МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 19, №2, 2026

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2026

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Дубов В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Карасёв П.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий, Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет, Канберра, Австралия;
Черепанов А.С., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ».

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Журнал индексируется в базах данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, а также включен в базы данных **«Российский индекс научного цитирования»** (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте http://www.elibrary.ru, и **"Directory of Open Access Journals"** (DOAJ).

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.

http://ntv.spbstu.ru/physics

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY

JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 19, No.2, 2026

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2026

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
VA.I. Rudskoy – full member of RAS;
A.E. Zhukov – corresponding member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Cherepanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
V.V. Dubov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.A. Firsov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
P.A. Karaseov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;
O.S. Loboda – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
J.B. Malherbe – Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.E. Privalov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.M. Smirnov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus,** the **Russian Science Citation Index** (RSCI) and the **Directory of Open Access Journals** (DOAJ) databases.

© Scientific Electronic Library (http://www.elibrary.ru).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address:
195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.
Phone: 8 (812) 552-62-16.
http://ntv.spbstu.ru/physics

© Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University, 2026

Содержание

Физика конденсированного состояния

Князева М. А., Жукова Н. С., Вакуленко А. Ф. *Влияние режимов переключения электрического поля на поляризационные свойства эпитаксиальных гетероструктур на основе цирконата-титаната свинца* 9

Математическое моделирование физических процессов

Ермакова К. К., Засимова М. А., Иванов Н. Г. *Исследование вихревых течений, сформированных импульсной турбулентной плавучей струей* 16

Адиатуллин В. Р., Галаев С. А., Рис В. В., Засимова М. А., Иванов Н. Г. *О неустойчивости встречных пристенных струй в вентилируемой полости* 27

Баранов М. А., Цыбин О. Ю. *Суперкомпьютерное моделирование динамики олигомеров ряда аминокислот (Gly, Ala, Trp, Val) в электромагнитном поле инфракрасного диапазона* 39

Долженко Д. И., Леткиман Е. Д. *Влияние профиля траншеи из диоксида кремния на фоточувствительность КМОП-совместимого лавинного фотодиода видимого диапазона* 57

Алифов А. А. *Смешанные параметрические и автоколебания: действие на них нелинейного параметрического возбуждения и запаздывания, вызывающего автоколебания* 68

Приборы и техника физического эксперимента

Козловский С. С., Гуньков П. С., Бердников Я. А., Донских-Тырса В. А. *Определение толщины покрытий методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием градуировочной зависимости, полученной расчетным путем* 76

Физическая электроника

Хужаниёзов Ж. Б., Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Лобода В. В., Абдувайитов А. А. *Влияние имплантации ионов Ar^+ и Cd^+ на состав и электронную структуру монокристаллического теллурида цинка* 84

Клевцов А. И., Карасев П. А., Титов А. И. *Образование устойчивых радиационных повреждений при последовательной ионной бомбардировке альфа-оксида галлия* 98

Физическое материаловедение

Журихина В. В., Бабич Е. С., Терпицкий А. Н., Нуритдинов И., Рахматов М. А., Эшбеков А. А. *Плазмонные наноматериалы, формируемые методом ионного обмена в стекле: свойства и применение* 107

Нассиф А., Юсеф Р., Юсеф А., Кадхим Ш. А. *Структурные свойства двух нанокристаллических хромшпинелей, полученных методом твердофазной реакции (статья на английском языке)* 136

Биофизика и медицинская физика

Гончаров И. Д., Садова А. И., Нужин И. М., Теницкая П. А., Курдюмова И. В., Горьковская А. А., Ходорковский М. А., Алексеев А. А. *Различия во взаимодействии рекомбиназ RAD51 и UvsX с ДНК, выявленные в экспериментах на уровне одиночных молекул* 147

Ядерная физика

Банников Е. В., Бердников Я. А., Ларионова Д. М., Котов Д. О., Басиров К. Н., Борисов И. И. *Азимутальные зависимости факторов ядерной модификации π^0-мезонов в столкновениях релятивистских ядер меди и золота при энергии 200 ГэВ и ядер урана при 193 ГэВ* 160

Круашвили Д. В., Бердников Я. А. *Двойная продольная спиновая асимметрия (J/ψ)-мезонов, рожденных в продольно-поляризованных протон-протонных столкновениях* 171

Механика

Смирнова Н. А. *Подавление колебаний маятника с помощью параметрического регулятора* 178

Contents

Condensed matter physics

Kniazeva M. A., Zhukova N. S., Vakulenko A. F. *The effect of electric field switching modes on polarization properties of the lead zirconate-titanate-based epitaxial heterostructures* 9

Simulation of physical processes

Ermakova K. K., Zasimova M. A., Ivanov N. G. *Study of vortex flows generated by a pulsed turbulent buoyant jet* 16

Adiatullin V. R., Galaev S. A., Ris V. V., Zasimova M. A., Ivanov N. G. *On the instability of counterflowing wall jets in a ventilated cavity* 27

Baranov M. A., Tsybin O. Yu. *Supercomputer simulation of the dynamics of oligomers of a number of amino acids (Gly, Ala, Trp, Val) in the infrared electromagnetic field* 39

Dolzhenko D. I., Letkiman E. D. *The influence of a silica trench profile on the photosensitivity of a CMOS-compatible APD in the visible range* 57

Alifov A. A. *The mixed parametric and self-oscillations: The effect of nonlinear parametric excitation and delays on them causing self-oscillations* 68

Experimental technique and devices

Kozlovskiy S. S., Gunkov P. S., Berdnikov Ya. A., Donskikh-Tyrsa V. A. *The thickness determination of coatings by X-ray fluorescent analysis using a calibration curve obtained by calculations* 76

Physical electronics

Khujaniyozov J. B., Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Loboda V. V., Abduvayitov A. A. *The influence of Ar^+ and Cd^+ ion implantation on the composition and electronic structure of monocrystalline zinc telluride* 84

Klevtsov A. I., Karaseov P. A., Titov A. I. *Radiation defect formation during sequential ion bombardment of alpha-gallium oxide* 98

Physical materials technology

Zhurikhina V. V., Babich E. S., Terpitskiy A. N., Nuritdinov I., Rakhmatov M. A., Eshbekov A. A. *Plasmonic nanomaterials formed by ion exchange in glass: properties and applications* 107

Nassif A., Yousef R., Yousef A., Kadhim Sh. A. *Structural properties of some nanocrystalline spinel chromites prepared by solid-state reaction method* 136

Biophysics and medical physics

Goncharov I. D., Sadova A. I., Nuzhin I. M., Tenitskaya P. A., Kurdyumova I. V., Gorkovskaia A. A., Khodorkovskiy M. A., Alekseev A. A. *Differences in the interaction of RAD51 and UvsX recombinases with DNA revealed by single-molecule experiments* 147

Nuclear physics

Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Larionova D. M., Kotov D. O., Basirov K. N., Borisov I. I. *Azimuthal dependences of the nuclear modification factors of π^0 mesons in Cu+Au collisions at an energy of 200 GeV and U+U collisions at 193 GeV* 160

Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A. *Double longitudinal spin asymmetry of J/ψ mesons produced in proton-proton collisions with longitudinal polarization* 171

Mechanics

Smirnova N. A. *The damping of pendulum oscillations using a parametric controller* 178

Физика конденсированного состояния

Научная статья
УДК 538.956
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19201

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА

М. А. Князева ✉, Н. С. Жукова, А. Ф. Вакуленко
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ kniazeva.maria225@yandex.ru

Аннотация. С целью продления работоспособности устройств на основе сегнетоэлектриков, в работе впервые предложен экспериментальный подход к выяснению механизма развития поляризационной усталости в тонкой сегнетоэлектрической пленке на основе цирконата-титаната свинца. Для этого проанализировано влияние конфигурации последовательности записывающих импульсов на поляризацию выбранного объекта. При двух режимах приложения электрического поля (они различались порядком следования положительных и отрицательных импульсов) было проведено сравнение значений коэрцитивного поля (КП) и остаточной поляризации сегнетоэлектрических петель гистерезиса. Установлено, что в моменты циклических переключений изменение компонент КП незначительно, тогда как после пауз между измерениями разница между значениями КП достигала 10% и более. Эксперименты показали, что полярность завершающего импульса переключающего сигнала задает благоприятные условия для стабилизации в пленке доменов, дипольный момент которых сонаправлен с полярностью импульса, и после возобновления измерений требуется поле большей величины для изменения поляризации на противоположную.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, эпитаксиальная гетероструктура, поляризационная усталость, остаточная поляризация, цирконат-титанат свинца

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (Проект №24-22-00453 «Влияние эпитаксиальных натяжений на структурные переключения в антисегнетоэлектрических гетероструктурах на основе гафната свинца»).

Для цитирования: Князева М. А., Жукова Н. С., Вакуленко А. Ф. Влияние режимов переключения электрического поля на поляризационные свойства эпитаксиальных гетероструктур на основе цирконата-титаната свинца // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 9–15. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19201

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19201

THE EFFECT OF ELECTRIC FIELD SWITCHING MODES ON POLARIZATION PROPERTIES OF THE LEAD ZIRCONATE-TITANATE-BASED EPITAXIAL HETEROSTRUCTURES

M. A. Kniazeva ✉, N. S. Zhukova, A. F. Vakulenko
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ kniazeva.maria225@yandex.ru

© Князева М. А., Жукова Н. С., Вакуленко А. Ф., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. In order to extend the serviceability of ferroelectric devices, this paper proposes an experimental approach (for the first time) to clearing up the mechanism of polarization fatigue development in a lead zirconate-titanate-based ferroelectric thin film. For this purpose, the influence of the recording pulse sequence configuration on the polarization of a selected object has been analyzed. The coercive field (CF) and remanent polarization of ferroelectric hysteresis loops were compared under two electric field application modes (they differed in the order of positive and negative pulses). The change in CF components was found to be insignificant during cyclic switching, whereas the difference between CF values reached 10% or more after pauses between the measurements. Experiments showed that the polarity of the final pulse of the switching signal set favorable conditions for stabilizing domains in the film whose dipole moment was aligned with the pulse polarity, and after resuming the measurements, a field of higher intensity was required to reverse the polarization.

Keywords: ferroelectric, epitaxial thin film, polarization fatigue, remanent polarization

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Project No. 24-22-00453 "The effect of epitaxial strain on the structure switching in the antiferroelectric heterostructures based on lead hafnate").

For citation: Kniazeva M. A., Zhukova N. S., Vakulenko A. F., The effect of electric field switching modes on polarization properties of the lead zirconate-titanate-based epitaxial heterostructures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 9–15. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19201

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Конденсаторы на основе тонких пленок сегнетоэлектриков (СЭ) являются объектами интереса многих исследователей ввиду обширности области их использования. В частности, на основе сегнетоэлектриков реализована концепция энергонезависимой памяти (*англ.* Ferromagnetic Random Access non-volatile Memory (FeRAM)), сочетающей в себе высокое быстродействие оперативной памяти и возможность сохранения данных при отключении питания [1, 2]. Запись информации в таких устройствах осуществляется путем приложения импульсов определенной полярности: при подаче импульса отрицательной полярности в ячейке памяти реализуется состояние, соответствующее логическому нулю («0»), а в случае приложения импульса положительной полярности – логической единице («1»). Ключевая особенность таких приборов – это их основа: они изготавливаются из сегнетоэлектрических материалов, которые обеспечивают быстрое переключение поляризации и возможность хранения информации без постоянного источника питания.

Однако одной из главных проблем, препятствующих коммерциализации устройств, созданных из сегнетоэлектриков, выступает поляризационная усталость, т. е. снижение величины остаточной поляризации при большом количестве циклов записи. Из-за такой усталости, состояния, соответствующие логическим «0» и «1», становятся менее различимыми.

Этот феномен находился в центре внимания многих исследователей; согласно их результатам, были предложены возможные причины поляризационной усталости. Согласно работе [3], основные механизмы развития указанного явления заключаются в ингибировании зародышей доменов и «замерзании» доменных стенок в кристалле СЭ. Помимо выявления механизмов, приводящих к усталости сегнетоэлектриков, множество работ посвящено анализу влияющих факторов: материалов конденсатора и электродов [4 – 6], рабочей температуры [7], размерных эффектов [8], параметров прикладываемого поля [9] и других. Тем не менее, на сегодняшний день многие вопросы как фундаментального, так и прикладного характера не имеют однозначного ответа.

Цель настоящего исследования – найти эффективный подход, позволяющий решить проблему продления работоспособности устройств на основе сегнетоэлектриков; подход, который бы дал ключ к механизму развития поляризационной усталости сегнетоэлектрика.

© Kniazeva M. A., Zhukova N. S., Vakulenko A. F., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Пробный подход к решению проблемы

Предлагаемый подход к выявлению механизма поляризационной усталости выбранного объекта исследования – тонкой СЭ-пленки на основе цирконата-титаната свинца – применяется впервые. Нами была поставлена задача экспериментально оценить влияние конфигурации последовательности записывающих импульсов на поляризационные свойства указанной пленки. Для этого на каждой итерации измерений к пленке прикладывалось напряжение в виде последовательности из двух пар треугольных импульсов с положительной и отрицательной полярностью. Нам было необходимо выяснить, как изменяются со временем коэрцитивное поле и остаточная поляризация при использовании двух различных режимов следования импульсов.

В первом случае сначала к пленке прикладывалась пара положительных импульсов, а затем пара отрицательных.

Во втором случае последовательность пар импульсов была противоположной.

Наблюдение осуществляли за двумя параметрами СЭ-петель гистерезиса, регистрируемыми на каждом цикле записи: модулями остаточной поляризации $|\mathbf{P}_r|$ и коэрцитивного поля $|\mathbf{E}_c|$.

Остаточная поляризация $\mathbf{P}_r$ – это векторная величина, сохраняющая свое значение в сегнетоэлектрическом конденсаторе после снятия электрического поля; ее изменение при многократном приложении поля характеризует поляризационную усталость материала.

Коэрцитивное поле $\mathbf{E}_c$ соответствует такому значению электрического поля, которое необходимо приложить к кристаллу для смены знака поляризации на противоположный.

По результатам измерений были построены зависимости положительной и отрицательной компонент $\mathbf{E}_c$ и $\mathbf{P}_r$ от количества циклов записи при различных режимах следования импульсов.

Анализ полученных зависимостей позволяет судить о влиянии режима следования импульсов на процессы, происходящие в СЭ-пленке.

Методическая часть

Приготовление образцов. В качестве объекта исследования была выбрана эпитаксиальная гетероструктура $PbZr_{0,3}Ti_{0,7}O_3/LaSr_{0,7}Mn_{0,3}O_3$ (PZT/LSMO), выращенная на подложке $SrTiO_3$ (STO) методом импульсного лазерного осаждения. Толщина слоев PZT и LSMO (последний выполняет роль нижнего электрода) составляла 60 и 50 нм, соответственно. Более подробно технология изготовления пленки описана в работе [10], где эта процедура изложена для аналогичного образца. На пленку наносились золотые электроды толщиной 60 нм (рис. 1, *а*). Чтобы улучшить адгезионные свойства контакта, между пленкой и электродами был нанесен промежуточный слой хрома толщиной 4,8 нм.

Детализация измерений. Амплитуда и длительность прикладываемых треугольных импульсов управляющего поля составляли ±8 В и 0,02 с, соответственно. Выбор треугольной формы импульса продиктован результатами работы [11], согласно которым использование таких записывающих импульсов наиболее благоприятно в случае медленных измерений.

Измерения проводились группами по 50 циклов с паузами между циклами 2 мин. На первом этапе исследования была поставлена задача изучить поляризационные свойства СЭ-пленки при небольшом количестве циклов переключения (порядка 10^3 циклов записи), чтобы сконцентрировать внимание на поведении пленки в отсутствие признаков усталости [3].

На каждом цикле записи регистрировалась петля СЭ-гистерезиса при использовании метода Сойера – Тауэра [12]. Суть метода заключается в измерении заряда эталонного конденсатора, включенного последовательно с образцом. Схема измерений была модифицирована в рамках метода двойной волны [13, 14] с целью устранения диэлектрического и электропроводного вкладов, которые могли бы привести к некорректной интерпретации результатов. На рис. 1, *b* представлен пример записи петли гистерезиса, получаемой при каждом цикле, а также подход к определению параметров векторов $\mathbf{P}_r$ и $\mathbf{E}_c$.

Положительная (E_c^+) и отрицательная (E_c^-) компоненты коэрцитивного поля $\mathbf{E}_c$ определяются как значение электрического поля, при котором достигается остаточная поляризация, равная половине значения соответствующих компонент $\mathbf{P}_r$ (P_r^+ и P_r^-).

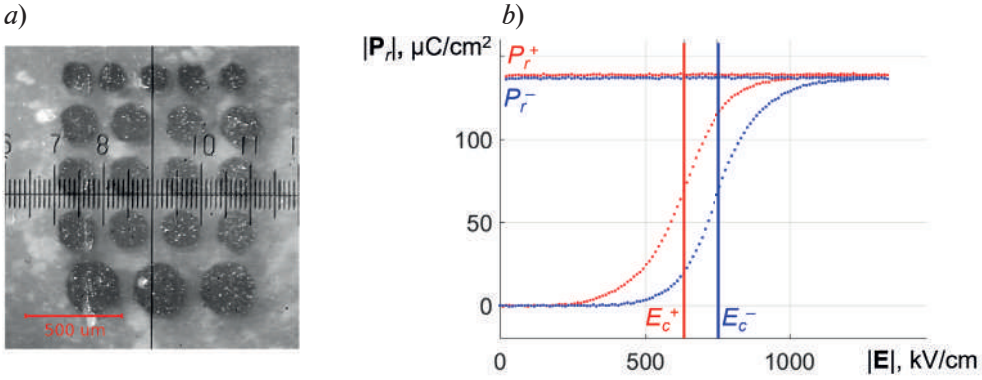


Рис. 1. Фотография электродов, нанесенных на пленку (*a*), и пример петли гистерезиса сегнетоэлектрика, измеряемой при каждом цикле записи (*b*);
P_r^+, P_r^- – компоненты остаточной поляризации; E_c^+, E_c^- – компоненты коэрцитивной силы

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 представлен график зависимости компонент коэрцитивного поля от количества циклов записи N в двух режимах следования импульсов. Вертикальной пунктирной линией на рисунке обозначен момент перехода от одного режима к другому. На зависимостях четко видны различия измерительных серий, которые соответствуют отдельным группам, включающим по 50 циклов записи. Для обоих режимов следования записывающих импульсов характерно несущественное изменение значений компонент E_c^+ и E_c^- в моменты циклических переключений, тогда как после пауз между измерениями наблюдаются скачки величины $|\mathbf{E}|$; при этом амплитуда скачков может достигать десяти и более процентов от исходных значений.

Анализ зависимости $|\mathbf{E}_c|(N)$ позволяет утверждать, что влияние режима следования импульсов на значения E_c выражается в корреляции между полярностью последнего приложенного импульса и амплитудой скачка величины E_c после паузы между измерениями.

Если новой группе измерений предшествовала серия переключений, которые завершались импульсами отрицательной полярности, то после паузы амплитуда E_c^+ заметно возрастала, в то время как амплитуда E_c^- снижалась, и наоборот.

Если принять во внимание физический смысл коэрцитивной силы E_c, то можно интерпретировать это наблюдение следующим образом: полярность завершающего записывающего импульса задает такие условия, при которых в кристалле сегнетоэлектрика стабилизируются домены с ориентацией дипольных моментов, которая совпадает с направлением импульса.

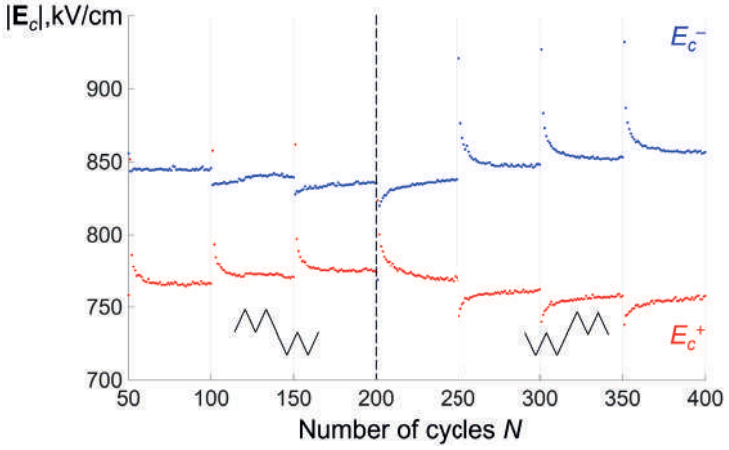


Рис. 2. График зависимости компонент коэрцитивной силы $\mathbf{E}_c$ от количества циклов записи в двух режимах следования импульсов
(вертикальным пунктиром показана граница между режимами)

На рис. 3 представлен график зависимости компонент остаточной поляризации $\mathbf{P}_r$ от количества циклов записи. Как и на рис. 2, на этом графике хорошо различимы экспериментальные точки, относящиеся к отдельным группам переключений, а паузы между переключениями сопровождаются преимущественно незначительными падениями величины $|\mathbf{P}_r|$. Однако в отличие от зависимости $|\mathbf{E}_c|(N)$, изменение режима следования записывающих импульсов с «два положительных – два отрицательных» на «два отрицательных – два положительных» качественно не влияет на характер зависимости $|\mathbf{P}_r|(N)$.

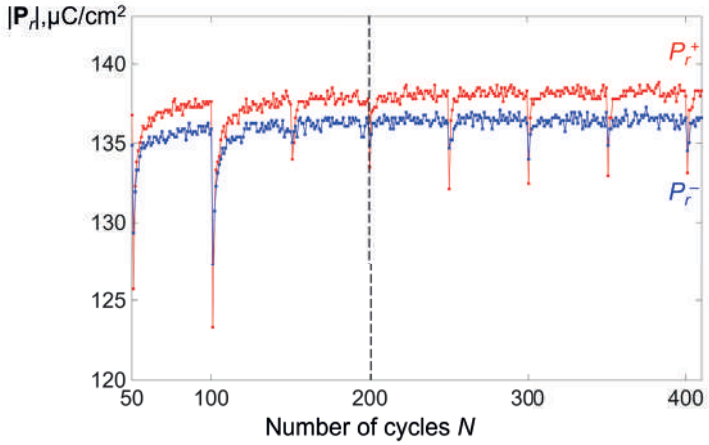


Рис. 3. График зависимости компонент остаточной поляризации $\mathbf{P}_r$ от количества циклов записи в двух режимах следования импульсов

Заключение

Идея данного исследования состояла в том, чтобы оценить, как конфигурация переключающих импульсов влияет на остаточную поляризацию и значение коэрцитивного поля в тонкой эпитаксиальной пленке на основе цирконата-титаната свинца. Анализ результатов показал, что при многократной записи полярность последнего импульса, приложенного к пленке, влияет на скачок $|\mathbf{E}_c|$ и тем самым задает благоприятные условия для стабилизации в ней доменов, дипольный момент которых сонаправлен с полярностью импульса. При этом не было обнаружено каких-либо корреляций между полярностью указанного импульса и знаком остаточной поляризации после возобновления измерений.

Подход, предложенный в настоящей статье, планируется доработать. В качестве одного из направлений дальнейшего развития этого подхода можно выделить постепенное приближение параметров записи к таковым, которые практически используются в устройствах хранения данных, а именно – следует увеличить количество циклов записи и снизить длительность импульсов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Scott J. F., Kammerdiner L., Parris M., Traynor S., Ottenbacher V., Shawabkeh A., Oliver W. F.** Switching kinetics of lead zirconate titanate submicron thin-film memories // Journal of Applied Physics. 1988. Vol. 64. No. 2. Pp. 787–792.

2. **Scott J. F.** Applications of modern ferroelectrics // Science. 2007. Vol. 315. No. 5814. Pp. 954–959.

3. **Tagantsev A. K., Stolichnov I., Colla E. L., Setter N.** Polarization fatigue in ferroelectric films: Basic experimental findings, phenomenological scenarios, and microscopic features // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 90. No. 3. Pp. 1387–1402.

4. **Auciello O., Gifford K. D., Lichtenwalner D. J., Dat R., Al-Shareef H. N., Bellur K. R., Kincon A. I.** A review of composition-structure-property relationships for PZT-based heterostructure capacitors // Integrated Ferroelectrics. 1995. Vol. 6. No. 1–4. Pp. 173–187.

5. **Nakamura T., Nakao Y., Kamisawa A., Takasu H.** Preparation of $Pb(Zr,Ti)O_3$ thin films on Ir and IrO_2 electrodes // Japanese Journal of Applied Physics. 1994. Vol. 33. No. 9S. Pp. 5207–5210.

6. **Bornand V., Trolier-McKinstry S., Takemura K., Randall C. A.** Orientation dependence of fatigue behavior in relaxor ferroelectric–$PbTiO_3$ thin films // Journal of Applied Physics. 2000. Vol. 87. No. 8. Pp. 3965–3972.

7. **Taylor D. J., Larsen P. K., Dormans G. J. M., de Vierman A. E. M.** Pulse switching characterization of organometallic chemical vapor deposited $PbZr_xTi_{1-x}O_3$ thin films for high-density memory applications // Integrated Ferroelectrics. 1995. Vol. 7. No. 1–4. Pp. 123–138.

8. **Lee J. J., Thio C. L., Desu S. B.** Electrode contacts on ferroelectric $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ and $SrBi_2Ta_2O_9$ thin films and their influence on fatigue properties // Journal of Applied Physics. 1995. Vol. 78. No. 8. Pp. 5073–5078.

9. **Jin L., Li F., Zhang S.** Decoding the fingerprint of ferroelectric loops: Comprehension of the material properties and structures // Journal of the American Ceramic Society. 2014. Vol. 97. No. 1. Pp. 1–27.

10. **Andreeva N. V., Vakulenko A. F., Petraru A., Soni R., Kohistedt H., Filimonov A. V., Rudskoy A. I., Vakhrushev S. B., Pertsev N. A.** Low-temperature dynamics of ferroelectric domains in $PbZr_{0.3}Ti_{0.7}O_3$ epitaxial thin films studied by piezoresponse force microscopy // Applied Physics Letters. 2015. Vol. 107. No. 15. P. 152904.

11. **Colla E. L., Taylor D. V., Tagantsev A. K., Setter N.** Discrimination between bulk and interface scenarios for the suppression of the switchable polarization (fatigue) in $Pb(Zr,Ti)O_3$ thin films capacitors with Pt electrodes // Applied Physics Letters. 1998. Vol. 72. No. 19. Pp. 2478–2480.

12. **Sawyer C. B., Tower C. H.** Rochelle salt as a dielectric // Physical Review. 1930. Vol. 35. No. 3. Pp. 269–273.

13. **Fukunaga M., Noda Y.** New technique for measuring ferroelectric and antiferroelectric hysteresis loops // Journal of the Physical Society of Japan. 2008. Vol. 77. No. 6. P. 064706.

14. **Fukunaga M., Noda Y.** Improvement of the double-wave method for ferroelectric hysteresis loops and its application to multiferroic $EuMn_2O_5$ // Journal of the Korean Physical Society. 2009. Vol. 55. No. 2 (Part 1). Pp. 888–892.

REFERENCES

1. **Scott J. F., Kammerdiner L., Parris M., et al.,** Switching kinetics of lead zirconate titanate submicron thin-film memories, J. Appl. Phys. 64 (2) (1988) 787–792.

2. **Scott J. F.,** Applications of modern ferroelectrics, Science. 315 (5814) (2007) 954–959.

3. **Tagantsev A. K., Stolichnov I., Colla E. L., Setter N.,** Polarization fatigue in ferroelectric films: Basic experimental findings, phenomenological scenarios, and microscopic features, J. Appl. Phys. 90 (3) (2001) 1387–1402.

4. **Auciello O., Gifford K. D., Lichtenwalner D. J., et al.,** A review of composition-structure-property relationships for PZT-based heterostructure capacitors, Integr. Ferroelectr. 6 (1–4) (1995) 173–187.

5. **Nakamura T., Nakao Y., Kamisawa A., Takasu H.,** Preparation of $Pb(Zr,Ti)O_3$ thin films on Ir and IrO_2 electrodes, Jpn. J. Appl. Phys. 33 (9S) (1994) 5207–5210.

6. **Bornand V., Trolier-McKinstry S., Takemura K., Randall C. A.,** Orientation dependence of fatigue behavior in relaxor ferroelectric–$PbTiO_3$ thin films, J. Appl. Phys. 87 (8) (2000) 3965–3972.

7. **Taylor D. J., Larsen P. K., Dormans G. J. M., de Vierman A. E. M.,** Pulse switching characterization of organometallic chemical vapor deposited $PbZr_xTi_{1-x}O_3$ thin films for high-density memory applications, Integr. Ferroelectr. 7 (1–4) (1995) 123–138.

8. **Lee J. J., Thio C. L., Desu S. B.,** Electrode contacts on ferroelectric $Pb(Zr_xTi_{1-x})O_3$ and $SrBi_2Ta_2O_9$ thin films and their influence on fatigue properties, J. Appl. Phys. 78 (8) (1995) 5073–5078.

9. **Jin L., Li F., Zhang S.,** Decoding the fingerprint of ferroelectric loops: Comprehension of the material properties and structures, J. Am. Ceram. Soc. 97 (1) (2014) 1–27.

10. **Andreeva N. V., Vakulenko A. F., Petraru A., et al.,** Low-temperature dynamics of ferroelectric domains in $PbZr_{0.3}Ti_{0.7}O_3$ epitaxial thin films studied by piezoresponse force microscopy, Appl. Phys. Lett. 107 (15) (2015) 152904.

11. **Colla E. L., Taylor D. V., Tagantsev A. K., Setter N.,** Discrimination between bulk and interface scenarios for the suppression of the switchable polarization (fatigue) in $Pb(Zr,Ti)O_3$ thin films capacitors with Pt electrodes, Appl. Phys. Lett. 72 (19) (1998) 2478–2480.

12. **Sawyer C. B., Tower C. H.,** Rochelle salt as a dielectric, Phys. Rev. 35 (3) (1930) 269–273.

13. **Fukunaga M., Noda Y.,** New technique for measuring ferroelectric and antiferroelectric hysteresis loops, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (6) (2008) 064706.

14. **Fukunaga M., Noda Y.,** Improvement of the double-wave method for ferroelectric hysteresis loops and its application to multiferroic $EuMn_2O_5$, J. Korean Phys. Soc. 55 (2(1)) (2009) 888–892.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КНЯЗЕВА Мария Александровна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kniazeva.maria225@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1120-2102

ЖУКОВА Наталья Сергеевна – *студентка Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zhukovaaa3781@gmail.com

ВАКУЛЕНКО Александр Феликсович – *кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sasha705@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5541-3409

THE AUTHORS

KNIAZEVA Maria A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kniazeva.maria225@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-1120-2102

ZHUKOVA Natalia S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zhukovaaa3781@gmail.com

VAKULENKO Aleksandr F.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sasha705@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5541-3409

Статья поступила в редакцию 04.12.2025. Одобрена после рецензирования 08.12.2025. Принята 08.12.2025.
Received 04.12.2025. Approved after reviewing 08.12.2025. Accepted 08.12.2025.

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья
УДК 532.517
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19202

ИССЛЕДОВАНИЕ ВИХРЕВЫХ ТЕЧЕНИЙ, СФОРМИРОВАННЫХ ИМПУЛЬСНОЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ ПЛАВУЧЕЙ СТРУЕЙ

К. К. Ермакова, М. А. Засимова, Н. Г. Иванов ✉

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

✉ ivanov_ng@spbstu.ru

Аннотация. Представлены результаты численного моделирования распространения вихревых облаков, сформированных импульсной турбулентной плавучей струей, для числа Рейнольдса Re = $1{,}5 \cdot 10^4$, параметра $P = 3{,}65$ и числа Грасгофа Gr = $3{,}9 \cdot 10^5$. Была принята модель трехмерного турбулентного течения, описываемого нестационарными уравнениями Рейнольдса. Угол α между направлениями подачи струи и гравитационной силы варьировался в диапазоне от 0° до 180°. Движение вихревого облака прослеживалось вплоть до момента, когда максимальное значение скорости в облаке становилось равным 3,5% от входной скорости. Для различных значений α получены степенные зависимости, описывающие распространение вихревого облака вдоль направления подачи струи и падение максимальной скорости и температуры в облаке.

Ключевые слова: смешанная конвекция, вихревое облако, импульсная струя, численное моделирование

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-19-00437).

Для цитирования: Ермакова К. К., Засимова М. А., Иванов Н. Г. Исследование вихревых течений, сформированных импульсной турбулентной плавучей струей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 16–26. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19202

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19202

STUDY OF VORTEX FLOWS GENERATED BY A PULSED TURBULENT BUOYANT JET

K. K. Ermakova, M. A. Zasimova, N. G. Ivanov ✉

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ ivanov_ng@spbstu.ru

Abstract. In the paper, the results of numerical modeling of the formation and propagation of vortex structures generated by a pulsed turbulent buoyant jet have been presented for the Reynolds number Re = 1.5×10^4, the parameter $P = 3.65$, and the Grashof number Gr = 3.9×10^5. A three-dimensional turbulent flow model based on the unsteady Reynolds equations was adopted. The angle α between the jet and gravity directions was varied from 0° to 180°. The vortex cloud movement was tracked up to the moment when the maximum velocity value in the cloud became equal to 3.5% of the inlet velocity. For various α values, the

© Ермакова К. К., Засимова М. А., Иванов Н. Г., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

power-law relationships describing the propagation of the vortex cloud and a decrease in the maximum velocity value and temperature within the cloud were obtained.

Keywords: mixed convection, turbulent puff, pulsed jet, numerical simulation

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-19-00437).

For citation: Ermakova K. K., Zasimova M. A., Ivanov N. G., Study of vortex flows generated by a pulsed turbulent buoyant jet, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 16–26. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19202

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В природе и технике широко распространены турбулентные струйные течения, возникающие при истечении жидкости или газа через отверстие за счет наложенного перепада давления. Динамика турбулентных струй на протяжении многих лет изучалась экспериментально и теоретически [1, 2]. Результаты исследований турбулентных струй имеют широкий спектр приложений; в частности, их можно использовать при проектировании систем вентиляции помещений, где приточные струи играют определяющую роль в формировании воздухораспределения, а также распределения теплоты, влажности и концентрации примесей [3]. В прикладных задачах вентиляции помещений влияние на воздухораспределение оказывают источники тепловыделения (в ряде случаев оно сопоставимо с эффектом подачи приточного воздуха); под воздействием этих источников развивается свободная конвекция [4].

При организации воздухообмена в помещениях приточный воздух обычно подается с постоянным расходом. Анализу закономерностей развития турбулентных струй при стационарных входных условиях посвящен основной массив исследований вентиляционных течений. Ввиду повышения требований к чистоте воздушной среды и параметрам теплового комфорта, обычно предлагаются новые технические решения; одно из них состоит в организации подачи приточного воздуха с переменным расходом, изменяющимся плавно или ступенчато. Предполагается, что при определенных условиях нестационарная подача приточного воздуха может повысить эффективность вентиляции [5]. Эффекты нестационарной подачи приточных струй подробно обсуждаются в обзорной работе [6], где приведено краткое описание проведенных исследований, представлены доступные технические решения и сделан вывод о необходимости всестороннего изучения фундаментальных аспектов нестационарной вентиляции.

В настоящей работе рассматривается модельная задача об однократном (импульсном) выдуве среды в затопленное пространство. Вихревое кольцо [7 – 9] относится к наиболее известным течениям; оно возникает в результате импульсного выдува, однако помимо вихревых колец могут формироваться вихревые облака и нестационарные струи, что зависит от продолжительности истечения и скорости истекающей среды. Согласно сведениям в статье [8], вихревые структуры, формируемые при импульсной подаче струи, характеризуются безразмерным параметром

$$P = (L_0/d)^{1/3},$$

где d – диаметр отверстия, через которое подается струя; L_0 – протяженность «жидкого поршня» при выдуве ($L_0 = V_0 t_0$); при этом t_0, V_0 – время выдува струи и скорость подачи среды через это отверстие.

Параметр P можно трактовать как линейный масштаб объема, добавленного импульсной струей во внешнюю среду, отнесенный к диаметру отверстия. Вихревые облака образуются при $1{,}6 < P < 8$. При меньших значениях P наблюдается формирование вихревых колец, при бóльших – нестационарных струй.

Экспериментальное моделирование турбулентных вихревых облаков [10, 11], которое базируется на методике многократного повторения импульсного выдува среды и

© Ermakova K. K., Zasimova M. A., Ivanov N. G., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

осреднения контролируемых параметров облака по ансамблю событий, позволило установить ряд важных, теоретически предсказанных [7] автомодельных свойств распространения турбулентных облаков во времени.

Численному исследованию формирования и движения турбулентных вихревых облаков в изотермических условиях посвящена работа [12], в которой задача решена в осесимметричной постановке. В этой работе, в частности, было показано, что течение при импульсной подаче струи можно разделить на две фазы: начальную, включающую истечение струи и образование вихревого облака, и последующую – автомодельности, на которой профили скорости в уже сформировавшемся вихревом облаке в последовательные моменты времени подобны друг другу. В результате расчетов были определены длительности этих фаз. Позднее, в статье [13], в осесимметричной постановке численно моделировалось распространение импульсной газокапельной струи; при этом в диапазоне определяющих параметров, рассмотренном в статье, было получено соответствие структуре течения однофазного потока.

В экспериментальных исследованиях, представленных в статье [10], детально изучено движение вихревых структур на удалении от источника распространения струи (фаза автомодельности). Было показано, что в изотермических условиях изменение положения вихревого облака во времени осуществляется по степенной зависимости: At^B, где $B = 0{,}25$. Изменение во времени скорости перемещения вихревого облака также происходит по степенной зависимости, при этом показатель степени $B = -0{,}75$. Данные параметрических расчетов в работе [12] также аппроксимировались указанными степенными зависимостями.

В отличие от статьи [12], в настоящей работе представлены данные численного моделирования неизотермического течения, возникающего при импульсной подаче в затопленное пространство одиночной плавучей струи. Параметрически исследовано влияние направления подачи струи относительно гравитационной силы на структуру формируемого вихревого течения.

Постановка задачи и метод решения

Аналогично постановке задачи в нашей статье [12], в данном случае рассматривается течение несжимаемой среды (воздуха) в полупространстве, ограниченном непроницаемой твердой стенкой (рис. 1), однако задача ставится как трехмерная.

