее время копулы стали использовать во многих сферах деятельности: страхование, оценки надежности наносистем, кредитование и финансы и т.д.

Копула это многомерная функция распределения, позволяющая связать несколько одномерных распределений в одно совместное, которое определяется на n -мерном единичном кубе $(u^{(1)}; u^{(2)}; \dots; u^{(n)})$ [3].

Рассмотрим элементы теории копул:

1. Теорема Склера, это один из основных результатов теории копул. Она заключается в том, что для всех интегральных функций распределения с одномерными частными существует такая копула, которая связывает их частные водносовместное распределение: $C(F(u); G(v)) = H(u, v)$ [4].

Теорема Склера позволяет разделить процедуру оценки параметров совместного распределения на два шага:

- оценка параметров частных функций распределения;
- оценка параметров копула-функции.

2. Непараметрический коэффициент ранговой корреляции τ -Кендалла. Он является самостоятельным оригинальным методом, опирающимся на вычисление соотношения пар значений двух выборок, имеющих одинаковые или отличающиеся тенденции (возрастание или убывание значений). τ -Кендалла является мерой связи между двумя случайными величинами (1).

$$r = \frac{c-d}{c+d} = \frac{c-d}{n} \quad (1)$$

(2)

3. Коэффициенты Хвостовой зависимости (2) предназначены для захвата зависимость между частными в верхнем правом и в нижнем левом сторонах квадрата [3].

$$\lambda_u = 2 - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1 - C(t)}{1 - t} \quad (2)$$

Мы использовали копулу из семейства «Архимедовых копул», свое название они получили из-за аналогии с архимедовой аксиомой - для любых двух целых положительных чисел a и b всегда найдется такое число n , что $n \cdot a > b$. А именно копула Гумбеля. Она является асимметричной Архимедовой копуле (3). Ее коэффициент хвостовой зависимости: $\lambda_u = 2 - 2^{\frac{1}{\alpha}}$ и τ -Кендалла : $r = \frac{\alpha - 1}{\alpha}$

$$C(u,v) = \exp(-[(-\ln u)^\alpha + (-\ln v)^\alpha]^{1/\alpha}) \quad (3)$$

Подход на основе LDA заключается в моделировании потерь для индивидуальных рисков, а затем объединение их для расчета общего распределения потерь. Распределение потере L_r для индивидуального риска рассматривается как смесь двух вероятностных распределений. Общая потеря для индивидуального риска определяется по формуле :

$$L_r = \sum_{i=1}^{N_r} X_i \quad (4)$$

Были объединены теория копул и модель LDA. Пусть n -мерная копула C и L_{r_i} распределения потерь будут различны, то совместное распределение индивидуальных потерь: $H(x_1, x_2, \dots, x_m) = C(L_{r_1}(x_1), L_{r_1}(x_2), \dots, L_{r_1}(x_m))$.

Наш пример основан на исследовании осадков на определенной территории, для того чтобы определить размер работ по защите от них. Определяется вероятность выпадения обильных осадков, в течении 10 лет на территории Поволжья в России [7-10]. Была построена гистограмма распределения частот выпадения осадков, зависимость плотности осадков (средняя интенсивность осадков в течении месяца) от количества дождливых дней.

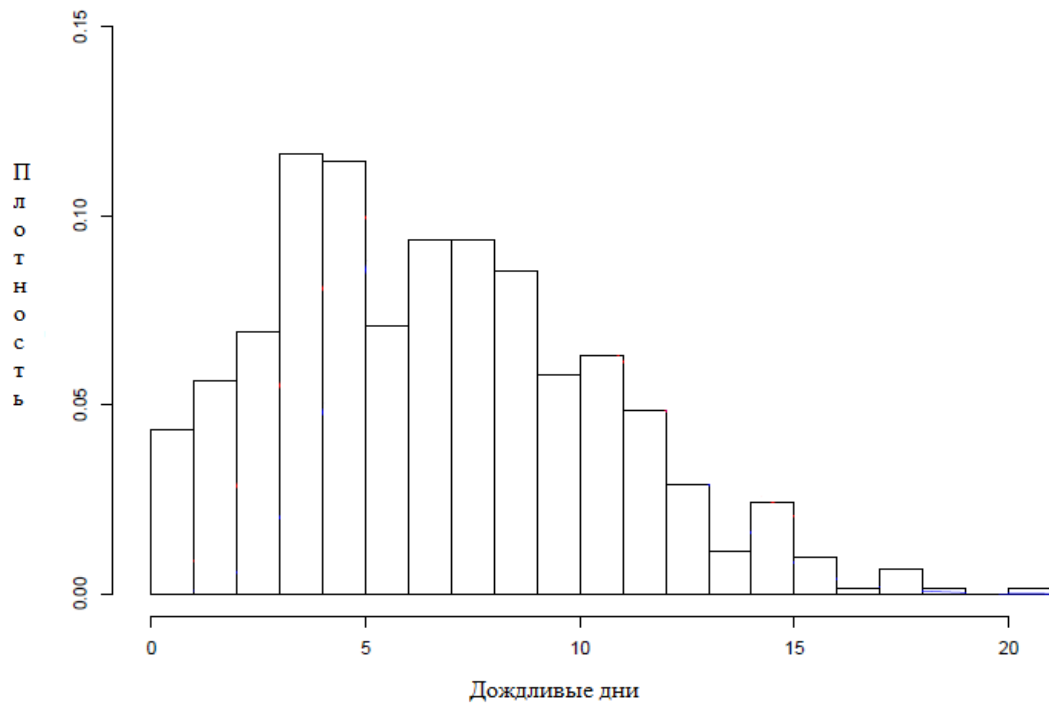


Рис.1 Гистограмма распределения частот выпадения осадков

Также были определена для каждого значения относительная частота возникновения события[11-13].

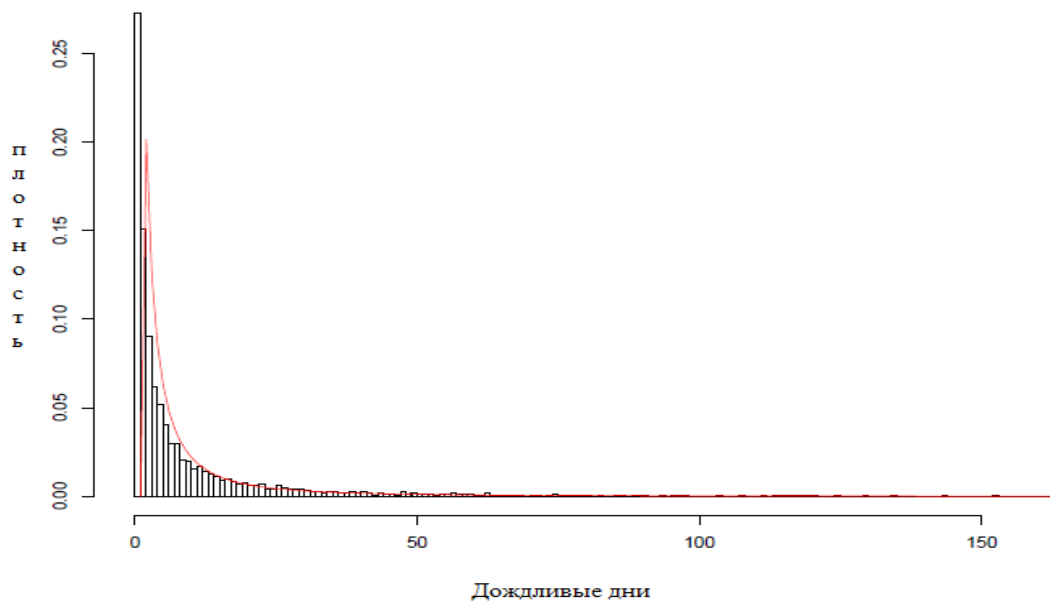


Рис.2 Эмпирическое распределение плотности осадков

Применив модель LDA и данные распределения, был построен график QQ для копулы Гумбеля (Рис.3)

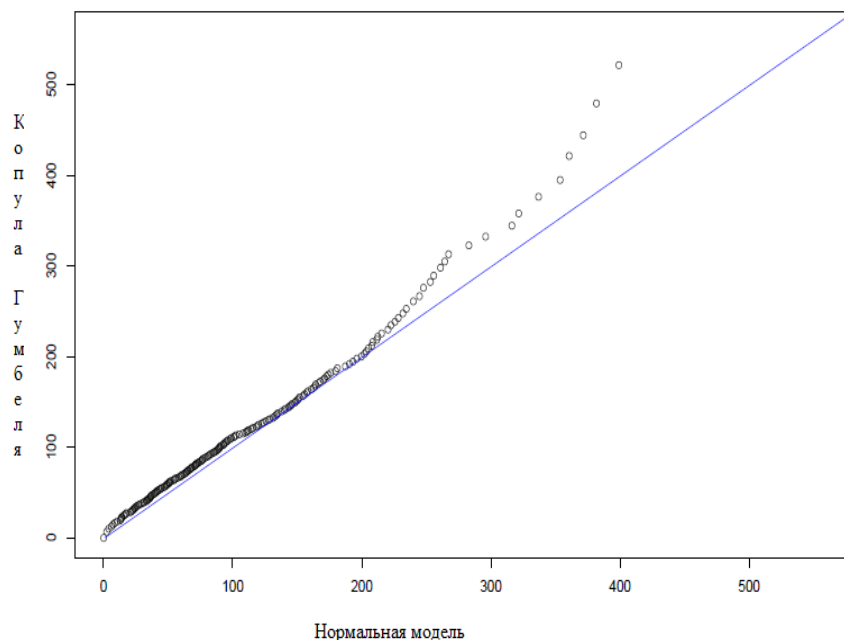


Рис.3 QQ для копулы Гумбеля

С помощью графика Quantile-Quantile Plot (QQ Plot) мы изучаем вероятность возникновения экологических рисков.

На этом графике сравнивается нормальная модель (идеальный случай, т.е. без риска финансовых потерь) и копула Гумбеля (с нашими данными из Рис.1), где отклонение от прямой, это и есть вероятность возникновения рисков. Из графика следует, что эта вероятность у нас мала, и это место подходит для строительства[14-16].

С помощью подхода на основе распределения потерь и теории копул были определены вероятности выпадения осадков, ее частота и плотность. И на основе этих данных можно определить территории, которые безопасны для строительства крупных промышленных объектов и предсказать вероятность возникновения финансовых потерь, что особенно важно в условиях глобальных экономических кризисов. Так же данный подход является одним из современных эффективных инструментов управления качеством.