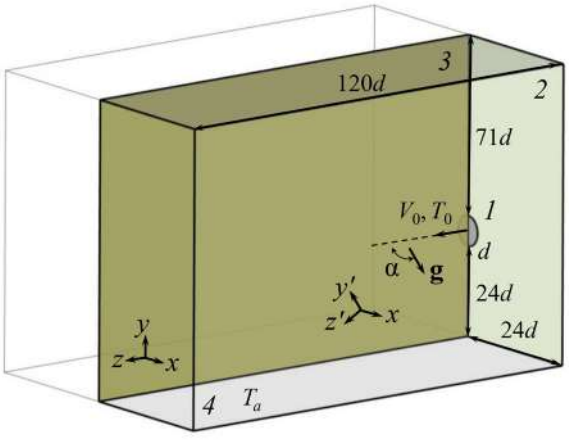


Рис. 1. Схема расчетной области: *1* – входное отверстие, *2* – стенка, *3* – плоскость симметрии, *4* – проницаемая граница;
d – диаметр входного отверстия воздушной струи; α – угол подачи струи относительно силы тяжести; значения параметров V_0, T_0, T_a и α даны в тексте; **g** – ускорение свободного падения

На стенке расположено круглое отверстие *1* диаметром d (при постановке расчетов в размерном виде $d = 0{,}05$ м), из которого по нормали к твердой поверхности *2* вытекает импульсная струя воздуха. Начало системы координат расположено в центре отверстия, ось z направлена в пространство по нормали к ограничивающей стенке. Предполагается симметрия течения относительно среднего сечения приточного отверстия, так что на границе *3* ($x = 0$) задано условие симметрии. Остальные границы расчетной области *4* являются открытыми (проницаемыми). Размеры расчетной области составляют $24d \times 101d \times 120d$.

В начальный момент времени $t = 0$ среда покоится, ее температура T_a задана постоянной. В промежуток времени $0 \le t \le t_0$ из отверстия вытекает среда с постоянной скоростью V_0 и температурой T_0. При постановке расчетов в размерном виде приняты следующие значения параметров:

$V_0 = 4{,}28$ м/с, $t_0 = 0{,}57$ с, $\Delta T = T_0 - T_a = 20$ K, $T_a = 293$ K.

Эффекты плавучести учитываются в приближении Буссинеска: значение величины $\beta\Delta T$ (β – коэффициент теплового расширения) составляет менее 0,07. Угол α между направлениями подачи струи и гравитационной силы (см. рис. 1) варьируется в диапазоне от 0 до 180° (при $\alpha = 0°$ струя подается по направлению гравитационной силы). Для последующей обработки данных введены дополнительные координатные оси (x', y', z') таким образом, что $x' = x$, а ось y' направлена против гравитационной силы.

Задача определяется тремя безразмерными параметрами:

число Рейнольдса $\mathrm{Re} = V_0 d/\nu = 1{,}5\cdot 10^4$,

параметр $P = (V_0 t_0/d)^{1/3} = 3{,}65$,

число Грасгофа $\mathrm{Gr} = g\beta d^3 \Delta T/\nu^2 = 3{,}9\cdot 10^5$.

Отметим, что эти параметры определены по значениям физических величин, соответствующим фазе истечения импульсной струи; значение числа Ричардсона $\mathrm{Ri} = \mathrm{Gr}/\mathrm{Re}^2$ при этом много меньше единицы, что свидетельствует о преобладании на данном этапе вынужденной конвекции. В последующих фазах течения, по мере падения характерной скорости вихревого облака, значения Ri близки к единице.

В расчетах использовалась квазиструктурированная расчетная сетка, размерность которой составила 540 тыс. ячеек. При пространственной дискретизации использовалась топология *O*-сетки; обеспечивалось сгущение к входному отверстию вдоль радиального и осевого направлений; во входном отверстии вдоль окружного направления размещалось 44 ячейки, в радиальном – 22. Была исследована чувствительность решения к размерности расчетной сетки: при увеличении числа ячеек сетки в 2 раза по каждому направлению, характеристики вихревых структур слабо изменяются, что позволяет сделать вывод о слабой сеточной зависимости решения, полученного на базовой сетке.

Задача решалась численным методом с использованием гидродинамического пакета ANSYS Fluent; при проведении параметрических расчетов привлекались ресурсы суперкомпьютерного центра «Политехнический» (scc.spbstu.ru). Моделирование нестационарного турбулентного течения и теплопереноса выполнено методом решения нестационарных уравнений Навье – Стокса, осредненных по Рейнольдсу (*англ.* Unsteady Reynolds-Averaged Navier–Stokes (URANS)). Для замыкания системы уравнений Рейнольдса использовалась стандартная k–ε модель турбулентности. На входе в расчетную область задавались постоянные значения турбулентной вязкости ($\nu_{t_0}/\nu = 10$) и интенсивности турбулентности ($I_0 = 5\%$), которые в коде пересчитывались во входные значения k и ε. Эти условия соответствуют умеренному уровню турбулентности вблизи входного отверстия. Турбулентное число Прандтля задано равным 0,9. Использовались схемы дискретизации второго порядка точности по пространству и времени. Шаг по времени составил $0{,}086 V_0/d$. Продолжительность расчетов составила около 3 тыс. конвективных времен $t' = tV_0/d$.

Описание движения и параметров вихревого облака

Особенности движения вихревой структуры, сформированной импульсной струей, рассматриваются на примере варианта со значением угла подачи струи относительно силы тяжести $\alpha = 120°$. На начальной фазе движения и формирования вихревого облака (при значениях t', меньших 80) структура течения аналогична описанной в статье [10], благодаря преобладающей роли вынужденной конвекции. Вклад естественной конвекции проявляется при значениях t', больших 80. Соответственно, в настоящей работе анализ структуры течения проводится для основной фазы движения вихревого облака, после завершения его формирования.

На рис. 2 показаны поля модуля скорости, модуля завихренности и температуры в три момента времени от начала подачи импульсной струи: $t' = 86$, 600 и 2910. Значения скорости отнесены к значению максимального модуля скорости в данный момент времени $|\mathbf{V}_c|$. За центр вихревого облака принята точка $C\ (0, y_c, z_c)$, в которой модуль скорости в данный момент времени максимален. Значения модуля завихренности отнесены к максимальной завихренности в данный момент времени $\Omega_{\max}$. Величина температуры $\theta = (T - T_a)/(T_{\max} - T_a)$ нормирована на перепад между максимальной температурой в вихревом облаке $T_{\max}$ (в данный момент времени) и температурой окружающей среды.

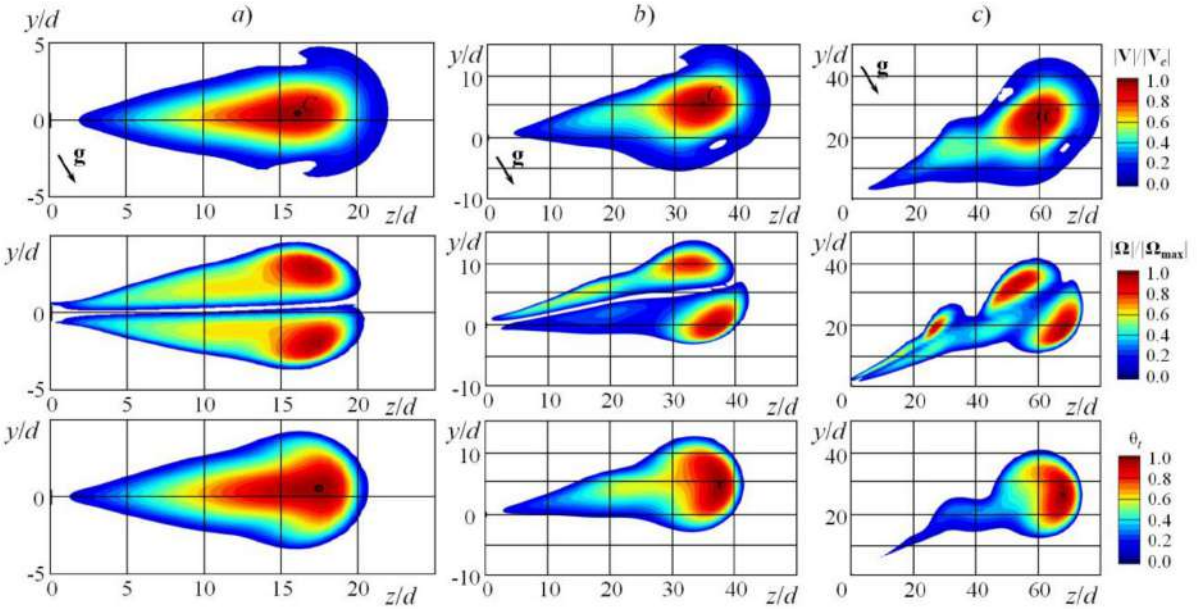


Рис. 2. Рассчитанные поля модуля скорости (верхний ряд), завихренности (средний ряд) и температуры (нижний ряд) в различные моменты времени t': 86 (*a*), 600 (*b*) и 2910 (*c*). Вариант α = 120°

В момент времени $t' = 86$ вихревая структура, которую характеризует поле завихренности, вытянута в направлении подачи струи, но ее форма постепенно приближается к сферической (см. рис. 2, *a*); повышенные значения Ω локализованы в области размерами примерно $8d \times 8d \times 10d$. Центр вихревого облака лишь незначительно смещен относительно оси подачи импульсной струи (его положение удалено от оси менее, чем на d). К этому моменту времени максимальная скорость снижается примерно на 75% относительно скорости подачи струи V_0, а перепад $(T_{\max} - T_a)$ – на 78%, по сравнению с перепадом $(T_0 - T_a)$.

При $t' = 600$ характерные размеры вихревого облака становятся равными $15d \times 15d \times 15d$, при этом оно заметно смещено относительно первоначального направления: положение максимума скорости находится на расстоянии $5d$ от оси импульсной струи (см. рис. 2, *b*). Поля завихренности несимметричны относительно центра вихревой структуры: в нижней части облака значения больше, чем в верхней. Интенсивность вихревого облака к этому моменту времени заметно ослабевает: максимум модуля скорости $|\mathbf{V}_c|$ составляет около 5% от скорости V_0, а перепад температуры – менее 3% от начального.

К моменту времени $t' = 2910$ размеры облака увеличиваются еще примерно в 2 раза по каждому направлению и составляют $30d \times 30d \times 30d$ (см. рис. 2, *c*). Интенсивность движения продолжает падать: продольная и поперечная компоненты скорости сопоставимы и составляют не более 2% от входной скорости. На представленных полях виден тепловой шлейф вихревого облака, движущийся еще медленнее и, по сути, отделенный от облака.

Необходимо отметить, что численное моделирование дальнейшей эволюции облака, вплоть до его полной остановки, некорректно осуществлять на основе URANS-подхода; для расчетов затухания турбулентного движения необходимо привлекать вихреразрешающие подходы, что выходит за рамки настоящей работы.

Изменение положения вихревого облака во времени и пространстве проиллюстрировано на рис. 3. Наблюдение за положением центра облака (сплошная линия) начинается с момента, когда он отстоит примерно на три калибра ($3d$) от приточного отверстия ($t' \approx 50$). По окончании формирования вихревого облака, когда завершается быстрое удаление точки z_c от источника (при $t' > 100$), кривая траектории центра облака (см. рис. 3, *a*, зависимость $y_c(z_c)$) начинает отклоняться от направления подачи струи; при этом функция $y_c(z_c)$ близка к кубической вплоть до значений t' порядка 10^3.

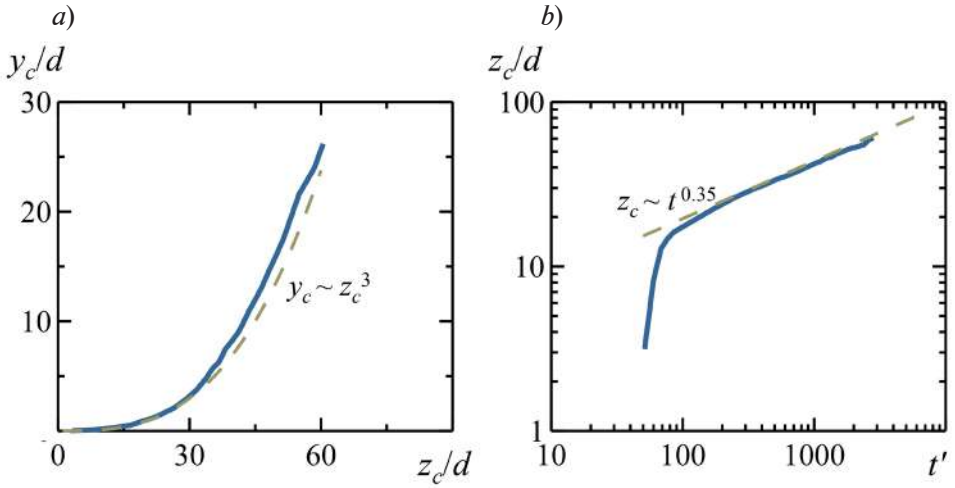


Рис. 3. Изменение положения максимума скорости вихревого облака в пространстве (*a*) и во времени (*b*). Пунктирами показаны графики аппроксимирующих функций

На интервале $100 < t' < 1000$ зависимость $z_c(t)$ принимает степенной характер с показателем 0,35; отметим, что для распространения изотермического вихревого облака (согласно результатам статьи [10]) показатель степени на автомодельном участке должен быть равным 0,25. При бóльших значениях t' ($t' > 1000$), т.е. на этапе медленного затухания облака (низкая скорость дрейфа), наблюдается некоторое отклонение от указанных степенных зависимостей. За расчетный промежуток времени центр вихревого облака сместился весьма существенно: крайнее положение (поля, показанные на рис. 2, *c*) соответствует точке (0, 27*d*, 60*d*).

Изменение скорости вихревого облака показано на рис. 4, где приведены графики эволюции максимальных значений модуля скорости $|\mathbf{V}_c|(t)$, а также ее продольной ($V_{c,z}(t)$) и поперечной ($V_{c,y}(t)$) компонент. Штриховые линии на рис. 4, *a* иллюстрируют изменение $|\mathbf{V}_c|(t)$ по степенным зависимостям с показателями −0,75 и −0,40. В отличие от изотермического случая [10], где поведение $V_c(t)$ на автомодельном участке описывается степенной зависимостью с фиксированным показателем −0,75, для ситуации с плавучей импульсной струей такое поведение проявляется только на участке $100 < t' < 600$, когда продольная скорость много больше поперечной (см. рис. 4, *b*). При бóльших t' значения $V_{c,z}(t)$ и $V_{c,y}(t)$ сближаются, а кривая изменения во времени модуля максимальной скорости $|\mathbf{V}_c|(t)$ отклоняется от прежней закономерности и следует новой, которая описывается степенной зависимостью с показателем степени, равным –0,4.

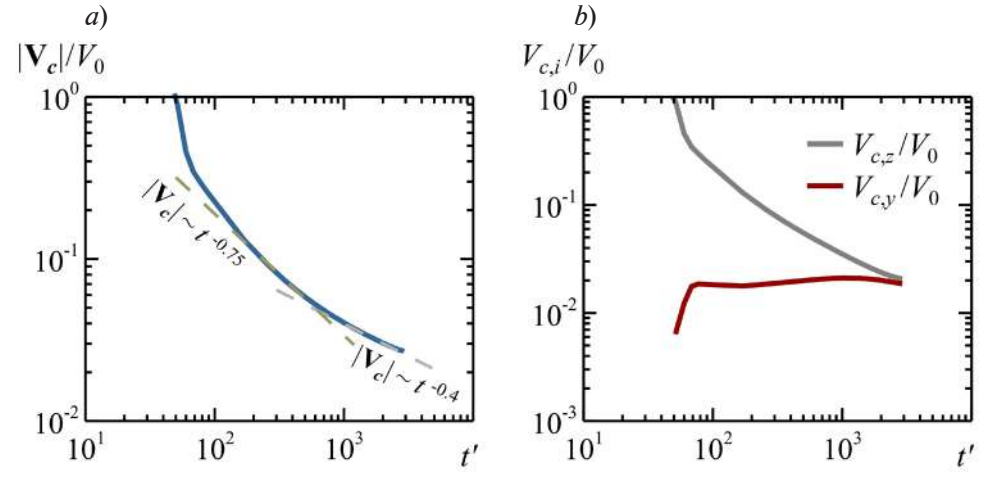


Рис. 4. Расчетная временная динамика модуля максимальной скорости вихревого облака (*a*), а также ее продольной и поперечной компонент (*b*)

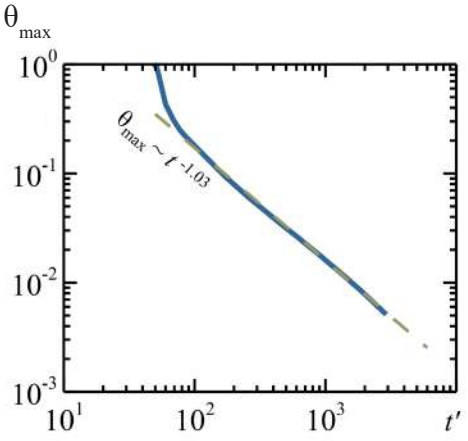


Рис. 5. Изменение во времени максимальной температуры в вихревом облаке.
Аппроксимация участка зависимости степенной функцией показана пунктирной прямой

Изменение во времени характерной температуры в вихревом облаке приведено на рис. 5, где представлены данные для нормированной максимальной температуры

$$\theta_{\max} = (T_{\max} - T_a)/(T_0 - T_a),$$

т.е. перепада (нормирован на исходный температурный перепад $T_0 - T_a$) между максимальной в данный момент температурой в облаке и температурой окружающей среды T_a.

Для рассмотренного интервала времени зависимость $\theta_{\max}(t)$ – степенная, с показателем –1,03. При значении $t' \approx 1400$ максимальный перепад температуры $T_{\max} - T_a$ составляет 1% от исходной величины $T_0 - T_a$.

Максимальное значение модуля скорости в облаке при этом уменьшилось менее существенно и составляет 3,5% от скорости подачи струи. Стоит повторить, что изучение дальнейшего движения облака с преобладающей ролью естественной конвекции выходит за рамки настоящей работы.

Зависимость движения вихревого облака от направления подачи импульсной струи

В этом разделе представлены результаты параметрических расчетов, выполненных для 7 вариантов, которые различаются значениями угла α между направлениями подачи струи и гравитационной силы (угол α варьировался в интервале от 0 до 180° с шагом 30°). Для каждого из вариантов рассмотрены временные выборки $t' < t'_{3,5\%}$, где $t'_{3,5\%}$ – момент времени, когда максимальное значение модуля скорости $|\mathbf{V}_c|$ становится равным 3,5% от входной скорости. В зависимости от варианта, значения $t'_{3,5\%}$ составили от 340 (α = 0°) до $2 \cdot 10^3$ (α = 180°). Для всех 7 вариантов на рис. 6, *a* показаны траектории движения вихревых облаков (кривые, иллюстрирующие изменение положения максимального значения скорости) в координатах (x', y', z'), а на рис. 6, *b* – распределения модуля скорости в последний момент времени представленной выборки $t' = t'_{3,5\%}$. Видно, что при α = 0° и 180° вихревое облако движется вдоль оси подачи импульсной струи; для остальных значений угла α вихревое облако под действием сил плавучести отклоняется от этого направления. С увеличением угла α длина траектории, пройденной облаком до выбранного уровня затухания, постепенно растет, соответственно возрастает и его размер (см. рис. 6, *b*).

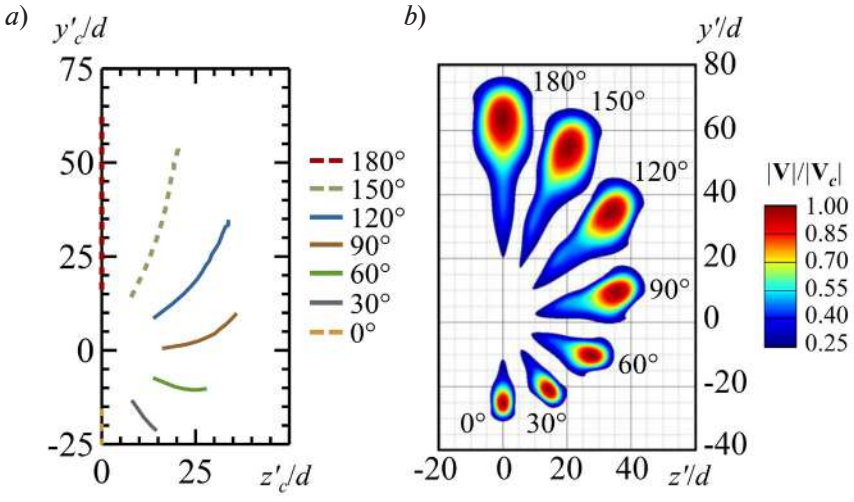


Рис. 6. Результаты параметрических расчетов для различных значений угла α:
a – траектории движения центра облака, *b* – распределения модуля скорости в момент времени $t' = t'_{3,5\%}$ (см. пояснения в тексте)

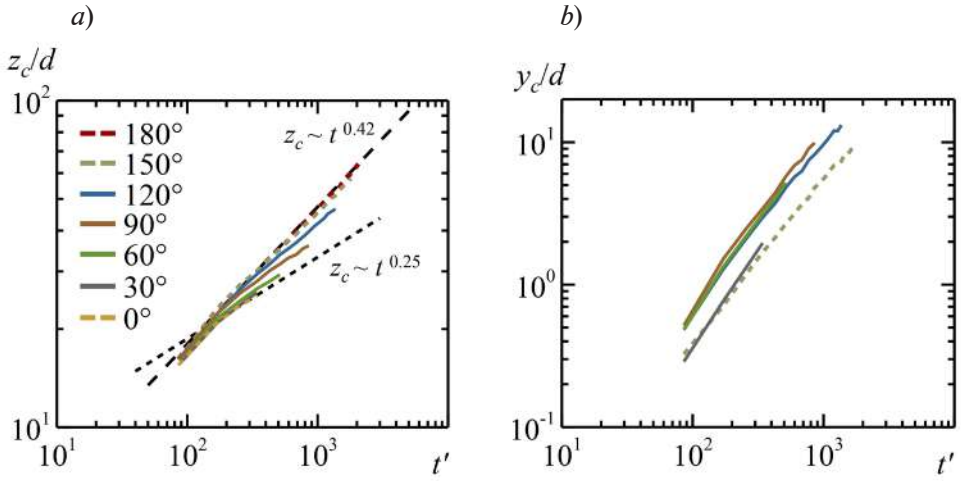


Рис. 7. Изменение положения центра вихревого облака во времени для вариантов с различными значениями α (угол подачи струи относительно силы тяжести)

На рис. 7 приведены графики изменения положения центра вихревого облака во времени для семи рассчитанных вариантов (графики построены в осях, связанных с направлением подачи струи). На семейство кривых $z_c(t)$, иллюстрирующее распространение облака вдоль направления подачи струи, нанесены две штриховые линии, аппроксимирующие данные расчетов предельными степенными зависимостями (см. рис. 7, *a*). При α = 0°, когда струя подается в направлении силы тяжести, расчетные данные аппроксимируются степенной зависимостью с показателем 0,25, что соответствует изотермическому случаю [12]. В другом предельном случае, когда импульсная струя подается вверх и гравитационная сила способствует его ускорению (при α = 180°), расчетные данные аппроксимируются степенной зависимостью с показателем 0,42. Кривые $y_c(t)$ на рис. 7, *b*, иллюстрирующие смещение вихревого облака от направления подачи струи, расслаиваются: самое большое смещение наблюдается при подаче струи перпендикулярно направлению гравитационной силы (при α = 90°). Несколько ниже этой кривой лежат графики, описывающие постепенное смещение центра вихревого облака при α = 60° и 120°. Более заметно различие кривых, построенных по данным для α = 30° и 150°: в этих случаях вихревое облако смещается от оси медленнее.

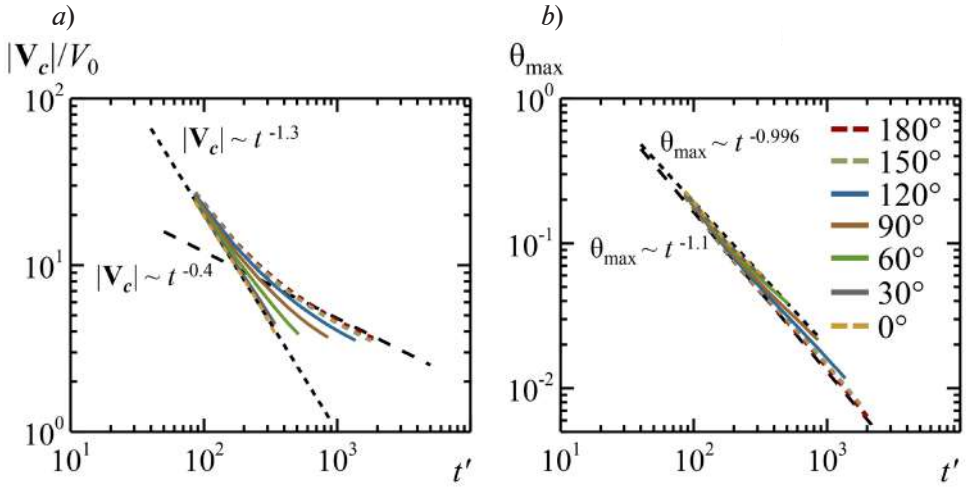


Рис. 8. Изменение во времени максимальных нормированных значений скорости (*a*) и температуры (*b*) для вариантов с различными значениями угла α.
Линии, аппроксимирующие данные расчетов предельными степенными зависимостями (при α = 0° и α = 180°), показаны пунктирными линиями

Кривые, отражающие изменение во времени максимальной скорости и нормированной максимальной температуры вихревого облака, показаны на рис. 8. Как и на рис. 7, *а*, на семейства кривых нанесены штриховые линии, аппроксимирующие данные расчетов предельными степенными зависимостями (при $\alpha = 0°$ и $\alpha = 180°$). Для варианта $\alpha = 0°$ замедление движения облака происходит быстрее всего, что неудивительно: сила плавучести оказывает заметный тормозящий эффект. Изменение $V_c(t)$ при этом аппроксимируется степенной зависимостью с показателем степени –1,3. Напротив, при $\alpha = 180°$ сила плавучести ослабляет торможение облака и скорость $V_c(t)$ снижается со временем по степенной зависимости с показателем –0,4. Различия в особенностях падения характерной температуры облака между вариантами проявляются не так существенно: все кривые лежат близко друг к другу, и показатели степенных зависимостей меняются в диапазоне от –0,996 при $\alpha = 0°$ до –1,100 при $\alpha = 180°$.

Заключение

В результате проведенного исследования представлены результаты трехмерного URANS-моделирования неизотермического течения, сформированного при импульсной подаче в затопленное пространство одиночной плавучей струи. Показано, что на начальной фазе движения и формирования вихревого облака, длительность которой составляет менее 100 безразмерных единиц времени, преобладает роль вынужденной конвекции; при бóльших значениях времени вклад естественной конвекции оказывается существенным.

Анализ структуры течения проведен для основной фазы движения вихревого облака вплоть до момента времени, когда максимальное значение модуля скорости $|\mathbf{V}_c|$ становится равным 3,5% от его входного значения.

Результаты параметрических исследований, в которых угол α между направлениями подачи струи и гравитационной силы варьировался в диапазоне от 0° до 180°, показали, что направление подачи плавучей импульсной струи существенно влияет на траекторию распространения вихревого облака и скорость его затухания. Показано, что зависимость, описывающая распространение вихревого облака вдоль направления подачи струи, следует степенному закону; при этом показатель степени лежит в пределах от 0,25 (это соответствует изотермическому случаю), до 0,42 и определяется указанным направлением.

Падение максимальной скорости в вихревом облаке со временем также аппроксимируется степенными зависимостями с показателями от –1,3 до –0,4.

Различия в особенностях падения характерной температуры облака для разных значений α (угол подачи струи относительно силы тяжести) проявляются не так существенно: показатель степени для всех случаев близок к значению –1.

Дальнейшие исследования будут направлены на изучение особенностей движения вихревых структур при различных значениях параметра P, в том числе с привлечением вихреразрешающих подходов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Абрамович Г. Н., Гиршович Т. А., Крашенинников С. Ю. и др.** Теория турбулентных струй. Под ред. Г. Н. Абрамовича. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1984. 716 с.

2. **List E. J.** Turbulent jets and plumes // Annual Review of Fluid Mechanics. 1982. Vol. 14. January. Pp. 189–212.

3. **Гримитлин М. И.** Распределение воздуха в помещениях. Изд. 3-е, доп. и испр. СПб.: АВОК Северо-Запад, 2004. 320 с.

4. **Davies Wykes M. S., Chahour E., Linden P. F.** The effect of an indoor-outdoor temperature difference on transient cross-ventilation // Building and Environment. 2020. Vol. 168. 15 January. P. 10644.

5. **Fan M., Fu Z., Wang J., Wang Z., Suo H., Kong X., Li H.** A review of different ventilation modes on thermal comfort, air quality and virus spread control // Building and Environment. 2022. Vol. 212. 15 March. P. 108831.

6. **Mesenhöller E., Vennemann P., Hussong J.** Unsteady room ventilation – A review // Building and Environment. 2020. Vol. 169. February. P. 106595.

7. **Glezer A., Coles D.** An experimental study of a turbulent vortex ring // Journal of Fluid Mechanics. 1990. Vol. 211. February. Pp. 243–283.

8. **Shariff K., Leonard A.** Vortex rings // Annual Review of Fluid Mechanics. 1992. Vol. 24. January. Pp. 235–279.

9. **Ахметов Д. Г.** Вихревые кольца. Новосибирск: ГЕО, 2007. 151 с.

10. **Sangras R., Kwon O. C., Faeth G. M.** Self-preserving properties of unsteady round nonbuoyant turbulent starting jets and puffs in still fluids // ASME. Journal of Heat Transfer. 2002. Vol. 124. No. 3. Pp. 460–469.

11. **Ghaem-Maghami E., Johari H.** Concentration field measurements within isolated turbulent puffs // ASME. Journal of Fluids Engineering. 2007. Vol. 129. No. 2. Pp. 194–199.

12. **Засимова М. А., Рис В. В., Иванов Н. Г.** Численное моделирование формирования и движения турбулентных вихревых облаков // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2023. № 5. С. 57–69.

13. **Пахомов М. А., Терехов В. И.** Особенности распространения газокапельного турбулентного импульсного вихревого облака // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2024. № 4. С. 55–68.

REFERENCES

1. **Abramovich G. N., Girshovich T. A., Krasheninnikov S. Iu., et al.,** The theory of turbulent jets, Ed. by G. N. Abramovich, 2-nd ed., Nauka Publishing, Moscow, 1984 (in Russian).

2. **List E. J.,** Turbulent jets and plumes, Ann. Rev. Fluid Mech. 14 (Jan) (1982) 189–212.

3. **Grimitlin M. I.,** Raspredeleniye vozdukha v pomeshcheniyakh [Indoor air distribution], Published by AVOK Severo-Zapad [Ventilation, Heating, air Conditioning Association (VHCA) of engineers in the North-West], Saint-Petersburg, 2004 (in Russian).

4. **Davies Wykes M. S., Chahour E., Linden P. F.,** The effect of an indoor-outdoor temperature difference on transient cross-ventilation, Build. Environ. 168 (15 Jan) (2020) 10644.

5. **Fan M., Fu Z., Wang J., et al.,** A review of different ventilation modes on thermal comfort, air quality and virus spread control, Build. Environ. 212 (15 March) (2022) 108831.

6. **Mesenhöller E., Vennemann P., Hussong J.,** Unsteady room ventilation – A review, Build. Environ. 169 (Febr) (2020) 106595.

7. **Glezer A., Coles D.,** An experimental study of a turbulent vortex ring, J. Fluid Mech. 211 (Febr) (1990) 243–283.

8. **Shariff K., Leonard A.,** Vortex rings, Ann. Rev. Fluid Mech. 24 (Jan) (1992) 235–279.

9. **Akhmetov D. G.,** Vortex rings, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009.

10. **Sangras R., Kwon O. C., Faeth G. M.,** Self-preserving properties of unsteady round nonbuoyant turbulent starting jets and puffs in still fluids, ASME. J. Heat Transfer. 124 (3) (2002) 460–469.

11. **Ghaem-Maghami E., Johari H.,** Concentration field measurements within isolated turbulent puffs, ASME. J. Fluids Eng. 129 (2) (2007) 194–199.

12. **Zasimova M. A., Ris V. V., Ivanov N. G.,** Numerical simulation of the formation and motion of turbulent vortex clouds (puffs), Fluid Dyn. 58 (5) (2023) 882–893.

13. **Pakhomov M. A., Terekhov V. P.,** Distinctive features of propagation of a turbulent pulsed gas-droplet eddy cloud. Fluid Dyn. 59 (4) (2024) 687–699.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЕРМАКОВА Карина Константиновна – *студентка Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

karinak77777@mail.ru

ЗАСИМОВА Марина Александровна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zasimova_ma@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

ИВАНОВ Николай Георгиевич – *кандидат физико-математических наук, заведующий научно-исследовательской лабораторией гидродинамики, директор Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

THE AUTHORS

ERMAKOVA Karina K.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
karinak77777@mail.ru

ZASIMOVA Marina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zasimova_ma@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

IVANOV Nikolay G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

Статья поступила в редакцию 27.11.2025. Одобрена после рецензирования 08.12.2025. Принята 08.12.2025.
Received 27.11.2025. Approved after reviewing 08.12.2025. Accepted 08.12.2025.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 532.517
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19203

О НЕУСТОЙЧИВОСТИ ВСТРЕЧНЫХ ПРИСТЕННЫХ СТРУЙ В ВЕНТИЛИРУЕМОЙ ПОЛОСТИ

В. Р. Адиатуллин, С. А. Галаев, В. В. Рис,
М. А. Засимова, Н. Г. Иванов ✉
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ ivanov_ng@spbstu.ru

Аннотация. Представлены результаты численного моделирования течения жидкости в прямоугольном помещении при ее встречной подаче через два щелевых отверстия. Число Рейнольдса Re, построенное по высоте приточного отверстия, варьировалось в диапазоне от 20 до 140. Для рассмотренного соотношения длин сторон помещения, при $Re \geq 50$ развиваются интенсивные автоколебания вследствие неустойчивости, которая проявляется при взаимодействии приточных струй. Уже при значении $Re = 100$ течение приобретает хаотический характер со сплошным спектром частот. Значения числа Струхаля, соответствующие основной частоте колебаний, слабо зависят от Re и составляют примерно $3 \cdot 10^{-3}$.

Ключевые слова: численное моделирование, плоская струя, вентилируемая полость, автоколебания

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 24-19-00437.

Для цитирования: Адиатуллин В. Р., Галаев С. А., Рис В. В., Засимова М. А., Иванов Н. Г. О неустойчивости встречных пристенных струй в вентилируемой полости // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 27–38. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19203

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19203

ON THE INSTABILITY OF COUNTERFLOWING WALL JETS IN A VENTILATED CAVITY

V. R. Adiatullin, S. A. Galaev, V. V. Ris,
M. A. Zasimova, N. G. Ivanov ✉
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ ivanov_ng@spbstu.ru

Abstract. The paper presents the results of numerical simulation of fluid flow in a rectangular room when fluid is supplied from two opposing slotted holes. The Reynolds number (Re) based on the height of the supply opening was varied from 20 to 140. For the given ratio of the lengths of the sides of the room, intensive self-oscillations developed due to instability arising when the supply jets interacted at $Re \geq 50$. Already at a value of $Re = 100$ the flow became chaotic with a continuous frequency spectrum. The Strouhal number values corresponding to the main frequency of the oscillations depended weakly on Re and were approximately $3 \cdot 10^{-3}$.

Keywords: numerical simulation, plain jet, ventilated cavity, self-oscillations

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-19-00437).

© Адиатуллин В. Р., Галаев С. А., Рис В. В., Засимова М. А., Иванов Н. Г., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Adiatullin V. R., Galaev S. A., Ris V. V., Zasimova M. A., Ivanov N. G., On the instability of counterflowing wall jets in a ventilated cavity, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 27–38. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19203

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

При распространении струй в стесненном пространстве на фоне турбулентного движения со сплошным спектром частот могут развиваться устойчивые, статистически установившиеся крупномасштабные автоколебания струй [1]. Взаимодействия струй между собой и с твердыми стенками, в том числе возможность развития автоколебательных режимов струйных течений, широко исследовались ранее применительно к струйным системам управления в устройствах пневмоавтоматики [2]. Низкочастотные автоколебания могут возникать и при распространении струй воздуха в вентилируемых помещениях. Так, возможность возникновения автоколебаний при работе системы вентиляции в университетской аудитории продемонстрирована в расчетно-экспериментальной работе [3]. В этой статье представлен анализ воздухораспределения в реальном помещении, геометрия которого включала ряд мелких деталей, при этом вентиляция обеспечивалась четырьмя стандартными приточно-вытяжными устройствами (общее число приточных струй составило 16). Для столь усложненной конфигурации анализ причин возникновения автоколебаний затруднен и не гарантирует однозначных результатов.

В литературе по этой тематике представлен ряд работ, в которых возможные причины возникновения и условия поддержания устойчивых автоколебаний струйного течения обсуждаются для упрощенных конфигураций, при этом упрощения делаются как в части геометрии, так и в способе подачи струй. Например, в обзорной работе [4], посвященной анализу взаимодействия свободных сдвиговых слоев с препятствиями для упрощенных постановок, а также в экспериментальной работе [5], где рассмотрено распространение плоской струи в прямоугольной полости, высказаны предположения, что при развитии автоколебаний существенную роль играет влияние вторичного возвратного течения на поведение струи в ограниченном пространстве. Экспериментальные исследования, представленные в статьях [6, 7], в которых рассматривалось распространение круглой струи в модельной конфигурации, типичной для процессов литья, а также последующие расчеты (см. работы [8, 9]) позволили сделать определенное заключение об условиях, позволяющих реализовать автоколебательный режим течения. Обеспечить такой режим можно при наличии протяженного открытого участка границы стесненного пространства, дающего определенную свободу для втекания/вытекания жидкости из окружающей среды.

Указанные условия, разумеется, нетипичны для вентилируемых помещений. Тем не менее, именно обеспечение этого условия в тестовом эксперименте, описанном авторами работ [10, 11], когда плоская струя распространялась в модели помещения, представляющей собой прямоугольную вентилируемую полость с протяженными открытыми участками торцевой границы, позволило установить развитие автоколебательных режимов течения. Низкочастотные автоколебания плоской струи для данной геометрической конфигурации были воспроизведены и детально изучены в ходе двумерного (2D) и трехмерного (3D) численного моделирования методом решения нестационарных уравнений Навье – Стокса, осредненных по Рейнольдсу (*англ.* 2D/3D Unsteady Reynolds-Averaged Navier–Stokes (URANS)), а также методом моделирования крупных вихрей (Large Eddy Simulation (LES)) [11 – 13].