Библиографический список

1. Шмаль, А.Г. Факторы экологической опасности и экологические риски / А.Г. Шмаль: МП «ИКЦ БНТВ», 2010, С 192.
2. Frachot, A. Loss Distribution Approach for operational risk / A. Frachot, P. Georges: 2011. С.43
3. Фантаццини, Д. Моделирование многомерных распределений с использованием копула-функций / Д. Фантаццини: Прикладная экономика, 2011, Т. 22 № 2. С. 98-134.
4. Roger B. Nelsen, A. An Introduction to Copulas/ B. Roger, Nelsen A.: Springer Series in Statistics, 2006, № 2.
5. Пеникас, Г.И. Модели «копула» в приложении к задачам финансов / Г.И. Пеникас: ГУ ВШЭ Москва, 2014. С.24-44
6. «Gismeteo.ru» — прогноз погоды [Электронный ресурс] // Прогноз погоды [Электронный ресурс] : сайт. URL: <https://www.gismeteo.ru/> (дата обращения 5.04.2016) Загл. с экрана. Яз.рус.
7. Quantile-Quantile Plot [Электронный ресурс] // Exploratory Data Analysis [Электронный ресурс]: сайт. URL: <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/qqplot.htm> (дата обращения 5.04.2016) Загл. с экрана. Яз.рус.
8. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Вениг С.Б. Оценка надежности нанобиосистем на основе теории копул // В сб.: Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине – 2015. Саратов 2015. С. 182-184.
9. Kondrateva O.Y., Bilenko D.I., Terin D.V., Revzina E.M., Safonov R., Lomovtseva K.S., Tugusheva G.R., Venig S.B. Reliability evaluation of nanostructures using the theory of copulas// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов 2015. С. 26-27.
10. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Сафонов Р.А., Ревзина Е.М., Кондратьева Е.В. К вопросу оценки надежности наноконструктивных элементов с использованием понятия копулы // Сб. Взаимодействие сверхвысокочастотного, терагерцового и оптического излучения с полупроводниковыми микро- и наноструктурами, метаматериалами и биообъектами Саратов. 2015. С. 72-74.
11. Kondrateva O.Y., Krylov S.N., Revzina E.M., Kondrateva E.V. Using modern software for modeling of nano-sized materials// Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения Саратов. 2015. С. 33-36.
12. Кондратьева О.Ю., Терин Д.В., Ревзина Е.М., Сафонов Р.А. Прогнозирование отказов наносистем// Сб.: Математическое моделирование и информационные технологии в научных исследованиях и образовании. Саратов, 2015. С. 98-101.
13. Терин Д.В. Математическое моделирование микроэлектромеханических систем на основе композитных сред// дисс. на соискание уч. ст. к.ф.-м.н.. Саратов, 2004
14. Safonov R., Glukhova O., Bulgakova K., Savostyanov G., Kondrateva O. Gpu parallel computing in molecular dynamics calculations // Сб.: Наночастицы, наноструктурные покрытия и микроконтейнеры: технология, свойства, применения. Саратов. 2015. С. 38.
15. Абашеев А.В., Терин Д.В. Применение современных математических и компьютерных методов для обработки и анализа результатов исследования устойчивости// Математические методы в технике и технологиях - ММТТ. 2014. № 12 (70). С. 46-49.
16. Вениг С.Б., Мурашев Д.А., Терин Д.В., Ставский Д.В. Индивидуальные образовательные траектории и реализация компетентностного подхода при совместном использовании клипатов и виртуальных информационных образовательных систем // Инженерное образование. 2012. № 11. С. 149-151.

НОВЫЕ ТИПЫ СВЧ-УСТРОЙСТВ НА ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Мерданов М.К., Пономарев Д.В.

Введение

Идея о возможности распада сплошного спектра электронных энергий на совокупность чередующихся разрешенных и запрещенных зон в направлении движения электрона и распространения волны при наличии пространственной периодичности поля деформаций была впервые высказана Л.В. Келдышем [1]. Периодические полупроводниковые структуры с заранее заданными параметрами слоев были названы полупроводниковыми сверхрешетками. Широкий интерес к проблеме их создания проявился после публикаций в 1970 г. статьи Есаки и Цу, которые предложили изготавливать такие структуры путем изменения легирования или состава слоев [2]. Периоды в таких структурах имели значения от 5 до 20 нм. Число слоев доходило до нескольких сотен.

Автор [3] привел определение фотонных кристаллов как материалов, кристаллическая решетка которых обладает периодичностью в диэлектрической проницаемости, приводящей к появлению области «запрещенных» частот, называемой фотонной запрещенной зоной. Яблоневич [4] и Джон [5] предложили создавать структуры с фотонной запрещенной зоной, которую можно рассматривать как оптический аналог запрещенной зоны в полупроводниках. Запрещенная зона в этом случае представляет собой область частот, в которой запрещено существование света во внутренней части кристалла. Вид дефекта или нарушения периодичности в этом случае может быть различным. Такие структуры приходится создавать искусственно в отличие от естественных кристаллов. При этом размер базисного единичного элемента фотонного кристалла должен быть сравним с длиной волны света. Для оптоэлектроники рабочая

длина волны ~ 1.5 мкм [3]. Изготовление таких структур предполагает использование электронно-лучевой и рентгеновской литографии [6].

В сверхвысокочастотном диапазоне фотонный кристалл может быть реализован как с помощью волноводов с диэлектрическим заполнением [8,9], так и с использованием плоских линий передачи с периодически изменяющейся структурой полоска [10]. Известны примеры создания фотонных кристаллов в оптическом, инфракрасном, ультрафиолетовом, СВЧ-диапазоне. Для СВЧ-диапазона создать фотонный кристалл наиболее просто.

Одномерные СВЧ фотонные кристаллы на основе прямоугольных волноводов

Одномерность кристалла означает, что заполняющая волновод диэлектрическая структура обладает периодичностью по диэлектрической проницаемости в одном направлении (вдоль направления распространения волны, по оси Z).

Для расчета коэффициентов отражения R и прохождения D электромагнитной волны при ее нормальном падении на слоистую структуру, состоящую из N слоев может быть использована матрица передачи волны между областями с различными значениями постоянных распространения волны, подобно тому, как это сделано в [11–13].

Появление резонансной особенности в фотонной запрещенной зоне, называемой примесной или дефектной модой колебаний, при наличии в структуре фотонного кристалла дефекта, нарушающего его периодичность, например, в виде изменения электрофизических параметров одного или нескольких элементов рассматривалось в [14, 15]. Изменение параметров создаваемых в СВЧ фотонном кристалле нарушений, в том числе с использованием температурных [16], электрических [17], магнитных полей [18], позволяет управлять частотными положениями примесной моды колебаний в запрещенной зоне фотонного кристалла.

Известно, что фотонные кристаллы относятся к классу метаматериалов, представляющих собой искусственно созданные гетерогенные среды. С

другой стороны, фотонные кристаллы, содержащие большое число повторяющихся элементов, можно рассматривать как разновидность композитов, для описания свойств которых используются параметры, характеризующие фотонный кристалл как единое целое.

В [19] приведены результаты исследования характеристик волноводного СВЧ фотонного кристалла, выполненного в виде диэлектрических матриц с воздушными включениями (см. рис. 1). В качестве материалов диэлектрических слоев использовались керамика (Al_2O_3) с большим числом воздушных включений и пенопласт.

На основе численного моделирования с использованием метода конечных элементов в программе ANSYS HFSS исследовалось влияние объемной доли воздушных включений на амплитудно-частотные характеристики коэффициента пропускания фотонного кристалла. Величина объемной доли воздушных включений регулировалась путём изменения размера отверстий a_{hole} в керамических пластинах при фиксированном их количестве, равном 36 в каждой из пластин. Моделирование проводилось для трёх размеров отверстий a_{hole} , равных 0.75 мм, 1.2 мм, 1.65 мм, что соответствует объемной доле воздушных включений, равной 8.5%, 23% и 43%, соответственно.

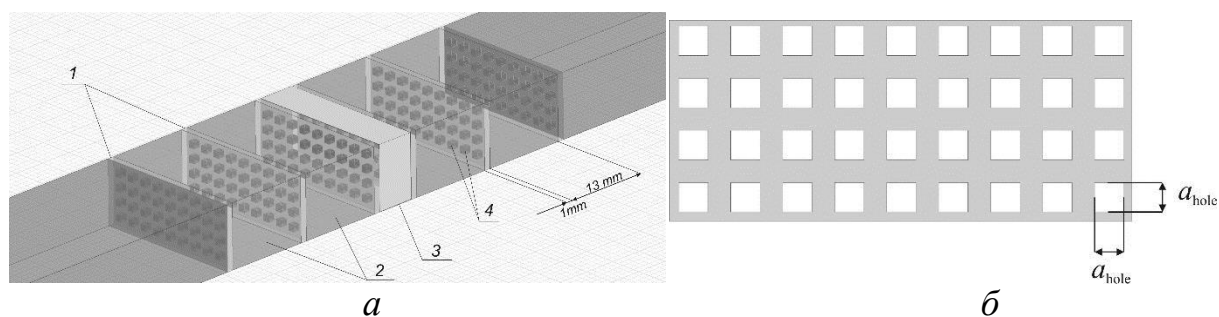


Рисунок 1 Модель фотонного кристалла: 1–слои керамики с квадратными сквозными отверстиями, 2–слои пенопласта, 3–нарушение в виде слоя пенопласта изменённой толщины (рис.1, а). Слой керамики с квадратными сквозными отверстиями (рис.1, б)

Наличие нарушения периодичности фотонной структуры в виде изменения толщины d_{foam} центрального (шестого) слоя пенопласта приводило к появлению в запрещённой зоне фотонного кристалла пика

пропускания, положение которого определяется размером этого нарушения. Изменение толщины d_{foam} нарушенного слоя пенопласта в диапазоне от 2.25 мм до 6.0 мм при отсутствии воздушных включений приводило к изменению положения пика пропускания от 10.88 ГГц до 8.89 ГГц, в то время как при объемной доле включений, равной 43%, положение пика пропускания изменялось от 10.62 ГГц до 12.0 ГГц.

Характеристики созданного в соответствии с описанной выше моделью фотонного кристалла были исследованы экспериментально. Измерение АЧХ коэффициента пропускания исследуемого фотонного кристалла в трехсантиметровом диапазоне длин волн проводилось с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA-L Network Analyzer N5230A. Результаты экспериментальных исследований амплитудно-частотных характеристик коэффициента пропускания фотонного кристалла без нарушения и при различной толщине d_{foam} нарушенного слоя пенопласта представлены на рис. 2. Сравнение результатов расчёта (непрерывные кривые) и эксперимента (дискретные кривые) свидетельствует об их хорошем совпадении.

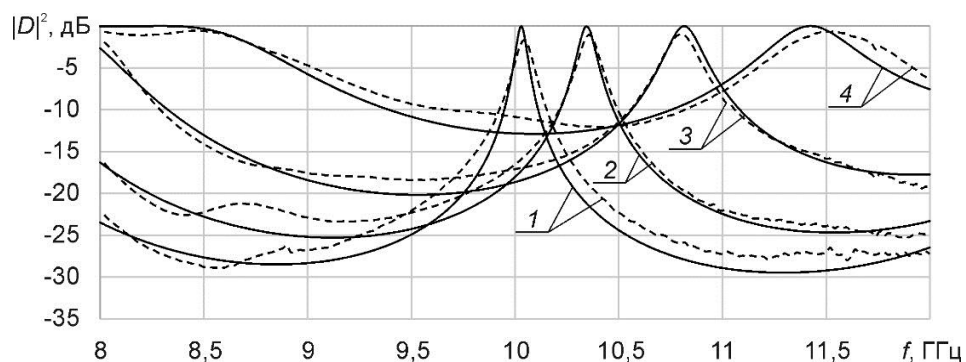


Рисунок 2 Расчётные (непрерывные кривые) и экспериментальные (дискретные кривые) АЧХ коэффициента пропускания фотонного кристалла при различных объемных долях воздушных включений с нарушенным шестым слоем пенопласта толщиной 3.49 мм. Объемная доля включений: 1–0%, 2–8.5%, 3–23.0%, 4–43.0%

Следует отметить, что слои исследуемых фотонных кристаллов, содержащие большое число воздушных включений, можно рассматривать как композитные материалы, представляющие собой диэлектрические матрицы на основе керамики с наполнителем в виде воздушных включений. Диэлектрические свойства таких композитных материалов могут быть

охарактеризованы величиной эффективной диэлектрической проницаемости ε_{ef} , определяемой величинами диэлектрических проницаемостей матрицы ε_1 и наполнителя ε_2 и их объёмными долями.

Представляет научный и практический интерес создание многоэлементных СВЧ фотонных кристаллов, характеризующихся малыми размерами. Для решения такого рода задачи можно в качестве фотонного кристалла использовать структуры, возбуждающие волны высших типов, длины волн которых существенно меньше длины волны в волноводе основного типа, как это предложено авторами [20]. Поэтому размеры устройств на высших типах волн становятся значительно меньше аналогичных устройств на основном типе волны. В связи с этим их можно называть низкоразмерными. В [20] приведены результаты исследований волноводных фотонных кристаллов, представляющих собой структуры из последовательно чередующихся диэлектрических слоёв – чётные элементы фотонного кристалла, и тонких металлических пластин, частично перекрывающих сечение волновода, – нечётные элементы фотонного кристалла.

Структура исследуемого низкоразмерного волноводного СВЧ фотонного кристалла изображена на рис. 3.

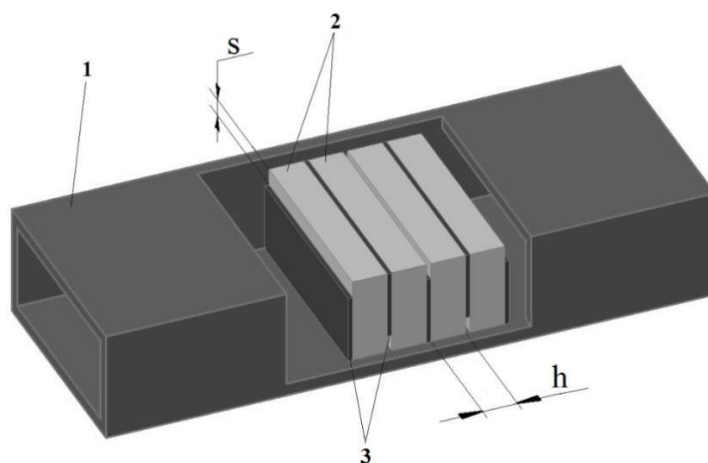


Рисунок 3 Модель фотонного кристалла: 1 – отрезок прямоугольного волновода, 2 – слои диэлектрика, 3 – тонкие металлические пластины, S – ширина зазора, h – толщина слоя диэлектрика

Нарушение периодичности в низкоразмерном СВЧ фотонном кристалле, так же как и в обычном должно приводить к появлению

дефектной (примесной) моды. Теоретическое определение условий ее появления и их экспериментальная реализация были описаны в [21]. Нарушением периодичности фотонного кристалла может служить отличный от других размер центрального диэлектрического слоя или измененный размер емкостного зазора диафрагмы, прилегающей к нарушенному слою. В [21] приведены результаты исследований описанных выше низкоразмерных фотонных кристаллов. Диафрагмы толщиной 50 мкм изготавливались из алюминия. Толщина каждого слоя диэлектрика в фотонном кристалле без «нарушений» составляла 3 мкм. Таким образом, общий продольный размер кристалла без нарушения периодичности равен ~ 15 мкм. Фотонный кристалл размещался в прямоугольном волноводе сечением 23×10 мкм.

Измерения проводились с использованием векторного анализатора цепей Agilent PNA-L Network Analyzer N5230A. Сопоставление результатов расчетов и измерений свидетельствует об их качественном соответствии.

Периодические структуры на основе резонаторов в качестве замедляющих систем для вакуумных СВЧ-приборов и СВЧ-фильтров были описаны еще в 60-е года прошлого века [22, 23]. Они предназначались для использования в качестве замедляющих систем в этих приборах, обеспечивающих оптимальное взаимодействие электронного потока с электромагнитной волной.

Одним из часто применяемых элементов конструкции СВЧ-выключателей на $p-i-n$ -диодах являются резонансные волноводные диафрагмы. Малые геометрические размеры щели обеспечивают эффективное взаимодействие полупроводниковых элементов, имеющих малые габариты с полем волновода.

В работе [24] СВЧ фотонная структура создавалась из периодически расположенных металлических резонансных диафрагм на расстоянии l друг от друга, нанесенных на диэлектрическую подложку (рис. 4).

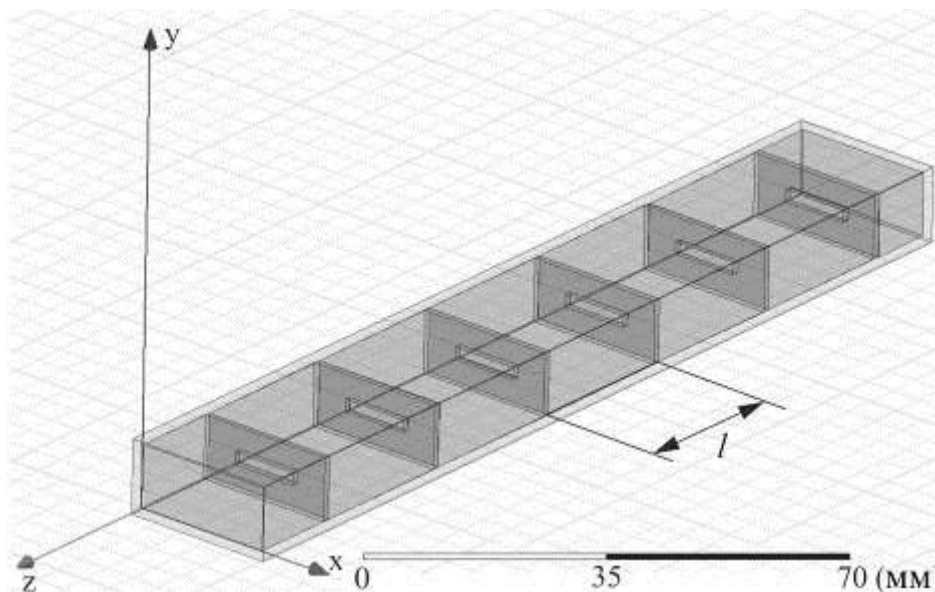


Рисунок 4 Схема СВЧ фотонного кристалла, где l – расстояние между диафрагмами

На основе численного моделирования с использованием метода конечных элементов в программе ANSYS HFSS исследовалось влияние подложек с различной диэлектрической проницаемостью на коэффициенты отражения и прохождения СВЧ волны для структуры.

Из полученных результатов следует, что амплитудно-частотная характеристика коэффициента пропускания исследуемой структуры имеет «зонный» характер. Амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) такого фотонного кристалла состоит из характерных чередующихся «разрешенных» и «запрещенных» зон. Причем, резонансы отдельных диафрагм могут находиться за пределами исследуемой частотной области, так как резонансные пики пропускания в фотонном кристалле образуются за счет формирования стоячих волн в промежутках между диафрагмами, а изменение параметров диафрагм (ширина и высота щели) позволяют сдвигать «разрешенную» и «запрещенную» зоны в нужный частотный диапазон.

Экспериментально исследовались фотонные кристаллы, созданные из периодически расположенных металлических резонансных диафрагм на расстоянии l друг от друга, нанесенных на диэлектрические подложки и без

подложек, что может быть использовано для создания фильтров с регулируемыми характеристиками.

Измерение частотных зависимостей коэффициентов пропускания и отражения исследуемых фотонных кристаллов проводились с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA-L Network Analyzer N5230A в диапазоне частот 8–12 ГГц.

Результаты измерений АЧХ фотонного кристалла с нарушением (сплошные кривые) и без нарушения (штриховые кривые) периодичности в виде измененного расстояния L между центральными диафрагмами представлены на рис. 5.

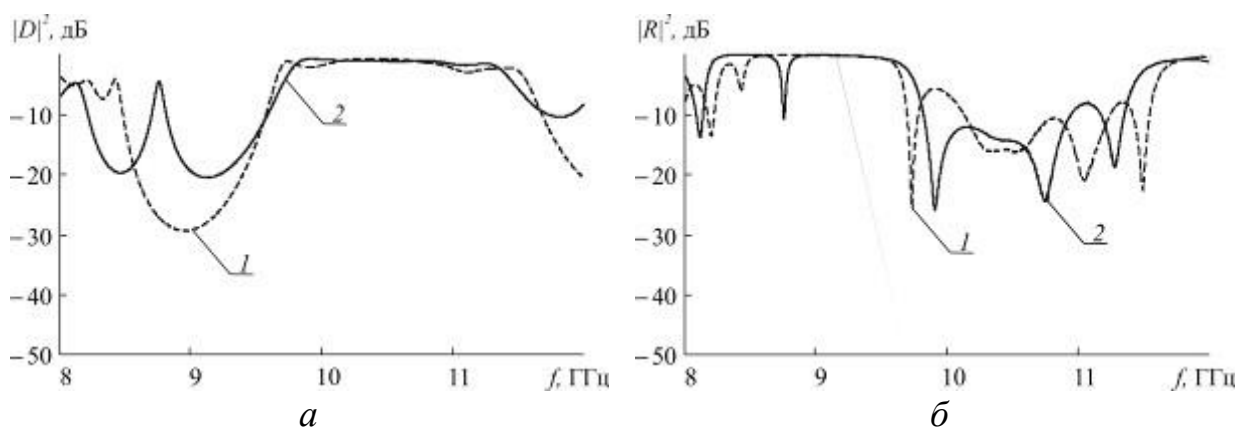


Рисунок 5 Экспериментальные амплитудно-частотные характеристики коэффициента прохождения (а) и отражения (б) фотонного кристалла на основе диафрагм без диэлектрических подложек без нарушения (кривая 1) и с нарушением периодичности (кривая 2). Расстояние между диафрагмами $l = 27$ мм, длина щелей $a_1 = 14$ мм, размер нарушения в центральном слое $L = 20$ мм

Одно из распространенных названий СВЧ фотонных кристаллов – структуры с запрещенной зоной. Это возможно связано с тем, что именно для обеспечения полосы запираения наиболее часто используются СВЧ-фотонные кристаллы. В то же время известно, что, наряду с полосой запираения (аналогом запрещенной зоны в полупроводниках), у СВЧ фотонных кристаллов существует полоса частот, в которой волна распространяется практически не затухая. Авторами [25] было предложено использовать это свойство для создания волноводных широкополосных согласованных нагрузок.

Исследуемая нагрузка представляла собой фотонный кристалл на основе многослойной металлодиэлектрической структуры с различными значениями толщины, диэлектрической проницаемости и электропроводности слоёв, которая помещалась в волновод и полностью заполняла его по поперечному сечению, причём плоскости слоёв располагались перпендикулярно направлению распространения электромагнитной волны. Количество слоёв, их толщины, диэлектрические проницаемости, электропроводности и порядок чередования слоев определялись в результате решения задачи по оптимизации, таким образом, чтобы в выбранном частотном диапазоне величины коэффициентов отражения и прохождения были меньше заданных значений. Оптимизация проводилась численно с использованием итерационного метода Левенберга-Марквардта. Описанная конструкция, в которой внешний диэлектрический слой имеет малое значение диэлектрической проницаемости, защищена патентом [26].

Авторами [27] в результате решения задачи оптимизации, в том числе выбора поверхностного сопротивления нанометровой металлической пленки, была показана возможность создания согласованной нагрузки описанного выше типа, обеспечивающей величину коэффициента стоячей волны по напряжению менее 1.10 в диапазоне частот 8.15–12.05 ГГц при линейном размере нагрузки менее 15 мм.