Нестационарность струйного течения, возникающая при распространении одиночной струи, может с еще большей долей вероятности проявляться при взаимодействии нескольких струй (что, в частности, продемонстрировано нами в статье [3]). Так, в экспериментальной работе [14] было установлено, что течение, возникающее при взаимодействии двух плоских струй, подаваемых навстречу друг другу в свободном

© Adiatullin V. R., Galaev S. A., Ris V. V., Zasimova M. A., Ivanov N. G., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

пространстве (вдали от верхней и нижней стенок полости), принципиально неустойчиво: поле давления периодически перестраивается, последовательно отклоняя струи вверх и вниз. Устойчивые автоколебания возникают и при истечении навстречу друг другу двух плоских пристенных струй: для прямоугольных полостей (модельных помещений) с различными геометрическими параметрами колебательный характер взаимодействия струй был получен экспериментально и численно (см. работы [15] и [16], соответственно).

Взаимодействие встречных припотолочных струй характерно для систем вентиляции салонов пассажирских самолетов. В работах [17 – 19] численно и экспериментально рассматривалась структура течения в условиях, типичных для таких вентиляционных систем, и во всех случаях регистрировались выраженные автоколебания. В работах [17, 18] расчетная область была приближена к модели салона самолета, при этом присутствовали загромождающие элементы, что затрудняло непосредственный анализ струйного течения. В экспериментальной работе [19] был принят ряд упрощений (плоские стенки и отсутствие загромождения), однако более предпочтительной для параметрического численного моделирования представляется максимально упрощенная постановка, предложенная в расчетной работе [20], в которой на противоположных торцевых стенках прямоугольного помещения симметрично размещены два щелевых приточных отверстия у потолка и два щелевых вытяжных отверстия в окрестности пола.

Геометрия и расход через каждое из приточных отверстий, принятые в работе [20], соответствуют тесту Нильсена, признанному вентиляционным сообществом [21, 22]; согласно этому тесту, воздушная струя подавалась из щелевого отверстия, расположенного под потолком. Экспериментальные данные, полученные через тест Нильсена, широко используются для валидации расчетных данных вплоть до настоящего времени (см., например, работу [23] 2025 года; в нашей работе [24] 2020 года представлен как достаточно полный обзор опубликованных работ на эту тему, так и ссылка на базу экспериментальных данных, имеющуюся в открытом доступе).

Основное внимание в статье [20] направлено на исследование нестационарности, вызванной подачей приточного воздуха с периодически меняющимся расходом. Однако, как можно предположить на основании результатов, полученных авторами статей [15, 16], даже при стационарных граничных условиях (при подаче постоянного расхода), взаимодействие встречных струй, ввиду проявления гидродинамической неустойчивости, должно приводить к возбуждению сильных низкочастотных автоколебаний, а это важное обстоятельство в статье [20] никак не обсуждается.

Цель настоящего исследования – проанализировать условия, приводящие к развитию автоколебаний при взаимодействии встречных струй в модельном помещении (полости).

Относительные размеры помещения и положение в нем входных/выходных отверстий соответствует постановке задачи, принятой в работе [20].

Постановка задачи

Рассматривается течение жидкости в помещении, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда, геометрические размеры которого $3H \times H \times H$ (рис. 1). Жидкость подается через щелевые отверстия высотой $h_{in} = 0{,}056H$ (размещены в верхней части противоположных торцевых стенок), к которым присоединены подводящие каналы длиной H. Жидкость покидает помещение через вытяжные отверстия высотой $h_{out} = 0{,}16H$, размещенные на тех же стенках в окрестности пола. В расчетную область включены также отводящие каналы длиной H, присоединенные к вытяжным отверстиям. Ширина подводящих и отводящих каналов равна ширине помещения. Начало системы координат расположено в одном из нижних углов помещения, ось x направлена в продольном направлении, ось y – в вертикальном.

На поверхности входных сечений подводящих каналов (на рис. 1 эти границы обозначены Inlet-1 и Inlet-2) задаются однородные распределения скорости V_0. На поверхности выходных сечений отводящих каналов (Outlet-1 и Outlet-2) ставится мягкое выходное граничное условие: давление полагается заданным и постоянным. Остальные границы – непроницаемые стенки, на которых задается условие прилипания.

Численно решается система нестационарных уравнений Навье – Стокса. Рассматривается течение несжимаемой среды с постоянными физическими свойствами.

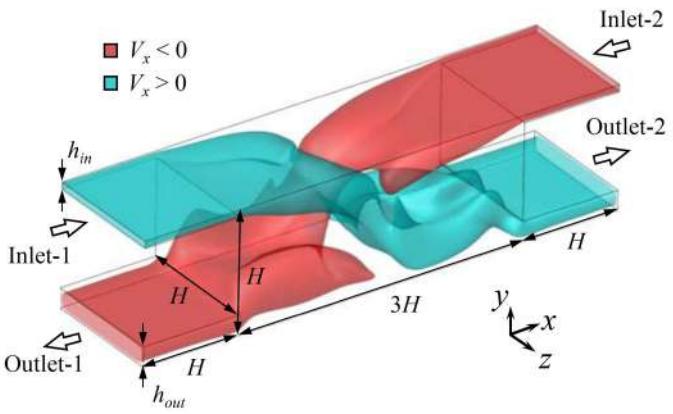


Рис. 1. Геометрическая модель расчетной области: Двумя изоповерхностями скорости $V_x > 0$ и $V_x < 0$ показана структура течения для числа Рейнольдса Re = 60; показаны высоты сечений входных – приточных (h_{in}) и выходных – вытяжных (h_{out}) отверстий, а также подводящих и отводящих каналов (соответственно), их границы обозначены как Inlet-1, Inlet-2 и Outlet-1, Outlet-2; фигурными стрелками указаны направления струй

Течение в полости характеризуется числом Рейнольдса $\mathrm{Re} = h_{in}V_0/\nu$, которое построено по высоте приточных отверстий и средней скорости на входе. Рассматриваются режимы течения со значениями Re от 20 до 140. Данный диапазон позволяет проводить расчеты в постановке, исключающей неопределенность, связанную с применением модели турбулентности. Он выбран нами примерно на два порядка ниже, чем значение числа Рейнольдса, принятое в работах [20 – 22], где $\mathrm{Re} = 5{,}5\cdot10^3$, что соответствует натурным условиям при вентиляции помещений. Выбранные нами уменьшенные значения Re можно трактовать как эффективные значения числа Рейнольдса, построенные по характерному уровню турбулентной вязкости, порожденной моделью турбулентности в слое смешения при натурном значении Re. Отметим также, что число Рейнольдса, построенное по высоте помещения H, для рассмотренных вариантов принимает значения в диапазоне $(0{,}36 – 2{,}50)\cdot10^3$ (в работе [15], например, значения Re определялись по величине H).

Параметрические расчеты в рассмотренном диапазоне числа Рейнольдса проводились на одной и той же сетке, состоящей из 860 тыс. ячеек; сетка была сгущена к приточному и вытяжному отверстиям. Для варианта Re = 60 (нестационарное течение) было выполнено исследование чувствительности решения к используемой в расчетах сетке: использовались сетки, состоящие из 50, 370 и 860 тыс. ячеек. Уже на сетке размерностью 370 тыс. ячеек осредненные во времени поля слабо зависели от выбора сетки: распределения средней скорости, полученные на сетках из 370 и 860 тыс. ячеек практически совпали. С учетом того, что верхняя граница рассматриваемого диапазона Re выше, было принято решение использовать сетку максимальной размерности.

Задача решалась в гидродинамическом пакете ANSYS Fluent (версия 2022r1), в котором реализован метод конечных объемов. В пакете заданы следующие опции численного метода. Для расчета конвективных потоков через грани контрольного объема использовалась противопоточная схема второго порядка (опция “Second Order Upwind”). Для продвижения по времени использовалась неявная схема второго порядка. Шаг по времени задавался равным $0{,}15h/V_0$. Для получения осредненных параметров течения накапливались выборки, продолжительность которых составляла более 10 тыс. конвективных времен (h/V_0). Расчеты выполнены с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра «Политехнический» (scc.spbstu.ru).

Результаты расчетов и обсуждение

Изменение структуры течения с ростом числа Рейнольдса показано на рис. 2. Здесь приведены распределения модуля скорости в среднем вертикальном сечении помещения ($z = H/2$) и вертикальной компоненты скорости в среднем горизонтальном сечении помещения ($y = H/2$).

При малых значениях числа Рейнольдса (Re = 20 – данные I, Re = 40 – данные II) решение в ходе расчетов в нестационарной постановке сходилось к стационарному. В данном диапазоне значений числа Рейнольдса дальнобойность струй невелика: на небольшом расстоянии от приточного отверстия они, постепенно опускаясь к полу, разворачиваются на 180°, и жидкость направляется к соответствующим выходам. Чем выше значение числа Рейнольдса, тем дальше струя проникает вглубь полости, однако до тех пор, пока струи не начинают взаимодействовать друг с другом, течение остается стационарным.

Анализ данных на рис. 2 позволяет заключить, что стационарное течение в обоих случаях существенно трехмерно, хотя рассматривается распространение плоских струй. Такое утверждение следует из изогнутости полей вертикальной скорости в срединном горизонтальном сечении. Это свидетельствует о протяженной области влияния боковых стенок в поперечном направлении ввиду существенной роли вязких эффектов. В то же время стационарное течение симметрично в продольном направлении относительно срединного сечения $x = 1{,}5H$.

При дальнейшем увеличении числа Рейнольдса дальнобойность струй постепенно растет, они достигают центра помещения и начинают взаимодействовать. Структура, которая формируется при совместном движении встречных струй, теряет устойчивость, течение в помещении становится нестационарным. В связи с этим на рис. 2 для значений Re = 60 и 100 показаны картины осредненного во времени поля скорости (данные III и IV). Уже при Re = 60 наблюдается квазипериодическое течение (структура обладает несколькими характерными частотами). Об этом свидетельствуют мгновенные поля скорости, показанные на рис. 3, а также эволюция компонент скорости в точках мониторинга (рис. 4, *a*). Все представленные сведения относятся к статистически установившемуся режиму течения (участку выборки, на котором обеспечена независимость средних значений от времени).

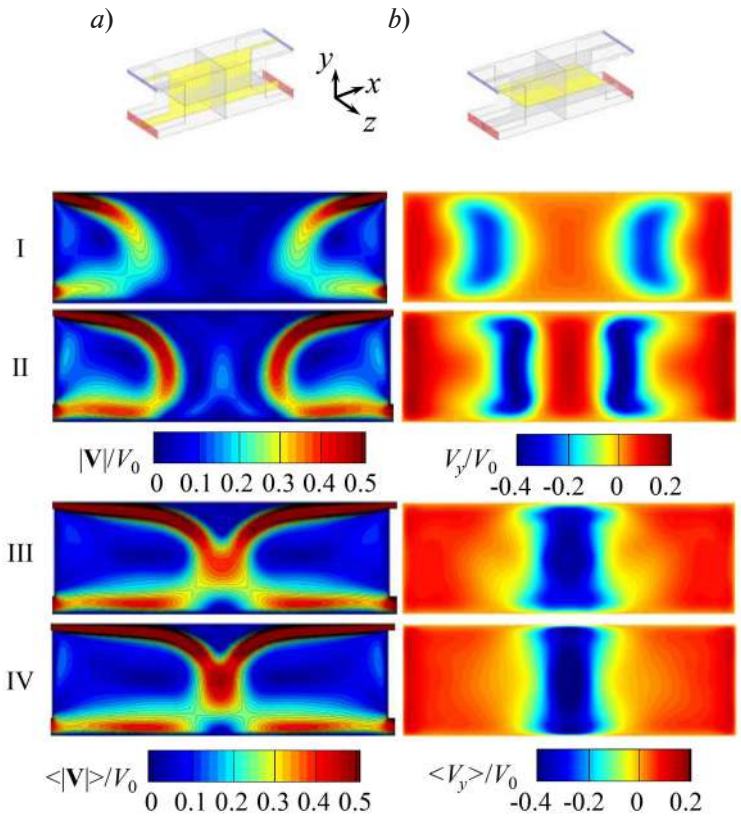


Рис. 2. Расчетные распределения модуля скорости в срединном вертикальном сечении $z = H/2$ (*a*) и вертикальной компоненты скорости в срединном горизонтальном сечении $y = H/2$ (*b*) (сечения показаны на схемах сверху) для разных значений числа Re: 20 (I), 40 (II), 60 (III) и 100 (IV).
В случаях I, II – решение стационарное; III, IV – нестационарное, поэтому даны распределения величин, осредненных во времени

Мгновенные поля скорости для режима нестационарного течения при Re = 60 показаны на рис. 3 для четырех моментов времени, которые составляют один период колебаний T (см. рис. 4, *a*). Эволюция полей скорости во времени демонстрирует интенсивное взаимодействие струй, при этом встречные плоские струи сохраняют двумерную структуру только на начальном этапе своего движения, в центральной же области помещения они «сворачиваются», смещаясь каждая к одной из двух боковых стенок. В момент времени $t = T/4$ (среднее сечение $x = 1{,}5H$), в правой его части течение идет в положительном направлении оси x, а в левой – в отрицательном (см. картины II на рис. 3, *b*); в момент времени $t = 3T/4$ (см. рис. 4) направления меняются: в правой части течение распространяется в отрицательном направлении, в левой – в положительном (данные IV на рис. 3, *b*). Поочередная смена положения областей с противоположными направлениями движения сопровождается периодической деформацией нисходящего потока, который поворачивается вокруг вертикальной оси, что хорошо видно при сопоставлении полей II и IV на рис. 3, *a*. Восходящее движение на периферии помещения также демонстрирует сильную нестационарность: максимумы положительной вертикальной скорости вторичного течения периодически перемещаются из одного угла в противоположный (см. рис. 3, *a*).

Итак, моментальные поля скорости демонстрируют принципиально трехмерный характер нестационарного течения; дополнительно это иллюстрирует моментальная картина изоповерхностей продольной скорости (см. рис. 1). В то же время картина течения, осредненная во времени, оказывается достаточно однородной в поперечном направлении z; при этом с ростом числа Рейнольдса степень однородности возрастает, что следует из сопоставления полей осредненной вертикальной компоненты скорости в сечении $y = H/2$ для Re = 60 и 100 (см. рис. 2). В осредненном течении, струи, сталкиваясь в центральной части помещения, совместно спускаются вниз, по направлению к полу помещения, где снова происходит разделение потоков, и жидкость движется вдоль пола к вытяжным отверстиям; осредненные картины течения при Re = 60 и 100 представляют собой логичное продолжение стационарных картин течения при меньших значениях числа Рейнольдса.

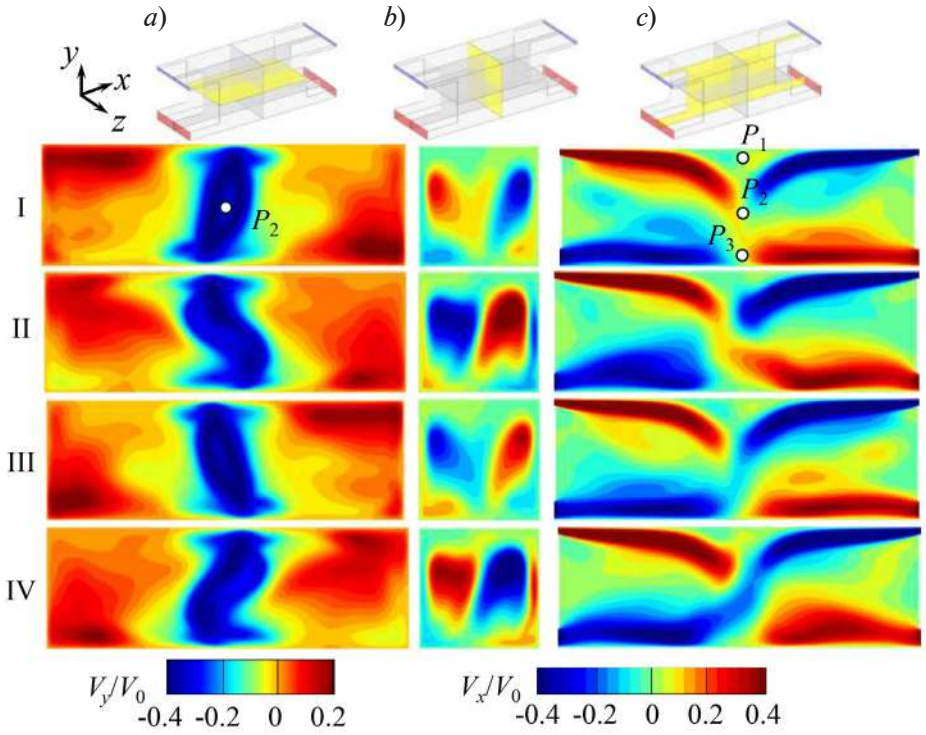


Рис. 3. Мгновенные распределения вертикальной (*a*) и продольной (*b*) компонент скорости, а также ее компоненты в трех средних сечениях помещения (*c*) в последовательные моменты времени t: 0 (I), $T/4$ (II), $T/2$ (III) и $3T/4$ (IV);
T – период колебаний; $P_1 - P_3$ – точки мониторинга, Re = 60

Графики изменения во времени продольной и поперечной компонент скорости в трех точках мониторинга $P_1 - P_3$ для вариантов Re = 60 и 100 приведены на рис. 4. Точки расположены на пересечении срединных вертикальных сечений ($z = H/2$ и $x = 1{,}5H$), т.е. вдоль центральной линии помещения, на разной высоте:

точка P_1 находится на расстоянии полувысоты приточного отверстия от потолка ($y = H - h_{in}/2$),

точка P_2 – в центральной точке помещения ($y = H/2$),

точка P_3 – на расстоянии полувысоты вытяжного отверстия от пола ($y = h_{out}/2$).

При представлении данных, за масштаб времени принят ведущий (основной) период колебаний T. Оценка значения T для каждого из вариантов выполнена на основе анализа энергетического спектра колебаний скорости.

Из анализа данных на рис. 4 следует, что режим течения при Re = 60 можно трактовать как квазипериодический, при этом наблюдается практически полная повторяемость (периодичность) характера изменения скорости в последовательные периоды колебаний, несмотря на наличие нескольких частот. В энергетическом спектре имеется ярко выраженная основная частота; соответствующее ей значение числа Струхаля $\mathrm{Sh} = h_{in}/TV_0$ составляет $2{,}5\cdot10^{-3}$. В центральной точке регистрируются интенсивные колебания, особенно заметные на графике эволюции компоненты V_x; знакопеременность продольной компоненты скорости отражает периодическую смену направления движения вдоль оси x на противоположное. Несмотря на сравнительно близкое размещение точки P_1 от потолка, в ней регистрируются заметные колебания вертикальной компоненты скорости; при этом за один период колебаний T возникают два максимума и два минимума, что говорит о поочередном влиянии струй из противоположных приточных отверстий на течение в этой точке. Амплитуда колебаний в точке P_3, находящейся в области низких скоростей, оказалась примерно на порядок ниже, чем в точках P_1 и P_2.

При значении Re = 100 изменение скорости в точках мониторинга приобретает случайный характер (см. рис. 4, *b*). Автоколебания становятся заметно интенсивнее: отклонение продольной компоненты скорости в центральной точке от среднего (нулевого) значения достигает $0{,}3V_0$. Следует отметить, что в этой точке возрастает по модулю и среднее значение вертикальной компоненты скорости V_y, что соответствует сужению центральной области с нисходящим течением на осредненной картине течения (см. рис. 2). Интенсивность колебаний увеличивается и в области низких скоростей (это точка мониторинга P_3).

Пространственное распределение интенсивности колебаний скорости для тех же самых нестационарных режимов (Re = 60 и 100) представлено на рис. 5. Здесь приведены поля среднеквадратичного отклонения (*англ.* Root Mean Square (RMS)) компоненты скорости V_z в срединном вертикальном сечении $z = H/2$ и компоненты скорости V_y в другом

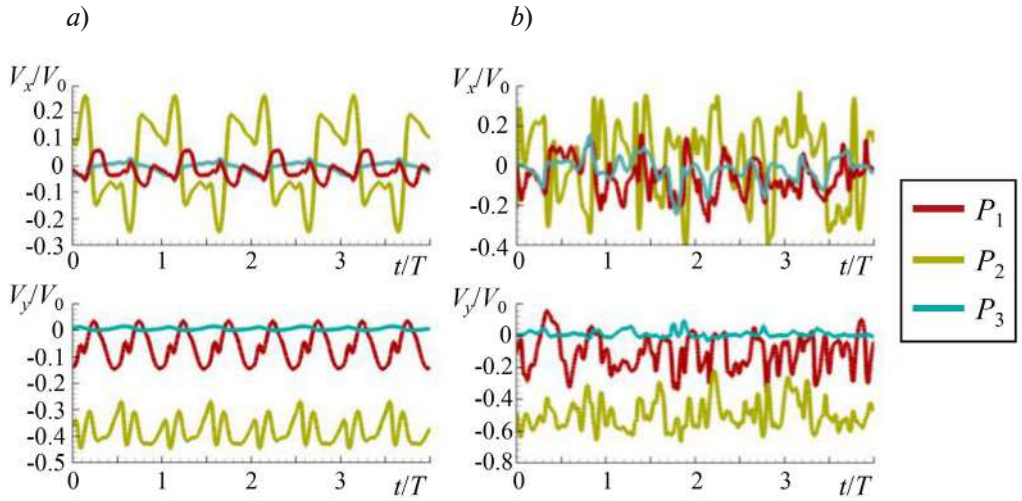


Рис. 4. Эволюция во времени продольной (V_x) и вертикальной (V_y) компонент скорости в трех точках мониторинга $P_1 - P_3$ при значениях Re = 60 (*a*) и Re = 100 (*b*)

срединном вертикальном сечении $y = H/2$ (оба распределения характеризуют интенсивность колебаний компоненты скорости, нормальной к данному сечению). Видно, что даже при Re = 60 колебания охватывают всю область течения; при этом локальные максимумы V_y и V_z в центральной части помещения дополнительно свидетельствуют об интенсивном перемещении нисходящей структуры, сформированной двумя струями, в поперечном направлении; кроме того, колебания, сопоставимые по интенсивности, зафиксированы в области вторичного течения. Сравнение пространственных распределений подтверждает вывод о заметном возрастании колебаний по мере увеличения числа Рейнольдса, сделанный ранее на основе локальных данных (см. рис. 4).

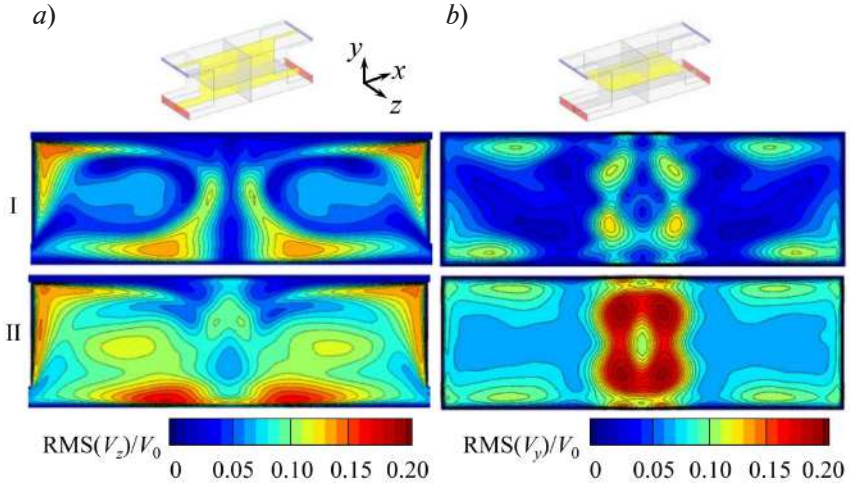


Рис. 5. Распределения среднеквадратичных отклонений компонент скорости V_z (*a*) и V_y (*b*) для значений числа Re = 60 (I) и Re = 100 (II)

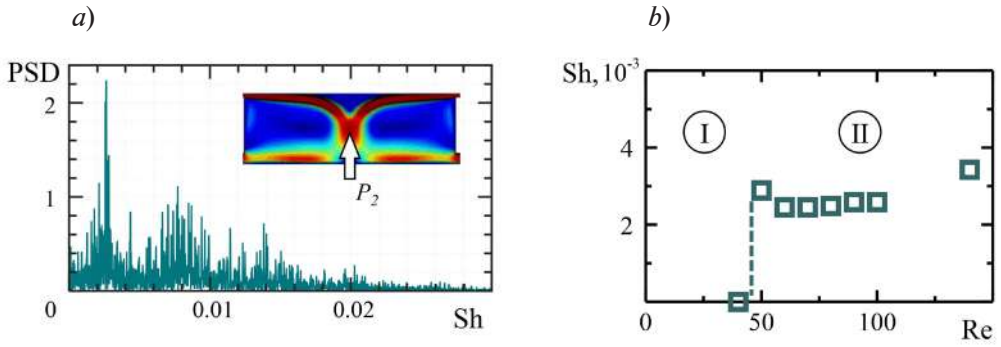


Рис. 6. Энергетический спектр колебаний компоненты скорости V_x в центральной точке помещения P_2 при значении Re = 100 (*a*) и зависимость числа Струхаля от чисел Рейнольдса, построенная по результатам всех рассчитанных вариантов (*b*).
Вертикальная штриховая линия показывает границу между стационарным (I) и нестационарным (II) режимами

Энергетический спектр колебаний (*англ.* Power Spectral Density (PSD)) продольной компоненты скорости V_x/V_0, построенный на основе выборки в центральной точке помещения P_2 для Re = 100, показан на рис. 6, *a*. Видно, что течение характеризуется практически сплошным спектром колебаний поля скорости (для значения Re = 60 спектр дискретный) с выраженной основной частотой колебаний. Число Струхаля, соответствующее основной частоте, составило Sh = $2{,}6\cdot10^{-3}$, что лишь немного отличается от значения числа Струхаля, полученного для Re = 60.

На рис. 6, *b* сведены воедино все варианты проведенных параметрических расчетов: построена зависимость безразмерной частоты основной гармоники поля скорости от числа Рейнольдса. Вертикальная штриховая линия показывает границу между стационарным (I) и нестационарным (II) режимами течения: согласно результатам всех рассчитанных

вариантов, течение стационарное при значениях $Re \leq 40$, а когда числа $Re \geq 50$, развиваются автоколебания. В рассмотренном диапазоне чисел Рейнольдса безразмерная частота колебаний практически не меняется для нестационарных режимов течения. Значения числа Струхаля лежат в диапазоне $(2{,}5 – 3{,}4)\cdot 10^{-3}$.

Заключение

Представлены результаты трехмерного моделирования течения жидкости в прямоугольном помещении при ее встречной подаче через два щелевых отверстия, находящихся в верхней части противоположных торцевых стенок, и ее отводе через два щелевых отверстия в нижней части тех же стенок. Численно решена система нестационарных уравнений Навье – Стокса; расчеты выполнены в диапазоне значений числа Рейнольдса, которое построено по высоте приточного отверстия, от 20 до 140.

Показано, что течение, возникающее при встречной подаче двух плоских пристенных струй, оказывается неустойчивым, как только дальнобойность струй становится достаточной для их непосредственного взаимодействия. Для рассмотренного отношения длин сторон помещения при значениях $Re \leq 40$ течение стационарное, при $Re \geq 50$ развиваются интенсивные автоколебания. Наиболее интенсивные пульсации поля скорости фиксируются в центральной части помещения, где нисходящий поток, объединяющий две струи, совершает повороты вокруг вертикальной оси, периодически деформируясь.

Колебания основной нисходящий структуры распространяются и на вторичное восходящее течение. Нестационарное течение довольно быстро (уже при значении $Re = 100$) приобретает хаотический характер со сплошным спектром частот.

В рассмотренном диапазоне чисел Рейнольдса явно выражена основная частота колебаний, при этом значения числа Струхаля остаются практически неизменными и составляют примерно $3\cdot 10^{-3}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Moloy N. A., Taylor P. L.** Oscillatory flow of a jet into a blind cavity // Nature. 1969. Vol. 224. No. 5225. Pp. 1192–1194.

2. **Алферов В. В., Владимиров В. С., Новиков Б. К., Строгалев В. П., Масленников С. Л.** Струйная автоматика в системах управления. М.: Машиностроение, 1975. 367 с.

3. **Markov D., Ivanov N., Pichurov G., Zasimova M., Stankov P., Smirnov E., Simova I., Ris V., Angelova R., Velichkova R.** On the procedure of draught rate assessment in indoor spaces // Applied Sciences. 2020. Vol. 10. No. 15. P. 5036.

4. **Rockwell D., Naudasher E.** Self-sustained oscillations of impinging free shear layers // Annual Review of Fluid Mechanics. 1979. Vol. 11. January. Pp. 67–94.

5. **Maurel A., Ern P., Zielinska B. J. A., Wesfreid J. E.** Experimental study of self-sustained oscillations in a confined jet // Physical Review E. 1996. Vol. 5. No. 4. Pp. 3643–3651.

6. **Lawson N. J., Davidson M. R.** Crossflow characteristics of an oscillating jet in a thin slab casting mould // Journal of Fluids Engineering Transactions of the ASME. 1999. Vol. 121. No. 3. Pp. 588–595.

7. **Lawson N. J., Davidson M. R.** Self-sustained oscillation of a submerged jet in a thin rectangular cavity // Journal of Fluids and Structures. 2001. Vol. 15. January. Pp. 59–81.

8. **Bensider N., Mataoui A., Aksouh M.** Control of self-sustained jet oscillations in 3D thin rectangular cavity // Chemical Engineering Research and Design. 2017. Vol. 117. January. Pp. 533–541.

9. **Засимова М. А., Иванов Н. Г., Красикова А. Д.** Управление автоколебаниями круглой турбулентной струи, распространяющейся в узкой прямоугольной полости // Теплофизика и аэромеханика. 2024. Т. 31. № 4. С. 771–785.

10. **Mataoui A., Schiestel R., Salem A.** Flow regimes of interaction of a turbulent plane jet into a rectangular cavity: experimental approach and numerical modelling // Flow, Turbulence and Combustion. 2001. Vol. 67. No. 4. Pp. 267–304.

11. **Mataoui A., Schiestel R.** Unsteady phenomena of an oscillating turbulent jet flow inside a cavity: effect of aspect ratio // Journal of Fluids and Structures. 2009. Vol. 25. No. 1. Pp. 60–79.

12. **Денисихина Д. М., Бассина И. А., Никулин Д. А. Стрелец М. Х.** Численное моделирование автоколебаний турбулентной струи, истекающей в прямоугольную полость // Теплофизика высоких температур. 2005. Т. 43. № 4. С. 568–579.

13. **Засимова М. А., Иванов Н. Г., Рис В. В., Степашева Е. Д.** Численное моделирование распространения турбулентной струи при истечении из щелевого отверстия в ограниченное пространство // Теплофизика и аэромеханика. 2025. Т. 32. № 3. С. 507–519.

14. **Денщиков В. А., Кондратьев В. Н., Ромашов А. Н.** О взаимодействии двух встречных струй // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1978. № 6. С. 165–167.

15. **Körner M., Shishkina O., Wagner C., Thess A.** Properties of large-scale flow structures in an isothermal ventilated room // Building and Environment. 2013. Vol. 59. January. Pp. 563–574.

16. **Wang C., Li Y., Ding P., Chen H., Zhang Y., Xing Y.** Analysis of airflow dynamics and instability in closed spaces ventilated by opposed jets using large eddy simulations // Buildings. 2025. Vol. 15. No. 10. P. 1707.

17. **Yang C., Zhang X., Yao Z., He F.** The large eddy simulation and stability analysis of flow field in a generic cabin // Procedia Engineering. 2015. Vol. 121. December. Pp. 1749–1756.

18. **Li J., Liu J., Wang C., Wesseling M., Müller D.** PIV experimental study of the large-scale dynamic airflow structures in an aircraft cabin: Swing and oscillation // Building and Environment. 2017. Vol. 125. No. 2. Pp. 180–191.

19. **Thysen J. H., van Hooff T., Blocken B., van Heijst G. J. F.** Instantaneous characteristics of interacting opposing plane jets in a generic enclosure measured with PIV // Experiments in Fluids. 2023. Vol. 64. No. 1. P. 19.

20. **van Hooff T., Blocken B.** Mixing ventilation driven by two oppositely located supply jets with a time-periodic supply velocity: a numerical analysis using computational fluid dynamics // Indoor and Built Environment. 2020. Vol. 29. No. 4. Pp. 603–620.

21. **Nielsen P. V., Restivo A., Whitelaw J. H.** The velocity characteristics of ventilated rooms // Journal of Fluids Engineering. 1978. Vol. 100. No. 3. Pp. 291–298.

22. **Nielsen P. V.** Specification of a two-dimensional test case. Aalborg, Denmark: Aalborg University, November 1990. 15 p.

23. **Buri S., Larkermani E., Georges L.** Influence of the inlet boundary conditions on the LES performance for the cavity flow benchmark // E3S Web of Conferences. 2025. Vol. 672. December. P. 02018.

24. **Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д.** Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. II. LES-расчеты для помещения конечной ширины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 75–92.

REFERENCES

1. **Moloy N. A., Taylor P. L.,** Oscillatory flow of a jet into a blind cavity, Nature. 224 (5225) (1969) 1192–1194.

2. **Alferov V. V., Vladimirov V. S., Novikov B. K., et al.,** Struynaya avtomatika v sistemakh upravleniya [Jet automation in control systems], Mashinostroyeniye Publishing, Moscow, 1975 (in Russian).

3. **Markov D., Ivanov N., Pichurov G., et al.,** On the procedure of draught rate assessment in indoor spaces, Appl. Sci. 10 (15) (2020) 5036.

4. **Rockwell D., Naudasher E.,** Self-sustained oscillations of impinging free shear layers, Ann. Rev. Fluid Mech. 11 (Jan) (1979) 67–94.

5. **Maurel A., Ern P., Zielinska B. J. A., Wesfreid J. E.,** Experimental study of self-sustained oscillations in a confined jet, Phys. Rev. E. 5 (4) (1996) 3643–3651.

6. **Lawson N. J., Davidson M. R.,** Crossflow characteristics of an oscillating jet in a thin slab casting mould, J. Fluids Eng. Trans. ASME. 121 (3) (1999) 588–595.

7. **Lawson N. J., Davidson M. R.,** Self-sustained oscillation of a submerged jet in a thin rectangular cavity, J. Fluids Struct. 15 (Jan) (2001) 59–81.

8. **Bensider N., Mataoui A., Aksouh M.,** Control of self-sustained jet oscillations in 3D thin rectangular cavity, Chem. Eng. Res. Des. 117 (Jan) (2017) 533–541.

9. **Zasimova M. A., Ivanov N. G., Krasikova A. D.,** Control of self-oscillations of a round turbulent jet propagating in a narrow rectangular cavity, Thermophys. Aeromech. 31 (4) (2024) 791–804.

10. **Mataoui A., Schiestel R., Salem A.,** Flow regimes of interaction of a turbulent plane jet into a rectangular cavity: experimental approach and numerical modelling, Flow Turbul. Combust. 67 (4) (2001) 267–304.

11. **Mataoui A., Schiestel R.,** Unsteady phenomena of an oscillating turbulent jet flow inside a cavity: Effect of aspect ratio, J. Fluids Struct. 25 (1) (2009) 60–79.

12. **Denisikhina D. M., Bassina I. A., Nikulin D. A., Strelets M. Kh.,** Numerical simulation of self-excited oscillation of a turbulent jet flowing into a rectangular cavity, High Temperature. 43 (4) (2005) 568–579.

13. **Zasimova M. A., Ivanov N. G., Ris V. V., Stepasheva E. D.,** Numerical modeling of the propagation of a turbulent jet flowing from a slot into a confined space, Thermophys. Aeromech. 32 (3) (2025) 623–635.

14. **Denshchikov V. A., Kondrat'ev V. N., Romashov A. N.,** Interaction between two opposed jets, Fluid Dyn. 13 (6) (1978) 924–926.

15. **Körner M., Shishkina O., Wagner C., Thess A.,** Properties of large-scale flow structures in an isothermal ventilated room, Build. Environ. 59 (Jan) (2013) 563–574.

16. **Wang C., Li Y., Ding P., et al.,** Analysis of airflow dynamics and instability in closed spaces ventilated by opposed jets using large eddy simulations, Build. 15 (10) (2025) 1707.

17. **Yang C., Zhang X., Yao Z., He F.,** The Large Eddy Simulation and stability analysis of flow field in a generic cabin, Procedia Eng. 121 (Dec) (2015) 1749–1756.

18. **Li J., Liu J., Wang C., et al.,** PIV experimental study of the large-scale dynamic airflow structures in an aircraft cabin: Swing and oscillation, Build. Environ. 125 (2) (2017) 180–191.

19. **Thysen J. H., van Hooff T., Blocken B., van Heijst G. J. F.,** Instantaneous characteristics of interacting opposing plane jets in a generic enclosure measured with PIV, Exp. Fluids. 64 (1) (2023) 19.

20. **van Hooff T., Blocken B.,** Mixing ventilation driven by two oppositely located supply jets with a time-periodic supply velocity: A numerical analysis using computational fluid dynamics, Indoor Built Environ. 29 (4) (2020) 603–620.

21. **Nielsen P. V., Restivo A., Whitelaw J. H.** The velocity characteristics of ventilated rooms, J. Fluids Eng. 100 (3) (1978) 291–298.

22. **Nielsen P. V.,** Specification of a two-dimensional test case, Aalborg University Publ., Aalborg, Denmark, November 1990.

23. **Buri S., Larkermani E., Georges L.,** Influence of the inlet boundary conditions on the LES performance for the cavity flow benchmark, E3S Web Conf. 672 (Dec) (2025) 02018.