По данным приведенного выше численного эксперимента были изготовлены согласованные нагрузки для диапазонов частот 8.15–12.05 ГГц, 12.05—17.44 ГГц и 25.95–37.50 ГГц.

Как показали результаты расчетов, в случае использования пластин из обычно применяемых в СВЧ-технике диэлектрических материалов далеко не всегда удается обеспечить требуемый рабочий диапазон частот при достаточно малых значениях КСВН. В частности, возникают трудности в подборе материалов с заданными с высокой точностью значением диэлектрической проницаемости из диапазона значений 1.1–1.5. Для того

чтобы избежать этих трудностей был предложен способ создания диэлектрических слоев с эффективной в заданном частотном диапазоне диэлектрической проницаемостью, величина которой определяется числом, расположением и геометрической формой введенных в них воздушных включений. В простейшем случае такие включения представляют собой сквозные отверстия, например, прямоугольной или круглой формы [28].

Заключение

Таким образом, рассмотрены различные типы фотонных кристаллов на прямоугольных волноводах с диэлектрическими вставками, на волноводных резонансных диафрагмах, на структурах, возбуждающих волны высших типов.

Приведены результаты исследования характеристик волноводного СВЧ фотонного кристалла, выполненного в виде диэлектрических матриц с воздушными включениями.

Предложен новый тип волноводных СВЧ фотонных кристаллов – низкоразмерные СВЧ фотонные кристаллы, представляющие собой структуру из последовательно чередующихся диэлектрических слоёв – чётные элементы фотонного кристалла, и тонких металлических пластин, частично перекрывающих сечение волновода, – нечётные элементы фотонного кристалла, и показана возможность существования в них дефектной моды.

Теоретически и экспериментально исследованы фотонные кристаллы, созданные из периодически расположенных металлических резонансных диафрагм на фиксированном расстоянии друг от друга, нанесенных на диэлектрические подложки и без подложек.

Приведены примеры новых применений СВЧ фотонных кристаллов в качестве широкополосных малогабаритных согласованных СВЧ-нагрузок.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 1376 и 1575).

Библиографический список

- 1 *Келдыш Л.В.* О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла//ФТТ. 1962.–Т.4.–№8.–С.2265-2267.
- 2 *Esaki. L.; Tsu. R.* Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors// IBM Journal of Research and Development. 1970. Vol.14, Issue 1. P.61–65.
- 3 *J. Joannopoulos, Villeneuve P.R., Fan S.* Photonic crystals: putting a new twist on light // Nature. –1997. – V. 386. – P. 143–146.
- 4 *Yablonovitch E.* Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 58. – P. 2059–2063.
- 5 *John S.* Strong localisation of fotons in certain disordered dielectric superlattices// Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 58. – P. 2486 – 2491.
- 6 *Зайцев Д. Ф.* Нанопотоника и ее применение. М.: Актеон. 2012.
- 7 *Силин Р.А., Сазонов В.П.* Замедляющие системы. М., "Сов. радио", 1966.
- 8 *Tae-Yeoul and Kai Chang.* Uiplanar one-dimensional photonic-bandgap structures and resonators // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2001. – Vol. 49, N. 3. — P. 549—553.
- 9 *D. Usanov, A.Skripal, A.Abramov, A.Bogolubov, V.Skvortsov, M.Merdanov.* Measurement of the Metal Nanometer Layer Parameters on Dielectric Substrates using Photonic Crystals based on the Waveguide Structures with Controlled Irregularity in the Microwave Band // Proc. of 37th European Microwave Conference. Munich, Germany. 8–12th October 2007. P. 198–201.
- 10 *Гуляев Ю.В., Никитов С.А.* Фотонные и магнитофотонные кристаллы – новая среда для передачи информации// Радиотехника. 2003. №8. С. 26–30.
- 11 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Абрамов А.В., Боголюбов А.С.* Измерения толщины нанометровых слоев металла и электропроводности полупроводника в структурах металл—полупроводник по спектрам отражения и прохождения электромагнитного излучения// ЖТФ. 2006. Т. 76, вып. 5. С. 112—117.
- 12 *Чаплыгин Ю.А., Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Абрамов А.В., Боголюбов А.С.* Методика измерения электропроводности нанометровых металлических пленок в слоистых структурах по спектрам отражения электромагнитного излучения // Известия вузов. Электроника. 2006, № 6, с. 27-35.
- 13 *D.A. Usanov, Al.V. Skripal, A.V. Abramov, A.S. Bogolyubov, N.V. Kalinina.* Measurements of thickness of metal films in sandwich structures by the microwave reflection spectrum // Proc. of 36rd European Microwave Conference. Manchester, UK. 10–15th September 2006. 509–512.
- 14 *Yablonovitch E., Gmitter T.J., Meade R.D.* Donor and acceptor modes in photonic band structure// Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 67, no. 24. pp. 3380–3383.
- 15 *Беляев Б. А., Волошин А.С., Шабанов В.Ф.* Исследование добротности резонанса примесной моды в микрополосковой модели одномерного фотонного кристалла// Доклады Академии Наук. 2005. Т. 403, № 3, С. 319—324.
- 16 *Гуняков В.А., Герасимов В.П., Мысливец С.А., Архипкин В.Г., Ветров С.Я., Камаев Г.Н., Шабанов А.В., Зырянов В.Я., Шабанов В.Ф.* Термооптическое переключение в одномерном фотонном кристалле// ПЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 21. С. 76–83.
- 17 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Абрамов А.В., Боголюбов А.С., Скворцов В.С., Мерданов М.К.* Волноводные фотонные кристаллы с характеристиками, управляемыми р-і-п-диодами// Изв.вузов Электроника. 2010. № 1. С. 24—29.
- 18 *Гуняков В.А., Мысливец С.А., Паришин А.М., Зырянов В.Я., Архипкин В.Г., Шабанов В.Ф.* Управление пропусканием многослойного фотонного кристалла с жидкокристаллическим дефектом с помощью магнитного поля// ЖТФ. 2010. Т. 80, вып. 10. С. 95–100.

- 19 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Мерданов М.К., Горлицкий В.О.* Волноводный фотонный кристалл, выполненный в виде диэлектрических матриц с воздушными включениями// ЖТФ. 2016. Т. 86, вып. 2. 65–70.
- 20 *Гуляев Ю.В., Никитов С.А., Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Посадский В.Н., Тяжлов В.С., Байкин А.В.* Низкоразмерные волноводные фотонные кристаллы// Доклады академии наук. 2014. Т.458, № 4. С. 406–409.
- 21 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Посадский В.Н., Тяжлов В.С., Байкин А.В.* Дефектная мода в низкоразмерном волноводном СВЧ фотонном кристалле// Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42, вып. 10. С. 106–110.
- 22 *Силин Р.А., Сазонов В.П.* Замедляющие системы. М.: Сов. радио, 1966, 631с.
- 23 *Cohn S. B.* Direct-coupled-resonator filters. Proc. IRE. 1957. Vol. 45. Feb. pp. 187–196.
- 24 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Мерданов М.К., Евтеев С.Г.* Волноводные фотонные структуры на резонансных диафрагмах// Радиотехника. 2015. №10. С. 108-114.
- 25 *Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Абрамов А. В., Боголюбов А. С., Скворцов В. С., Мерданов М. К.* Широкополосные волноводные согласованные нагрузки на основе фотонных кристаллов с нанометровыми металлическими слоями// Известия вузов. Радиоэлектроника. 2009.Т.52, №1. С.73 – 80.
- 26 *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Абрамов А.В., Боголюбов А.С., Скворцов В.С., Мерданов М.К.* Патент РФ на изобретение №2360336. Широкополосная волноводная согласованная нагрузка/ Оpubл. 27.06.2009. Бюл. № 18. (по заявке на изобретение 2008106244/09 от 21.02.2008). МПК H01P 7/00 (2006.01)
- 27 *Усанов Д.А., Мещанов В.П., Скрипаль А.В., Попова Н.Ф., Пономарев Д.В.* Широкополосные согласованные нагрузки на СВЧ фотонных кристаллах/ Радиотехника. 2015. № 7. С. 58-63.
- 28 *Усанов Д.А., Мещанов В.П., Скрипаль А.В., Попова Н.Ф., Пономарев Д.В.* Согласованные нагрузки СВЧ-диапазона на основе нанометровых металлических пленок и диэлектрических слоев с воздушными включениями// Материалы 25-ой Международной Крымской конференции "СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии" (КрыМиКо'2015). Севастополь, Крым, 6-12 сентября 2015 г. Т. 1, С. 515–516.

ЛАЗЕРНАЯ АВТОДИННАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ МИКРО- И НАНОПЕРЕМЕЩЕНИЙ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ В МЕДИЦИНЕ

Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Добдин С.Ю., Кацавцев Е.О., Феклистов В.Б.

Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского
usanovda@info.sgu.ru

Введение

Развитие современных аппаратных диагностических систем направлено на все более прецизионное измерение электрических, акустических и волновых полей организма человека. В отличие от электрических и волновых полей человека измерение механических деформаций органов и тканей человека затруднено из-за необходимости

измерений микро- и наносмещений на фоне различных видов тремора человеческого организма.

В настоящее время для бесконтактного измерения микро- и наносмещений находят применение методы лазерной интерферометрии [1-4]. В работах [5–10] приведены результаты исследований возможности использования методов интерферометрии в измерениях биовибраций и в задачах кардиодиагностики. В работе [8] исследован механизм формирования выходного сигнала спекл-интерферометра для анализа вибраций поверхности кожи и биотканей. Результаты теоретического исследования зависимости структуры фазовых портретов выходного сигнала спекл-интерферометра биовибраций поверхности кожи от тяжести сердечно-сосудистых заболеваний приведены в [10].

Значительный прогресс в задачах диагностики микро- и наносмещений был достигнут при создании измерительных систем на базе лазерной автодинной интерферометрии. Автодинные системы обладают более высокой чувствительностью к отраженному сигналу из-за высокого коэффициента автодинного усиления отраженного от рассеивающего объекта излучения. Созданные на базе полупроводникового лазерного диода автодинные измерители были использованы для измерения тремора и сакадических движений глаза человека [11,12], для измерения смещений барабанной перепонки [13,14], регистрации формы пульсовой волны [15-17].

Особый интерес представляют измерения микро- и наноперемещений при исследовании функционального состояния органов и систем человеческого организма. В этом случае диагностика микро- и наносмещений органов человеческого организма позволяет диагностировать отличие нормы от патологических состояний.

Функциональная диагностика в офтальмологии

Одним из распространённых видов нарушения нормального функционирования органов зрения является повышенный тонус глаз. Повышенный тонус возникает, когда внутриглазная жидкость сдавливает

сосуды, а также зрительные нервы, что может приводить к атрофии зрительного нерва.

В настоящее время в медицинской практике используются пневмотонометры, которые позволяют проводить измерения ВГД при помощи направленной струи воздуха, не касаясь поверхности глаза, т.е. бесконтактно [18]. Подобный процесс измерений является более комфортным для пациента по сравнению с традиционными контактными методами измерений ВГД [19], но по точности уступающим им. Кроме того, давление воздушного импульса пневмотонометра может приводить к искажению результатов измерения истинного давления.

Для повышения точности измерений ВГД бесконтактным способом перспективным может оказаться метод, основанный на использовании лазерной автодинной интерферометрии [20].