24. **Zasimova M. A., Ivanov N. G., Markov D.,** Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. II. LES-computations for the room with finite width, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 65–79.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АДИАТУЛЛИН Владислав Рустамович – *аспирант, инженер научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vlad-adia@mail.ru

ГАЛАЕВ Сергей Александрович – *кандидат технических наук, директор научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

galaev_sa@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-7964-0200

РИС Владимир Вольдемарович – *кандидат технических наук; отдал служению Политехническому университету пятьдесят восемь лет.*

ЗАСИМОВА Марина Александровна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zasimova_ma@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

ИВАНОВ Николай Георгиевич – *кандидат физико-математических наук, заведующий научно-исследовательской лабораторией гидродинамики, директор Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

THE AUTHORS

ADIATULLIN Vladislav R.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vlad-adia@mail.ru

GALAEV Sergey A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
galaev_sa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-7964-0200

RIS Vladimir V.
He dedicated 58 years to serving Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

ZASIMOVA Marina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zasimova_ma@mail.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

IVANOV Nikolay G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

Статья поступила в редакцию 07.12.2025. Одобрена после рецензирования 12.12.2025. Принята 12.12.2025.
Received 07.12.2025. Approved after reviewing 12.12.2025. Accepted 12.12.2025.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 53.093, 53.096, 57.031, 57.033, 57.038
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОЛИГОМЕРОВ РЯДА АМИНОКИСЛОТ (Gly, Ala, Trp, Val) В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА

М. А. Баранов ✉, О. Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ baranovma1993@gmail.com

Аннотация. Суперкомпьютерное моделирование методом молекулярной динамики ряда олигомеров аминокислот позволило впервые выявить для таких частиц особенности комплекса характеристик как собственных внутримолекулярных локальных колебаний (нормальных мод), так и вынужденных колебаний в растворе при задании электромагнитного поля в дальнем и среднем ИК-диапазонах, а также различных алгоритмов структуры растворителя. Для олигомеров аминокислот Gly, Ala, Trp, Val и их групп получены амплитудно-временные зависимости энергии и электрического дипольного момента, Фурье-преобразованием которых выявлены спектры частот. Впервые обнаружены и вычислены смещения спектральных пиков, вызванные различиями алгоритмов задания структуры растворителя. Интерпретация полученных закономерностей позволила предложить непротиворечивую модель, удовлетворяющую фундаментальным физическим представлениям о внутримолекулярной и межмолекулярной динамике групп биомолекул. Эта модель допускает внутримолекулярные взаимодействия нормальных локальных колебаний, в том числе по типу Ферми-резонанса.

Ключевые слова: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, аминокислота, биомолекулярная электроника

Для цитирования: Баранов М. А., Цыбин О. Ю. Суперкомпьютерное моделирование динамики олигомеров ряда аминокислот (Gly, Ala, Trp, Val) в электромагнитном поле инфракрасного диапазона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 39–56. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

SUPERCOMPUTER SIMULATION OF THE DYNAMICS OF OLIGOMERS OF A NUMBER OF AMINO ACIDS (Gly, Ala, Trp, Val) IN AN INFRARED ELECTROMAGNETIC FIELD

M. A. Baranov ✉, O. Yu. Tsybin

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ baranovma1993@gmail.com

Abstract. Supercomputer simulation of several amino acid oligomers using the molecular dynamics method has made it possible for the first time to identify a complex of characteristics of both intrinsic intramolecular local vibrations, or normal modes, and forced vibrations when specifying an alternating electric field in the IR frequency range. Amplitude-time dependences of energy and electric dipole moment were obtained for oligomers of Gly, Ala, Trp, Val amino acids, the Fourier transform of which revealed their frequency spectra. The type of solvent

© Баранов М. А., Цыбин О. Ю., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

model was shown to significantly affect the position of spectral peaks because of variations in local interactions and system dynamics. The interpretation of the obtained patterns made it possible to propose a non-contradictory model that satisfied the fundamental physical concepts of the intramolecular and intermolecular dynamics of groups of biomolecules. The model allows for intramolecular interactions of normal local vibrations, including those of the Fermi resonance type.

Keywords: molecular dynamics, simulation, amino acid, biomolecular electronics

For citation: Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Supercomputer simulation of the dynamics of oligomers of a number of amino acids (Gly, Ala, Trp, Val) in the infrared electromagnetic field, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 39–56. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19204

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Вынужденные биомолекулярные колебательные процессы, обусловленные воздействием внешнего электромагнитного поля, имеют важное значение для наук о жизни, медицине, микроэлектронике и нанотехнологиях, экспериментальной спектроскопии и др. [1 – 13]. Компьютерными вычислениями амплитудно-временных реализаций (АВР) суммарного, или интегрального по всем зарядам молекулы, электрического дипольного момента (ЭДМ) в отсутствие внешнего воздействия выявлена субпикосекундная динамика собственных биомолекулярных колебаний [14, 15]. Значения частот собственных колебаний соответствуют локальным нормальным модам и распределенным колебаниям в диапазоне от терагерцовых (ТГц) до инфракрасных (ИК) частот. Компьютерная молекулярная динамика с вычислением амплитудно-временных реализаций интегрального ЭДМ во внешнем электромагнитном поле позволила вычислить конформации молекул и ИК-спектры их вынужденных колебаний, получить значительные научные и прикладные результаты в современной био- и нанофизике [10, 16 – 25]. Реализована, например, молекулярная динамика мономеров, димеров и протофибрилл молекул Aβ42 в терагерцовом (ТГц)-диапазоне, обоснованы возможности использования этого метода в среднем и дальнем ИК-диапазонах [20]. Показано, что использование ньютоновской механики силовых полей допустимо в молекулярной динамике в среднем и дальнем ИК-диапазонах наряду с квантовомеханическими вычислениями [17, 20, 21, 23, 24, 26 – 28]. Сопоставление молекулярно-динамических исследований в этих диапазонах частот показало довольно близкое соответствие спектральных характеристик экспериментальным и теоретическим данным, относящимся к собственным и вынужденным колебаниям [6, 21 – 23].

Примерами служат отнесения наиболее интенсивных собственных колебаний на вычисленных частотах (волновые числа, $см^{-1}$):

1100, 1519, 1652, 3018, 3322, 3364, 3362 – в растворах аминокислот аланина (Ala);

927, 1060, 1542, 1643, 3210, 3322, 3364, 3479 – в растворах глицина (Gly);

1048, 1533, 1640, 3030, 3325, 3361, 3479, 3663 – в растворах валина (Val);

784, 1403, 1495, 1536, 1646, 2917, 3325, 3562, 3766 – в растворах триптофана (Trp).

Эти результаты соответствует имеющимся теоретическим и экспериментальным данным, однако точность такого соответствия не определена [26, 28].

Согласно известным представлениям, частотные составляющие типичных спектров, которые лежат выше приблизительно на 200 – 800 $см^{-1}$, относятся к локальным собственным внутримолекулярным колебаниям, а ниже – к распределенным коллективным. Установление соответствия (соотнесение) полос локальных осцилляторов с нормальными модами и частотами представлено во многих известных источниках, например, в статье [26].

Спектральный диапазон 2600 – 900 $см^{-1}$ представлен в статье [29]. Девять характерных колебательных полос (амиды A, B, I, II, ..., VII), где амиды I и II дают полосы между 1600 и 1700 $см^{-1}$, а также между 1500 и 1600 $см^{-1}$, соответственно, являются интенсивными в ИК-спектре. Невозмущенный резонанс C=O группы (Amide I) находится на 1688 $см^{-1}$; при этом полоса смещается при наличии воды или других растворителей, а также зависит

© Baranov M. A., Tsybin O. Yu., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

от конформации. Резонанс (N–H)-группы (Amide II) лежит в интервале волновых чисел 1530 – 1580 см$^{-1}$. Резонанс Ca–N (Amide III) соответствует области 1200 – 1340 см$^{-1}$. Значения резонансных колебаний поля (основной гармоники меандра 3335,66 и 1042,37 см$^{-1}$) совпадают с собственными локальными колебаниями определенных типов (асимметричных N–H (Amide A) и C–N, соответственно).

Благодаря развитию методов молекулярной динамики, в последние годы получены новые результаты суперкомпьютерного моделирования, представляющие динамику все более сложных белковых молекул в электрическом поле с разной поляризацией и модуляцией в ТГц- и ИК- диапазонах [30 – 33]. Нарастающее внимание уделяется олигомерам как основным функциональным компонентам, которые позволяют белкам инициировать аллостерию и кооперативность [14, 15, 34 – 37].

Впервые выполнено моделирование колебательной динамики олигомеров, инициированной электромагнитными полями различной поляризации и временной зависимости в разных диапазонах волновых чисел, особенно в дальнем и среднем инфракрасном диапазонах [25].

Актуальность суперкомпьютерного исследования молекулярной динамики олигомеров, изложенного в данной статье, обусловлена необходимостью уточнить результаты анализа вынужденных колебаний таких частиц и их групп в растворах для развития фундаментальных биологических и биофизических представлений, а также для ряда современных и перспективных приложений.

Методика исследования и методические результаты

Выбранный подход к проблеме основывался на том, что разработанная суперкомпьютерная методика молекулярной динамики показала свою достаточно высокую и надежную эффективность [25, 29, 38 – 41].

Методики, развитые ранее для единичных молекул, также использованы в данной работе при изучении олигомеров и их групп.

Методика динамического моделирования молекулярного комплекса реализована с использованием кластера «РСК-Торнадо» суперкомпьютерного центра «Политехнический» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и подробно рассмотрена в нашей статье [33]. Кластер с пиковой производительностью 10^{15} флопс содержит 668 двухпроцессорных узлов (Intel Xeon E5 2697 *v*3), из них 56 имеют два ускорителя вычислений NVIDIA K40. Это позволяет создавать за приемлемое компьютерное время эффективные базы данных амплитудно-временных реализаций интегрального электрического дипольного момента молекул с максимальной длительностью до 40 нс и с наименьшим шагом дискретизации до 1 фс, а также обеспечивать тем самым высокое разрешение Фурье-спектров в дальнем и среднем инфракрасных частотных диапазонах. В состав программно-вычислительного комплекса входили пакеты прикладных программ Avogadro, Visual Molecular Dynamics, и NAMD, а также дополнительные оригинальные программы, написанные на языке Python. Пакет Packmol позволил размещать олигомеры группами с количеством частиц $p = 1, 2, ..., 20$ в водном кубе со стороной 70 Å. С помощью пакета Avogadro были созданы исходные координатные файлы олигомеров аминокислот Gly, Ala, Trp и Val в водных растворах. Ниже представлены, в основном, результаты моделирования олигомеров polyAlaN (при их начальном задании в виде α-спиралей) с различным количеством аминокислотных остатков $N = 1, 2, ..., 18$. Программа VMD позволяла создавать структурные файлы на основе топологии молекулярных связей, добавлять «молекулы воды» и «ионы солей», визуализировать молекулярные системы, выполнять вычисления энергии и дипольных моментов конформационно-подвижных молекул. Для каждого атома системы решали уравнение динамики Ньютона, по временным шагам определяли координаты атомов, параметры силового поля, температуру системы, давление и т.п. В результате получали мгновенные значения координат и скорости заряженных частиц, через которые вычисляли зависимости от времени мгновенных значений интегрального электрического дипольного момента $\mu(t)$ путем суммирования векторов смещений каждого заряда, находящегося в системе в каждый момент времени.

Изменение вектора парциального электрического дипольного момента $\Delta\mu_{n,j}$ на j-м временном шаге длительностью Δt соответствует пространственному смещению заряда q_n на этом шаге на вектор $\Delta\mathbf{r}_{n,j}$:

$$\Delta\mu_{n,j} = q_n \Delta r_{n,j} = q_n \left[r_{n,j} - r_{n,j-1} \right].$$

Временную динамику мгновенных значений интегрального электрического дипольного момента $\mu(t)$ вычисляли путем суммирования по времени суммы парциальных моментов для каждого заряда в растворе олигомеров:

$$\mu(t) = \sum_{j} \sum_{n}^{N} q_n \Delta r_{n,j}, \quad (1)$$

где N – полное количество зарядов.

Динамические зависимости мгновенных значений электрического дипольного момента $\mu(t)$, или амплитудно-временные реализации интегрального ЭДМ, представляют собой суперпозицию локальных колебаний всех внутримолекулярных зарядов.

Спектр волновых чисел колебаний зарядов получали путем Фурье-преобразования функции амплитудно-временной реализации интегрального электрического дипольного момента как каждого олигомера, так и всего комплекса частиц в ячейке системы. При этом в алгоритме вычисления АВР использовалось свойство независимости флуктуаций интегрального электрического дипольного момента (1) от начала отсчета векторов $\Delta\mathbf{r}_{n,j}$. Достигалось высокое разрешение по характеристическим частотам в исследуемой части Фурье-спектра благодаря его численному равенству с отношением длительности амплитудно-временной реализации (АВР) к периоду колебания.

Достоинства применяемого Фурье-метода заключаются в воспроизведении всех спектральных компонент в заданном интервале волновых чисел, в том числе высших и комбинационных гармоник. Диапазон ограничен половиной частоты дискретизации, однако может быть расширен при использовании вычислительных ресурсов суперкомпьютера.

Приложение внешнего электромагнитного поля вызывает смещения зарядов на характеристических частотах ИК-диапазона и реакцию поляризации, изменяющую компоненты вектора и модуль электрического дипольного момента. Для обеспечения наиболее информативного исследования задавали три вида электромагнитного поля с плоской пространственной поляризацией по координатным осям (x, y, z), компонентами [E,0,0] с амплитудами от 0,01 до 0,50 В/нм:

гармоническое электромагнитное поле,

периодическая последовательность однополярных прямоугольных импульсов,

симметричный прямоугольный меандр.

Значение последнего было продиктовано тем, что меандр обладает свойствами периодических последовательностей импульсов и представляет практический интерес в микроэлектронике для задач управляемого переключения состояний молекул, а также для выявления ангармонической динамики молекул. Возможность и эффективность применения электромагнитного поля в виде меандра с основной гармоникой в ИК-диапазоне частот апробирована и подтверждена в ряде работ [14, 15, 23 – 25]. Подобное поле в виде меандра было реализовано в молекулярной динамике с воздействием на воду (в жидком состоянии) в интервале частот 20 – 500 ГГц [40].

Напряженность локального электрического поля, действующего на заряды в молекуле, варьировали в широком интервале значений: 0,004 – 0,400 В/нм. Как и в предыдущих наших работах, а также в работах других авторов, зависимость амплитуд колебаний от времени была линейной и не вызывала фрагментации молекулы. Действительно, такие поля существуют только в микроскопической области вблизи заряда и соответствуют типичным атомным внутримолекулярным. Такой подход не требует сопоставления с макроскопическим полем, имеющим иные энергетические характеристики [42 – 44].

Руководствуясь предварительно полученными данными о спектрах собственных колебаний олигомеров, мы задавали внешнее электрическое поле $E(t)$ резонансными выборками со следующими волновыми числами основной гармоники (см$^{-1}$):

5555, 4167, 3333, 1667, 1515, 1111, 1042, 980 и 200.

Этим выборкам сопоставлены их энергетические характеристики (рис. 1).

Сценарии изменения кинетической и потенциальной энергии частиц и системы в целом определяли одновременно с вычислением амплитудно-временной реализации величины электрического дипольного момента.

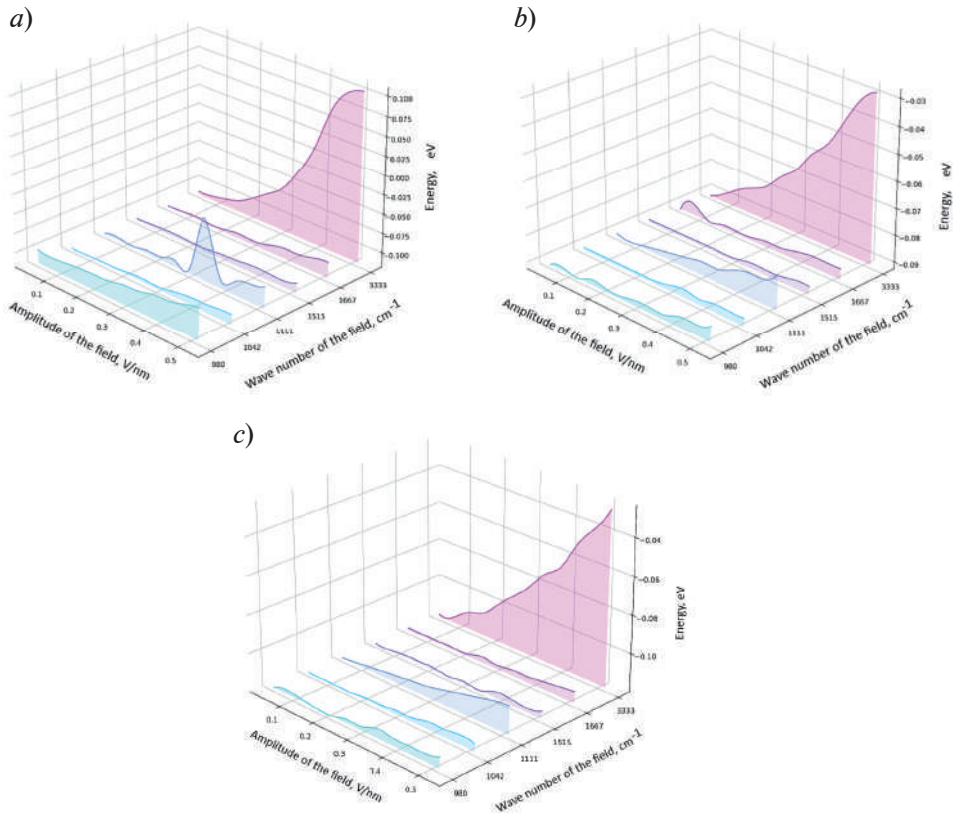


Рис. 1. Типичные характеристики потенциальной энергии молекул Ala (*a*), Gly (*b*), Trp (*c*) в водных растворах при задании растворителя алгоритмом явного растворителя. Показаны 3D-зависимости энергии от амплитуды меандра электромагнитного поля на ряде выбранных значений волновых чисел (WN). Температура была равна 298 K, шаг дискретизации по времени – 5 фс

Существенная, наиболее сильная, зависимость от амплитуды переменного электрического поля проявляется на значении волнового числа 3333 см$^{-1}$, соответствующем локализации колебаний асимметричных групп NH (Amide A) (см. рис. 1, *a*). Возможно, это связано также с преимущественной локализацией колебаний в цепях водородных связей. Энергия молекулы при резонансе зависела в большей степени от напряженности приложенного электромагнитного поля, и в меньшей степени (или почти не зависела) от длительности амплитудно-временной реализации. В области с амплитудой поля приблизительно от 0,01 до 0,50 В/нм сохранялись как практически постоянное значение потенциальной энергии во временном интервале от 0 до 510 пс для молекул Gly и Trp, так и более сложная зависимость, обусловленная, по-видимому, увеличенной боковой ветвью, – для Ala (см. рис. 1, *b*).

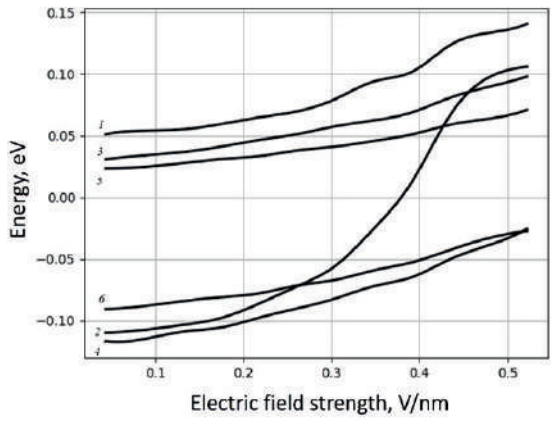


Рис. 2. Зависимости значений потенциальной и кинетической энергии молекул аминокислот дифенил-L-аланина (*1*, *2*), триптофана (*3*, *4*) и глицина (*5*, *6*) в водном растворе от амплитуды поля в момент времени $t = 500$ пс. Волновое число основной гармоники электромагнитного поля составляет 3333 см$^{-1}$

На рис. 2 представлены зависимости значений потенциальной и кинетической энергии молекул аминокислот дифенил-L-аланина, триптофана и глицина в водном растворе от амплитуды электромагнитного поля в фиксированный момент

времени t = 500 пс. Волновое число основной гармоники электромагнитного поля равно 3333 см$^{-1}$. Характерно, что имеется линейный участок нарастания энергии от предельно малых амплитуд электромагнитного поля на значении основной гармоники поля 3333 см$^{-1}$ до приблизительно 0,4 В/нм для глицина и триптофана, и 0,2 В/нм – для дифенил-L-аланина. На других характеристических частотах (например, 980 и 200 см$^{-1}$) оба вида энергии практически не зависят от амплитуды поля, что соответствует данным на рис. 1, *а*.

Выявлены смещения спектральных пиков по шкале волновых чисел при задании различий в алгоритмах локальных взаимодействий и динамики системы. В частности, виртуальные молекулярные системы различались по способу добавления воды (растворитель). Так, в систему можно было «добавлять» как неявный растворитель, так и явный (с добавлением молекул воды), т.е. использовать модель Coarse-Grained [45].

Во втором случае объем и сложность вычислений возрастают, поскольку необходимо задавать параметры и состояния молекул воды, размер водного куба и др. Для первого случая использовали метод GBIS (Generalized Born Implicit Solvent). Обобщенный неявный растворитель Борна (GBIS) – это быстрый, но приближенный метод расчета молекулярной электростатики в растворителе, описываемый уравнением Пуассона – Больцмана, которое моделирует воду как диэлектрический континуум:

$$\nabla \times \left[\varepsilon(r)\nabla\varphi(r)\right] = -\rho^{f}(r) - \sum_{i} c_i^{\infty} z_i e_0 \exp\left[\frac{-z_i e_0 \varphi(r)}{k_{\text{в}} T}\right], \qquad (2)$$

где $\varepsilon(\mathbf{r})$ – диэлектрическая проницаемость среды, φ – электрический потенциал, $\rho^{f}(\mathbf{r})$ – плотность электрического заряда в среде, c_i^{∞} – концентрация i-ого иона на бесконечности, z_i – валентность i-го иона, $k_{\text{в}}$ – постоянная Больцмана, T – температура.

Данный метод позволяет моделировать атомные структуры без включения явной воды, т.е. без добавления атомов водорода и кислорода (H и O), и не проводить для них вычисления координат. Использование неявного растворителя значительно ускоряет моделирование и значительно уменьшает размер выходных файлов (примерно 1 : 50 Гб), что выступает ключевым фактором в данном исследовании.

Молекулы аминокислот помещали в моделируемую периодическую систему с ячейкой в виде куба воды (длина его стороны составляла 70 Å и не зависела от размеров молекул аминокислот). Расстояние от крайней молекулы до границы куба составляло 15 Å. Для моделирования растворения молекул была использована модель воды TIP3W, соответствующая трем атомам молекулы воды в трех точках взаимодействия с молекулой. Подобные модели обеспечивают высокую вычислительную эффективность и применяются в многих приложениях молекулярной динамики. Кроме того, выбранная нами модель воды была также использована в силовом поле CHARMM. Разница заключалась в применении параметров Леннарда – Джонса: в отличие от модели TIP3, версия модели CHARMM присваивает указанные параметры атомам водорода в дополнение к параметрам кислорода в молекуле воды [46, 47]. Эту модель воды использовали авторы многих подобных исследований, однако смещения частоты собственных колебаний, связанные с различием алгоритмов, не были ими замечены [48, 49].

Результаты моделирования системы

На рис. 3 показаны спектральные характеристики воды в периодической системе кубических ячеек, вычисленные в данной работе при использовании алгоритма явного растворителя; для сравнения приведены известные из литературы диапазоны собственных колебаний молекул воды [50].

Спектр Фурье электрического дипольного момента молекул воды был вычислен при помощи плагина VMD IR Spectral Density Calculator, длительность амплитудно-временной реализации составляла 20 нс.

Анализ данных на рис. 3 позволяет заключить, что спектральные полосы колебаний молекул воды близки к позициям спектральных пиков собственных колебаний биомолекул [20, 30, 31, 33]. Спектральные резонансные эффекты вынужденных колебаний во внешнем электромагнитном поле, выявленные в интегральных электрических дипольных моментах ансамблей олигомеров, по энергетическим характеристикам подобны наблюдаемым в единичных молекулах аминокислот, приведенным в статьях [20, 33], а также в димерах, тримерах и других пептидах [51, 52].

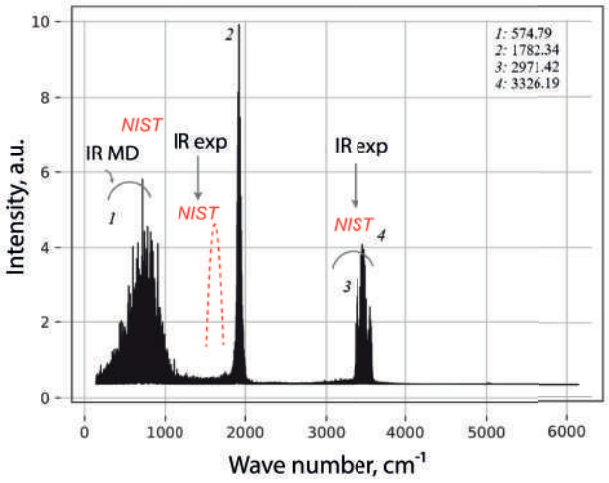


Рис. 3. Спектры Фурье амплитудно-временной реализации электрического дипольного момента молекул воды: IR MD – результат вычисления с помощью плагина VMD IR Spectral Density Calculator (t = 1 нс, f_D = 200 ТГц); IR exp NIST – экспериментальный результат по базе данных NIST (Национального института стандартов и технологий) [48].
Волновые числа (см$^{-1}$) спектральных колебательных полос *1 – 4* представлены в легенде

Фурье-спектры полос собственных внутримолекулярных колебаний олигомеров polyAlaN были качественно взаимно подобны при разных значениях N (N = 1, 2, ..., 18) и количества p (p = 1, 2, ..., 10) таких олигомеров в водном кубе, но при этом они содержали ряд количественных особенностей. Типичные обзорные и оконные (фрагментарные) спектры собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla12 при длительности амплитудно-временной реализации 2 нс, длительности времени реализации 510 пс и шаге дискретизации по времени 5 фс (температура равна 298 K), представлены на рис. 4.

Сравнение обзорных Фурье-спектров собственных колебаний единичных олигомеров polyAla12 (p = 1) и их группы при p = 10 (см. рис. 4) показывает, что состав спектральных компонент практически одинаков. Прослеживается смена спектральных составляющих при увеличении количества олигомеров: переход от структуры двух пиков в центре на волновых числах 3313,5 и 3358,1 см$^{-1}$ к структуре, состоящей из двух пиков на 3277 и 3394,4 см$^{-1}$. По-видимому, этот факт указывает на диполь-дипольное взаимодействие олигомеров в группе частиц. Аналогичная эволюция спектральных составляющих воспроизводилась и при других значениях параметров N и p. Анализ типичных фрагментов обзорного спектра частот, или оконных спектров собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента ансамбля олигомеров polyAla12 (см. рис. 4), приводит к предположению, что наблюдаемые в них различия обусловлены эффектами взаимной фононной связи локальных колебаний, а также групповыми механизмами формирования спектральных компонент в ансамбле молекул.

Нами были вычислены Фурье-спектры вынужденных колебаний интегрального ЭДМ олигомеров polyAla18 при p = 1 и длительности амплитудно-временной реализации, равной 2 нс при воздействии внешнего электромагнитного поля в виде симметричного прямоугольного меандра. Амплитуду меандра изменяли на два порядка в пределах от 0,004 до 0,400 В/нм, соответствующих локальным атомным полям в пределах молекулы. На разных частотах колебаний основные гармоники в спектре при изменении параметров воздействия показали практически одинаковые сценарии и закономерности. Типичные обзорные спектры вынужденных колебаний интегрального ЭДМ ансамбля олигомеров polyAla18 при p = 1, длительности амплитудно-временной реализации, равной 2 нс, при воздействии внешнего поля в виде симметричного прямоугольного меандра с амплитудой размаха 0,4 В/нм на разных волновых числах основной гармоники представлены на рис. 5.

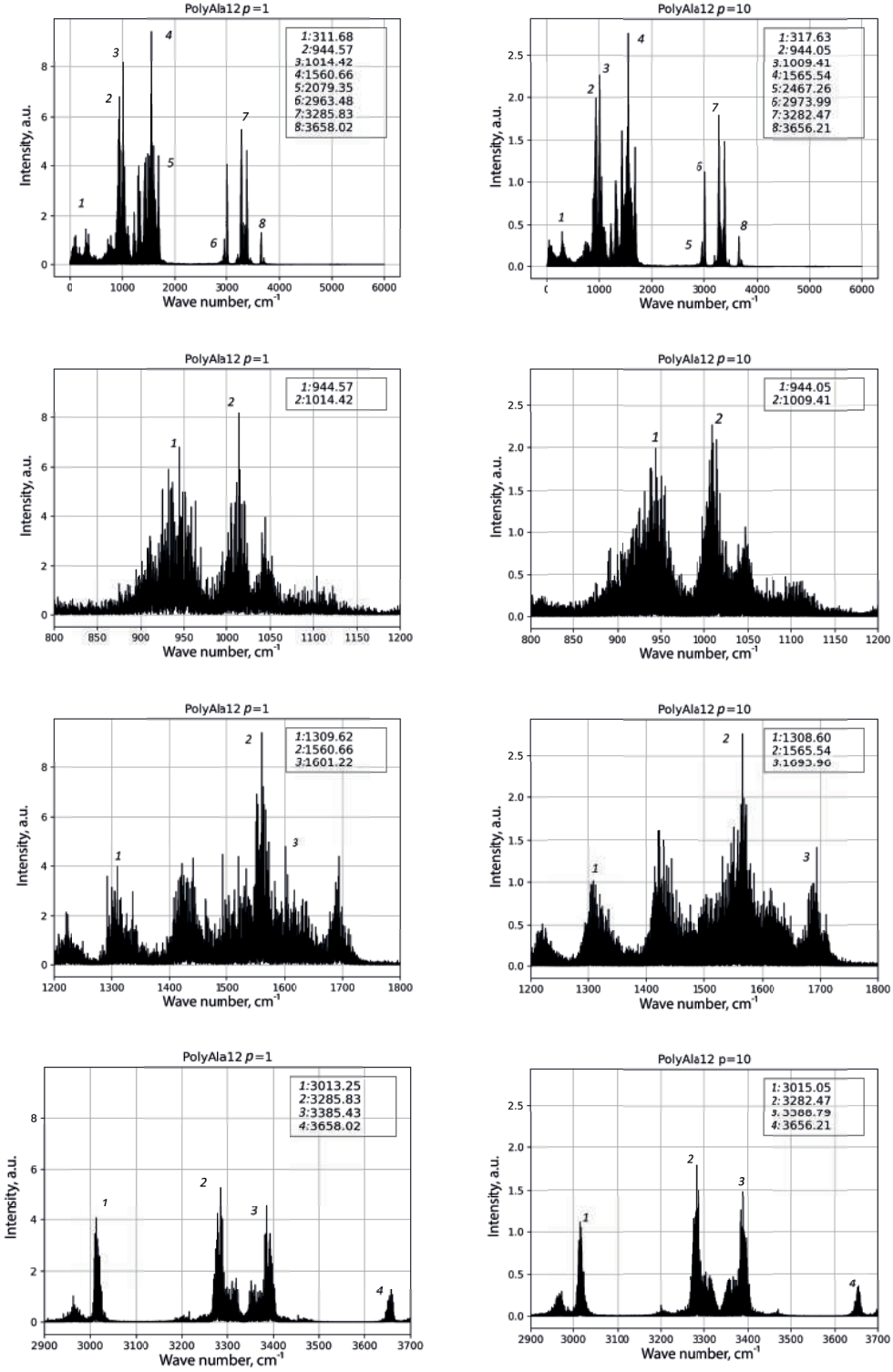
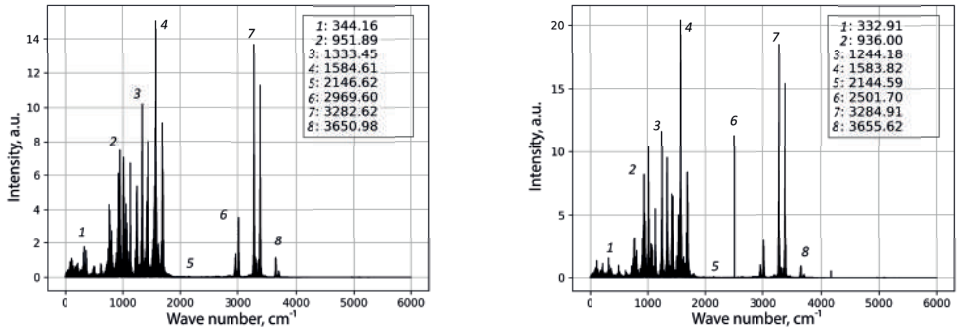


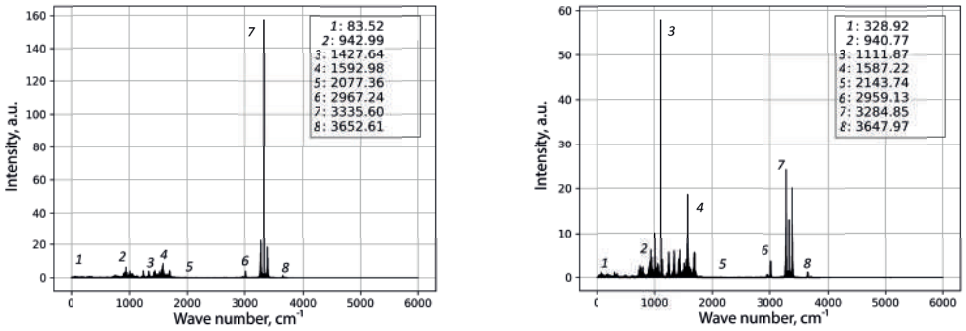
Рис. 4. Типичные фрагменты из обзорного спектра волновых чисел (оконные спектры) собственных внутримолекулярных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla12 при различных значениях количества олигомеров *p*.

Волновые числа ($см^{-1}$) спектральных колебательных полос представлены в легендах

a) WN = 5555 cm^{-1} *b*) WN = 4167 cm^{-1}



c) WN = 3333 cm^{-1} *d*) WN = 1111 cm^{-1}



e) WN = 1042cm^{-1} *f*) WN = 980cm^{-1}

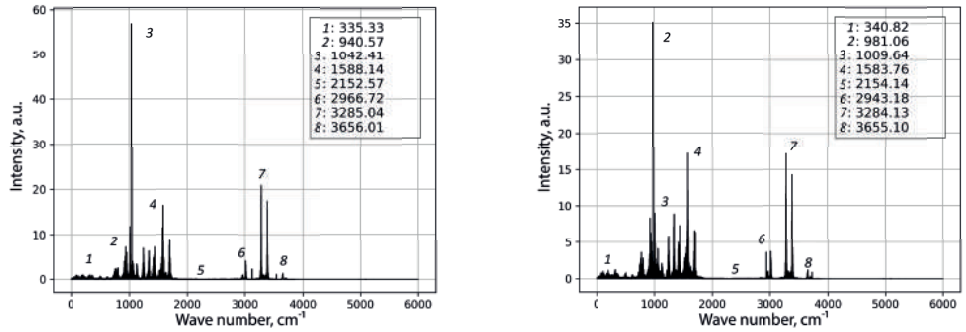


Рис. 5. Фурье-спектры вынужденных колебаний интегрального электрического дипольного момента олигомеров polyAla18 (p = 1, длительность амплитудно-временной реализации − 2 нс) при воздействии внешнего электромагнитного поля в виде симметричного прямоугольного меандра с амплитудой размаха 0,4 В/нм при разных значениях волнового числа (WN) основной гармоники

Аналогичные спектры с подобными характеристиками получены при меньших полях в интервале 0,01 − 0,400 В/нм для всех трех форм задания электромагнитного поля.

Сопоставление спектров вынужденных (см. рис. 5) и собственных колебаний показало, что воздействие поля на значениях волновых чисел 5555 и 4167 $см^{-1}$, а также других в области, лежащей выше частот собственных локальных колебаний, не вызывают заметной перестройки спектральных составляющих олигомеров при разных значениях N (N = 1, 2, ..., 18). При совпадении частоты воздействия, например при значениях волновых чисел (в $см^{-1}$) 3333, 1111, 1042 и 980, и частоты собственного локального колебания выявляется сильная амплитудная перестройка по типу резонансной накачки вынужденных колебаний (см. рис. 4). Причинами такого результата, скорее всего,

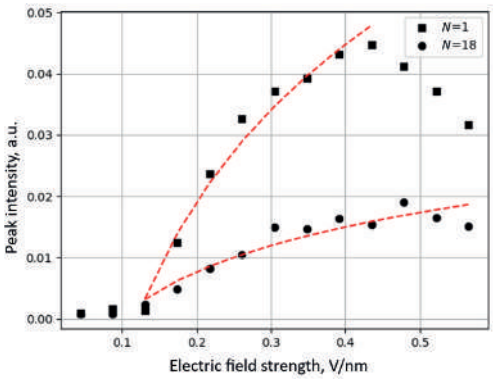


Рис. 6. Зависимости значений резонансных пиков молекул polyAlaN при $N = 1$ и $N = 18$, $p = 1$, от амплитуды напряженности электромагнитного поля при воздействии его меандра и значении волнового числа основной гармоники WN = 3333 см$^{-1}$

являются соответствующие изменения конформационной структуры и значений интегрального ЭДМ. Действительно, полученные частотные зависимости значений интегрального ЭДМ (усредненных за время амплитудно-временной реализации) олигомеров polyAla18 при различных значениях параметра p для электрического поля с амплитудой $E = 0{,}4$ В/нм не противоречили этому предположению.

На рис. 6 приведены зависимости максимальных значений резонансных спектральных полос молекул polyAlaN при $N = 1$, $N = 18$ и $p = 1$, от значений амплитуды напряженности электромагнитного поля при воздействии меандра на волновом числе основной гармоники 3333 см$^{-1}$. Выявлен участок почти линейной связи между

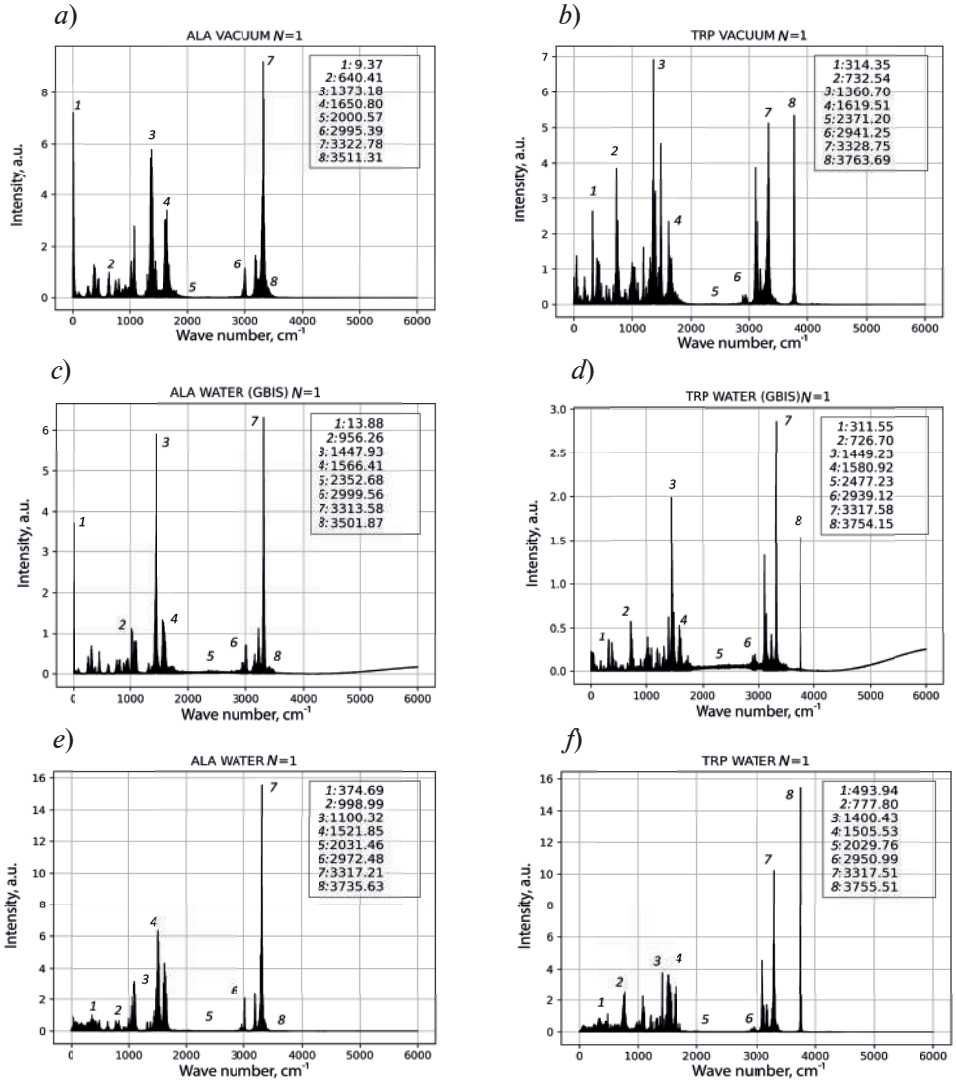


Рис. 7. Промоделированные спектральные характеристики амплитудно-временной реализации электрического дипольного момента молекул Ala и Trp (при $t = 1$ нс) в разных средах: Ala в вакууме (*a*); Trp в вакууме (*b*); Ala GBIS (*c*); Trp GBIS (*d*); Ala в явном водном растворителе (*e*); Trp в явном водном растворителе (*f*)

амплитудами резонансов и предельно малыми значениями амплитуды электромагнитного поля. Этот участок простирается вплоть до максимальных значений резонансных спектральных полос, когда величина поля составляет примерно 0,4 В/нм, что соответствует известным результатам других работ [53, 54].

Для разных частот воздействия поля, амплитуда спектральных линий либо почти не изменялась подобным образом, либо нарастала линейно при повышении поля в указанном интервале.

На рис. 7 представлены спектральные характеристики амплитудно-временной реализации электрических дипольных моментов молекул Ala и Trp при моделировании системы для условий вакуума и различных моделей воды-растворителя. Выявленные различия в спектральных характеристиках, обсуждаемые далее, позволили сформулировать и обосновать некоторые существенные дополнения к описанию колебательных свойств молекул.

Обсуждение полученных результатов

Представленные результаты позволяют проанализировать динамические свойства рассмотренного ряда олигомеров в ИК-диапазоне. Сравнение обзорных Фурье-спектров собственных колебаний единичных олигомеров и их групп показало, что состав спектральных компонент при различных значениях параметров N и p практически совпадает. Эффекты вынужденных колебаний во внешних электромагнитных полях различной формы, в том числе гармонических и импульсных периодических, выявленные в интегральных электрических дипольных моментах ансамблей олигомеров, по энергетическим и спектральным характеристикам оказались подобными наблюдаемым в единичных молекулах аминокислот.

При рассмотрении типичных фрагментов обзорного спектра частот (оконных спектров) собственных колебаний интегрального электрического дипольного момента ансамбля олигомеров выявляется эффект близости осцилляторов по частоте, а также осцилляторов электромагнитных полей по частоте. На этом основании можно предположить, что в них имеют место эффекты взаимосвязи локальных колебаний; такая связь, скорее всего, обусловлена фононными взаимодействиями, при этом происходит групповое формирование спектральных компонент. При увеличении размера олигомера совершалось перераспределение компонент частотного спектра: переход от структуры двух пиков в центре (при значениях волновых чисел 3313,5 и 3358,1 $см^{-1}$) к структуре, состоящей также из двух пиков – 3277 и 3394,4 $см^{-1}$. Аналогичная эволюция спектральных составляющих воспроизводилась и при других значениях размера N. На наш взгляд, такой эффект вызван Ферми-резонансом второй гармоники колебаний на 1565,7 и 1695,5 $см^{-1}$, имеющихся в спектре, с резонансным колебанием при 3333 $см^{-1}$, которое нам удалось выявить через воздействие внешнего электромагнитного поля.

Для единичной молекулы не наблюдалось существенных изменений интегрального ЭДМ при воздействии внешнего электромагнитного поля в режиме вынужденных локальных колебаний, что указывает, по всей вероятности, на устойчивость конформации единичного олигомера при возбуждении в нем локальных, а не коллективных колебаний. Однако существенные изменения появляются при бóльших значениях количества олигомеров в ансамбле частиц, когда параметр $p = 3$, 4 и 5. В этом случае возможны, по-видимому, эффекты воздействия внешнего электромагнитного поля на межмолекулярные колебания и силовые диполь-дипольные взаимодействия.

При моделировании впервые выявлено различие зависимостей резонансных пиков молекул polyAlaN при значениях $N = 1$ и $N = 18$, от напряженности электромагнитного поля при воздействии меандра при волновом числе основной гармоники 3333 $см^{-1}$ (см. рис. 5). Резонансное возрастание электрического дипольного момента происходит значительно интенсивнее для единичной молекулы (см. рис. 1), чем для олигомера, конформация и интегральная энергия которого оказываются стабильнее по отношению к возбуждению внутримолекулярных локальных осцилляторов.

Заключение

В работе впервые осуществлено суперкомпьютерное молекулярно-динамическое моделирование олигомеров ряда аминокислот в электромагнитных полях ИК-диапазона. Реализованные суперкомпьютерные методы такого рода целесообразно использовать

в области нанобиотехнологий и микроэлектроники со встроенными биомолекулярными компонентами, среди которых важное место занимают олигомеры аминокислот. Применение методики доказало свою довольно высокую и надежную эффективность; оно обеспечило получение новых результатов, которые непротиворечиво дополняют известные теоретические и экспериментальные данные. Использование трех разных видов амплитудной модуляции воздействующего электромагнитного поля (гармоническая, периодическая последовательность однополярных прямоугольных импульсов, симметричный прямоугольный меандр) позволило сформировать основы дальнейшего практического рассмотрения, а также создать условия контроля ангармоничности в широкой полосе частот среднего и дальнего ИК-диапазонов.

Применяемая методика позволила сравнивать спектры частот собственных колебаний молекул как в воде, так и без водной среды, а также выявлять общие свойства и особенности. Добавление воды (виртуальное) приводило к положительным сдвигам частот в пределах нескольких процентов, т.е. смещению значений энергии колебаний в целом в сторону увеличения. Вероятно, природа такой трансформации обусловлена особенностями спектра собственных колебаний молекул воды, нелинейные связи которых возникали одновременно с локальными осцилляторами молекул.

Для олигомеров нами впервые выявлен комплекс характеристик как собственных внутримолекулярных локальных колебаний (нормальных мод), так и вынужденных колебаний в дальнем и среднем ИК-диапазонах. Интерпретация полученных закономерностей позволила предложить непротиворечивую модель физики молекул, включающую взаимные фононные связи локальных осцилляторов, удовлетворяющую фундаментальным физическим представлениям о внутримолекулярной и межмолекулярной динамике групп биомолекул.

Полученные результаты можно использовать для определения функциональных свойств дегидратированных биомолекулярных пленок, применяемых в биофизике, нанобиотехнологии и микроэлектронике, например при разработке и поиске прототипов биоэлектронных и гетерогенных гибридных микроэлектронных приборов с встроенными биомолекулярными компонентами [55].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ruan X., Ruan X., Huang H.** Application of terahertz spectroscopy in medical microbiological detection // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2425. No. 1. P. 012045.

2. **Turton D. A., Senn H. M., Harwood T., Lapthorn A. J., Ellis E. M., Wynne K.** Terahertz underdamped vibrational motion governs protein-ligand binding in solution // Nature Communications. 2014. Vol. 5. 03 June. P. 3999.

3. **Noble B. B., Todorova N., Yarovsky I.** Electromagnetic bioeffects: a multiscale molecular simulation perspective // Physical Chemistry Chemical Physics. 2022. Vol. 24. No. 11. Pp. 6327–6348.

4. **Woods K. N.** Solvent-induced backbone fluctuations and the collective librational dynamics of lysozyme studied by terahertz spectroscopy // Physical Review E. 2010. Vol. 81. No. 3. P. 031915.

5. **Niehues G., Heyden M., Schmidt D. A., Havenith M.** Exploring hydrophobicity by THz absorption spectroscopy of solvated amino acids // Faraday Discussions. 2011. Vol. 150. 23 May. Pp. 193–207.

6. **Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H.** Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment // Optics Express. 2020. Vol. 28. No. 3. Pp. 3854–3863.

7. **Grechko M., Hasegawa T., D'Angelo F., Ito H., Turchinovich D., Nagata Y., Bonn M.** Coupling between intra- and intermolecular motions in liquid water revealed by two-dimensional terahertz-infrared-visible spectroscopy // Nature Communications. 2018. Vol. 9. No. 1. P. 885.

8. **Xu J., Galan J., Ramian G., Savvidis P., Scopatz A., Birge R. R., Allen S. J., Plaxco K.** Terahertz circular dichroism spectroscopy of biomolecules // Edited by Jensen J. O., Theriault J.-M. Proceedings SPIE. 2004. Vol. 5268. Chemical and Biological Standoff Detection. 27 February. Pp. 19–26.

9. **Beyer C., Christen P., Jelesarov I., Fröhlichet J.** Real-time assessment of possible electromagnetic-field-induced changesin protein conformationand thermal stability // Bioelectromagnetics. 2014. Vol. 35. No. 7. Pp. 470–478.

10. **Calabrò E., Magazù S.** Resonant interaction between electromagnetic fields and proteins: A possible starting point for the treatment of cancer // Electromagnetic Biology and Medicine. 2018. Vol. 37. No. 3. Pp. 155–168.

11. **Harvey A.** The interaction between electromagnetic fields at megahertz, gigahertz and terahertz frequencies with cells, tissues and organisms: Risks and potential // Journal of the Royal Society, Interface. 2017. Vol. 14. P. 0585

12. **Wu H., Ghaani M. R., Futera Z., English N. J.** Effects of externally applied electric fields on the manipulation of solvated-chignolin folding: Static- versus alternating-field dichotomy at play // The Journal of Physical Chemistry B. 2022. Vol. 126. No. 2. Pp. 376–386.

13. **Vaden T. D., de Boer T. S. J. A., Simons J. P., Snoek L. C., Suhai S., Paizs B.** Vibrational spectroscopy and conformational structure of protonated polyalanine peptides isolated in the gas phase // The Journal of Physical Chemistry A. 2008. Vol. 112. No. 20. Pp. 4608–4616.

14. **Matsunaga Y., Koike R., Ota M., Tame J. R. H., Kidera A.** Influence of structural symmetry on protein dynamics // PLoS One. 2012. Vol. 7. No. 11. P. e50011.

15. **Wako H., Endo S.** Dynamic properties of oligomers that characterize low-frequency normal modes // Biophysics and Physicobiology. 2019. Vol. 16. November 29. Pp. 220–231.

16. **Husseini F. S., Robinson D., Hunt N. T., Parker A. W., Hirst J. D.** Computing infrared spectra of proteins using the exciton model // Journal of Computational Chemistry. 2017. Vol. 38. No. 16. Pp. 1362–1375.

17. **Schultheis V., Reichold R., Schropp B., Tavan P.** A polarizable force field for computing the infrared spectra of the polypeptide backbone // The Journal of Physical Chemistry B. 2008. Vol. 112. No. 39. Pp. 12217–12230.

18. **Narayan B., Herbert C., Rodriguez B. J., Brooks B. R., Buchete N.-V.** Replica exchange molecular dynamics of diphenylalanine amyloid peptides in electric fields // The Journal of Physical Chemistry B. 2021. Vol. 125. No. 20. Pp. 5233–5242.

19. **Bradshaw R. T., Dziedzic J., Skylaris Ch.-K., Essex J. W.** The role of electrostatics in enzymes: Do biomolecular force fields reflect protein electric fields? // Journal of Chemical Information and Modeling. 2020. Vol. 60. No. 6. Pp. 3131–3144.

20. **Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю.** Суперкомпьютерное моделирование внутримолекулярных колебаний глицина, дифенилаланина и триптофана в электрическом поле терагерцового и инфракрасного диапазонов // Биофизика. 2024. Т. 69. № 2. С. 213–229.

21. **Wolpert M., Hellwig P.** Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm^{-1} // Spectrochimica Acta A.: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2006. Vol. 64. No. 4. Pp. 987–1001.

22. **Barth A.** Infrared spectroscopy of proteins // Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics. 2007. Vol. 1767. No. 9. Pp. 1073–1101.

23. **Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H.-W.** Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory // Zhang C., Zhang Xi-Ch., Nani M. (Eds.) Proceedings of SPI. Vol. 9275. Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III. Conference: SPIE/COS Photonics Asia 2014. 11 November, Beijing, P. 92750D.

24. **Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S.** A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant // Journal of the American Society for Mass Spectrometry. 2006. Vol. 17. No. 12. Pp. 1749–1757.

25. **Baranov M. A., Shariaty F., Tsybin O. Y.** Dynamics of glycine, diphenylalanine, and tryptophan oligomers: Computer simulation in an IR electric field with different forms and polarization // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 2026. Vol. 44. No. 5. Pp. 2651–2658.

26. **Barth A.** The infrared absorption of amino acid side chains // Progress in Biophysics and Molecular Biology. 2000. Vol. 74. No. 3–5. Pp. 141–173.

27. **Barth A., Zscherp C.** What vibrations tell us about proteins // Quarterly Reviews of Biophysics. 2002. Vol. 35. No. 4. Pp. 369–430.

28. **Бутырская Е. В., Нечаева Л. С., Шапошник В. А., Дроздова В. И.** Отнесение полос в ИК спектрах водных растворов глицина на основе квантовохимического расчета // Сорбционные и хроматографические процессы. 2012. Т. 12. № 4. С. 501–512.

29. **Редьков А. В., Осипов А. В. Кукушкин С. А.** Моделирование процесса индентирования наномасштабных пленок на подложках методом молекулярной динамики // Письма в Журнал технической физики. 2016. Т. 42. № 12. С. 64–72.

30. **Непомнящая Э. К., Баранов М. А., Цыбин О. Ю.** Компьютерная резонансная динамика молекулы глицина в электрическом поле инфракрасного диапазона // Письма в Журнал технической физики. 2023. Т. 49. № 7. С. 8–11.

31. **Баранов М. А., Непомнящая Э. К., Цыбин О. Ю.** Фурье-спектр интегрального дипольного момента суперкомпьютерных моделей ряда аминокислот // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 4. С. 55–68.

32. **Баранов М. А., Цыбин О. Ю., Величко Е. Н.** Компьютерный анализ релаксации свободной энергии молекул глицина, триптофана и альбумина в ионизованном водном растворе // Научно-технические ведомости СПбПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 4. С. 135–146.

33. **Баранов М. А., Карсеева Э. К., Цыбин О. Ю.** Суперкомпьютерные динамические модели глицина, триптофана и дифенилаланина в электрических полях терагерцового и инфракрасного спектральных диапазонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 59–72.

34. **Goodsell D. S., Olson A. J.** Structural symmetry and protein function // Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure. 2000. Vol. 29. No. 1. Pp. 105–153.

35. **Bahar I., Lezon T. R., Bakan A., Shrivastava I. H.** Normal mode analysis of biomolecular structures: Functional mechanisms of membrane proteins // Chemical Review. 2010. Vol. 110. No. 3. Pp. 1463–1497.

36. **Faridoddin S., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.** Structure of biomolecular films through advanced imaging and statistical analysis // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2024. Vol. 702. Part 1. 5 December. P. 134920.

37. **Компан М. Е., Баранов М. А., Малышкин В. Г., Цыбин О. Ю.** Спектры комбинационного рассеяния в диапазоне 75 – 1200 $см^{-1}$ аминокислот L-триптофана, дифенил-L-аланина и глицина в водном растворе и в гидратированных пленках // Физика твердого тела. 2024. Т. 66. № 8. С. 1445–1449.

38. **Löffler G., Schreiber H., Steinhauser O.** Calculation of the dielectric properties of a protein and its solvent: Theory and a case study // Journal of Molecular Biology. 1997. Vol. 270. No. 3. Pp. 520–534.

39. **Baranov M., Tsybin O.** Supercomputer simulation of amino acid molecules high-frequency polarizability in THz electric field // Proceedings of the 2023 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), 19–20 October 2023. St. Petersburg, Russian Federation. IEEE, 2023. Pp. 261–264.

40. **Karplus M.** Molecular dynamics simulations of biomolecules // Accounts of Chemical Research. 2002. Vol. 35. No. 6. Pp. 321–323.

41. **Ruiz M. P., Aragonès A. C., Camarero N., Vilhena J. G., Ortega M., Zotti L. A., Pérez R., Cuevas J. C., Gorostiza P., Díez-Pérez I.** Bioengineering a single-protein junction // Journal of the American Chemical Society. 2017. Vol. 139. No. 43. Pp. 15337–15346.

42. **Reimann K., Woerner M., Elsaesser T.** Two-dimensional terahertz spectroscopy of condensed-phase molecular systems // The Journal of Chemical Physics. 2021. Vol. 154. No. 12. P. 120901.

43. **Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A.** Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide // Journal of Computational Chemistry. 2012. Vol. 33. No. 9. Pp. 917–923.

44. **Kelly C. M., Northey T., Ryan K., Brooks B. R., Kholkin A. L., Rodriguez B. J., Buchete N.-V.** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field // Biophysical Chemistry. 2015. Vol. 196. January. Pp. 16–24.

45. **Hadley K. R., McCabe C.** Coarse-grained molecular models of water: A review // Molecular Simulation. 2012. Vol. 38. No. 8–9. Pp. 671–681.

46. **Mao Y., Zhang Y.** Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models // Chemical Physics Letters. 2012. Vol. 542. 23 July. Pp. 37–41.

47. **MacKerell, Ir., A. D., Bashford D., Bellott M., et al.** All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins // The Journal of Physical Chemistry B. 1998. Vol. 102. No. 18. Pp. 3586–3616.

48. **Linstrom P. J., Mallard W. G.** NIST standard reference database number 69 // NIST (National Institute of Standards and Technologies) Chemistry WebBook. 2005. Vol. 1227. No. 69. P. 20899.

49. **Feng J.-Y., Lee Y.-P., Zhu Ch.-Y., Hsu P.-J., Kuo J.-L., Ebata T.** IR–VUV spectroscopy of pyridine dimers, trimers and pyridine – ammonia complexes in a supersonic jet // Physical Chemistry Chemical Physics. 2020. Vol. 22. No. 37. Pp. 21520–21534.

50. **Zhang B., Yu Y., Zhang Zh., et al.** Infrared spectroscopy of neutral water dimer based on a tunable vacuum ultraviolet free electron laser // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2020. Vol. 11. No. 3. Pp. 851–855.

51. **Баранов М. А., Карсеева Е. К., Цыбин О. Ю.** Прототипы приборов гетерогенной гибридной полупроводниковой электроники с встроенным биомолекулярным доменом // Микроэлектроника. 2023. Т. 52. № 6. Р. 497–507.

REFERENCES

1. **Ruan X., Ruan X., Huang H.,** Application of terahertz spectroscopy in medical microbiological detection, J. Phys. Conf. Ser. 2425 (1) 012045.

2. **Turton D. A., Senn H. M., Harwood T., et al.,** Terahertz underdamped vibrational motion governs protein-ligand binding in solution, Nat. Commun. 5 (03 Jun) (2014) 3999.

3. **Noble B. B., Todorova N., Yarovsky I.,** Electromagnetic bioeffects: A multiscale molecular simulation perspective, Phys. Chem. Chem. Phys. 24 (11) (2022) 6327–6348.

4. **Woods K. N.,** Solvent-induced backbone fluctuations and the collective librational dynamics of lysozyme studied by terahertz spectroscopy, Phys. Rev. E. 81 (3) (2010) 031915.

5. **Niehues G., Heyden M., Schmidt D. A., Havenith M.,** Exploring hydrophobicity by THz absorption spectroscopy of solvated amino acids, Faraday Discuss. 150 (23 May) (2011) 193–207.

6. **Jeong S.-Y., Cheon H., Lee D., Son J.-H.,** Determining terahertz resonant peaks of biomolecules in aqueous environment, Opt. Express. 28 (3) (2020) 3854–3863.

7. **Grechko M., Hasegawa T., D'Angelo F., et al.,** Coupling between intra- and intermolecular motions in liquid water revealed by two-dimensional terahertz-infrared-visible spectroscopy, Nat. Commun. 9 (1) (2018) 885.

8. **Xu J., Galan J., Ramian G., et al.,** Terahertz circular dichroism spectroscopy of biomolecules, In book: Jensen J. O., Theriault J.-M. (Eds.) Proc. SPIE. Vol. 5268: Chemical and Biological Standoff Detection. (27 Febr) (2004) 19–26.

9. **Beyer C., Christen P., Jelesarov I., Fröhlichet J.,** Real-time assessment of possible electromagnetic-field-induced changesin protein conformation and thermal stability, Bioelectromagnetics. 35 (7) (2014) 470–478.

10. **Calabrò E., Magazù S.,** Resonant interaction between electromagnetic fields and proteins: A possible starting point for the treatment of cancer, Electromagn. Biol. Med. 37 (3) (2018) 155–168.

11. **Harvey A.,** The interaction between electromagnetic fields at megahertz, gigahertz and terahertz frequencies with cells, tissues and organisms: Risks and potential, J. R. Soc. Interface. 14 (2017) 0585.

12. **Wu H., Ghaani M. R., Futera Z., English N. J.,** Effects of externally applied electric fields on the manipulation of solvated-chignolin folding: Static- versus alternating-field dichotomy at play, J. Phys. Chem. B. 126 (2) (2022) 376–386.

13. **Vaden T. D., de Boer T. S. J. A., Simons J. P., et al.,** Vibrational spectroscopy and conformational structure of protonated polyalanine peptides isolated in the gas phase, J. Phys. Chem. A. 112 (20) (2008) 4608–4616.

14. **Matsunaga Y., Koike R., Ota M., et al.,** Influence of structural symmetry on protein dynamics, PLoS One. 7 (11) (2012) e50011.

15. **Wako H., Endo S.,** Dynamic properties of oligomers that characterize low-frequency normal modes, Biophys. Physicobiol. 16 (Nov 29) (2019) 220–231.

16. **Husseini F. S., Robinson D., Hunt N. T., et al.,** Computing infrared spectra of proteins using the exciton model, J. Comput. Chem. 38 (16) (2017) 1362–1375.

17. **Schultheis V., Reichold R., Schropp B., Tavan P.,** A polarizable force field for computing the infrared spectra of the polypeptide backbone, J. Phys. Chem. B. 112 (39) (2008) 12217–12230.

18. **Narayan B., Herbert C., Rodriguez B. J., et al.,** Replica exchange molecular dynamics of diphenylalanine amyloid peptides in electric fields, J. Phys. Chem. B. 125 (20) (2021) 5233–5242.

19. **Bradshaw R. T., Dziedzic J., Skylaris Ch.-K., Essex J. W.,** The role of electrostatics in enzymes: Do biomolecular force fields reflect protein electric fields? J. Chem. Inf. Model. 60 (6) (2020) 3131–3144.

20. **Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Supercomputer simulation of intramolecular oscillations of glycine, diphenylalanine, and tryptophan in an electric field of the terahertz and infrared ranges, Biophysics. 69 (2) (2024) 179–194.

21. **Wolpert M., Hellwig P.,** Infrared spectra and molar absorption coefficients of the 20 alpha amino acids in aqueous solutions in the spectral range from 1800 to 500 cm^{-1}, Spectrochim. Acta A.: Mol. Biomol. Spectrosc. 64 (4) (2006) 987–1001.

22. **Barth A.,** Infrared spectroscopy of proteins, Biochim. Biophys. Acta Bioenerg. 1767 (9) (2007) 1073–1101.

23. **Zhang F., Tominaga K., Hayashi M., Wang H.-W.,** Low-frequency vibration study of amino acids using terahertz spectroscopy and solid-state density functional theory, In book: Zhang C., Zhang Xi-Ch., Nani M. (Eds.) Proc. SPI. Vol. 9275, Infrared, Millimeter-Wave, and Terahertz Technologies III; Conf.: SPIE/COS Photonics Asia 2014, 11 Nov., Beijing, P. 92750D.

24. **Moon J. H., Oh J. Y., Kim M. S.,** A systematic and efficient method to estimate the vibrational frequencies of linear peptide and protein ions with any amino acid sequence for the calculation of Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus rate constant, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 17 (12) (2006) 1749–1757.

25. **Baranov M. A., Shariaty F., Tsybin O. Y.,** Dynamics of glycine, diphenylalanine, and tryptophan oligomers: Computer simulation in an IR electric field with different forms and polarization, J. Biomol. Struct. Dyn. 44 (5) (2026) 2651–2658.

26. **Barth A.,** The infrared absorption of amino acid side chains, Progr. Biophys. Mol. Biol. 74 (3–5) (2000) 141–173.

27. **Barth A., Zscherp C.,** What vibrations tell us about proteins, Q. Rev. Biophys. 35 (4) (2002) 369–430.

28. **Butyrskaya E. V., Nechaeva L. S., Shaposhnik V. A., Drozdova E. I.,** The assignment of the bands in IR spectra of aqueous solutions of glycine on the basis of quantum-chemical calculations, Sorbtsionnyye i Khromatograficheskiye Protsessy [Sorption & Chromatographic Processes]. 12 (4) (2012) 501–512 (in Russian).

29. **Redkov A. V., Osipov A. V., Kukushkin S. A.,** Molecular dynamics simulation of the indentation of nanoscale films on a substrate, Tech. Phys. Lett. 42 (6) (2016) 639–643.

30. **Nepomnyashchaya E. K., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.,** Computer resonance dynamics of a glycine molecule in an infrared electric field, Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki. 49 (7) (2023) 8–11 (in Russian).

31. **Baranov M. A., Nepomnyashchaya E. K., Tsybin O. Yu.,** Fourier spectrum of the integral dipole moment of a number of amino acids supercomputer models, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (4) (2022) 55–68 (in Russian).

32. **Baranov M. A., Tsybin O. Yu., Velichko E. N.,** Free energy relaxation of glycine, tryptophan and albumin molecules in the ionized aqueous solution: Computer analysis, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (4) (2021) 135–146 (in Russian).

33. **Baranov M. A., Karseyeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Supercomputer dynamical models of glycine, tryptophan and diphenyl-L-alanine in the electrical fields of terahertz and infrared spectral ranges, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 59–72 (in Russian).

34. **Goodsell D. S., Olson A. J.,** Structural symmetry and protein function, Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct. 29 (1) (2000) 105–153.

35. **Bahar I., Lezon T. R., Bakan A., Shrivastava I. H.,** Normal mode analysis of biomolecular structures: Functional mechanisms of membrane proteins, Chem. Rev. 110 (3) (2010) 1463–1497.

36. **Faridoddin S., Baranov M. A., Tsybin O. Yu.,** Structure of biomolecular films through advanced imaging and statistical analysis, Colloids Surf. A. Physicoch. Eng. Asp. 702 (P. 1– 5 Dec) (2024) 134920.

37. **Kompan M. E., Baranov M. A., Malyshkin V. G., Tsybin O. Yu.,** Raman spectra in range 75 – 1200 cm^{-1} of amino acids L-tryptophan, diphenyl-L-alanine and glycine in aqueous solution and in dehydrated films, Phys. Solid State. 66 (8) (2024) 1445–1449 (in Russian).

38. **Löffler G., Schreiber H., Steinhauser O.,** Calculation of the dielectric properties of a protein and its solvent: Theory and a case study, J. Mol. Biol. 270 (3) (1997) 520–534.

39. **Baranov M., Tsybin O.,** Supercomputer simulation of amino acid molecules high-frequency polarizability in THz electric field, Proc. 2023 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), 19–20 Oct., 2023, St. Petersburg, Russian Federation, IEEE (2023) 261–264.

40. **Karplus M.,** Molecular dynamics simulations of biomolecules, Acc. Chem. Res. 35 (6) (2002) 321–323.

41. **Ruiz M. P., Aragonès A. C., Camarero N., et al.,** Bioengineering a single-protein junction, J. Am. Chem. Soc. 139 (43) (2017) 15337–15346.

42. **Reimann K., Woerner M., Elsaesser T.,** Two-dimensional terahertz spectroscopy of condensed-phase molecular systems, J. Chem. Phys. 154 (12) (2021) 120901.

43. **Solomentsev G. Y., English N. J., Mooney D. A.,** Effects of external electromagnetic fields on the conformational sampling of a short alanine peptide, J. Comput. Chem. 33 (9) (2012) 917–923.

44. **Kelly C. M., Northey T., Ryan K., et al.,** Conformational dynamics and aggregation behavior of piezoelectric diphenylalanine peptides in an external electric field, Biophys. Chem. 196 (Jan) (2015) 16–24.

45. **Hadley K. R., McCabe C.,** Coarse-grained molecular models of water: A review, Mol. Simul. 38 (8–9) (2012) 671–681.

46. **Mao Y., Zhang Y.,** Thermal conductivity, shear viscosity and specific heat of rigid water models, Chem. Phys. Lett. 542 (23 Jul) (2012) 37–41.

47. **MacKerell, Ir., A. D., Bashford D., Bellott M., et al.,** All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins, J. Phys. Chem. B. 102 (18) (1998) 3586–3616.

48. **Linstrom P. J., Mallard W. G.,** NIST standard reference database number 69, NIST (National Institute of Standards and Technologies) Chemistry WebBook. Vol. 1227. No. 69 (2005.) 20899.

49. **Feng J.-Y., Lee Y.-P., Zhu Ch.-Y., et al.,** IR–VUV spectroscopy of pyridine dimers, trimers and pyridine – ammonia complexes in a supersonic jet, Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (37) (2020) 21520–21534.

50. **Zhang B., Yu Y., Zhang Zh., et al.,** Infrared spectroscopy of neutral water dimer based on a tunable vacuum ultraviolet free electron laser, J. Phys. Chem. Lett. 11 (3) (2020) 851–855.

51. **Baranov M. A., Karseeva E. K., Tsybin O. Yu.,** Prototypes of devices for heterogeneous hybrid semiconductor electronics with an embedded biomolecular domain, Russian Microelectronics. 52 (6) (2023) 517–526.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАРАНОВ Максим Александрович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

baranovma1993@gmail.com

ORCID: 0000-0003-4555-0009

ЦЫБИН Олег Юрьевич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

oleg.tsybin@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8308-059X

THE AUTHORS

BARANOV Maksim A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
baranovma1993@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4555-0009

TSYBIN Oleg Yu.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
oleg.tsybin@gmail.com
ORCID: 0000-0002-8308-059X

Статья поступила в редакцию 24.04.2025. Одобрена после рецензирования 27.02.2026. Принята 27.02.2026.
Received 24.04.2025. Approved after reviewing 27.02.2026. Accepted 27.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 621.383.523
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19205

ВЛИЯНИЕ ПРОФИЛЯ ТРАНШЕИ ИЗ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ НА ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ КМОП-СОВМЕСТИМОГО ЛАВИННОГО ФОТОДИОДА ВИДИМОГО ДИАПАЗОНА

Д. И. Долженко ✉, Е. Д. Леткиман

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ ddi.dev.94@gmail.com

Аннотация. В работе проведено моделирование технологических операций изготовления кремниевого лавинного фотодиода и расчет его выходных характеристик. В результате представлены значения его коэффициента умножения (49,5 – 62,3) и спектральной чувствительности (15,8 – 19,6 А/Вт) в зависимости от типа дефекта траншеи из диоксида кремния. Показано, что наибольшим образом на данные параметры влияют технологические дефекты, вызывающие сужение профиля траншеи (узкой щели) по направлению к ее дну, что приводит к снижению коэффициента умножения вплоть до 18%. Установлено, что зависимость усиления фотодиода от угла наклона стенки траншеи хорошо описывается линейной функцией. Показано, что сужение траншеи вызывает увеличение латеральной компоненты напряженности электрического поля вблизи этой траншеи, что снижает значение пробивного напряжения и не увеличивает коэффициент умножения исследуемого фотодиода.

Ключевые слова: лавинный фотодиод, коэффициент умножения, спектральная чувствительность, технологические дефекты, STI, TCAD

Для цитирования: Долженко Д. И., Леткиман Е. Д. Влияние профиля траншеи из диоксида кремния на фоточувствительность КМОП-совместимого лавинного фотодиода видимого диапазона // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 57–67. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19205

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19205

THE INFLUENCE OF A SILICA TRENCH PROFILE ON THE PHOTOSENSITIVITY OF A CMOS-COMPATIBLE AVALANCHE PHOTODIODE IN THE VISIBLE RANGE

D. I. Dolzhenko ✉, E. D. Letkiman

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ ddi.dev.94@gmail.com

Abstract. This work has involved the simulation of technological operations of manufacturing a silicon (Si) avalanche photodiode and calculating its output characteristics. As a result, the values of its multiplication factor (from 49.5 to 63.3) and spectral sensitivity (from 15.8 to 19.6 A/W) depending on the shallow trench insulation defect type are presented for a Si avalanche photodiode. It has been shown that the technological defects causing narrowing of the width of the trench towards its bottom have the greatest impact on these parameters. As a result, the multiplication factor decreases to 18%. The dependence of the photodiode gain on the trench's wall inclination angle was established to be described well by a linear function. It

© Долженко Д. И., Леткиман Е. Д., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

was also demonstrated that the trench narrowing led to an increase in the lateral component of the electric field strength near the groove, which reduced the breakdown voltage, but did not lead to an increase in multiplication.

Keywords: avalanche photodiode, multiplication factor, spectral sensitivity, technological defects, STI, TCAD

For citation: Dolzhenko D. I., Letkiman E. D., The influence of a silica trench profile on the photosensitivity of a CMOS-compatible APD in the visible range, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 57–67. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19205

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Использование КМОП-совместимых (КМОП – комплементарная структура металл-оксид-полупроводник) лавинных фотодиодов находит широкое применение в устройствах прецизионного позиционирования, оптической коммуникации, а также в системах LIDAR (устройства обнаружения и определения дальности с помощью света) [1 – 4]. Однако формирование катода и анода на поверхности кремниевой пластины приводит к ряду серьезных проблем, наиболее значимыми из которых являются поверхностные эффекты: неоднородность распределения электрического поля и поверхностные токи утечки [5]. Эти факторы могут вызывать не только резкое снижение коэффициента лавинного умножения во всем спектральном диапазоне, но и преждевременный поверхностный пробой пластины.

К одному из перспективных решений относится создание узкой траншеи (ширина составляет несколько микрометров) между катодом и анодом, заполненной оксидом кремния SiO_2 (узкощелевая изоляция, *англ.* Shallow Trench Isolation (STI)) [6]. Существует довольно большое число способов травления кремния, но как правило, чем сильнее анизотропия формируемого профиля, тем выше сложность технологической операции и требования к оборудованию.

При этом каждый подход имеет свои недостатки. Такая совокупность факторов далеко не всегда гарантирует требуемые распределение поля и пути ударной ионизации, а это отражается на значениях тока при заданном напряжении питания. Кроме того, создаются различные картины светового переотражения при засветке всей фоточувствительной зоны (или ее части под некоторым углом). Из описания сложившихся неблагоприятных условий следует формулировка цели настоящего исследования.

Цель данной работы – анализ влияния профиля траншеи, заполненной оксидом кремния, на поведение вольтамперных характеристик КМОП-совместимого лавинного фотодиода.

Методика исследования и особенности кремниевой структуры лавинного фотодиода

Расчеты выходных характеристик и моделирование технологических операций изготовления лавинного фотодиода проводились с использованием пакета моделирования Sentaurus TCAD. Несмотря на ограничения формы фотошаблонов, мы рассматривали осесимметричную структуру (рис. 1), поскольку такой подход позволяет свести к минимуму краевые эффекты, что упрощает и делает однозначной интерпретацию получаемых результатов по распределению электрического поля. Концентрации донорной (N_D) и акцепторной (N_A) примесей, а также скорость изменения концентраций ΔN_D и ΔN_A вблизи *p–n*-перехода были подобраны таким образом, чтобы обеспечить достаточный наклон кривой вольтамперной характеристики (ВАХ) в линейном режиме [7]. Создание таких условий для концентраций имело целью наблюдать изменение поведения указанной кривой на всех ее участках.