Параметры движения оболочки глаза могут быть определены по сигналу полупроводникового лазерного автодина.

$$Z(t) = \int_0^t (V_0 + a \cdot t) dt, \quad (8)$$

где V_0 – начальная скорость движущегося объекта, a – ускорение внешнего отражателя. Неизвестные параметры движения можно найти, определив частоту переменной составляющей автодинного сигнала по её спектру [20]. Скорость движения поверхности оболочки определяют, используя выражение (9):

$$V = \frac{1}{\gamma} \cdot \lambda_0 \cdot \nu_n, \quad (9)$$

где V – скорость движущегося объекта, ν_n – частота автодинного сигнала. По рассчитанным значениям скорости определяют значение ускорения, с которым движется оболочка.

Для измерения деформаций глаза, при различном давлении, использовался полупроводниковый лазер с мощностью излучения до 1 мВт. Кроме того, для контроля внутриглазного давления использовался

пневмотонометр Canon Full Auto Tonometr TX – F10 (CFAT). Измерения параметров движения проводились с использованием лазерного диода RLD-650.

Блок-схема устройства для измерения внутриглазного давления *in vivo* приведена на рис.2. Излучение полупроводникового лазера с диафрагмой (1), стабилизированного источником тока (4), направлялось на склеру глаза (3). Пневмоимпульсы от пневмосистемы с электронным блоком управления (ЭБУ) (2), запитанной источником тока (5), по гибкому шлангу и пластмассовой трубке направлялись на освещаемую лазером поверхность склеры. Часть излучения, отражённого от глаза, возвращалась в резонатор полупроводникового лазера, изменение выходной мощности которого регистрировалось встроенным фотодетектором (6). Сигнал с фотодетектора поступал через усилитель (7) на аналого-цифровой преобразователь (АЦП) (8). Цифровой сигнал с АЦП для последующей обработки сохраняли в памяти ЭВМ (9).

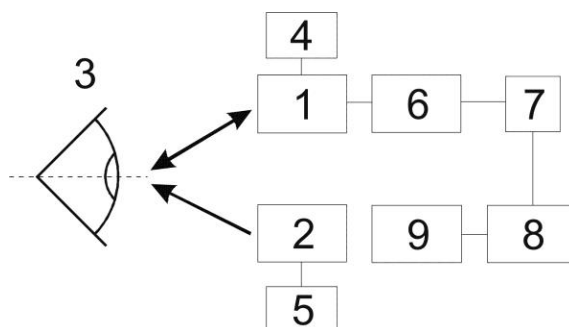


Рисунок 2. Блок-схема устройства для измерения ВГД

Пневмосистема состоит из следующих элементов: контроллер управления на базе микроконтроллера PIC16F877A (Microchip), датчик давления MPX5050 (Motorolla), ресивер, обратный клапан давления, микронасос, драйвер управления насосом L293D (Texas Instrument). Все элементы размещаются на единой электронной платформе, способной обмениваться данными с ПЭВМ. Измерения параметров движения проводились с использованием лазерного диода RLD-650. Длина волны лазерного излучения составляла 650 нм.

Перед проведением измерений голова пациента фиксировалась при помощи лобно-подбородной опоры. При проведении экспериментов пневмоимпульсы были одной и той же силы. Деформация поверхности склеры приводила к изменению величины автодинного сигнала полупроводникового лазера. Параметры движения при этом определялась по автодинному сигналу по методике, приведённой выше.

Измерения параметров движения оболочки глаза пациента под действием пневмоимпульсов проводились при изменении внутриглазного давления прибором SFAT. Изменения параметров движения склеры проводилось с помощью закапывания препарата “Дуотрав”, понижающего ВГД.

Измеренные спектры автодинного сигнала, полученного при отражении от поверхности склеры, до закапывания препарата “дуотрав” и после, показаны соответственно на рис.6 а и рис.6 б.

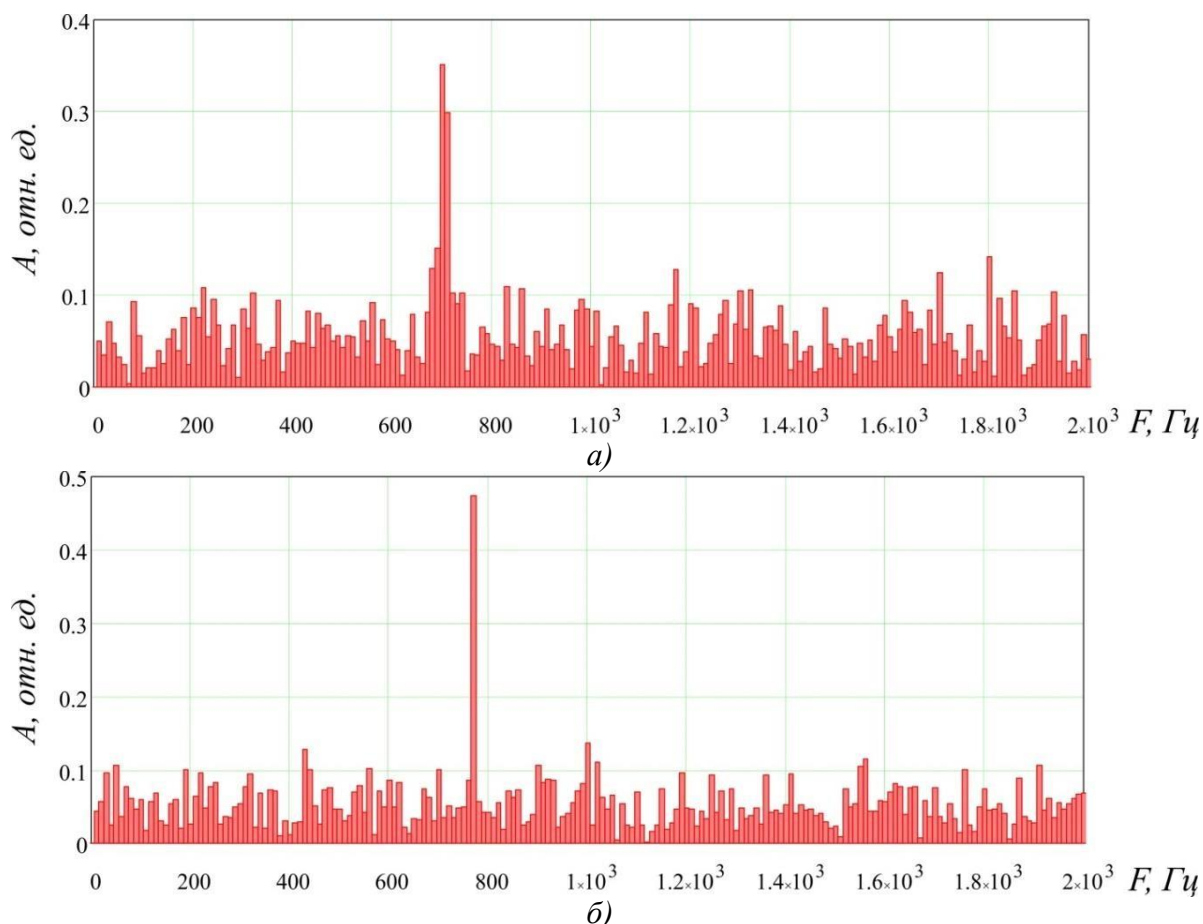


Рис.6. Измеренные спектры автодинного сигнала: а – до закапывания препарата “Дуотрав”, б – после закапывания препарата “Дуотрав”

Анализ полученных спектров показал, что значения максимальной скорости и ускорения склеральной оболочки, рассчитанные до закапывания препарата “Дуотрав”, оказались меньше, чем после закапывания. Контроль ВГД серийно выпускаемым пневмотонометром подтвердил уменьшение давления после закапывания препарата. Результаты расчёта средних значений максимальной величины прогиба склеры ΔZ и ВГД, до и после закапывания препарата, приведены в таблице 3.

Таблица 3

№		ВГД (Canon Full Auto Tonometr), у.е.	Частота авт. сигнала (F), Гц	ΔZ , мкм	$\Delta Z / a \cdot 10^{-4}$, c^2
1.	до препарата	OD = 15	704	2,81	1,912
2.	после препарата	OD = 14	769	3,75	2,027

Из таблицы видно, что прогиб склеры после закапывания препарата “Дуотрав” увеличился на 33,45 %. При этом по показаниям пневмотонометра SFAT давление изменилось на 1 условную единицу.

Из полученных результатов следует, что возможность измерения микро- и наносмещений позволяет существенно снизить величину воздушного импульса, влияющую на истинное давление. Использование полупроводникового лазерного автодина позволяет повысить точность определения давления при проведении функциональной диагностики органов зрения, поскольку с его помощью с высокой точностью можно определить прогиб склеры и по этим данным ВГД.

Лазерная диагностика формы пульсовой волны

Известно, что пульсовая волна, возникающая при прохождении крови по артериальным сосудам, несет информацию о состоянии сердечнососудистой системы. При механических измерениях [21, 22] используется датчик, прикладываемый к поверхности кожи в области над артерией, движения которой регистрируются электрическим или оптическим методами.

В работе [23] для оценки риска возникновения сердечно-сосудистой недостаточности при физической нагрузке использовался

осциллометрический метод определения аномалий в форме пульсовой волны в сочетании с регистрацией типа нервной регуляции сердечно-сосудистой системы по индексам Баевского. Форма пульсовой волны в этом методе регистрируется с помощью пневматического датчика давления, подключенного к манжете. При проведении измерений манжета накладывается на предплечье пациента и накачивается до необходимого давления. Форма пульсовой волны регистрируется при давлении манжеты, что может вносить погрешность в результат измерений.

Наиболее перспективным для оценки состояния сосудистой системы является бесконтактный метод, основанный на измерении формы пульсовой волны с помощью полупроводникового лазерного автодина.

Для восстановления формы пульсовой волны лучевой артерии в области запястья переменная нормированная составляющая автодинного сигнала при движении объекта может быть записана в виде [24]:

$$P(t) = \cos \left(\theta + \frac{2\pi x}{\lambda} \cdot f(t) \right) \quad (1)$$

где θ – стационарный набег фазы, λ - длина волны излучения лазера, $f(t)$ - функция продольных движений отражателя. В выражении (1) изменение аргумента косинуса на 2π , т.е. один период автодинного сигнала $P(t)$, соответствует изменению расстояния до отражателя на $\lambda / 2$. Таким образом, $f(t)$ может быть восстановлена подсчетом количества периодов автодинного сигнала при фиксировании их временных координат.

При измерениях использовался лазерный диод типа RLD-650 на квантоворазмерных InGaAlP структурах с дифракционно-ограниченной одиночной пространственной модой с характеристиками: мощность излучения 5 мВт, длина волны излучения 654 нм.

Для исключения случайных движений во время измерений рука испытуемого фиксировалась на станине, на которой была жестко закреплена также автодинная система. На рис. 1 приведена блок-схема экспериментальной установки. Излучение полупроводникового лазера 1,

стабилизированного источником тока 2, направлялось на поверхность кожи в области запястья, где лучевая артерия расположена ближе к поверхности кожи. Часть излучения, отраженного от поверхности кожи, возвращалась в резонатор полупроводникового лазера, изменение выходной мощности которого регистрировалось встроенным в корпус лазера фотодетектором 3. Сигнал с фотодетектора поступал через усилитель 4 на аналого-цифровой преобразователь 5. Цифровой сигнал с АЦП для последующей обработки сохранялся в памяти ЭВМ 6.