© Dolzhenko D. I., Letkiman E. D., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

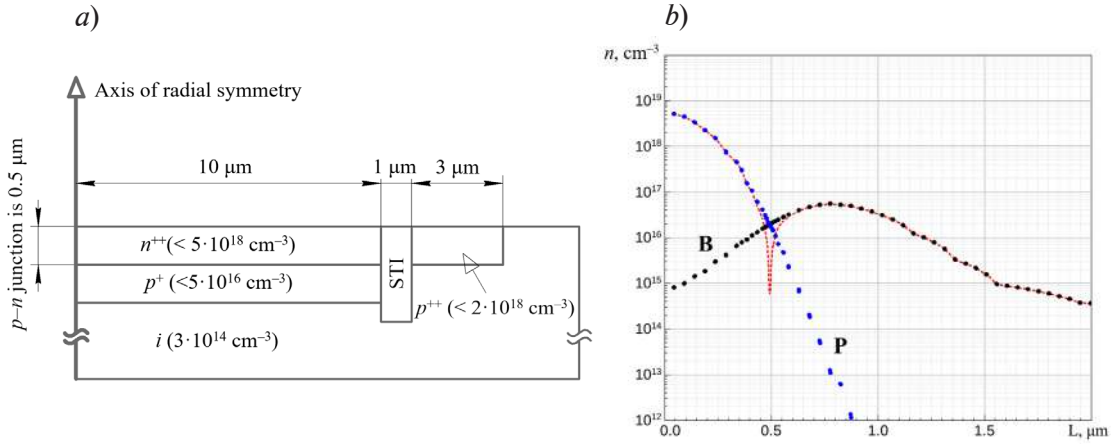


Рис. 1. Схематичное изображение радиального среза структуры (*a*) и график зависимостей концентрации легирующих примесей (бора и фосфора) от глубины в фоточувствительной области (*b*).
Красной кривой показана концентрация примеси без учета ее знака

При моделировании, в качестве профилей траншеи использовались наиболее часто встречающиеся структуры и сопутствующие дефекты, представленные на рис. 2. Соответствующие технологии изготовления этих структур приведены в табл. 1. Несмотря на то, что набор выбранных профилей далеко не исчерпан, он позволяет составить представление о тенденции развития лавины и формировании поля вблизи траншеи.

Ожидалось, что часть дефектов профилей STI не должна вносить существенных изменений в развитие лавины и значение коэффициента усиления, однако без моделирования невозможно произвести предварительную выборку, так как нереально учесть сразу несколько изменений в распределении электрического поля, ионизационного потенциала и подвижности носителей заряда.

Один из первых этапов моделирования широкого перечня структур – это оценка сеточной сходимости. Важно отметить, что для моделирования технологических процессов и физики полупроводникового устройства целесообразно использовать два типа сеток. Для моделей технологических операций удобна адаптивная сетка, шаг a которой тем меньше, чем выше скорость изменения искомой величины N_D по координате x, т.е. $1 / a \sim dN_D / dx$. Она демонстрирует высокую точность и экономию вычислительных ресурсов.

Для моделирования физики полученной структуры адаптивная сетка не подходит, так как размер ячейки стремительно нарастает в глубине структуры, что приводит к значительной ошибке и, зачастую, к отсутствию сходимости решения, особенно в оптике. Таким образом, перед этапом моделирования выходных характеристик необходимо проводить перестроение сетки с минимальным шагом, с учетом анализа сеточной сходимости.

В качестве транспортной модели мы использовали классические уравнения дрейфа-диффузии, уравнение Пуассона для концентрации электронов и дырок, которые традиционно применяются в TCAD-моделировании полупроводниковых структур (*англ.* Technology Computer-Aided Design (TCAD)). Для описания механизмов генерации и рекомбинации был использован стандартный набор физических моделей, рекомендованный для моделирования кремниевых фотодиодов [16].

Для лавинного фотодиода крайне важно отметить способ оценки параметров самой лавины. Для кремниевой структуры пробивная напряженность электрического поля оценивалась по хорошо известной модели ионизации [16, 17]. Для этого вычислялись ионизационные интегралы для электронов и дырок, которые при пробое кремния становятся равными единице; применялись следующие уравнения:

$$\int_0^W \alpha_n \exp\left(-\int_x^W (\alpha_n - \alpha_p)dx'\right) dx = 1, \int_0^W \alpha_p \exp\left(-\int_x^W (\alpha_p - \alpha_n)dx'\right) dx = 1, \quad (1)$$

где α_n, α_p – коэффициенты ионизации электронов и дырок, соответственно; W – ширина области пространственного заряда; x, x' – координаты для внешнего и внутреннего интегралов, соответственно.

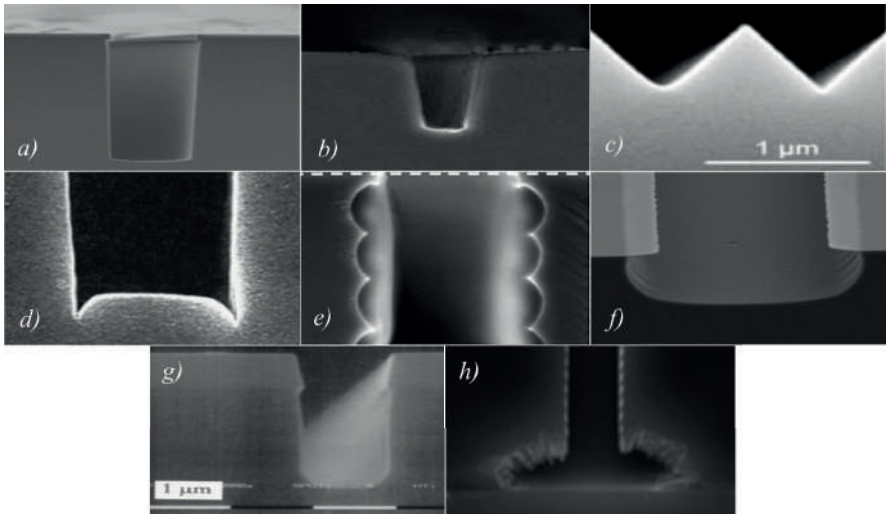


Рис. 2. Профили легирования с различным типом дефектов:
a – вертикальный, прямоугольный, анизотропный, с гладкими стенками;
b – трапециевидный, угол наклона стенок ≥ 80° (чаще всего); *c* – V-образный, с углом < 80°;
d – W-образный, анизотропный, с протравом у краев стенки; *e* – «скаллопированный»;
f – овальный, полусферический, изотропный; *g* – U-образный, анизотропный;
h – профиль с подтравом у дна канавки. Технологии изготовления см. в табл. 1

Таблица 1

Технологии получения профилей легирования, приведенных на рис. 2

Позиция на рис. 2	Технология	Источник
a)	Сухое травление (ICP-RIE)	[8]
b)	Сухое травление	[9]
c)	Влажное травление KOH	[10]
d)	Реактивное ионное травление (RIE)	[11]
e)	Сухое циклическое травление (BOSCH-процесс)	[12]
f)	Изотропное плазмохимическое травление SF_6	[13]
g)		[14]
h)	Реактивное ионное травление (RIE)	[15]

В свою очередь ионизационные коэффициенты можно оценить из модели Ван Оверстратена – де Мана [18] на основе уравнений Чиновета [19], хорошо описывающей явление ионизации в диапазоне полей $(1 – 6)\cdot10^5$ В/см вблизи значения напряженности пробоя кремния:

$$\alpha_n(x) = \gamma\alpha_n \exp\left(-\frac{\gamma b_n}{E(x)}\right),\ \alpha_p(x) = \gamma\alpha_p \exp\left(-\frac{\gamma b_p}{E(x)}\right), \quad (2)$$

где α_n, α_p, b_n, b_p – эмпирические коэффициенты модели, отражающие скорость ионизации; $E(x)$ – локальная напряженность электрического поля; γ – фононная поправка на температуру.

В работе использовались следующие значения коэффициентов:

$$\alpha_n = 7{,}03\cdot10^5 \text{ см}^{-1},\ \alpha_p = (6{,}71 – 15{,}82)\cdot10^5 \text{ см}^{-1};$$

$$b_n = 1{,}231\cdot10^6 \text{ В/см},\ b_p = (1{,}693 – 2{,}036)\cdot10^6 \text{ В/см}.$$

Выбор значений α_p и b_p из интервалов зависел от величины $E(x)$.

Фононная поправка на температуру следует выражению

$$\gamma = \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT_0}\right) \Big/ \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right), \qquad (3)$$

где $\hbar\omega$ – энергия фононов ($\hbar\omega = 0{,}063$); T_0 – температура, для которой приведены эмпирические параметры.

Полученные результаты и их обсуждение

При моделировании таких структур встает вопрос о геометрических параметрах профиля траншеи, для которого предстоит анализировать форму профиля. Ширина последнего обычно не превышает 1 мкм [20, 21], глубина STI является параметром варьируемым. Поэтому на первом этапе, помимо анализа сеточной сходимости, оценивалось влияние глубины профиля узкощелевой изоляции (STI) на вольтамперную характеристику лавинного фотодиода при прямоугольном профиле траншеи.

На обеих зависимостях рис. 3 видно, что на глубине траншеи $L < 3$ мкм наблюдается значительный спад коэффициента умножения M. Несмотря на уменьшение напряжения питания примерно на 10%, величина M снижается примерно на 72%. Это объясняется тем, что, когда глубина STI, выполняющей роль охранного кольца, уменьшается, становится возможным латеральное протекание лавинных процессов. Профиль электрического поля все более смещается к поверхности, а латеральное электрическое поле вблизи поверхности (при малых значениях L) имеет напряженность в несколько раз выше, так как оно не ограничено канавкой с оксидом кремния.

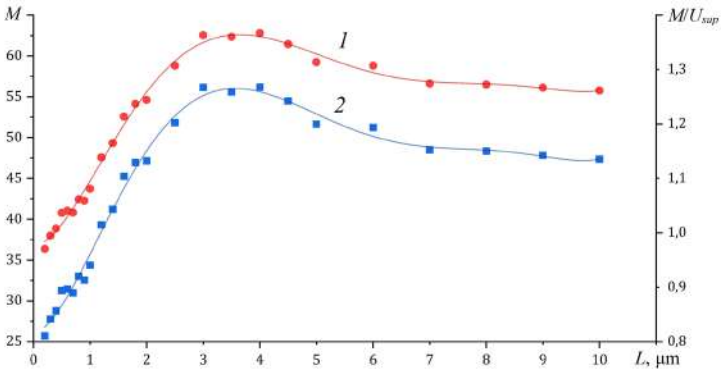


Рис. 3. График зависимости коэффициента умножения M (*1*) и его же значений, нормированных на величину напряжения питания, M/U_{sup} (*2*), от глубины STI-профиля.
Питающее напряжение $U_{sup} = 0{,}98U_{br}$ (U_{br} – пробивное напряжение)

При $L > 4$ мкм начинается постепенный спад коэффициента умножения M. При увеличении глубины поле становится более вытянутым, и при длине волны около 670 нм, на глубине 10 мкм интенсивность падает уже примерно на порядок. Вместе с тем происходит несущественное падение напряженности поля в области значений глубины менее 10 мкм, где поглощается наибольшая доля излучения (здесь оно значительнее ближе к зоне STI). При бóльших значениях глубины скорость изменения коэффициента M будет постепенно нарастать. Однако важно отметить, что моделирование бóльших глубин нецелесообразно, так как на практике это резко снижает число доступных методов травления, требуя высокого аспектного соотношения для профиля STI.

На втором этапе перейдем к моделированию профилей (ширина траншеи $W = 1$ мкм, глубина $L = 3$ мкм) с разным типом дефектов. Необходимо отметить, что реализация полностью изотропного варианта травления невозможна из-за неблагоприятного аспектного соотношения 3 : 1. На рис. 4 представлены ВАХ фототока и тока темновой проводимости. Видно, что наибольшее влияние на пробивное напряжение оказывает степень сужения по направлению ко дну STI-канавки, что ведет к усилению влияния латеральной компоненты поля на лавинный процесс. Остальные типы дефектов хотя и приводят к изменению

профиля поля вблизи края фоточувствительной зоны, но почти не влияют на пробивное напряжение.

Полученные значения коэффициента умножения и спектральной чувствительности приведены в табл. 2. Таким образом, дефекты, связанные с сужением ширины траншеи, могут приводить к падению величины M вплоть до 18%.

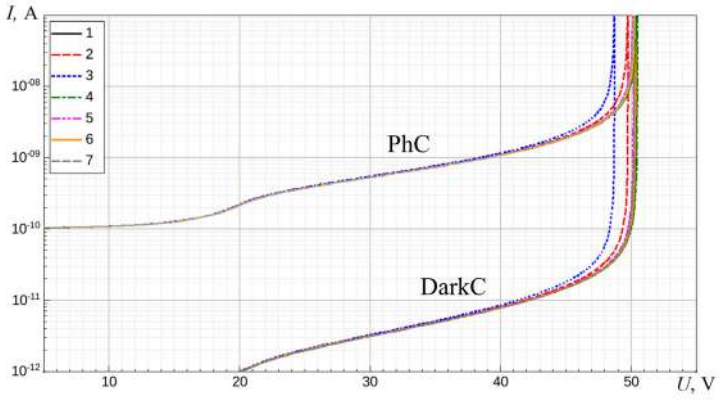


Рис. 4. Расчетные ВАХ фототока (PhC) и темнового тока (DarkC) при различных видах профиля STI и наличии его дефектов.
Номера кривых соответствуют типам профиля, приведенным в табл. 2

Таблица 2

Значения ключевых параметров профиля STI для разных типов дефектов

Тип профиля	S, А/Вт	M	U_{br}, В	$M/U_{sup}(0{,}98\ U_{br})$
1. Прямоугольный	19,0	60,4	50,3	1,23
2. Трапециевидный	18,2	57,3	49,7	1,18
3. V-образный	15,8	49,5	48,6	1,04
4. W-образный	19,6	62,3	50,4	1,26
5. Скаллопированный	18,6	59,0	50,1	1,20
6. U-образный	18,8	59,6	50,3	1,21
7. Подтрав у дна канавки	18,6	59,4	50,2	1,21

Обозначения: S – спектральная чувствительность на длине волны $\lambda = 670$ нм; U_{br} – пробивное напряжение; M, M/U_{sup} – соответственно ненормированный коэффициент умножения и нормированный на величину напряжения питания U_{sup}; $U_{sup} = 0{,}98 U_{br}$.

Для W-образного типа дефекта значения практически идентичны идеализированному прямоугольному профилю, так как формирование двух углублений вблизи стенок канавки может приводить к локальному увеличению ее глубины вплоть до 4 мкм. А согласно данным, представленным на рис. 3, величина коэффициента умножения M в диапазоне 3 – 4 мкм практически остается неизменной.

На третьем этапе было проанализировано влияние сужения профиля у дна канавки на коэффициент умножения. На рис. 5 представлен график зависимости коэффициента умножения и спектральной чувствительности от ширины траншеи у дна канавки W_b. Зависимости хорошо ложатся на прямые аппроксимирующие линии:

$$y_1 = 10{,}3498\ x_1 + 50{,}2300,\ R_1^2 = 0{,}9786 \text{ (для } M),$$

$$y_2 = 2{,}9825\ x_2 + 16{,}0922,\ R_2^2 = 0{,}9728 \text{ (для } S).$$

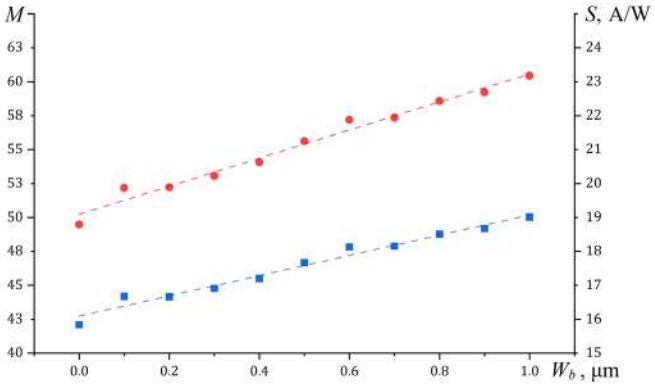


Рис. 5. Зависимости коэффициента умножения M (красные символы) и спектральной чувствительности S (синие символы) от ширины траншеи W_b у дна канавки. Аппроксимирующие прямые показаны пунктирными линиями

Полученные зависимости $M(W_b)$ и $S(W_b)$ можно переписать в виде других линейных функций, связанных с изменением ширины канавки:

$$M(W_b) = M(W_{b(\max)}) - x_1 \Delta W_b,\ S(W_b) = S(W_{b(\max)}) - x_2 \Delta W_b, \quad (4)$$

где $W_{b(\max)}$, мкм, – максимальная ширина у дна канавки (прямоугольный профиль траншеи); ΔW_b, мкм, – отклонение ширины канавки у дна от ширины дна прямоугольного профиля; x_1, x_2 – коэффициенты линеаризации для величин M и S, соответственно ($x_1 \approx 10, x_2 \approx 3$).

На рис. 6 представлены графики зависимости модуля напряженности электрического поля и ее латеральной компоненты от глубины профиля STI.

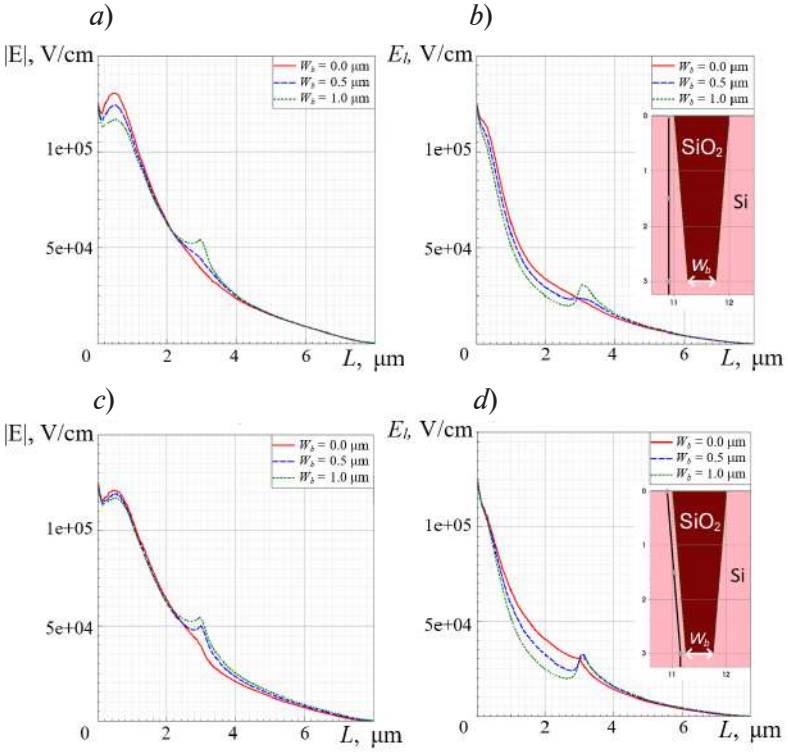


Рис. 6. Зависимости модуля напряженности электрического поля (*a*, *c*) и ее латеральной компоненты (*b*, *d*) от глубины STI-профиля для трех значений ширины дна W_b и разных позиций относительно границ STI (направления указывают черные отрезки на вставках): *b* – 0,1 мкм по перпендикуляру к верхней границе STI, *d* – вдоль линии, параллельной боковой границе STI с зазором 0,1 мкм ($L < 3$ мкм) и перпендикулярно поверхности ($L > 3$ мкм). $U_{sup} = 40$ В

Видно, что для латеральной компоненты напряженности поля вдоль выбранной оси при глубинах менее 3 мкм, где свет обладает наибольшей интенсивностью, значение напряженности электрического поля выше у зауженного профиля. Это приводит к тому, что при критической напряженности электрического поля возрастает вклад ионизационных процессов, протекающих в латеральном направлении, что инициирует преждевременный пробой лавинного фотодиода.

Заключение

В работе были изучены КМОП-совместимые структуры лавинных фотодиодов с узкощелевой изоляцией (STI) в виде охранного кольца. При напряжении питания $U_{sup} = 0{,}98U_{br}$ (λ = 670 нм), путем моделирования технологических операций и выходных характеристик лавинного фотодиода были получены следующие значения ключевых характеристик: коэффициент умножения M = 62,3, спектральная чувствительность S = 19,6 А/Вт.

При ширине профиля траншеи SiO_2 около 1 мкм оптимальной глубиной, как показали расчеты, является значение порядка 3 – 4 мкм, что исключает методы одностадийного изотропного травления кремния. В случае травления с аспектным отношением 1 : 1 падение величины M может достигать 30%.

Установлено, что дефекты, влияющие на ширину профиля STI, направленные ко дну канавки, могут вызывать снижение коэффициента умножения M до 18%. При остальных типах рассмотренных дефектов, отклонения значения M от оптимума не превышают 2,5%.

Зависимости коэффициента умножения и спектральной чувствительности от ширины профиля у дна канавки хорошо аппроксимируются линейными функциями, связанными с отклонением от идеального профиля. Уменьшение коэффициента умножения при сужении ширины канавки связано с увлечением вклада латеральной составляющей напряженности электрического поля в области с наибольшей интенсивностью света.

В дальнейшем планируется направить наши исследования на анализ процессов, приводящих к снижению величины W_b, на необходимость перекалибровки модели, на изучение спектральных зависимостей, а также на возможности минимизации влияния такого рода технологических дефектов и отклонений на коэффициент умножения лавинного фотодиода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Joo J. E., Lee M. J., Park S. M.** A CMOS optoelectronic receiver IC with an on-chip avalanche photodiode for home-monitoring LiDAR sensors // Sensors. 2021. Vol. 21. No. 13. P. 4364.

2. **Wu Q., Li Y., Yang Y., Chen S., Zhao Y.** The law that guides the development of photolithography technology and the methodology in the design of photolithographic process // Proceedings of the 2020 China Semiconductor Technology International Conference (CSTIC). June 26–July 17, 2020, Shanghai, China, IEEE, 2020. Pp. 3–8.

3. **Furtado A. S., Diniz J. A., Monteiro D. W. D. L.** Fabrication and characterization of active pixel sensors (APS) using simple metal gate nMOS technology // ECS Transactions. 2009. Vol. 23. No. 1. P. 461.

4. **Goy J., Courtois B., Karam J. M., Pressecq F.** Design of an APS CMOS image sensor for low light level applications using standard CMOS technology // Analog Integrated Circuits and Signal Processing. 2001. Vol. 29. No. 1–2. Pp. 95–104.

5. **Kamrani E., Lesage F., Sawan M.** Efficient premature edge breakdown prevention in SiAPD fabrication using the standard CMOS process // Semiconductor Science and Technology. 2013. Vol. 28. No. 4. P. 045008.

6. **Zhi W., Quan Q., Yu P., Jiang Y.** A 45 nm CMOS avalanche photodiode with 8.4-GHz bandwidth // Micromachines. 2020. Vol. 11. No. 1. P. 65.

7. **Williams G. M., Huntington A. S.** Probabilistic analysis of linear mode vs. Geiger mode APD FPAs for advanced LADAR enabled interceptors // Howart R. T., Richards R. D. (Eds.). Spaceborne Sensors III. Proceedings SPIE. 2006. Vol. 6220. 30 May. P. 622008.

8. **Zhang Y., Wu Y., Sun Q., Shen L., Lan J., Guo L., Shen Zh., Wang X., Xiao J., Xu J.** Inductively coupled plasma dry etching of silicon deep trenches with extremely vertical smooth sidewalls used in micro-optical gyroscopes // Micromachines. 2023. Vol. 14. No. 4. P. 846.

9. **Li L., Zhao X., Wong C.-P.** Charge transport in uniform metal-assisted chemical etching for 3D high-aspect-ratio micro-and nanofabrication on silicon // ECS Journal of Solid State Science and Technology. 2015. Vol. 4. No. 9. Pp. P337–P346.

10. **Frühauf J., Krönert S.** Wet etching of silicon gratings with triangular profiles // Microsystem Technologies. 2005. Vol. 11. No. 12. Pp. 1287–1291.

11. **Hoekstra R. J., Kushner M. J., Sukharev V., Schoenborn P.** Microtrenching resulting from specular reflection during chlorine etching of silicon // Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. 1998. Vol. 16. No. 4. Pp. 2102–2104.

12. **Chang B., Leussink P., Jensen F., Hübner J., Jansen H.** DREM: Infinite etch selectivity and optimized scallop size distribution with conventional photoresists in an adapted multiplexed Bosch DRIE process // Microelectronic Engineering. 2018. Vol. 191. 5 May. Pp. 77–83.

13. **Panduranga P., Abdou A., Ren Zh., Pedersen R. H., Nezhad M. P.** Isotropic silicon etch characteristics in a purely inductively coupled SF6 plasma // Journal of Vacuum Science & Technology B. 2019. Vol. 37. No. 6. P. 061206.

14. **Burtsev A., Li Y. X., Zeijl H. W., Beenakker C. I. M.** An anisotropic U-shaped SF6-based plasma silicon trench etching investigation // Microelectronic Engineering. 1998. Vol. 40. No. 2. Pp. 85–97.

15. **Laermer F., Urban A.,** Milestones in deep reactive ion etching // Digest of technical papers (Vol. 2) of the 13th International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems (TRANSDUCERS'05), Seoul, Korea (South), 05–09 June, 2005. IEEE. 2005, Pp. 1118–1121.

16. **Hofbauer M., Schneider-Hornstein K., Zimmermann H.,** Single-photon detection for data communication and quantum systems. Bristol (UK): IOP Publishing, 2053–2563, 2021.

17. **Зи С.** Физика полупроводниковых приборов. Пер. с англ. М.: Рипол Классик, 1973. 655 с.

18. **Van Overstraeten R., De Man H.** Measurement of the ionization rates in diffused silicon *p–n* junctions // Solid State Electronics. 1970. Vol. 13. No. 5. Pp. 583–608.

19. **Chynoweth A. G.** Ionization rates for electrons and holes in silicon // Physical Review. 1958. Vol. 109. No. 5. Pp. 1537–1540.

20. **Lee M.-J., Choi W.-Y.** Performance optimization and improvement of silicon avalanche photodetectors in standard CMOS technology // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 2017. Vol. P-P. 20 September. Pp. 1–1.

21. **Wang W., Zeng H.-A., Wang F., Wang G., Xie Y., Feng Sh.** A speed-optimized, low-noise APD with 0.18 μm CMOS technology for the VLC applications // Modern Physics Letters B. 2020. Vol. 34. No. 29. P. 2050321.

REFERENCES

1. **Joo J. E., Lee M. J., Park S. M.,** A CMOS optoelectronic receiver IC with an on-chip avalanche photodiode for home-monitoring LiDAR sensors, Sensors. 21 (13) (2021) 4364.

2. **Wu Q., Li Y., Yang Y., et al.,** The law that guides the development of photolithography technology and the methodology in the design of photolithographic process, Proc. 2020 China Semiconductor Technology International Conference (CSTIC), Jun 26–Jul 17, 2020, Shanghai, China, IEEE, (2020) 3–8.

3. **Furtado A. S., Diniz J. A., Monteiro D. W. D. L.,** Fabrication and characterization of active pixel sensors (APS) using simple metal gate nMOS technology, ECS Trans. 23 (1) (2009) 461.

4. **Goy J., Courtois B., Karam J. M., Pressecq F.,** Design of an APS CMOS image sensor for low light level applications using standard CMOS technology, Analog Integr. Cir. Sig. Proc. 29 (1) (2001) 95–104.

5. **Kamrani E., Lesage F., Sawan M.,** Efficient premature edge breakdown prevention in SiAPD fabrication using the standard CMOS process, Semicond. Sci. Technol. 28 (4) (2013) 045008.

6. **Zhi W., Quan Q., Yu P., Jiang Y.,** A 45 nm CMOS avalanche photodiode with 8.4-GHz bandwidth, Micromachines. 11 (1) (2020) 65.

7. **Williams G. M., Huntington A. S.,** Probabilistic analysis of linear mode vs. Geiger mode APD FPAs for advanced LADAR enabled interceptors, In book: Howart R. T., Richards R. D. (Eds.) "Spaceborne Sensors III", Proc. SPIE. 6220 (30 May) (2006) 622008.

8. **Zhang Y., Wu Y., Sun Q., et al.,** Inductively coupled plasma dry etching of silicon deep trenches with extremely vertical smooth sidewalls used in micro-optical gyroscopes, Micromachines.14 (4) (2023) 846.

9. **Li L., Zhao X., Wong C. P.,** Charge transport in uniform metal-assisted chemical etching for 3D high-aspect-ratio micro-and nanofabrication on silicon, ECS J. Solid State Sci. Technol. 4 (9) (2015) P337–P346.

10. **Frühauf J., Krönert S.,** Wet etching of silicon gratings with triangular profiles, Microsyst. Technol.11 (12) (2005) 1287–1291.

11. **Hoekstra R. J., Kushner M. J., Sukharev V., Schoenborn P.,** Microtrenching resulting from specular reflection during chlorine etching of silicon, J. Vac. Sci. Technol. B. 16 (4) (1998) 2102–2104.

12. **Chang B., Leussink P., Jensen F., et al.,** DREM: Infinite etch selectivity and optimized scallop size distribution with conventional photoresists in an adapted multiplexed Bosch DRIE process, Microelectron. Eng. 191 (5 May) (2018) 77–83.

13. **Panduranga P., Abdou A., Ren Zh., et al.,** Isotropic silicon etch characteristics in a purely inductively coupled SF6 plasma, J. Vac. Sci. Technol. B. 37 (6) (2019) 061206.

14. **Burtsev A., Li Y. X., Zeijl H. W., Beenakker C. I. M.,** An anisotropic U-shaped SF6-based plasma silicon trench etching investigation, Microelectron. Eng. 40 (2) (1998) 85–97.

15. **Laermer F., Urban A.,** Milestones in deep reactive ion etching, In book: Digest of technical papers of the 13th Int. Conf. on Solid-State Sensors, Actuators & Microsyst., Seoul, Korea (South), 05–09 June, 2005. TRANSDUCERS'05, IEEE. 2 (2005) 1118–1121.

16. **Hofbauer M., Schneider-Hornstein K., Zimmermann H.,** Single-photon detection for data communication and quantum systems, IOP Publishing, 2053–2563, Bristol (UK), 2021.

17. **Sze S. M., Yiming Li, Ng K. K.,** Physics of semiconductor devices, Second Ed., Wiley, New York, 1981.

18. **Van Overstraeten R., De Man H.,** Measurement of the ionization rates in diffused silicon *p–n* junctions, Solid State Electron.13 (5) (1970) 583–608.

19. **Chynoweth A. G.,** Chynoweth, ionization rates for electrons and holes in silicon, Phys. Rev. 109 (5) (1958) 1537–1540.

20. **Lee M. J., Choi W. Y.,** Performance optimization and improvement of silicon avalanche photodetectors in standard CMOS technology, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. P-P (20 Sept) (2017) 1–1.

21. **Wang W., Zeng H.-A., Wang F., et al.,** A speed-optimized, low-noise APD with 0.18 μm CMOS technology for the VLC applications, Mod. Phys. Lett. B, 34 (29) (2020) 2050321.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДОЛЖЕНКО Дмитрий Игоревич – *кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург. Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

ddi.dev.94@gmail.com

ORCID: 0000-0002-5707-4145

ЛЕТКИМАН Егор Дмитриевич – *студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

letkiman.egor@gmail.com

THE AUTHORS

DOLZHENKO Dmitry I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ddi.dev.94@gmail.com
ORCID: 0000-0002-5707-4145

LETKIMAN Egor D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
letkiman.egor@gmail.com

Статья поступила в редакцию 11.12.2025. Одобрена после рецензирования 26.12.2025. Принята 02.02.2026.
Received 11.12.2025. Approved after reviewing 26.12.2025. Accepted 02.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 534.16
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19206

СМЕШАННЫЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ И АВТОКОЛЕБАНИЯ: ДЕЙСТВИЕ НА НИХ НЕЛИНЕЙНОГО ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ И ЗАПАЗДЫВАНИЯ, ВЫЗЫВАЮЩЕГО АВТОКОЛЕБАНИЯ

А. А. Алифов ✉

Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, Россия

✉ alishir@mail.ru

Аннотация. В работе изучены смешанные параметрические и автоколебания при наличии нелинейного параметрического воздействия и запаздывания в трении, вызывающего автоколебания. Для этого использована модель фрикционной автоколебательной системы, взаимодействующей с источником энергии ограниченной мощности. Решение нелинейных дифференциальных уравнений движения достигнуто методом прямой линеаризации. Получены соотношения между нестационарными и стационарными режимами колебаний. С применением критериев Рауса – Гурвица установлены условия устойчивости стационарных колебаний. Проведены расчеты с целью получения информации о динамике колебаний. Анализ полученных данных показал, что под действием запаздывания амплитудно-частотная зависимость изменяет свое поведение. Запаздывание приводит также к появлению участков устойчивости на нижних ветвях амплитудных кривых, и возникает зависимость от крутизны характеристики источника энергии.

Ключевые слова: нелинейность, параметрическое возбуждение, запаздывание, смешанные колебания, параметрические колебания, автоколебания, линеаризация

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FFGU-2024-0018).

Для цитирования: Алифов А. А. Смешанные параметрические и автоколебания: действие на них нелинейного параметрического возбуждения и запаздывания, вызывающего автоколебания // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 68–75. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19206

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19206

THE MIXED PARAMETRIC AND SELF-OSCILLATIONS: THE EFFECT OF NONLINEAR PARAMETRIC EXCITATION AND DELAYS ON THEM CAUSING SELF-OSCILLATIONS

A. A. Alifov ✉

Mechanical Engineering Research Institute of the RAS, Moscow, Russia

✉ alishir@mail.ru

Abstract. In the paper, the mixed parametric and self-oscillations in the presence of a nonlinear parametric action and a delay in friction causing self-oscillations have been studied. For this purpose, a model of a frictional self-oscillating system interacting with an energy source of limited power was used. The solution of nonlinear differential equations of motion was constructed using the direct linearization method. The relations of nonstationary and stationary oscillation modes were obtained. By application of the Routh – Hurwitz criteria, the conditions for the stability of stationary oscillations were derived. The calculations were carried out in order to gain information about the dynamics of fluctuations. An analysis of the data showed that

© Алифов А. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

the amplitude-frequency dependence changed its behavior under the influence of the delay. The latter also led to the appearance of stability regions on the lower branches of the amplitude curves, and a dependence arose on the steepness of the energy source characteristic.

Keywords: nonlinearity, parametric excitation, delay, mixed oscillations, parametric oscillations, self-oscillations, method, linearization, energy source

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FFGU-2024-0018).

For citation: Alifov A. A., The mixed parametric and self-oscillations: The effect of nonlinear parametric excitation and delays on them causing self-oscillations, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 68–75. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19206

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Исследованию различных колебательных процессов посвящено большое число работ. По известной классификации, в теории колебаний выделяют четыре типа колебаний, которые образуют четыре класса смешанных (взаимодействие типов) колебаний [1 – 3]. К одному из классов смешанных колебаний относятся смешанные параметрические и автоколебания.

Цель настоящей работы – анализ смешанных параметрических и автоколебаний с учетом трех факторов: нелинейного параметрического возбуждения, запаздывания в трении, вызывающего автоколебания, и ограниченной мощности источника энергии.

Вопросы энергопотребления приобрели в современном мире большую актуальность, а запаздывание может присутствовать во многих системах [4 – 10].

Параметрические колебания, которые математически описываются дифференциальными уравнениями с периодическими коэффициентами, могут возникать при функционировании различных систем. Работа [11] содержит многостороннее исследование параметрических колебаний при квадратичном параметрическом возбуждении.

В настоящей работе решение нелинейных дифференциальных уравнений смешанных параметрических и автоколебаний построено методом линеаризации и замены переменных с усреднением [17].

Уравнения движения

Рассмотрим смешанные параметрические и автоколебания на основе достаточно широко используемой схемы автоколебательной системы [1, 2, 15]. В этой схеме пружина (ее концы неподвижно закреплены) и демпфер соединены с телом, лежащим на ленте, непрерывно движущейся с определенной скоростью V. Параметры c_0 и γ – соответственно коэффициенты линейной и нелинейной частей силы упругости пружины; k_0 – коэффициент демпфирования (все три параметра – константы). Скорость V следует выражению $V = r_0\dot{\varphi}$. Тело обладает массой m и скоростью $\dot{x}$ по направлению движения x. Лента приводится в движение двигателем со скоростью $\dot{\varphi}$ вращения ротора и моментной характеристикой $M(\dot{\varphi})$, включающей силу сопротивления вращению. Между телом и лентой возникает сила трения $T(U)$, вызывающая автоколебания и зависящая от относительной скорости $U = r_0\dot{\varphi} - \dot{x}$.

Система дифференциальных уравнений, описывающая смешанные параметрические и автоколебания при нелинейном параметрическом возбуждении и запаздывании, имеет следующий вид:

$$\begin{gathered} m\ddot{x} + k_0\dot{x} + c_0 x = T(U_\Delta) - \gamma x^3 - bx^3\cos\nu t, \\ I\ddot{\varphi} = M(\dot{\varphi}) - r_0 T\left(U_\Delta\right), \end{gathered} \tag{1}$$

© Alifov A. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

где $bx^3\cos(\nu t)$ – слагаемое, выражающее нелинейное параметрическое возбуждение (b = const, ν = const); r_0 – радиус точки приложения силы трения (r_0 = const); U_Δ – относительная скорость ($U_\Delta = r_0\dot{\varphi} - \dot{x}_\Delta$, $\dot{x}_\Delta = \dot{x}(t-\Delta)$, Δ = const – запаздывание); I – момент инерции ротора двигателя, I = const.

Характеристику силы трения $T(U_\Delta)$ примем в виде

$$T\left(U_\Delta\right) = T_0\left(\operatorname{sgn} U_\Delta - \alpha_1 U_\Delta + \alpha_3 U_\Delta^3\right), \tag{2}$$

где T_0 – нормальная сила реакции (T_0 = const); коэффициенты α_1 и α_3 – константы; $\operatorname{sgn}(U_\Delta) = +1$ при $U_\Delta > 0$, $\operatorname{sgn}(U_\Delta) = -1$ при $U_\Delta < 0$.

В случае $U_\Delta = 0$ характеристика $T(0)$ лежит в интервале

$$-T_0 \le T(0) \le T_0.$$

Интересно отметить, что характеристика (2) имела место и при опытах в космических условиях [16].

С помощью метода прямой линеаризации [17 – 20] заменим выражение (2) функцией вида

$$T(U_\Delta) = T_0[\operatorname{sgn}(U_\Delta) + B_T + k_T\dot{x}],$$

где коэффициенты линеаризации B_T и k_T определяются выражениями

$$\begin{gathered} B_T = -\alpha_1 u + \alpha_3 u^3 + 3N_2\alpha_3 u p^2 a^2,\ k_T = -\alpha_3\bar{N}_3\left(p^2a^2 - h\right),\ h = 3\left(u_0^2 - u^2\right)/\bar{N}_3, \\ u_0^2 = \alpha_1/3\alpha_3,\ N_2 = \left(2r+1\right)/\left(2r+3\right),\ \bar{N}_3 = \left(2r+3\right)/\left(2r+5\right), \end{gathered} \tag{3}$$

$a = \max|x|$ – амплитуда.

Методом прямой линеаризации также заменим нелинейную часть силы упругости γx^3 линейной $c_f x$ с коэффициентом линеаризации $c_f = \bar{N}_3\gamma a^2$. Уравнения (1) с учетом линеаризации принимают вид

$$m\ddot{x} + k_0\dot{x} + c\,x = T_0\left(B_T + \operatorname{sgn} U_\Delta + k_T\dot{x}_\Delta\right) - bx^3\cos\nu t, \tag{4}$$

$$I\ddot{\varphi} = M\left(\dot{\varphi}\right) - r_0T_0\left(\operatorname{sgn} U_\Delta + B_T + k_T\dot{x}_\Delta\right),$$

где $c = c_0 + c_f$.

Решение уравнений и условия устойчивости стационарных колебаний

Решения (4) по методу замены переменных с усреднением [17] имеют, с учетом уравнения

$$\dot{x}_\Delta = -ap\sin(\psi - p\Delta),$$

следующий вид:

$$x = a\cos\psi,\ \dot{x}_\Delta = -ap\sin\psi,\ \psi = pt + \xi,\ p = \nu/2,\ \dot{\varphi} = \Omega. \tag{5}$$

Решения (4) для случаев $U_\Delta > 0$ и $U_\Delta < 0$ различны, и уравнения для определения нестационарных значений амплитуды a, фазы ξ колебаний и скорости u, которая следует выражению $u = r_0\Omega$, имеют следующий вид.

а) $u \ge ap$:

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= -\frac{1}{4pm}\left(2aG - 0{,}5ba^3\sin 2\xi\right), \\ \frac{d\xi}{dt} &= \frac{1}{4pma}\left(2aW + ba^3\cos 2\xi\right), \end{aligned} \tag{6а}$$

$$\frac{du}{dt} = \frac{r_0}{I}\left[M\left(\frac{u}{r}\right) - r_0 T_0\left(1 + B_T\right)\right]; \tag{6a}$$

b) $u < ap$:

$$\frac{da}{dt} = -\frac{1}{4pm}\left[2aG - 0.5ba^3 \sin 2\xi - \frac{8T_0}{\pi ap}\sqrt{a^2p^2 - u^2}\right],$$

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{4pma}\left(2aW + ba^3 \cos 2\xi\right), \tag{6b}$$

$$\frac{du}{dt} = \frac{r_0}{I}\left[M\left(\frac{u}{r}\right) - r_0 T_0\left(1 + B_T\right) - \frac{r_0 T_0}{\pi}\left(3\pi - 2\psi_*\right)\right],$$

где $\omega_0^2 = c_0/m$, $G = p[k_0 - T_0 k_T \cos(p\Delta)]$, $W = m(\omega_0^2 - p^2) + c_f - pT_0 k_T \sin p\Delta$, $\psi^* = 2\pi - \arcsin(u/ap)$.

Стационарные значения амплитуды и фазы определяются условиями $\dot{a} = 0, \dot{\xi} = 0$. В случае значений скорости $u \geq ap$ они находятся из соотношений

$$4(4G^2 + W^2) = b^2a^4, \operatorname{tg}(2\xi) = -2G/W,$$

а при $u < ap$ для стационарной амплитуды имеет место соотношение $a \approx u/p$.

Нагрузка на источник энергии со стороны колебательной системы определяется условием $\dot{u} = 0$, из которого следует соотношение

$$M(u/r) - S(a, u) = 0,$$

где

а) $u \geq ap$: $S(a, u) = r_0 T_0(1 + B_T)$;

б) $u < ap$: $S(a, u) = r_0 T_0[(1 + B_T) + \pi^{-1}(3\pi - 2\psi)]$.

Стационарные значения скорости u можно найти по точкам пересечения кривых $M(u/r)$ и $S(a, u)$.

Чтобы вывести условия устойчивости стационарных колебаний составляем уравнения в вариациях для уравнений (6) и, применяя критерии Рауса – Гурвица, получаем:

$$B_1 > 0, B_3 > 0, B_1B_2 - B_3 > 0, \tag{7}$$

где $B_1 = -(b_{11} + b_{22} + b_{33})$, $B_2 = b_{11}b_{33} + b_{11}b_{22} + b_{22}b_{33} - b_{23}b_{32} - b_{12}b_{21} - b_{13}b_{31}$, $B_3 = b_{11}b_{23}b_{32} + b_{12}b_{21}b_{33} + b_{22}b_{13}b_{31} - b_{11}b_{22}b_{33} - b_{12}b_{23}b_{31} - b_{13}b_{21}b_{32}$.

В случае $u \geq ap$ имеем:

$$b_{11} = \frac{r_0}{I}\left(Q - r_0 T_0 \frac{\partial B_T}{\partial u}\right), b_{12} = -6I^{-1}r_0^2 T_0 N_2 \alpha_3 u a p^2, b_{13} = 0,$$

$$b_{21} = -3m^{-1}T_0 a\alpha_3 u \cdot \cos\left(p\Delta\right),$$

$$b_{22} = -\frac{1}{4pm}\left\{2p\left[k_0 + T_0\bar{N}_3\alpha_3\left(3a^2p^2 - h\right)\cos\left(p\Delta\right)\right] - \frac{3}{2}ba^2 \sin 2\xi\right\},$$

$$b_{23} = \frac{ba^3}{4pm}\cos 2\xi, b_{31} = -3m^{-1}T_0\alpha_3 u \cdot \sin\left(p\Delta\right),$$

$$b_{32} = \frac{1}{2pm}\left\{\bar{N}_3 a\left[\gamma + 2T_0\alpha_3 p^3 \sin\left(p\Delta\right)\right] + ba\cos 2\xi\right\}, b_{33} = -\frac{ba^3}{2pma}\sin 2\xi,$$

$$\frac{\partial B_T}{\partial u} = -\left(\alpha_1 - 3\alpha_3 u^2 - 3\alpha_3 N_2 a^2 p^2\right), \frac{\partial k_T}{\partial a} = -2\bar{N}_3\alpha_3 a p^2,$$

где $Q = \dfrac{d}{du} M\left(\dfrac{u}{r_0}\right)$.

В случае $u < ap$ имеют место следующие коэффициенты:

$$b_{11} = \frac{r_0}{I}\left[Q - r_0 T_0 \frac{\partial B_T}{\partial u} - \frac{2 r_0 T_0}{\pi\sqrt{a^2 p^2 - u^2}}\right],$$

$$b_{12} = -\frac{r_0^2 T_0}{I}\left[\frac{\partial B_T}{\partial a} + \frac{2u}{\pi a\sqrt{a^2 p^2 - u^2}}\right],$$

$$b_{21} = -\frac{auT_0}{m}\left[3\alpha_3 \cos(p\Delta) - \frac{2}{\pi a^2 p^2 \sqrt{a^2 p^2 - u^2}}\right],$$

$$b_{22} = -\frac{1}{4pm}\left\{2p\left[k_0 + T_0 \bar{N}_3 \alpha_3 \left(3a^2 p^2 - h\right)\cos(p\Delta)\right] - \frac{3}{2} b a^2 \sin 2\xi\right\} - \frac{2T_0 u^2}{\pi m a^2 p^2 \sqrt{a^2 p^2 - u^2}},$$

а коэффициенты b_{13}, b_{23}, b_{31}, b_{33} не изменяются.

Расчеты стационарных режимов колебаний

Для проведения расчетов были выбраны следующие значения параметров:

$$m = 9{,}8\ \text{Н}\cdot\text{с}^2\cdot\text{см}^{-1},\ k_0 = 0{,}196\ \text{Н}\cdot\text{с}\cdot\text{см}^{-1},\ c_0 = \text{Н}\cdot\text{см}^{-1},\ b = 0{,}686\ \text{Н}\cdot\text{см}^{-1},$$

$$\gamma = \pm 1{,}96\ \text{Н}\cdot\text{см}^{-3},\ T_0 = 4{,}9\ \text{Н},\ \alpha_1 = 0{,}84\ \text{с}\cdot\text{см}^{-1},\ \alpha_3 = 0{,}18\ \text{с}^3\cdot\text{см}^{-3},$$

$$r_0 = 1\ \text{см},\ I = 9{,}8\ \text{Н}\cdot\text{с}\cdot\text{см}^2,\ p\Delta = \pi/2,\ \pi,\ 3\pi/2.$$

Некоторые результаты расчетов при $u = 1{,}2\ \text{см}\cdot\text{с}^{-1}$ и различных характеристиках силы упругости ($\gamma > 0$, $\gamma < 0$) показаны на рис. 1. Сплошные линии отражают случаи запаздывания $p\Delta = \pi/2$, штриховые – $p\Delta = \pi$, пунктирные – $p\Delta = 3\pi/2$.

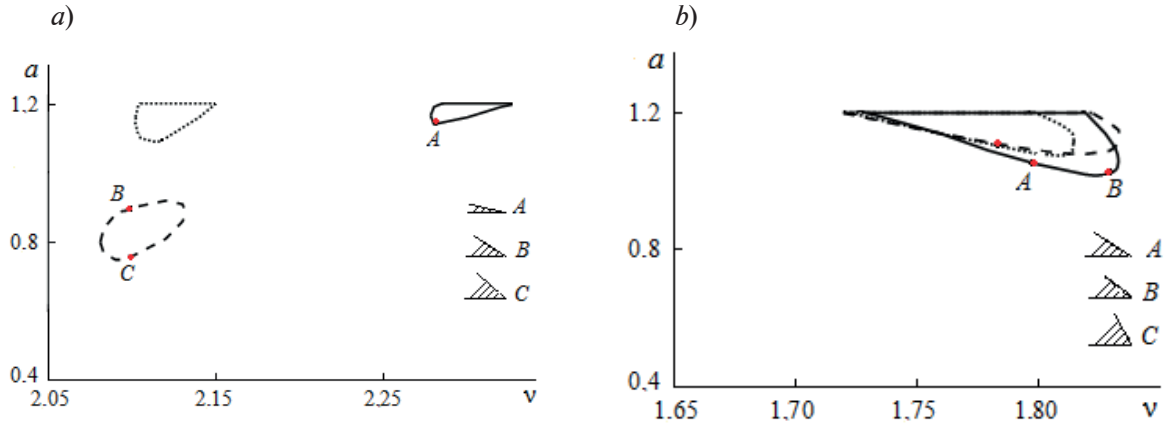


Рис. 1. Результаты численных расчетов амплитудно-частотных характеристик рассматриваемой системы для сил упругости $\gamma = 0{,}2$ (*a*) и $\gamma = -0{,}2$ (*b*).

Представлены 3 случая запаздывания $p\Delta$:$\pi/2$ (сплошные линии), π(штриховые) и $3\pi/2$ (пунктирные). Красные точки *A*, *B*, *C* соответствуют заштрихованным секторам, относящимся к крутизне *Q* характеристики источника энергии (колебания устойчивы в пределах этих секторов)

Заштрихованные секторы относятся к крутизне Q характеристики источника энергии, при которых колебания устойчивы. Эти секторы было бы правильнее расположить на кривой нагрузки $S(a, u)$, но для экономии места они показаны на амплитудных кривых.

Заключение

Рассмотрена динамика смешанных параметрических и автоколебаний при нелинейном параметрическом возбуждении и запаздывании в автоколебаниях. Для получения информации о свойствах этих колебаний использована модель фрикционной автоколебательной системы, взаимодействующей с источником энергии ограниченной мощности, и проведены расчеты стационарных режимов колебаний.

Анализ полученных данных позволил сделать ряд выводов.

Во-первых, амплитудная кривая значительно сдвигается в амплитудно-частотной плоскости, по сравнению со случаем отсутствия запаздывания, и зона резонанса увеличивается.

Во-вторых, на некоторых участках нижних ветвей амплитудных кривых наблюдается появление устойчивости, зависящей от крутизны характеристики источника энергии.

Ряд эффектов, имеющих место при взаимодействии колебательной системы с источником энергии в случае линейного параметрического возбуждения, подробно описаны в монографии [1]. Как показало настоящее исследование, подобные эффекты имеют место и в случае нелинейного параметрического возбуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Alifov A. A., Frolov K. V.** Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources. New York, Washington, Philadelphia, London: Hemisphere Publishing Corporation, 1990. 327 p.

2. Вибрации в технике. Справочник: В 6-ти т. Ред. совет: В. Н. Челомей (пред., гл. ред.) и др. Т. 2. Колебания нелинейных механических систем. Под ред. И. И. Блехмана. М.: Машиностроение, 1979. 351 с.

3. **Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э.** Теория колебаний. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1981. 568 с.

4. **Красносельский М. А., Покровский А. В.** Системы с гистерезисом. М.: Наука, 1983. 272 с.

5. **Тхан В. З., Дементьев Ю. Н., Гончаров В. И.** Повышение точности расчета систем автоматического управления с запаздыванием // Программные продукты и системы. 2018. Т. 31. № 3. С. 521– 526.

6. **Keller A. A.** Time-delay systems with application to mechanical engineering process dynamics and control // International Journal of Mathematics and Computers in Simulation. 2018. Vol. 12. Pp. 64–73.

7. **Sykora H. T., Sadeghpour M., Ge J. I., Bachrathy D., Orosz G.** On the moment dynamics of stochastically delayed linear control systems // International Journal of Robust and Nonlinear Control. 2020. Vol. 30. No. 18. Pp. 8074–8097.

8. **Gupta S. K., Wang J., Barry O. R.** Nonlinear vibration analysis in precision motion stage with PID and time-delayed feedback controls // Nonlinear Dynamics. 2020. Vol. 101. No. 2. Pp. 439–464.

9. **Цыкунов А. М.** Робастное управление объектом с распределенным запаздыванием и неизвестным порядком математической модели // Мехатроника, автоматизация, управление. 2016. Т. 17. № 4. С. 219–227.

10. **Рубаник В. П.** Колебания квазилинейных систем с запаздыванием. М.: Наука, 1969. 288 с.

11. **Шмидт Г.** Параметрические колебания. М.: Мир, 1978. 336 с.

12. **Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А.** Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974. 504 с.

13. **Моисеев Н. Н.** Асимптотические методы нелинейной механики. М.: Наука, 1981. 400 с.

14. **Бутенин Н. В., Неймарк Ю. И., Фуфаев Н. А.** Введение в теорию нелинейных колебаний. М.: Наука, 1976. 256 с.

15. **Климов Д. М.** Об одном виде автоколебаний в системе с сухим трением // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2003. № 3. С. 6–12.

16. **Броновец М. А., Журавлёв В. Ф.** Об автоколебаниях в системах измерения сил трения // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2012. № 3. С. 3–11.

17. **Алифов А. А.** Методы прямой линеаризации для расчета нелинейных систем. Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 2015. 74 с.

18. **Alifov A. A.** Method of the direct linearization of mixed nonlinearities // Journal of Machinery Manufacture and Reliability. 2017. Vol. 46. No. 2. Pp. 128–131.

19. **Alifov A. A.** About direct linearization methods for nonlinearity // Hu Z., Petoukhov S., He M. (Eds.) Conference proceedings: "Advances in Artificial Systems for Medicine and Education III (AIMEE 2019)" (Book Series "Advances in Intelligent Systems and Computing". Vol. 1126). Cham, Switzerland: Springer, 2020. Pp. 105–114.

20. **Alifov A. A.** On the calculation by the method of direct linearization of mixed oscillations in a system with limited power-supply // Hu Z., Petoukhov S., Dychka I., He M. (Eds.). Conference proceedings: "Advances in Computer Science for Engineering and Education II (ICCSEEA 2019)" (Book Series "Advances in Intelligent Systems and Computing". Vol. 938). Cham, Switzerland: Springer, 2020. Pp. 23–31.

REFERENCES

1. **Alifov A. A., Frolov K. V.,** Interaction of nonlinear oscillatory systems with energy sources; Hemisphere Publishing Corporation, New York, Washington, Philadelphia, London, 1990.

2. **Chelomey V. N.** (Chairman), Vibratsii v technike: spravochnik [Vibrations in machinery: Handbook], in 6 Vols., Vol. 2; Ed. by Blekhman I. I., Publishing House of Mechanical Engineering, Moscow, 1979 (in Russian).

3. **Andronov A. A., Vitt A. A., Khaikin S. E.,** Theory of vibration, Nauka Publishing, Moscow, 1981 (in Russian).

4. **Krasnoselskiĭ M., Pokrovskiĭ A.,** Systems with hysteresis, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1989.

5. **Tkhan V. Z., Dementev Yu. N., Goncharov V. I.,** Improving the accuracy calculation of time delay automatic control, Software & Systems. 31 (3) (2018) 521–526 (in Russian).

6. **Keller A. A.,** Time-delay systems with application to mechanical engineering process dynamics and control, Math. Comput. Simul. 12 (2018) 64–73.

7. **Sykora H. T., Sadeghpour M., Ge J. I., et al.,** On the moment dynamics of stochastically delayed linear control systems, Int. J. Robust Nonlin. 30 (18) (2020) 8074–8097.

8. **Gupta S. K., Wang J., Barry O. R.,** Nonlinear vibration analysis in precision motion stage with PID and time-delayed feedback controls, Nonlinear Dyn. 101 (2) (2020) 439–464.

9. **Tsykunov A. M.,** Robust control of object with distributed delay and unknown order of mathematical model, Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie [Mechatronics., Automatization, Control]. 17 (4) (2016) 219–227 (in Russian).

10. **Rubanik V. P.,** Kolebaniya kvazilineynykh sistem s zapazdyvaniyem [Oscillations of quasilinear systems having delay], Nauka Publishing, Moscow, 1969 (in Russian).

11. **Schmidt G., Schulz R.,** Parametererregte Schwingungen, Deutscher Verlag d. Wiss., VEB, Berlin, 1975.

12. **Bogolyubov N. N., Mitropolsky Y. A.,** Asymptotic methods in the theory of non-linear oscillations, CRC Press, Florida, USA, 1961.

13. **Moiseev N. N.,** Asimptoticheskiye metody nelineynoy mekhaniki [Asymptotic methods of nonlinear mechanics], Nauka, Moscow, 1981 (in Russian).

14. **Butenin N. V., Neymark Yu. I., Fufayev N. A.,** Vvedeniye v teoriyu nelineynykh kolebaniy [Introduction to the theory of nonlinear oscillations], Nauka, Moscow, 1976) (in Russian).

15. **Klimov D. M.,** On one type of self-excited vibrations in a system with dry friction, Mech. Solids. 38 (3) (2003) 1–7.

16. **Bronovets M. A., Zhuravlev V. F.,** On self-excited vibrations in friction source measurement systems, Mech. Solids. 47 (3) (2012) 261–268.

17. **Alifov A. A.,** Metody pryamoy linearizatsii dlya rascheta nelineynykh system [Methods of direct linearization for calculation of nonlinear systems], Research Center "Regular and Chaotic Dynamics", Moscow, 2015 (in Russian).

18. **Alifov A. A.,** Method of the direct linearization of mixed nonlinearities, J. Mach. Manuf. Reliab. 46 (2) (2017) 128–131.

19. **Alifov A. A.,** About direct linearization methods for nonlinearity, Hu Z., Petoukhov S., He M. (Eds.); Conf. proc.: "Advances in Artificial Systems for Medicine and Education III (AIMEE 2019)" (Book Ser. "Advances in Intelligent Systems and Computing". Vol. 1126). Springer, Cham, Switzerland (2020) 105–114.

20. **Alifov A. A.,** On the calculation by the method of direct linearization of mixed oscillations in a system with limited power-supply, Hu Z., Petoukhov S., Dychka I., He M. (Eds.); Conf. proc.: "Advances in Computer Science for Engineering and Education II (ICCSEEA 2019)" (Book Ser. "Advances in Intelligent Systems and Computing". Vol. 938). Springer, Cham, Switzerland (2020) 23–31.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

АЛИФОВ Алишир Али оглы – *доктор технических наук, главный научный сотрудник Лаборатории динамических процессов Института машиноведения имени А. А. Благонравова Российской академии наук, Москва, Россия.*

101000, Москва, Малый Харитоньевский переулок, 4
alishir@mail.ru
ORCID: 0000-0003-2327-068X

THE AUTHOR

ALIFOV Alishir A.
Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences
4 Malij Haritonjevskij lane, Moscow, 101000, Russia
alishir@mail.ru
ORCID: 0000-0003-2327-068X

Статья поступила в редакцию 01.12.2025. Одобрена после рецензирования 06.02.2026. Принята 06.02.2026.

Received 01.12.2025. Approved after reviewing 06.02.2026. Accepted 06.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья
УДК 539.1.075
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19207

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЛЩИНЫ ПОКРЫТИЙ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГРАДУИРОВОЧНОЙ ЗАВИСИМОСТИ, ПОЛУЧЕННОЙ РАСЧЕТНЫМ ПУТЕМ

С. С. Козловский [1], П. С. Гуньков [1] ✉,
Я. А. Бердников [1], В. А. Донских-Тырса [2]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Государственный региональный центр стандартизации, метрологии и испытаний в г. Санкт-Петербурге и Ленинградской области (ФБУ «Тест-С.-Петербург»), Санкт-Петербург, Россия

✉ gunkov-pavel@yandex.ru

Аннотация. При измерении толщины покрытия методом рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) требуется провести предварительную калибровку системы регистрации на эталонных образцах с известной толщиной покрытия. Такая операция занимает довольно много времени и дает результат лишь для определенной системы регистрации и пары элементов (базового материала и его покрытия). В настоящей работе калибровочная кривая определена расчетным методом Монте-Карло с использованием программы MCC 3D. Так были получены зависимости отношения интенсивностей линий флуоресценции Fe K_α (подложка) и Zn K_α (покрытие), а также Cu K_α (подложка) и Au L_α (покрытие) от значений толщины покрытий. Кроме того, рассчитаны погрешности определения толщины покрытий и сделан вывод о возможности применения метода Монте-Карло для расчета толщины покрытия без предварительной градуировки. Помимо этого, были рассчитаны оптимальные углы установки детекторов относительно нормали для расчета толщины покрытия методом РФА.

Ключевые слова: рентгенофлуоресцентный анализ, покрытие, подложка, тонкая пленка, симуляция Монте-Карло, градуировочная зависимость

Для цитирования: Козловский С. С., Гуньков П. С., Бердников Я. А., Донских-Тырса В. А. Определение толщины покрытий методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием градуировочной зависимости, полученной расчетным путем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 76–83. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19207

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Козловский С. С., Гуньков П. С., Бердников Я. А., Донских-Тырса В. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19207

THE THICKNESS DETERMINATION OF COATINGS BY X-RAY FLUORESCENT ANALYSIS USING A CALIBRATION CURVE OBTAINED BY CALCULATIONS

S. S. Kozlovskii [1], P. S. Gunkov [1] ✉,
Ya. A. Berdnikov [1], V. A. Donskikh-Tyrsa [2]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;
[2] Regional Center for Standardization, Metrology and Testing in St. Petersburg and Leningrad Region (Test-St. Petersburg), St. Petersburg, Russia
✉ gunkov-pavel@yandex.ru

Abstract. When measuring a coating thickness by X-ray fluorescent analysis, the preliminary calibration of the detection system is required using reference samples with a known coating thickness. This operation is quite time-consuming and gives results only for a certain detection system and a pair of elements (the base material and coating). In our study, the calibration curve has been obtained by the Monte Carlo calculation method using the MCC 3D software. In so doing, we calculated the dependences of the ratios of peak intensities of fluorescence lines from Fe K_α (substrate) and Zn K_α (coating), as well as Cu K_α (substrate) and Au L_α (coating) on the values of coating thickness. Moreover, the coating thickness determination errors were obtained. A conclusion was made about the possibility of using the Monte Carlo method to determine the coating thickness without preliminary calibration.

Keywords: X-ray fluorescence analysis, thickness, substrate, thin film, simulation, Monte Carlo method

For citation: Kozlovskiy S. S., Gunkov P. S., Berdnikov Ya. A., Donskikh-Tyrsa V. A., The thickness determination of coatings by X-ray fluorescent analysis using a calibration curve obtained by calculations, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 76–83. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19207

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Нанесение покрытий на различные поверхности и контроль их толщины – это актуальная задача для многих отраслей промышленности. На сегодняшний день состав и толщину покрытий определяют с помощью ультразвука, вихретокового контроля, рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и электронной микроскопии. Каждый из методов имеет свои преимущества и недостатки [1]. Для анализа толщины покрытий методом РФА требуется информация о порядке следования слоев и наличие стандартных образцов для калибровки.

Цель настоящего исследования – разработать методику определения толщины покрытия расчетным методом Монте-Карло [2]. Использование данной методики позволило определять необходимое время экспозиции при рентгеновским облучении образца для нахождения этой толщины с необходимой точностью.

В качестве тестируемых пар были выбраны цинковое покрытие на железной основе и золотое на медной основе как наиболее распространенные. Цинкование стали, т.е. покрытие этого металла слоем цинка, который не пропускает влагу и кислород, защищает сталь от коррозии, весьма распространено для защиты стальных изделий от ржавчины. Позолота медных изделий чаще всего используется в ювелирной промышленности, а также в декоративном дизайне, создании и реставрации произведений искусства [3]. Хотя на практике используются сплавы вместо чистых металлов, мы прибегли к простейшим системам: Zn-Fe и Au-Cu.

© Kozlovskiy S. S., Gunkov P. S., Berdnikov Ya. A., Donskikh-Tyrsa V. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Объекты и методы исследования

Расчеты ключевых зависимостей и времен экспозиции были выполнены методом Монте-Карло с помощью сертифицированной программы МСС 3D [4 – 6]. Это программное обеспечение прошло метрологическую аттестацию, поэтому результаты, полученные с его помощью, следует считать достоверными.

В качестве источника излучения, которым облучался образец, был выбран спектр рентгеновской трубки с прострельным родиевым анодом и бериллиевым окном толщиной 127 мкм при напряжении 30 кВ (аналог Moxtek Magnum). В отличие от авторов статей [7 – 10], которые использовали в качестве источника облучения экспериментальный спектр рентгеновской трубки, в нашей работе спектр рентгеновского излучения был промоделирован путем расчета методом Монте-Карло.

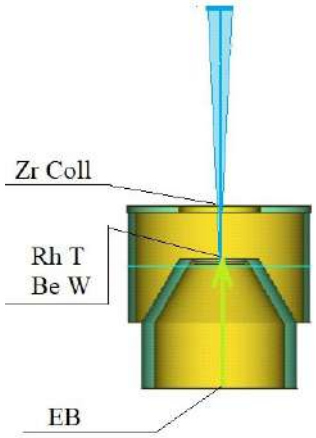


Рис. 1. Модель рентгеновской трубки с коллиматором, использованная в расчетах: Zr Coll –циркониевый коллиматор, Rh T – родиевая мишень, Be W – бериллиевое окно, EB – пучок электронов; пучок генерируемых фотонов показан голубым конусом

Использованная модель рентгеновской трубки приведена на рис. 1. Расчет был выполнен для трубки с коллиматором, при этом диаметр пучка генерируемых квантов (кв) на образце был равен 2 мм, а интенсивность излучения составила величину $I = 1{,}26 \cdot 10^7$ (кв/с)·мкА.

В данной работе в качестве детектора использовали расчетную модель детектора фирмы Амптек с толщиной кристалла 500 мкм и с бериллиевым окном толщиной 12,7 мкм.

Определение оптимального угла установки детектора относительно нормали для расчета толщины покрытия

Для решения задачи, указанной в подзаголовке, в расчетах рассматривалась система со следующим расположением элементов: рентгеновское излучение от источника попадало под прямым углом на исследуемый образец, а поток квантов флуоресценции регистрировался кольцевыми детекторами (для ускорения расчетов), расположенными под разными углами на расстоянии 3 см от поверхности образца. Для расчетов было выбрано 5 позиций детекторов. Детекторы были расположены под следующими углами к нормали образца (градусы): 15, 30, 45, 60 и 75. В качестве образца использовали железный диск диаметром 0,5 см и толщиной 1 см. На образец «наносился» слой цинка разной толщины s: от 0 до 50 мкм. Схема расчета представлена на рис. 2.

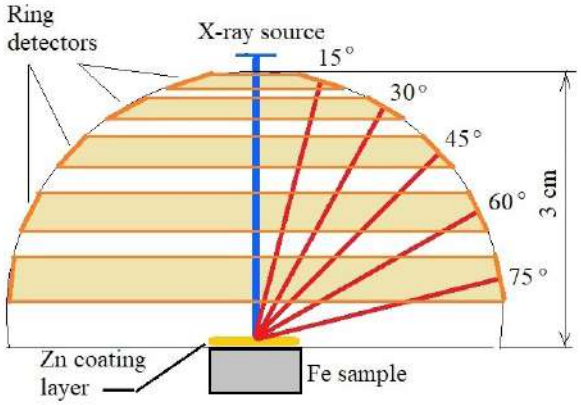


Рис. 2. Модель расчетной системы (для пары Zn-Fe):
Fe sample – образец железа, Zn coating layer – цинковое покрытие; Ring detectors – кольцевые детекторы, X-ray source – источник фотонов рентгеновского излучения. Рентгеновское излучение на образец показано синей прямой; распространение флуоресценции от образца под разными углами показано красными лучами

В ходе расчетов были получены спектры флуоресценции от образцов с различными значениями толщины цинкового покрытия и под разными углами. Вначале были построены зависимости интенсивности линий флуоресценции Fe K_α и Zn K_α от толщины s слоя покрытия для разных углов установки детектора. Аналогичная зависимость была построена для золотого покрытия меди.

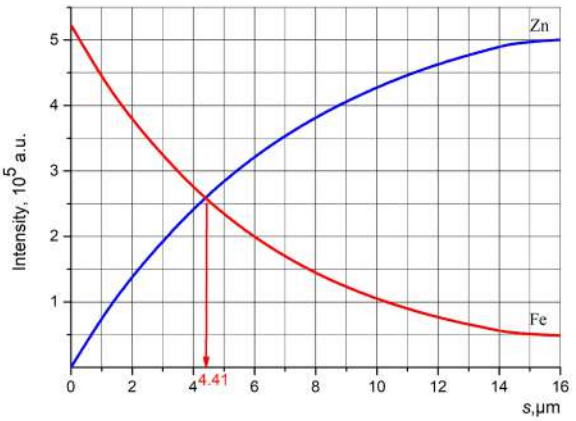


Рис. 3. Расчетные зависимости интенсивности линий флуоресценции в пиках Fe K_α и Zn K_α от толщины покрытия для угла установки детектора 45°.

Значение s = 4,41 мкм соответствует равенству высот максимумов флуоресценции, относящихся к подложке и покрытию

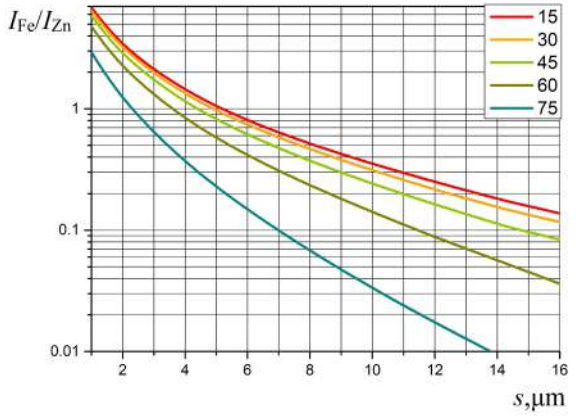


Рис. 4. Расчетные зависимости отношения интенсивностей линий флуоресценции в пиках Fe K_α и Zn K_α от толщины покрытия для разных углов (в градусах) установки детектора

В качестве примера на рис. 3 представлена зависимость интенсивности линий Fe K_α и Zn K_α от толщины s слоя покрытия для угла установки детектора 45°. Аналогичный вид имеют и другие зависимости, однако при увеличении угла установки детектора точка пересечения кривых сдвигается в сторону меньших значений толщины. Это объясняется удлинением расстояния выхода флуоресценции с максимальной глубины при увеличении этого угла.

Пересечение кривых соответствует толщине покрытия при равенстве высот пиков, относящихся к Fe K_α (подложка) и Zn K_α (покрытие).

На рис. 4 представлены зависимости отношения интенсивностей линий флуоресценции в пиках Fe K_α и Zn K_α от толщины покрытия для разных углов установки детектора.

По результатам расчетов было построено семейство кривых, отражающих зависимости отношения интенсивностей двух пиков от толщины покрытия для различных углов. Анализ данных на рис. 4 показывает, что зависимости величины отношения интенсивностей в пиках Fe K_α и Zn K_α от толщины слоя покрытия близки для значений углов установки детектора вплоть до 45°. В случаях превышения указанного значения поведение зависимостей меняется: наблюдается более резкое снижение величины этого отношения. При этом значительно снижается диапазон измеряемых значений толщины. Этот результат указывает на требование строго учитывать геометрические характеристики используемого прибора.

Расчетная модель рентгенофлуоресцентного анализатора представлена на рис. 5. Показана модель, включающая источник излучения, образец и детекторы (рис. 5, *a*). На рис 5, *b* представлена визуализация распространения рентгеновских лучей, падающих на образец, и флуоресцентного излучения, полученная с помощью модельных расчетов.

В расчетной схеме, представленной на рис. 5, четыре одинаковых детектора Амптек были расположены симметрично по отношению к вертикальной оси под углом 45° относительно нормали для ускорения набора статистики.

В результате расчетов была получена градуировочная зависимость для отношения интенсивностей линий Fe K_α и Zn K_αот толщины покрытия для угла установки детектора 45° при напряжении на трубке 30 кВ, токе 1 мА. Такая же зависимость была получена для медной подложки, покрытой золотом. Результаты приведены на рис. 6. Аналогичная зависимость была представлена в работе [2].

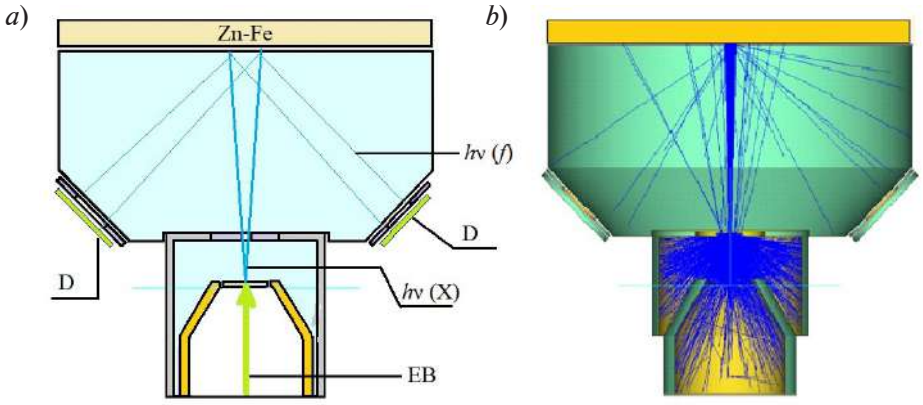


Рис. 5. Расчетная модель рентгенофлуоресцентного анализатора (*a*)
и картина распространения рентгеновских квантов, полученная при расчете (*b*);
EB – пучок электронов, *hν* (X) – генерируемые рентгеновские фотоны,
Zn-Fe – образец, *hν* (*f*) – фотоны флуоресценции, D – детекторы

Точность определения толщины покрытия с помощью градуировочной зависимости зависит от числа зафиксированных сигналов при расчете этой зависимости.

Относительная погрешность δ при измерении отношения числа отсчетов n_1/n_2 для пуассоновского распределения числа отсчетов n_1 и n_2 определяется формулой:

$$\delta = \sqrt{1/n_1 + 1/n_2}.$$

На рис. 6 представлены зависимости отношения интенсивностей линий флуоресценции подложки и покрытия от значений толщины покрытия, а также соответствующие погрешности.

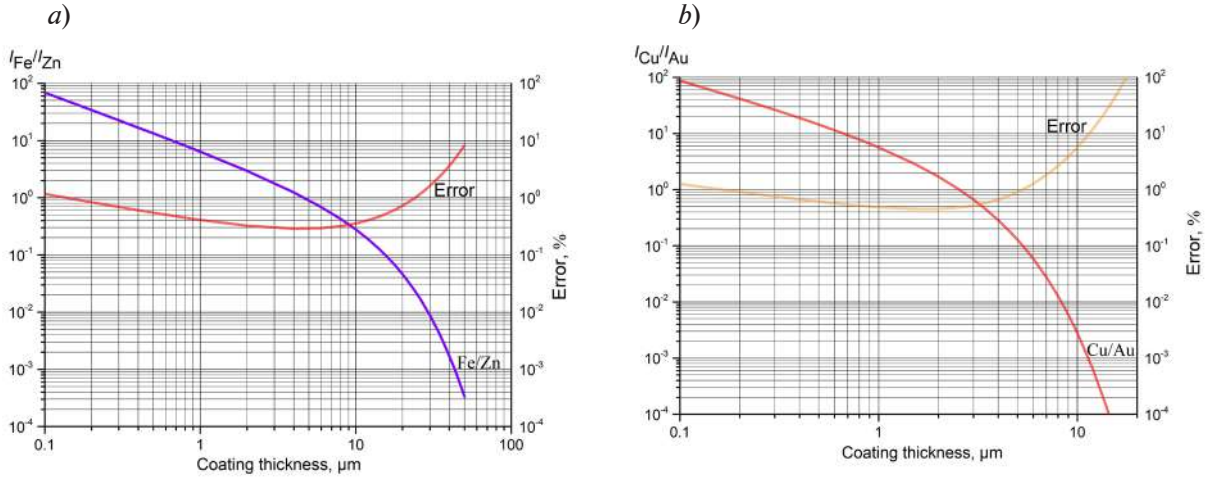


Рис. 6. Зависимости отношений интенсивностей *I* линий в пиках Fe K_α и Zn K_α (*a*),
Cu K_α и Au L_α (*b*) от толщины покрытий, а также погрешности ее определения
для выбранной интенсивности излучения трубки (U = 30 кВ, I = 1 мА);
угол установки детектора равен 45° в обоих случаях

Полученная нами погрешность определения толщины покрытий сопоставима с погрешностью, описанной в работах [2, 9].

Заключение

Результаты, представленные в работе, показывают, что при рентгенофлуоресцентном анализе толщины покрытий с использованием моделирования методом Монте-Карло можно определять толщину покрытий без предварительной калибровки и оптимизировать

процесс измерения с точки зрения получения требуемой точности. Однако, разумеется, это требует экспериментальной проверки. В работе рассмотрен простейший случай расчета толщины покрытия простого вещества на подложке из простого вещества. Вместе с тем метод Монте-Карло позволяет выполнять расчеты значений толщины покрытия, состоящего из произвольного набора элементов.