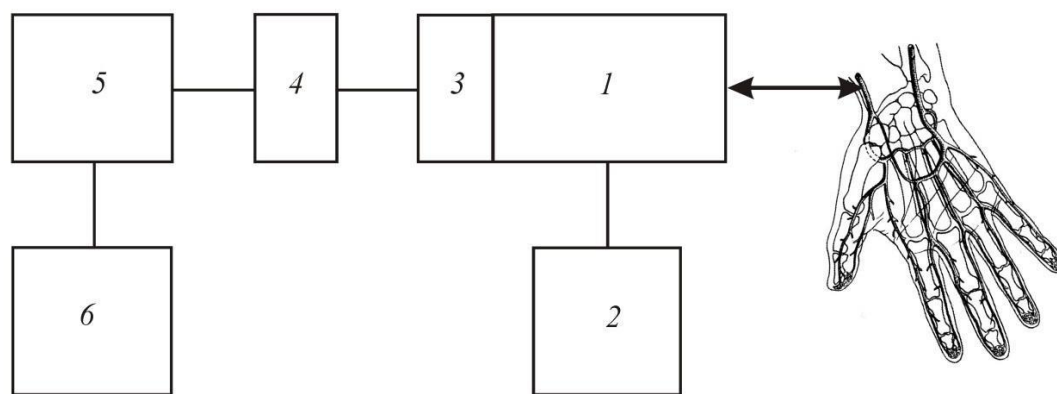


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки.

Автодинный сигнал регистрировался в течение времени, соответствующего нескольким кардиоциклам. На рис. 2 представлен автодинный сигнал, соответствующий одному кардиоциклу.

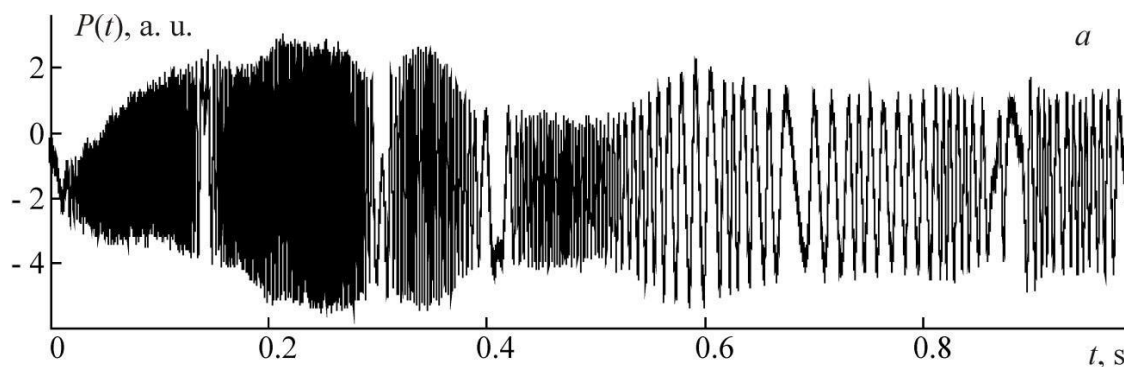


Рис.2. Измеренный автодинный сигнал $P(t)$ лучевой артерии в области запястья

Для восстановления функции движения стенки артерии при прохождении пульсовой волны определялись временные координаты всех максимумов автодинного сигнала. Временной интервал между двумя ближайшими максимумами автодинного сигнала соответствует

прохождению объектом расстояния равного половине длины волны излучения лазера, т.е. 327 нм. При работе автодинной системы в режиме слабой обратной связи [26] автодинный сигнал приобретает наклон, характеризующий направление движение отражателя [27]. Это позволило решить проблему определения направления движения стенки лучевой артерии при восстановлении функции движения.

Для анализа формы пульсовой волны в работе [23] предложено использовать амплитудный параметр ВППВ (вторая производная пульсовой волны), вычисляемый на ее нисходящем участке (катакроте) по модулю второй производной от времени d^2A/dt^2 :

$$\text{ВППВ} = (1/N) \sum_{i=1}^N \left| d^2 A_i / dt^2 \right|,$$

где N - количество точек пульсовой волны, в которых вычислялась вторая производная по времени. Увеличение параметра ВППВ характеризует уменьшение кривизны формы пульсовой волны и свидетельствует о повышении тонуса сосудистой системы.

Примеры пульсовых волн испытуемых Д. и С., восстановленные из измеренных автодинных сигналов, приведены на рис. 3. Испытуемый Д. – мужчина 26 лет, испытуемый С. – мужчина 28 лет.

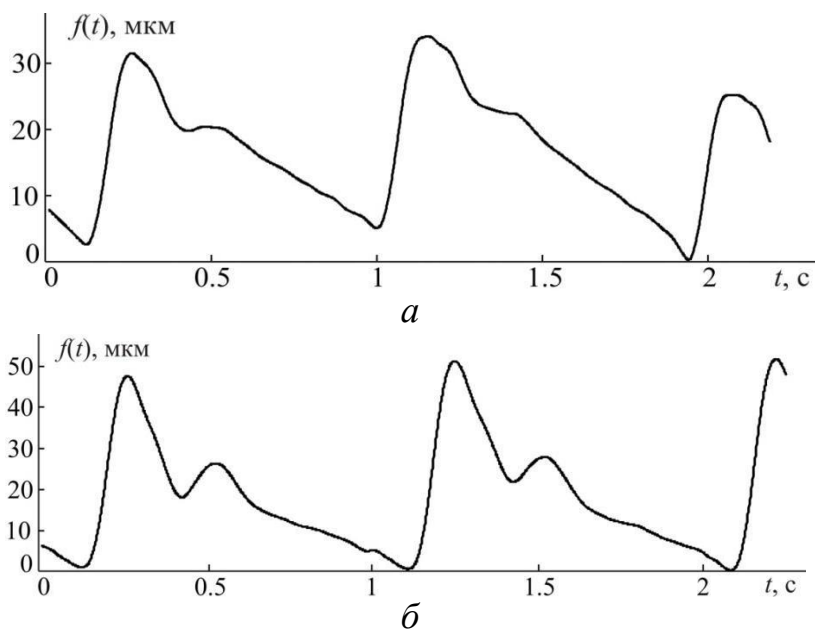


Рис. 3. Формы пульсовых волн, полученных с помощью автодинной системы: а – испытуемый Д., б – испытуемый С.

По восстановленным формам пульсовых волн рассчитывался параметр ВППВ. Для испытуемого Д. с пульсовой волной, изображенной на рис. 3 а, параметр ВППВ составил 17.6, для испытуемого С. с пульсовой волной, изображенной на рис. 3 б, ВППВ = 25.5.

Как следует из данных, приведенных на рис. 3, у испытуемого С. наблюдается пониженный тонус сосудистой системы.

Одновременное сочетание указанного фактора с ваготонической нервной регуляцией сердечного ритма свидетельствует об опасности возникновения сердечно-сосудистой недостаточности при стрессовой физической нагрузке. Полученные с помощью полупроводникового лазерного автодина данные исследования пульсовой волны в сочетании с вегетативной регуляцией сердечно-сосудистой системы согласуются с результатами клинического обследования испытуемых на базе Клинической больницы им. С.Р. Миротворцева (Саратовский государственный медицинский университет им. В.И. Разумовского).

Необходимо отметить, что при измерении формы пульсовой волны с использованием пневматического датчика [15], значительное отличие давления в манжете от диастолического давления обследуемого может приводить к существенному искажению формы пульсовой волны, и, как следствие, к ошибочному значению рассчитанного параметра ВППВ. Вычисленные значения параметра ВППВ из автодинного сигнала полупроводникового лазера и из пульсовой волны, измеренной с помощью датчика давления, характеризуют отличие в эластичности сосудов испытуемых. Отличие в значениях параметра ВППВ, полученные из формы пульсовой волны, измеряемой с помощью датчика давления [15] и по автодинному сигналу полупроводникового лазера, могут быть объяснены тем, что область измерения для датчика давления является более распределенной, а для лазерного автодина более локальной.

Таким образом, показана возможность бесконтактного измерения формы пульсовой волны лучевой артерии в области запястья с использованием полупроводникового лазерного автодина. Восстановленная форма пульсовой волны и измеренная вариабельность сердечного ритма характеризуют степень риска возникновения острой сосудистой недостаточности.

Заключение

Таким образом, лазерные методы диагностики параметров микро- и наноперемещений органов могут быть использованы для оценки функционального состояния организма человека. В частности, использование пневмоимпульса позволяет разработать метод бесконтактной диагностики внутриглазного давления, а измерение формы пульсовой волны с одновременной регистрацией типа нервной регуляцией сердечного ритма может явиться диагностическим критерием опасности возникновения сердечно-сосудистой недостаточности при стрессовой физической нагрузке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 1376 и 1575).

Библиографический список

1. *Коронкевич В. П., Соболев В. С., Дубнищев Ю. Н.* Лазерная интерферометрия. – Наука. Сиб. отд-ние, 1983. 212 с.
2. *Дубнищев Ю. Н., Ринкевичус Б. С.* Методы лазерной доплеровской анемометрии. М.: Наука, 1982. 303 с.
3. *Максимова Л. А., Рябухо В. П., Рябухо П. В., Мысина Н. Ю.* Цифровая спекл-фотография с корреляционной обработкой пространственного спектра спеклограммы для определения микросмещений рассеивающего объекта // Известия Саратовского университета. Нов. сер. Сер. Физика. 2015. Т. 15, вып.3 . С. 5–11.
4. *Диков О.В., Савонин С.А., Качула В.И., Рябухо В.П.* Цифровая голографическая интерферометрия микросмещений объектов с рассеивающей поверхностью // Компьютерная оптика. 2012. Т. 36. № 1. С. 51-64.
5. *Fercher A. F., Hu H. Z., Steeger P. F., Briers J. D.* Eye deformation measurement by laser interferometry// Opt. Acta. 1982. Vol.29, №10. P. 1401–1406.
6. *Ulyanov S. S.* Speckle-interferometry and Doppler diagnostics of scattering microflows// Optics and Spectroscopy. 2003. Vol.94, №1. P. 88–92.
7. *Ryabukho V. P., Tuchin V. V., Ulyanov S. S., Zimnyakov D. A.* Coherent Optical Techniques in Biomedical Diagnostics// Proc. SPIE. 1994. Vol. 2100. P. 19–29.
8. *Ulyanov S. S., Ryabukho V. P., Tuchin V. V.* Speckle interferometry for biotissue vibration measurement// Opt. Eng. 1994. Vol.33, №3. P. 908–914.

9. *Tuchin V. V., Ampilogov A. V., Bogoroditzky A. G., Rabinowitz E. M., Ryabukho V. P., Ul'yanov S. S., Viewshkin M. E.* Laser speckle and optical fiber sensor for micromovements monitoring in biotissues// Proc. SPIE: Optical Fiber in Medicine VI. 1991. Vol. 1420. P. 81–92.
10. *Ульянов С. С., Тучин В. В.* Получение фазовых портретов кардиовибраций человека с помощью спекл-интерферометрии// Изв.вузов. Прикладная нелинейная динамика. 1994. Т.2, №3-4. С. 44–53.
11. *Skripal A.V., Usanov D.A.* Semiconductor laser interferometry of eye movements // Progress in Biomedical Optics and Imaging. Proc. SPIE Vol. 3908. 2000. P.7-12. (Ophthalmic Technologies X, Pascal O. Rol; Karen M. Joos; Fabrice Manns; Eds.)
12. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Усанова Т.Б.* Методы исследования и коррекции движений глаз при нистагме – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2008. 116 с.
13. *Мареев О.В., Мареев Г.О., Усанов Д.А., Скрипаль А.В.* Результаты использования метода лазерного автодинного измерения смещения барабанной перепонки а дифференциальной диагностике патологии среднего уха // Медицинский альманах. - №3. – 2008 г. – с. 49-51.
14. *Д.А. Усанов, О.В. Мареев, А.В. Скрипаль, Г.О. Мареев.* Лазерные автодинные измерения параметров движений барабанной перепонки // Российский журнал биомеханики. 2012. Т.16, №1. С.8-21.
15. *Д.А.Усанов, А.В.Скрипаль, Е.О.Кащавцев* Определение формы пульсовой волны по сигналу полупроводникового лазерного автодина // Письма в ЖТФ. 2013. Том 39, выпуск 5. С.82-87.
16. *Hast J., Myllyla R., Sorvoja H., Miettinen J.* Arterial pilse shape measurement using self-mixing effect in a diode laser // Quantum Electronic. 2002. Vol. 32. No. 11. P. 975-980.
17. *Meiges K., Hiurikus H., Kattai R., Lass J.* Self-mixing in a diode laser as a method for cardiovascular diagnostics // Journal of Biomedicsl Optics. 2003. Vol. 8. No. 1. P. 152-160.
18. *.. Астахов Ю.С., Акопов Е.Л., Потемкин В.В.* Апплационная и динамическая контурная тонометрия: сравнительный анализ // Офтальмологические ведомости. 2008. Т. 1. № 1. С. 4-10.
19. *Любимов Г.А.* История развития и биомеханическое содержание измерения внутриглазного давления по методу Маклакова // Глаукома. 2006. №1. С.43–49.
20. *Д.А. Усанов, А.В. Скрипаль, Т.Б. Усанова, С.Ю. Добдин, Е.И. Астахов* Методы анализа автодинного сигнала при измерении внутриглазного давления // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2014. – № 4. – С. 204–212.
21. *Валтнерис А.Д.* Сфигмография при гемодинамических измерениях в организме // Риж. мед. ин-т. Рига: Зинатне, 1976. 166 с.
22. *Явелов И.С., Рогоза А.Н.* О новых возможностях сфигмографии высокого разрешения // Функциональная диагностика. 2009. № 2. С. 82-86.
23. *Усанов Д.А., Протопопов А.А., Бугаева И.О., Скрипаль А.В., Аверьянов А.П., Вагарин А.Ю., Сагайдачный А.А., Кащавцев Е.О.* Устройство оценки риска возникновения сердечно-сосудистой недостаточности при физической нагрузке // Медицинская техника, 2012. №2. С. 34-37.
24. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В.* Полупроводниковые лазерные автодины для измерения параметров движения при микро- и наносмещениях — Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2014. 136 с.
25. *Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Рытик А.П. и др.* Диагностика риска развития коллапсоидных осложнений в группе студентов с аномальной сердечно-сосудистой реакцией // Саратовский научно-медицинский журнал. 2010. Т. 6, № 3. С. 615-619.
26. *Giuliani G., Norgia M., Donati S. and Bosch T.* Laser diode self-mixing technique for sensing application // J. Opt. A: Pure Appl. Opt., 2002. Vol. 4. S283-S294.
27. *Donati S., Giuliani G., Merlo S.* Laser diode feedback interferometer for measurements of displacements without ambiguity// IEEE J. Quantum Electron. 1995. Vol. 31, №1. P. 113–119.

МЕТОД ЭЛЕКТРОФОРМОВАНИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НЕТКАНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОВОЛОКОН

Усачев А.Н., Климова С.А.

СГУ имени Н. Г. Чернышевского

E-mail: klimovasa@info.sgu.ru

В работе определен и применен бескапиллярный метод электроформования для получения нановолокон и композитных материалов. Подобраны наиболее подходящие растворители для каждого из исследуемых полимеров. Показано, что меняя макроскопические параметры такие, как концентрацию и состав полимерного раствора, становится возможным создавать нетканые материалы разной толщины и плотности. Измерены основные физические параметры: диаметр волокон, поверхностная плотность, толщина и воздухопроницаемость полученного материала. Показано, что полимерный нетканый материал на основе 10% фторопласта марки ФП-42Л обладает большей поверхностной плотностью, чем 15% полиамид-6 и 14% полиакрилонитрил при сравнительно одинаковой толщине материала.

Ключевые слова: электроформование, полимерный раствор, нетканый материал, фторопласт, полиамид-6, полиакрилонитрил

Коды по рубрикации ГРНТИ: 47.09.48, 47.13.07, 47.09.51, 47.59.29, 47.59.39

Введение

В современной науке ученые уделяют большой интерес к новым технологиям получения тонких материалов с заданными свойствами[1]. Процессы электроформования позволяют получать тонкие нетканые материалы, у которых механические свойства такие, как предел прочности, прочность на разрыв, на изгиб и на сжатие, модули упругости возрастают при уменьшении диаметра волокон и достигают теоретического предела при достижении наноразмеров. С одной стороны это связано со снижением концентрации протяженных дефектов в нановолокне, а с другой стороны – с изменением физических свойств самого нановолокна за счет вклада поверхности, поскольку поверхность любого материала представляет собой особое двумерно упорядоченное состояние [2].

Электроформование – это процесс, который приводит к формированию нановолокон в результате действия электростатических сил на электрически заряженную струю полимерного раствора или расплава [3].

Полимерные нановолокна представляют самостоятельный интерес для различных применений, т.к. имеют улучшенные физические свойства (прочность, эластичность и др.) по сравнению с их «толстыми» аналогами. С прикладной точки зрения получение длинномерных нановолокон является предпочтительным, поскольку позволяет организовать процесс их получения в непрерывном режиме, а также расширяет способы их дальнейшей переработки в изделие, позволяя использовать разнообразные текстильные переделы (кручение, плетение и др.). Нановолокна чаще всего используют для изготовления нетканых материалов по различным технологиям, которые применяются, например, для защитной одежды, аккумуляторов, которые в дальнейшем используются во всех известных технических устройствах [4].

Поэтому целью работы является разработка технологии получения новых нетканых материалов на основе нановолокон и их композитов методом электроформования на установке Nanospider NS 200 Lab.

Экспериментальная часть

Нетканые материалы получали на установке Nanospider NS200LAB (Elmarco, Чехия). В качестве используемого полимера применялись порошкообразные вещества 14% полиакрилонитрила (ПАН), 15% полиамида-6 (ПА-6) и 10% фторопласта 42Л (ФП-42Л), а также наполнители: углеродные нанотрубки (УНТ) и наночастицы магнетита (МНЧ). В качестве растворителей были подобраны и использовались кислоты: бутилацетат (БА), диметилформамид (ДМФА), уксусная кислота (УК), муравьиная кислота (МК).

Для работы в установке необходима определенная влажность и температура 12% и 32 °С, соответственно. Параметры процесса электроформования нетканого материала устанавливаются разные, в зависимости от полимерного раствора: напряжение, скорость вращения электрода, скорость движения подложки и расстояние между электродами, после чего запускаем установку.

Метод электроформования

Процесс электроформования бывает двух видов: капиллярный и бескапиллярный. Капиллярный метод заключается в том, что к раствору полимера прикладывается электрическое напряжение 10-80 кВ, после чего уже заряженный раствор подается с помощью дозатора через капилляр [5]. В растворе полимера индуцируются одноименные электрические заряды за счет высокого напряжения, которые, в результате кулоновского электростатического взаимодействия, приводят к вытягиванию раствора полимера в тонкую струю. Бескапиллярный метод получения нетканого материала осуществляется с помощью электрического поля и смоченного в растворе полимера заряженного электрода [6]. Осадительный электрод может быть стержневидный, плоский или цилиндрический, так же он может быть сплошным или в виде сетки, может находиться в неподвижном состоянии или двигаться. Технология бескапиллярного электроформования является более применимой для промышленного получения нановолокон, так как позволяет добиться высокой производительности при достаточно простом конструктивном исполнении.

Особенностями процесса ЭФ, которые необходимо учитывать при получении необходимого материала [7]:

1) выбор растворителя, который должен испаряться достаточно быстро, обеспечивая отвердевание волокон до достижения собирающего электрода (подложка), но не слишком быстро, чтобы позволить максимальное вытягивание волокон вплоть до нанометрового размера, пока они не отвердеют;

2) оптимальные значения вязкости и поверхностного натяжения раствора полимера, которым соответствовать должно электрическое напряжение, чтобы обеспечить формирование и поддержание струи раствора из форсунки-капилляра;

3) расстояние между форсункой-капилляром и осадительным электродом не должно быть слишком маленьким, чтобы предотвратить

электрической пробой, но должно быть достаточно большим, чтобы волокно успевало высохнуть до достижения подложки.

Для получения нетканого материала из нановолокон могут использоваться теоретически все волокнообразующие полимеры, обладающие следующими свойствами [8]:

- термостойкостью и термопластичностью;
- аморфно-кристаллической или кристаллично-аморфной структурой;
- определенной молекулярной массой, так как, чем она выше, тем ниже растворимость и выше вязкость раствора;
- температурой плавления, так как: температура плавления пленки меньше температуры плавления объемного материала.

Способы получения композитных материалов на основе нановолокон разнообразны, но существует формальная классификация на 2 метода:

1. Наполнение обычных химических волокон наночастицами различной природы;
2. Включение наночастиц непосредственно в полимерный раствор.

Существует много способов получения волокон первого вида: метод вытягивания, «шаблонный синтез», фазовое распределение, самоорганизация ассоциаций, метод ассоциаций [9]. Для наполнения природных или химических волокон используют минеральные и органические наночастицы. Наночастицы при введении в структуру волокон в количестве 2-3 % передают свои свойства всему объему волокна. От природы и свойств наночастиц зависят новые или улучшенные потребительские свойства. Размер полученного волокна может измеряться в нанометрах, что приводит к иным способам взаимодействия с другими материалами по сравнению с макромасштабными материалами.

Применение нановолокон и материалов из них разнообразно (рис. 1). В медицине используются нановолокна в тканевой инженерии в качестве искусственных органов. Хирурги используют синтетические биоразлагаемые

имплантаты для спонтанного роста здоровой естественной ткани и полного восстановления организма [10].



Рис. 1. Области применения нановолокон нетканых материалов, полученных методом электроформования

В современных аккумуляторах в качестве сепаратора используется конденсаторная бумага, которая имеет диаметр волокон, равный 22-47 мкм. Необходимыми свойствами мембранного материала сепаратора является высокая развитая удельная поверхность (большое количество пор на единицу площади) при минимальной толщине материала с определенным диаметром волокон, что увеличивает ёмкость и энергию аккумулятора. С возрастанием пористости сепаратора улучшаются условия диффузии электролитического раствора, и повышается его запас в межэлектродном зазоре, что обеспечивает низкое удельное сопротивление и приводит к увеличению ионной проводимости [11].

Исследуемые нетканые материалы, полученные на основе полимеров полиамида-6, полиакрилонитрила и фторопласта 42-Л, также можно использовать в аккумуляторах в качестве сепараторов. За счет более тонких волокон сепарационные свойства будут на порядок лучше, чем у

конденсаторной бумаги, из-за высокой пористости материала, которая улучшит взаимодействие между электролитом и сепаратором.

Для электродных материалов в аккумуляторах используют тканый материал Бусофит Т-040, диаметр волокон которого 6-9 мкм. Вместо него можно использовать также нетканый материал, полученный методом электроформования, на основе фторопласта 42-Л с добавлением наночастиц магнетита и углеродных нанотрубок, так как диаметр волокон с наночастицами может достигать 100-400 нм, который во много раз меньше, по сравнению с диаметров волокон используемого материала в настоящее время [12].

Результаты

В результате эксперимента получены нетканые материалы и их композиты. Изображения поверхности нетканых материалов были получены с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) для качественного и количественного сравнения поверхности полученных материалов. СЭМ-изображения представлены на рисунках 2-3.

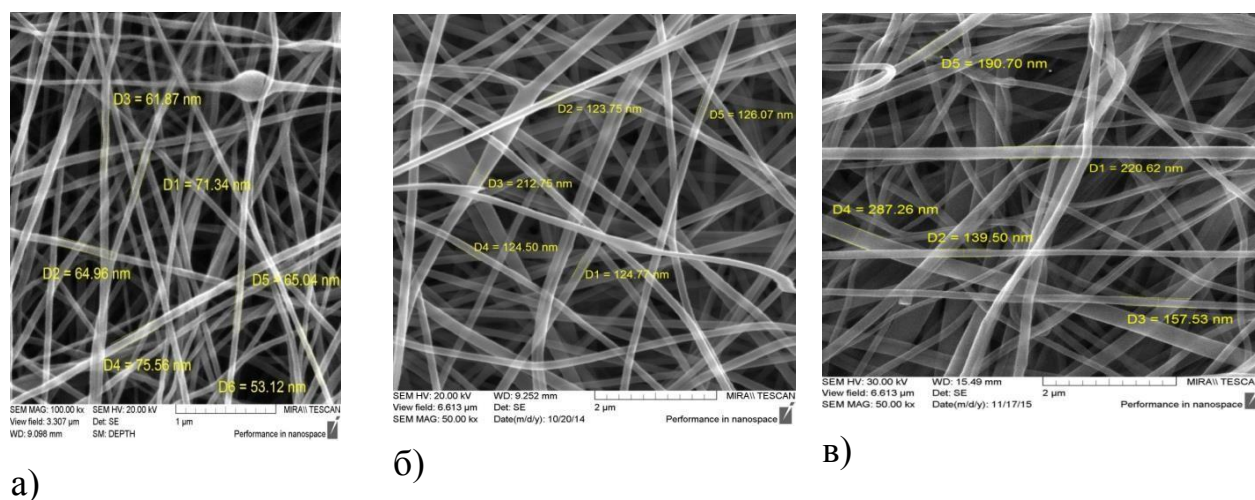


Рис. 2. СЭМ-изображения поверхности нановолокнистого нетканого материала на основе ПА-6 (а), ПАН (б) и ФП-42Л (в)

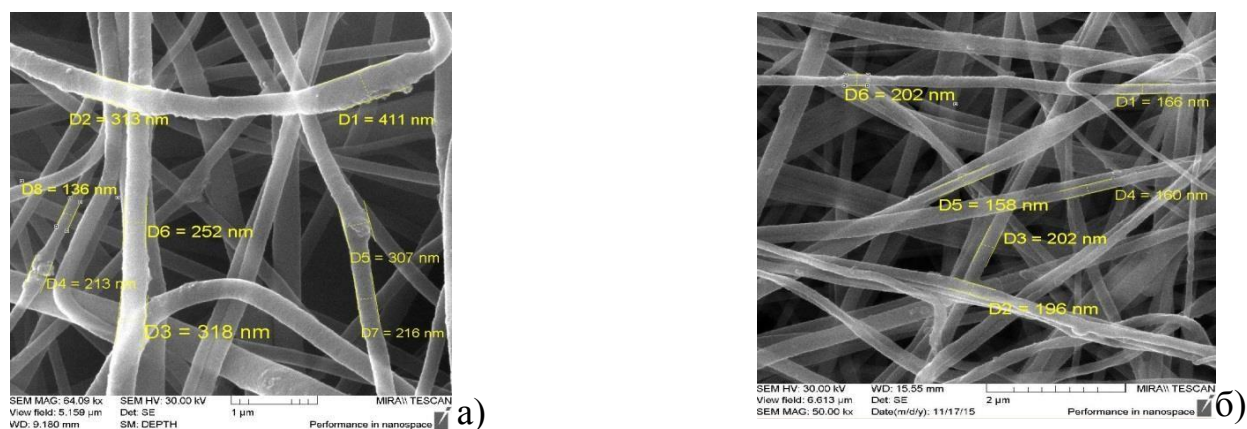


Рис. 3. СЭМ-изображения поверхности нановолокнистого нетканого материала ФП-42Л с углеродными нанотрубками (а) и магнитными наночастицами (б)

В результате использования процессов электроформования, меняя макроскопические параметры такие, как электрическое поле, концентрацию и состав раствора, получены полимерные нановолокны нетканого материала диаметром от 65 нм для ПА-6 до 270 нм – для ФП-42Л (Таблица 1). Кроме того, поверхностная плотность получилась для каждого полимера своя. Полимерный нетканый материал на основе 10% ФП-42Л обладает большей поверхностной плотностью, чем 15% ПА-6 при сравнительно одинаковой толщине материала. Полимерный материал на основе 10% ФП-42Л в 2 раза толще и более плотный (в 3 раза), чем 14% ПАН, материал при сравнительно одинаковом диаметре волокон. Следовательно, наиболее плотный, но в тоже время тонкий материал был получен на основе ФП-42Л. Поэтому композитные материалы представлены на основе данного полимера (Табл. 1).
Таблица 1 Физические параметры полученных нетканых материалов на основе полимеров

Материал	Диапазон значений диаметра волокон, нм	Плотность, г/м ²	Воздухопроницаемость, мм/с (пост. давл. P = 200 Па)	Толщина, мкм
ПА-6	65-75	8	14	72
ПАН	120-220	10	11	30
ФП-42Л	130-270	30	5	82
ФП-42Л с УНТ	200-400	4	28	69
ФП-42Л с МНЧ	150-210	28	2	96

Показано значительное увеличение диаметра волокон материала, содержащего около 2% углеродных трубок, и незначительное увеличение

диаметра для композитного материала с магнитными наночастицами (2%). Хотя, диаметр волокон большой (200-400 нм), относительно исходного материала (130-270 нм), но поверхностная плотность и толщина меньше, чем для материала с магнитными наночастицами – в 7 и в 1,4 раза меньше. Воздухопроницаемость для данного материала большая, поэтому наиболее интересным для дальнейших исследований представляет материал ФП-42Л и его композит на основе магнитных наночастиц.

Заключение

В результате выполнения работы было определено, что метод электроформования является универсальным методом получения тонких нетканых материалов на основе нановолокон, благодаря применению практически любых растворимых полимеров, технологической простоте и его безопасности, а именно, не требуется специфических условий таких, как высокая температура, вакуум, инертный газ, больших энергозатрат.

Основные преимущества метода электроформования в том, что нетканый материал получается с уникально малым диаметром волокна (от 70 нм до 250 нм, в зависимости от полимера). Существует однородность структуры и параметров волокна по длине (непрерывные волокна неограниченной длины, отсутствие дефектов (капель, обрывков)). В работе показана возможность получения волокон сложной структуры – композитов, содержащих углеродные нанотрубки и магнитные наночастицы. Установлено, что полимерный материал ФП-42Л обладает большей поверхностной плотностью, чем ПА-6 и ПАН, при сравнительно одинаковой толщине материала. В свою очередь, данный материал имеет волокна диаметром в 2 раза большим, чем у ПА-6, и сравним с диаметром волокон ПАН. При внедрении наночастиц магнетита и нанотрубок отмечается уменьшение диаметра волокон в первом случае, и увеличение его во втором случае. Данное поведение материалов необходимо исследовать. Воздухопроницаемость для нетканого материала ФП-42Л и его композита на основе магнитных наночастиц маленькая, 5 и 2 мм/с, поэтому наиболее

интересным для дальнейших исследований представляет именно эти материалы.

Работа выполнена в рамках инициативной темы «Разработка и внедрение гибких электродных материалов на основе электроформованного полимера для гибридного накопителя электрической энергии»

Библиографический список

1. *Klimova S.A., Venig S.B.* The activated porous carbon-based materials of ultrafine fibers in high-energy storage devices // Proceeding of the Annual International Conference “DPG Spring Meeting 2015” (DPG’15). Vacuum Physics and Technics: VA 2: Vacuum based manufacturing, coating and analysis. 15-20 March 2015, Berlin (Germany). – P. 225.
2. *Филатов, Ю.Н.* Электроформирование волокнистых материалов / Ю.Н. Филатов // М.: Волокнистые материалы, 2001, С. 105-107.
3. *Матвеев, А.Т.* Получение нановолокон методом электроформирования / А.Т. Матвеев, И.М. Афанасов // М.: Методы формирования нановолокон, 2010, С. 87-91.
4. *Лайле, И. Р.* Нетканые волокнистые материалы и электроды из них / И. Р. Лайле // М.: Нетканые волокнистые материалы и электроды из них, 2006, С. 82-88.
5. *Соколов, В.В.* Получение ультратонких волокон Eudragit RS методом электроформования / В. В. Соколов, И. Ю. Филатов, Ю. Н. Филатов // М.: Пластические массы, 2012, №8, С. 24-29.
6. *Матюшин, А.Н.* Исследование процесса бескапиллярного электроформования материалов с повышенной гидрофобностью / Ф. Н. Матюшин // М.: Процессы электроформования, 2007, С. 124-130.
7. *Милютин, Г.Р.* Метод электропрядения для получения нанотекстиля / Г.Р. Милютин, И.В. Черунова // М.: Метод электропрядения для получения нанотекстиля, 2011, С. 56-59.
8. *Кузнецов, В. П.* Конденсаторы с двойным электрическим слоем (ионисторы): разработка и производство / В. П. Кузнецов, О. Е. Панькина, Н. М. Мачковская // М.: Компоненты и технологии, 2005, №6, С. 1-7.
9. *Денисов, А. Д., Гвоздева В. А.* Анализ спроса на стеклохолст в производстве сепараторов для аккумуляторных батарей// М.: Новые химические технологии, 2002, С. 43-49.
10. *Иноземцева О. А., Сальковский Ю. Е., Северюхина А. Н., Видяшева И. В., Петрова Н. В., Метвалли Х. А., Стецюра И. Ю., Горин Д. А.* Электроформование функциональных материалов для биомедицины и тканевой инженерии// Усп. хим., 2015, Т. 84, №3, С. 251–274.
11. *Шиповская, А. Б.* Биополимерное волокно, состав формовочного раствора для его получения, способ приготовления формовочного раствора, полотно биомедицинского назначения, способ его модификации, биологическая повязка и способ лечения ран / А. Б. Шиповская, Н.В. Островский, Ю.Е. Сальковский, [и др.] // М.: Биополимерное волокно, 2012, С. 26-33.
12. *Артемов, Г. С.* Биополимерные нановолокна / Г. С. Артемов, И. А. Повышев // М.: Биополимерные нановолокна, 2004, С. 45-52.

Научное издание

**НАНО- И БИОМЕДИЦИНСКИЕ
ТЕХНОЛОГИИ.
УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ.
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ.**

Сборник научных статей

ISBN 978-5-9908612-1-3



Издается в авторской редакции

Подписано в печать 11.08.2016 Формат 60 84 1/16.
Бумага офсетная. Гарнитура Times. Печать офсетная.
Усл. печ.л. 9,30 (10,0). Уч. изд. л. 6,67. Тираж 100 экз.

Издательство «Техно-Декор»
Саратов, Московская, 160
Тел. (8452) 26-38-48
sar-print.ru

ISBN 978-5-9908612-1-3



9 785990 861213