Если использовать зависимость отношения пиковых интенсивностей линий флуоресценции подложки и покрытия от толщины этого покрытия, то легко находить время экспозиции для определения толщины покрытия с необходимой точностью. Следует отметить, что измерение толщины золотого покрытия, превышающей 10 мкм, наносимого на медную подложку, а также измерение цинкового покрытия толщиной свыше 40 мкм на железной подложке потребуют длительного времени для достижения приемлемой точности. При проектировании же действующего прибора для измерения толщины покрытий рассмотренным способом оптимальный угол установки детектора не должен превышать 45° к нормали. При бóльших значениях этого угла диапазон измеряемых значений толщины существенно сужается и при этом возрастает погрешность измерений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Li Z., Wang C., Ju H., Li X., Qu Y., Yu J.** Prediction model of aluminized coating thicknesses based on Monte Carlo simulation by X-ray fluorescence // Coatings. 2022. Vol. 12. No. 6. P. 764.

2. **Giurlani W., Berretti E., Innocenti M., Lavacchi A.** Coating thickness determination using X-ray fluorescence spectroscopy: Monte Carlo simulations as an alternative to the use of standards // Coatings. 2019. Vol. 9. No. 2. P. 79.

3. **Brunetti A., Golosio B., Schoonjans T., Oliva P.** Use of Monte Carlo simulations for cultural heritage X-ray fluorescence analysis // Spectrochimica Acta. Part B: Atomic Spectroscopy. 2015. Vol. 108. 1 June. Pp. 15–20.

4. **Багаев К. А., Козловский С. С.** Применение компьютерного моделирования для калибровки детекторов в водной среде // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 2 (122). С. 106–111.

5. **Гуньков П. С., Козловский С. С., Бердников Я. А.** Оптимизация параметров измерения на рентгенофлуоресцентном анализаторе с помощью программы для расчета прохождения излучения через вещество // X Всероссийская научно-практическая конференция производителей рентгеновской техники. Программа и материалы конференции. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2023. С. 52–54.

6. **Репникова Е. А., Деч А. В., Козловский С. С.** Моделирование прохождения гамма-излучения через трехмерные многослойные структуры // XXX Юбилейная Неделя науки СПбГТУ. 26 ноября – 1 декабря 2001. Материалы межвузовской научной конференции. Часть V (ФизМех). СПб.: Издательство СПбГТУ, 2002. С. 58–59.

7. **Giurlani W., Berretti E., Lavacchi A., Innocenti M.** Thickness determination of metal multilayers by ED-XRF multivariate analysis using Monte Carlo simulated standards // Analytica Chimica Acta. 2020. Vol. 1130. 15 September. Pp. 72–79.

8. **Pessanha S., Manso M., Antunes V., Carvalho M. L., Sampaio J. M.** Monte Carlo simulation of portable XRF setup: Non-invasive determination of gold leaf thickness in indo-Portuguese panel paintings // Spectrochimica Acta. Part B: Atomic Spectroscopy. 2019. Vol. 156. June. Pp. 1–6.

9. **Pessanha S., Queralt I., Carvalho M. L., Sampaio J. M.** Determination of gold leaf thickness using X-ray fluorescence spectrometry: Accuracy comparison using analytical methodology and Monte Carlo simulations // Applied Radiation and Isotopes. 2019. Vol. 152. 1 June. Pp. 6–10.

10. **Lins S. A. B., Gigante G. E., Cesareo R., Ridolfi S., Brunetti A.** Testing the accuracy of the calculation of gold leaf thickness by MC simulations and MA-XRF scanning // Applied Sciences 2020. Vol. 10. No. 10. P. 3582.

REFERENCES

1. **Li Z., Wang C., Ju H., et al.,** Prediction model of aluminized coating thicknesses based on Monte Carlo simulation by X-ray fluorescence, Coatings. 12 (6) (2022) 764.

2. **Giurlani W., Berretti E., Innocenti M., Lavacchi A.,** Coating thickness determination using X-ray fluorescence spectroscopy: Monte Carlo simulations as an alternative to the use of standards, Coatings. 9 (2) (2019) 79.

3. **Brunetti A., Golosio B., Schoonjans T., Oliva P.,** Use of Monte Carlo simulations for cultural heritage X-ray fluorescence analysis, Spectrochim. Acta B. At. Spectrosc. 108 (1 June) (2015) 15–20.

4. **Bagayev K. A., Kozlovskiy S. S.,** An application of computer simulation to detector calibration in the aqueous medium, St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics. (2(122)) (2011) 106–111 (in Russian).

5. **Gunkov P. S., Kozlovskiy S. S., Berdnikov Ya. A.,** Optimizatsiya parametrov izmereniya na rentgenofluorestsentnom analizatore s pomoshchyu programmy dlya rascheta prokhozhdeniya izlucheniya cherez veshchestvo [Optimization of measurement parameters on an X-ray fluorescence analyzer using a program for calculating the passage of radiation through matter], Proc. X Russian Scientific and Practical Conf. of X-ray equipment manufacturers, Nov. 24, 2023, St. Petersburg, Publishing House of the St. Petersburg State Electrotechnical University ("LETI"), (2023) 52–54 (in Russian).

6. **Repnikova E. A., Dech A. V., Kozlovskiy S. S.,** Modelirovaniye prokhozhdeniya gamma-izlucheniya cherez trekhmernyye mnogosloynyye struktury [Simulation of the gamma-radiation passage through 3D multilayer structures], Proc. the 30-th anniversary of Science Week at SPbGTU, Part 5 (Interuniversity Sci. conf., Nov. 26 – Dec. 1, 2001), Publ. House of SPbGTU (2002) 58–59 (in Russian).

7. **Giurlani W., Berretti E., Lavacchi A., Innocenti M.,** Thickness determination of metal multilayers by ED-XRF multivariate analysis using Monte Carlo simulated standards, Anal. Chim. Acta. 1130 (15 Sept) (2020) 72–79.

8. **Pessanha S., Manso M., Antunes V., et al.,** Monte Carlo simulation of portable XRF setup: Non-invasive determination of gold leaf thickness in indo-Portuguese panel paintings, Spectrochim. Acta B. At. Spectrosc. 156 (June) (2019) 1–6.

9. **Pessanha S., Queralt I., Carvalho M. L., Sampaio J. M.,** Determination of gold leaf thickness using X-ray fluorescence spectrometry: Accuracy comparison using analytical methodology and Monte Carlo simulations, Appl. Radiat. Isot. 152 (1 June) (2019) 6–10.

10. **Lins S. A. B., Gigante G. E., Cesareo R., et al.,** Testing the accuracy of the calculation of gold leaf thickness by MC simulations and MA-XRF scanning, Appl. Sci. 10 (10) (2020) 3582.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОЗЛОВСКИЙ Станислав Станиславович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
skozlovski@phmf.spbstu.ru
ORCID: 0009-0006-9088-3581

ГУНЬКОВ Павел Сергеевич – *аспирант Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
gunkov-pavel@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

ДОНСКИХ-ТЫРСА Виктор Александрович – *инженер испытательной лаборатории товаров бытового и промышленного назначения Федерального бюджетного учреждения «Государственный региональный центр стандартизации, метрологии и испытаний в г. Санкт-Петербурге и Ленинградской области» (ФБУ «Тест-С.-Петербург»), Санкт-Петербург, Россия.*
190103, Россия, г. Санкт-Петербург, Курляндская ул., 1
vdt.test.spb@gmail.com

THE AUTHORS

KOZLOVSKIY Stanislav S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
skozlovski@phmf.spbstu.ru
ORCID: 0009-0006-9088-3581

GUNKOV Pavel S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
gunkov-pavel@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

DONSKIKH-TYRSA Victor A.
The Federal Budgetary Institution "State Regional Center for Standardization, Metrology and Testing in St. Petersburg and Leningrad Region" ("Test-St. Petersburg")
1 Kurlyandskaya St., St. Petersburg, 190103, Russia
vdt.test.spb@gmail.com

Статья поступила в редакцию 19.01.2026. Одобрена после рецензирования 09.02.2026. Принята 09.02.2026.
Received 19.01.2026. Approved after reviewing 09.02.2026. Accepted 09.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Физическая электроника

Научная статья
УДК 538.971:621.315.592
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19208

ВЛИЯНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНОВ Ar^+ И Cd^+ НА СОСТАВ И ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ТЕЛЛУРИДА ЦИНКА

Ж. Б. Хужаниёзов [1] ✉, Б. Е. Умирзаков [1], Д. А. Ташмухамедова [1], В. В. Лобода [2], А. А. Абдувайитов [1]

[1] Ташкентский государственный технический университет им. Ислама Каримова, г. Ташкент, Узбекистан;

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

✉ KhujaniyozovJB@mail.ru

Аннотация. Влияние ионной имплантации Ar^+ и Cd^+, а также последующего термического отжига было изучено на монокристаллическом образце ZnTe(111) с применением комплекса методов спектроскопии: ультрафиолетовой фотоэлектронной, поглощения света в УФ-. ИК-, видимой областях и Оже-электронной. Результаты исследований показали, что бомбардировка поверхности ионами Ar^+ и Cd^+ с энергией E_0 = 1 кэВ до достижения дозы насыщения $D_{sat} = (6-8)\cdot10^{16}$ см$^{-2}$ приводит к разрушению кристаллической структуры ионно-имплантированных слоев и, как следствие, к металлизации поверхности. В частности, после имплантации ионами Cd^+ и последующего отжига при температуре T = 850 K наблюдается формирование гомогенной сплошной пленки $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ толщиной 30 – 35 Å, что свидетельствует о перераспределении компонентов и образовании нового фазового состояния на поверхности ZnTe. Результаты исследования тонких пленок $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ демонстрируют наличие двух отчетливо выраженных максимумов в спектрах валентных электронов, соответствующих энергиям связи −1,4 эВ и −5,2 эВ.

Ключевые слова: гетероструктура, фотоэлектронная спектроскопия, имплантация, молекулярно-лучевая эпитаксия, доза насыщения, тонкая пленка, теллурид цинка

Для цитирования: Хужаниёзов Ж. Б., Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Лобода В. В., Абдувайитов А. А. Влияние имплантации ионов Ar^+ и Cd^+ на состав и электронную структуру монокристаллического теллурида цинка // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 84–97. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19208

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Хужаниёзов Ж. Б., Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Лобода В. В., Абдувайитов А. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19208

THE INFLUENCE OF Ar^+ AND Cd^+ ION IMPLANTATION ON THE COMPOSITION AND ELECTRONIC STRUCTURE OF MONOCRYSTALLINE ZINC TELLURIDE

J. B. Khujaniyozov [1]✉, B. E. Umirzakov [1], D. A. Tashmukhamedova [1], V. V. Loboda [2], A. A. Abduvayitov [1]

[1] Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov, Tashkent, Republic of Uzbekistan;

[2] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ KhujaniyozovJB@mail.ru

Abstract. The effect of Ar^+ and Cd^+ ion implantation and subsequent thermal annealing has been studied on a single-crystal ZnTe (111) using a whole range of spectroscopy methods: ultraviolet photoelectron one (UPS), light absorption one, and Auger electron one (AES). The results showed that bombardment of the surface with Ar^+ and Cd^+ ions with an energy of $E_0 = 1$ keV until a saturation dose of $D_{sat} = (6-8)\cdot10^{16}$ cm^{-2} was reached resulted in the destruction of the crystal structure of the ion-implanted layers and, as a consequence, in surface metallization. In particular, after implantation with Cd^+ ions and subsequent annealing at $T = 850$ K, the formation of a homogeneous continuous $Zn_{0.5}Cd_{0.5}Te$ film 30–35 Å thick was observed, which indicated the redistribution of components and the formation of a new phase state on the ZnTe surface. The results of the study of $Zn_{0.5}Cd_{0.5}Te$ thin films demonstrate the presence of two clearly defined maxima in the valence electron spectra corresponding to binding energies of −1.4 eV and −5.2 eV.

Keywords: heterostructure, photoelectron spectroscopy, implantation, molecular beam epitaxy, saturation dose, thin film, zinc telluride

For citation: Khujaniyozov J. B., Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Loboda V. V., Abduvayitov A. A., The influence of Ar^+ and Cd^+ ion implantation on the composition and electronic structure of monocrystalline zinc telluride, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and. 19 (2) (2026) 84–97. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19208

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/ Mathematics licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Полупроводники $A^{II}B^{VI}$, такие как теллуриды кадмия и цинка (CdTe, ZnTe), долгое время служили модельными объектами для фундаментальных исследований, однако их практическое применение оставалось сравнительно ограниченным, сводясь преимущественно к использованию в рентгеновских детекторах и люминофорах. Несмотря на такое недоразумение, эти соединения отличаются высоким структурным совершенством и обладают уникальными оптическими характеристиками.

В последние годы соединения $A^{II}B^{VI}$ привлекают все большее внимание как перспективные материалы для солнечной энергетики [1 – 5]. Благодаря высокому квантовому выходу в зеленой области спектра, они представляются весьма многообещающими для эффективного преобразования солнечной энергии в электрическую.

Одним из факторов, сдерживающих широкое применение гетероструктур на основе CdTe и ZnTe, выступает значительное несоответствие параметров их кристаллических решеток. Возникающие при этом механические напряжения на границах раздела могут приводить к деградации и разрушению структур. Несовпадение решеток также вносит неопределенности в точность определения величины разрыва зон, что, в частности, проявляется в существенном разбросе (до ±10% от средней ширины запрещенной зоны) в опубликованных данных о разрыве зон в валентной зоне гетероструктур CdTe/ZnTe [6 – 9].

© Khujaniyozov J. B., Umirzakov B. Y., Tashmukhamedova D. A., Loboda V. V., Abduvayitov A. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Результаты исследований гетероструктур, сформированных на основе бинарных полупроводников [10 – 18], в частности системы CdTe/ZnTe при идентичной номинальной толщине узкозонного слоя, демонстрируют существенное расхождение в энергетическом положении и форме полосы излучения. Это обстоятельство указывает на ярко выраженную зависимость реальной структуры тонкого слоя от специфических технологических условий его формирования. Для системы CdTe/ZnTe указанный аспект приобретает особую значимость в контексте разработки квантовых точек CdTe, легированных прецизионно контролируемым количеством магнитных ионов Mn^{2+} [19].

В гетероэпитаксиальных структурах ключевую роль играют напряжения, возникающие в процессе роста, и их последующая релаксация. Эти процессы оказывают определяющее влияние на кристаллическое совершенство структуры, которое, в свою очередь, влияет непосредственно на электронные характеристики материала и, как следствие, на параметры изготавливаемых инфракрасных детекторов [20 – 28]. Для прецизионной оценки остаточных деформаций, возникающих в объеме материала, используется широкий спектр оптических методов [24] и рентгеновской дифракции [25, 26], позволяющих получать ценную информацию о механическом состоянии структуры.

В работе [28] представлено экспериментальное исследование слабых деформаций в приповерхностных областях аморфных слоев хрома Cr и теллурида ртути-кадмия HgCdTe с использованием инновационного нуль-метода. В результате исследования получены количественные данные, демонстрирующие зависимость амплитуды сигнала второй гармоники от величины приложенных напряжений. Кроме того, проведены прецизионные измерения остаточных напряжений в поверхностном слое многослойной структуры HgCdTe/CdTe/ZnTe/GaAs, выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии, что позволило установить параметры ее напряженного состояния.

В последние годы метод низкоэнергетической ионной имплантации зарекомендовал себя как эффективный инструмент для целенаправленного изменения состава, структуры и свойств материалов разнообразной природы [29 – 37], открывая новые перспективы в материаловедении и инженерии поверхности.

В настоящей работе представлено исследование модификации поверхности монокристаллических пленок теллурида цинка ZnTe посредством имплантации ионов аргона Ar^+ и кадмия Cd^+, сопряженной с термическим воздействием.

Цель настоящего исследования – детальное изучение механизмов, приводящих к изменениям элементного состава и характеристик электронной структуры пленок теллурида цинка в результате комплексной обработки.

Методика эксперимента

Исследование образцов пленок проводилось с использованием сверхвысоковакуумной установки (рис. 1), состоящей из двух функционально разделенных отсеков.



Рис. 1. Экспериментальная установка

В первом блоке осуществлялись процедуры отжига, термического окисления и ионной бомбардировки; эти процедуры подготавливали материалы к дальнейшему анализу.

Второй блок служил для детального анализа состава, плотности состояний валентных электронов, зонно-энергетической структуры, а также эмиссионных и оптических характеристик образцов.

В качестве объектов исследования были использованы тщательно отполированные и подвергнутые химическому травлению монокристаллические образцы ZnTe(111) и эпитаксиальные пленки ZnTe/Si(111) *n*-типа, полученные методом магнетронного напыления.

Эксперименты проводились в условиях высокого вакуума (достигал значения 10^{-7} Па), с применением целого комплекса спектроскопических методов: Оже-электронной (ОЭС), ультрафиолетовой

фотоэлектронной (УФЭС) спектроскопии, оптической спектроскопии поглощения электромагнитного излучения УФ-, ИК- и видимого диапазонов, а также спектроскопии упруго-отраженных электронов (СУОЭ).

Профили распределения атомов по глубине определяли методом ОЭС в сечетании с прецезионным послойными травлением поверхности ионами Ar^+ с энергией E_0, варьируемой в пределах от 2 до 3 кэВ. Перед процедурой ионной имплантации образцы ZnTe подвергались дегазации путем прогрева до температуры T = 900 K в течение трех часов. Этот процесс сочетался с травлением поверхности ионами Ar^+ при давлении 10^{-7} Па для удаления поверхностных загрязнений.

После завершения очистки, Оже-пики, соответствующие углероду C, сере S и кислороду O, полностью исчезали, что свидетельствовало о высокой степени чистоты поверхности. При этом концентрации атомов цинка Zn и теллура Te стабилизировались в диапазоне ~ 49 – 50 ат.%, что указывало на восстановление стехиометрии материала.

Имплантация ионов кадмия Cd^+ осуществлялась при энергии E_0 = 1 – 3 кэВ с использованием дозы $D = 8 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$; это значение соответствовало дозе насыщения, при которой дальнейшее повышение дозы не приводило к существенным изменениям свойств материала. Ионы Cd^+ генерировались путем электронной бомбардировки, которая обеспечивала высокую точность контроля параметров ионного пучка.

Результаты экспериментов и их обсуждение

Рис. 2 демонстрирует изменение поверхностной концентрации цинка в соединении ZnTe под воздействием бомбардировки ионами аргона Ar^+ с энергией E_0 = 1 кэВ при комнатной температуре.

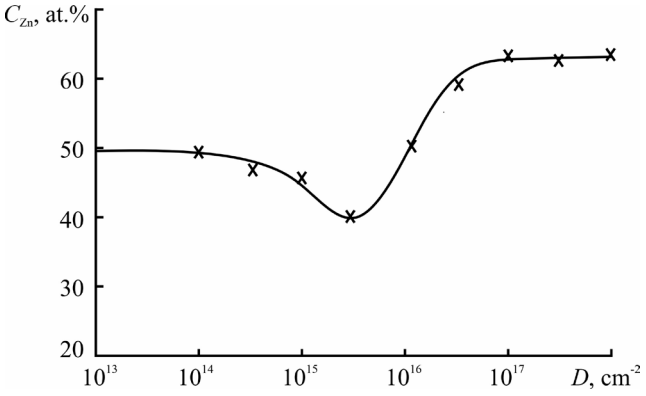


Рис. 2. Зависимость поверхностной концентрации цинка в пленке ZnTe/Si(111) от дозы облучения после ее бомбардировки ионами Ar^+ с энергией E_0 = 1 кэВ (температура комнатная)

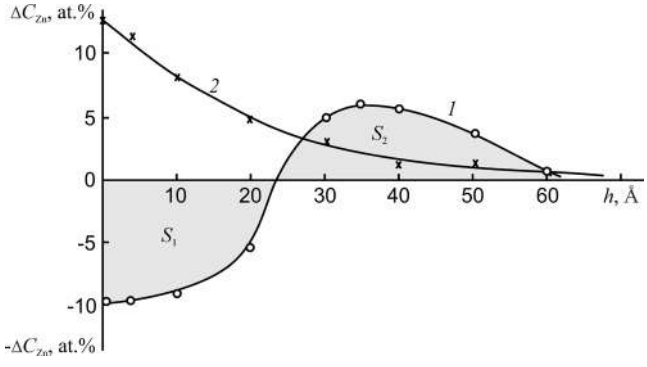


Рис. 3. Зависимости величины ΔC_{Zn} от глубины пленки ZnTe/Si(111), бомбардированной ионами Ar^+ с энергией E_0 = 1 кэВ и дозами облучения D, см$^{-2}$: $5 \cdot 10^{15}$ (кривая *1*) и $6 \cdot 10^{16}$ (кривая *2*)

Видно, что вплоть до дозы облучения $D = 2 \cdot 10^{14}$ см$^{-2}$ поверхностная концентрация цинка C_{Zn} остается практически неизменной, свидетельствуя о стабильности поверхности материала в начальной стадии ионного воздействия. Затем, в диапазоне доз от $2 \cdot 10^{14}$ до $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$, наблюдается снижение концентрации цинка на 7 – 8 ат.%. Последующее повышение дозы ионов приводит к росту концентрации C_{Zn}, достигающей 65 – 66 ат.% при $D = (4 - 6) \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$. После этого дальнейшее наращивание дозы облучения приводит к стабилизации концентрации цинка, которая далее практически не претерпевает изменений.

С целью детального анализа модификации поверхностной концентрации атомов цинка и теллура в процессе бомбардировки ионами аргона, была исследована зависимость от глубины пленки h отклонения концентрации цинка ΔC_{Zn} от стехиометрического состава при двух различных значениях дозы облучения: $5 \cdot 10^{15}$ и $6 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$ (рис. 3).

Из данных рис. 3 следует, что при дозе $D = 5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$ наблюдается снижение концентрации цинка до 8 – 10 ат.% в самых поверхностных слоях, которое остается практически неизменным до глубины h = 5 – 6 Å. В интервале значений h = 10 – 40 Å отмечается увеличение ΔC_{Zn} примерно до 6 ат.%. При дальнейшем

увеличении глубины, величина ΔC_{Zn} монотонно снижается, стремясь к нулю при h = 60 – 65 Å, что свидетельствует о восстановлении стехиометрического состава, характерного для теллурида цинка. Убывание концентрации цинка в интервале значений h = 0 – 20 Å, вероятно, обусловлено диффузией атомов Zn вглубь мишени или (с меньшей вероятностью) диффузией атомов Te к поверхности (если принять во внимание существенную разницу в массах атомов Te и Zn). Можно видеть, что площади S_1 и S_2 под кривой *1* различаются незначительно, что позволяет предположить отсутствие заметного испарения атомов Zn (а также Te). При более высоких дозах бомбардировки ионами ($D \geq 6 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$, см. кривую *2* на рис. 3) значение ΔC_{Zn} в приповерхностных слоях пленки возрастает до 10 – 12 ат.%, затем монотонно снижается с ростом величины h. На глубине 50 – 60 Å значение ΔC_{Zn} составляет около 1 – 2 ат.%, а при $h \geq 60$ Å оно практически не изменяется.

По всей вероятности, при высоких дозах ионной бомбардировки, наряду с диффузией атомов теллура к поверхности, происходит их десорбция из поверхностных слоев, что приводит к «металлизации» поверхностных слоев пленки ZnTe. При этом ее поверхностные слои полностью разупорядочиваются.

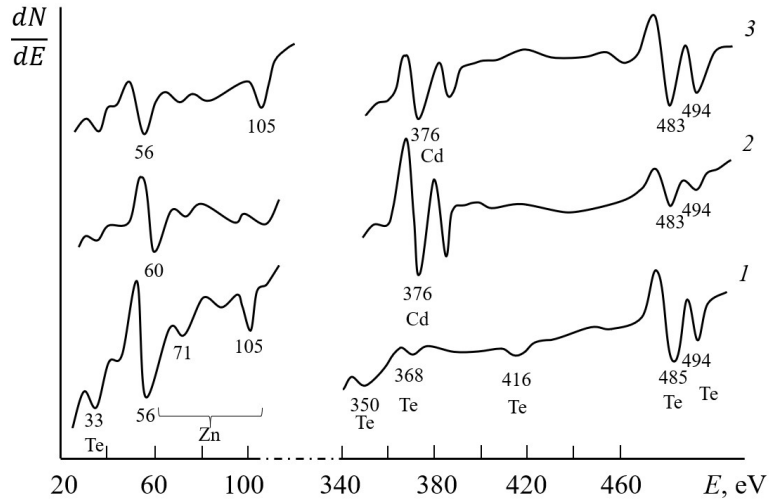


Рис. 4. Оже-спектры образцов на разных этапах исследования:
исходный образец ZnTe(111) (кривая *1*); подвергнутый имплантации ионами Cd^+ (E_0 = 1 кэВ, $D_s = 8 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$) (2); после ионной имплантации и 40-мин. отжига при температуре T = 850 K (*3*). Числа отражают позиции пиков (эВ)

На рис. 4 представлены Оже-спектры образцов ZnTe, подвергшегося имплантации ионами Cd^+ с энергией E_0 = 1 кэВ и дозой $D_s = 8 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$, зарегистрированные до и после отжига при температуре T = 850 K в течение 40 мин. Известно, что анализ изменения положения и формы низкоэнергетических пиков, обусловленных участием электронов валентной зоны, позволяет получать информацию об образовании новых соединений.

Концентрацию атомов C_x в приповерхностных слоях можно оценить на основе информации об интенсивности высокоэнергетических пиков, по следующей формуле [38]:

$$C_x = \frac{I_x / S_x}{\sum_{i=1} \frac{I_i}{S_i}},$$

где I_i, I_x – интенсивности Оже-пиков; S_i, S_x – коэффициенты Оже-чувствительности.

Для определения концентрации атомов элементов использовались Оже-пики с значениями энергии

Zn: E = 994 эВ; Te: E = 483 эВ; Cd: E = 376 эВ.

В Оже-спектре неимплантированной пленки ZnTe отчетливо прослеживаются характерные Оже-пики цинка Zn и теллура Te. Количественный анализ спектров показал, что поверхностная концентрация цинка составляет приблизительно 49 ат.%, а теллура – около 51 ат.%. Процесс имплантации ионов Cd^+ приводит к разложению соединения ZnTe с одновременным внедрением атомов Cd в решетку ZnTe. После ионной имплантации в Оже-спектре наблюдаются выраженные пики цинка и кадмия, в то время как интенсивность пиков теллура значительно снижается, вплоть до полного исчезновения малоинтенсивных пиков, что свидетельствует о преимущественной десорбции атомов теллура с поверхности образца. При этом наблюдается смещение основного низкоэнергетического пика (56 эВ), характерного для ZnTe, на 4 эВ в область более высоких энергий. Это обусловлено тем, что имплантация ионов Cd^+ индуцирует разложение исходного образца ZnTe и резкое снижение концентрации теллура; в результате энергия пика приближается к значению, свойственному чистому цинку. Анализ, проведенный с учетом высокоэнергетических пиков полного Оже-спектра, выявил, что концентрации атомов кадмия, цинка и теллура на поверхности составляют значения приблизительно 48, 40 и 12 ат.%, соответственно.

После отжига при температуре 850 K в течение 40 мин, положение пика 60 эВ вновь смещается в сторону более низких энергий. Концентрации атомов кадмия и цинка снижаются до 23 − 25 ат.%, а теллура возрастает до 50 − 52 ат.%, что указывает на формирование монокристаллической пленки с приблизительным составом $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ (см. кривую *3* на рис. 4).

Исследование электронной структуры поверхностных слоев, включая плотность состояний электронов и параметры энергетических зон, было выполнено с применением методов ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) и спектроскопии поглощения света [39].

На рис. 5 представлены спектры фотоэлектронов, полученные при энергии фотонов $h\nu = 10{,}8$ эВ для образца ZnTe, имплантированного ионами Cd^+ с энергией $E_0 = 1$ кэВ и дозой $D = 8\cdot10^{16}$ см$^{-2}$, до и после термической обработки при температуре $T = 850$ K.

В спектре чистого ZnTe отчетливо прослеживаются два выраженных пика при энергиях связи приблизительно –1,4 и –5,2 эВ, а также характерная особенность при $E_{SS} = -0{,}5$ эВ, предположительно связанная с существованием поверхностных состояний. Подробные сведения о возможных механизмах формирования данных пиков представлены в табл. 1.

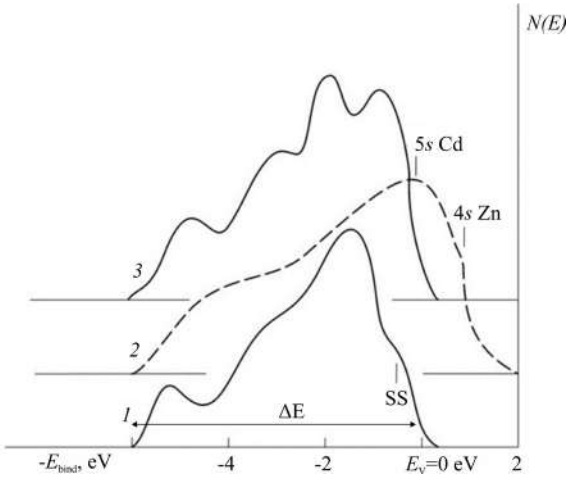


Рис. 5. Результаты регистрации УФЭС на разных этапах исследования:
исходный образец ZnTe(111) (кривая *1*); подвергнутый имплантации ионами Cd^+ ($E_0 = 1$ кэВ, $D_s = 8\cdot10^{16}$ см$^{-2}$) (*2*); после ионной имплантации и 40-мин. отжига при температуре $T = 850$ K (*3*);
SS (Surface state) − поверхностное состояние

Анализ данных в табл. 1 показывает, что спектральные пики чистого теллурида цинка обусловлены возбуждением электронов из гибридизированных состояний 4*s* Zn + 5*p* Te и 5*s*-состояний Te. Ионная имплантация приводит к смещению начала спектра в область более высоких энергий, достигая значения около 1,8 эВ. Кроме того, отмечается увеличение ширины спектра (ΔE), исчезновение основных пиков, характерных для ZnTe (111), и появление новых пиков, которые, по всей видимости, связаны с образованием включений Zn, Cd и их соединений (см. табл. 1). При этом положение энергетических уровней потолка валентной зоны E_v и уровня Ферми E_F полностью совпадают, что указывает на металлический характер ионно-легированных слоев. В спектре пленки $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$, полученной в результате термической обработки ионно-имплантированного теллурида цинка при температуре $T = 850$ K, выявляется характерная спектральная особенность,

Таблица 1

Этапы УФЭС-исследований образцов, подвергнутых бомбардировке ионами Cd^+ и отжигу, а также трактовка результатов

Этап	Образец	Результат УФЭС	
		E_{bind}, эВ	Механизм формирования пика
1. Исходный	ZnTe (111)	–0,5	Поверхностное состояние (SS)
		–1,4	4*s* Zn + 5*p* Te
		–5,2	5*s* Te
2. Имплантация E_0 = 1 кэВ, $D_s = 8\cdot10^{16}$ см$^{-2}$	ZnTe	+0,2	5*s* Cd
		+0,8	4*s* Zn
		–3,8	5*s* Te
3. Отжиг при температуре T = 850 K	$Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$/ZnTe	–0,3	Поверхностное состояние (SS)
		–0,8	4*s* Zn + 5*p* Te
		–1,8	5*s* Cd + 5*p* Te
		–2,8	4*s* Zn + 5*p* Te
		–4,6	5*s* Te

сопровождаемая появлением четырех отчетливых пиков. Детальная интерпретация этих пиков также представлена в табл. 1. Важно отметить, что положение энергетического уровня E_v претерпевает сдвиг в сторону меньших энергий приблизительно на 2 эВ.

Ширина запрещенной зоны исследованных образцов оценивалась посредством анализа оптических спектров поглощения (пропускания).

На рис. 6 представлены зависимости коэффициента пропускания света T_{ph} от энергии фотонов $h\nu$ для чистого ZnTe(111) и пленки $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$/ZnTe(111), полученной постимплантационным отжигом при T = 850 K. Анализ рис. 6 показывает, что коэффициент прохождения света в чистом образце ZnTe остается практически неизменным до значения энергии фотонов около 2,1 эВ, что свидетельствует об отсутствии заметного поглощения света в этой области спектра. В диапазоне энергий $h\nu$ = 2,1 – 2,3 эВ наблюдается резкое падение коэффициента пропускания до нулевого значения, обусловленное интенсивным поглощением света. Экстраполяция указанного отрезка кривой к оси $h\nu$ позволяет приближенно оценить ширину запрещенной зоны E_g. Аналогичным образом было найдено значение E_g для пленки $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$, которое составило примерно 1,75 эВ. Следует отметить, что во втором случае резкое снижение величины T_{ph} начинается уже при значении около 1,7 эВ, однако полное поглощение света достигается лишь при ~2,2 эВ. По-видимому, ультратонкие пленки (менее 40 Å) обладают некоторой остаточной прозрачностью даже при значениях $h\nu > E_g$, пропуская свет с малой интенсивностью.

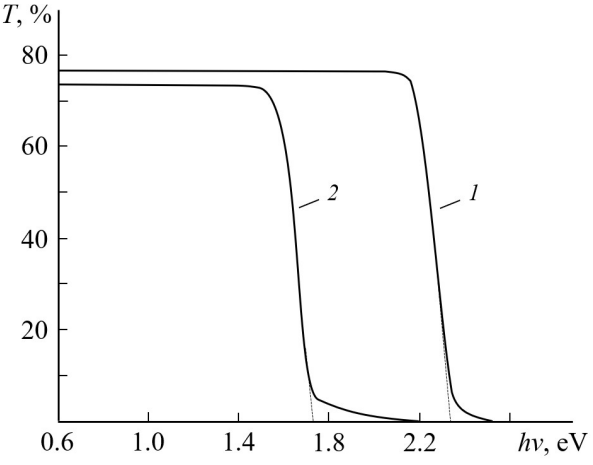


Рис. 6. Зависимости коэффициента пропускания света от энергии фотонов для исходного образца ZnTe (кривая *1*) и финального $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$/ZnTe(111) (кривая *2*). Толщина пленок 30 – 35 Å, температура комнатная

В табл. 2 представлены зонно-энергетические и оптические параметры, полученные на основе анализа спектров фотоэлектронов и поглощения света для исходного и финального образцов (ZnTe и $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$/ZnTe, соответственно).

Таблица 2

Зонно-энергетические и оптические параметры пленок, полученные из УФЭС и оптических спектров пропускания

Объект исследования	Зонно-энергетические параметры, эВ			Оптические параметры при $h\nu = 1{,}2$ эВ		
	E_v	E_g	χ	R	T_{ph}	K
ZnTe	5,30	2,35	2,95	22	78	0
$Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$	5,35	1,75	3,60	26	74	

Обозначения: E_v – энергия уровня потолка валентной зоны, E_g – ширина запрещенной зоны; χ – энергия сродства к электрону; R, T_{ph}, K – коэффициенты отражения, пропускания и поглощения света, соответственно; $h\nu$ – энергия фотона.

Значение энергии E_v определялась как разность между энергией фотона и шириной спектра фотоэлектронов:

$$E_v = h\nu - \Delta E.$$

Оптические параметры образцов установлены при энергии фотонов $h\nu = 1{,}2$ эВ. Анализ данных в табл. 2 показал существенные различия в зонно-энергетических и оптических параметрах пленки $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ и подложки ZnTe. В частности, ширина запрещенной зоны для трехкомпонентной пленки составляет приблизительно 1,75 эВ, тогда как для подложки этот параметр равен 2,35 эВ. Последующие исследования продемонстрировали, что при повышении температуры отжига до 900 K значение x в системе $Zn_{1-x}Cd_x$ достигало 0,6, а при температуре 950 K – увеличивалось до 0,8. При дальнейшем повышении температуры в диапазоне 1000 – 1050 K происходило полное испарение атомов кадмия из пленки. Варьирование энергии бомбардировки ионами Cd^+ в пределах от 1 до 10 кэВ даст возможность контролируемо изменять значения толщины пленки $Zn_{1-x}Cd_xTe$ от 30 – 35 Å до 900 – 1000 Å, что открывает заманчивые перспективы для точной настройки свойств материала.

Заключение

В настоящей работе впервые детально исследовано воздействие бомбардировки поверхности пленки теллурида цинка ZnTe низкоэнергетическими ионами аргона Ar^+ и кадмия Cd^+ на изменение элементного состава и электронную структуру приповерхностных слоев объекта.

Обнаружено, что облучение ионами Ar^+ в низкодозовом диапазоне ($D \le 5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$) приводит к обогащению поверхности ZnTe атомами теллура, в то время как при увеличении дозы ($D \ge 5 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$) наблюдается преобладание атомов цинка, а имплантация ионов Cd^+ вызывает аккумуляцию атомов цинка и кадмия на поверхности ZnTe.

Путем имплантации ионов Cd^+ в монокристаллический ZnTe с последующим контролируемым отжигом при температуре 850 K, сформированы тонкие пленки твердого раствора $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ с равномерной толщиной в пределах значений 30 – 35 Å.

Методами фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии оптического пропускания изучены распределение плотности состояний валентных электронов, параметры энергетических зон и оптические характеристики полученных тонких пленок $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$. Установлено, что на спектрах валентных электронов $Zn_{0,5}Cd_{0,5}Te$ имеется два максимума плотностных состояний при энергиях связи –1,4 и –5,2 эВ. Эти максимумы отражают особенности распределения электронной плотности в валентной зоне исследуемого материала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Iniewski K.** CdTe and CdZnTe materials: Material properties and applications. Cham, Switzerland: Springer, 2024. 259 p.

2. **Suthar D., Chuhadiya S., Sharma R., Himanshu, Dhaka M. S.** An overview on the role of ZnTe as an efficient interface in CdTe thin film solar cells: A review // Materials Advances. 2022. Vol. 3. No. 22. Pp. 8081–8107.

3. **Zhao Y., Jia Z., Lin Q.** Optoelectronic properties and charge carrier dynamics of polycrystalline ZnTe thin films // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2025. Vol. 16. No. 24. Pp. 5979–5985.

4. **Yilmaz S., Başol B. M., Olğar M. A., Bayazıt T., Küçükömeroğlu T., Bacaksız E.** Comparative analysis of chloride-treated ZnTe films in photodetector devices // Materials Science in Semiconductor Processing. 2025. Vol. 198. 1 November. P. 109733.

5. **Zhang L., Liu C., Yang Q., Cui L., Zeng Y.** Growth and characterization of highly nitrogen doped ZnTe films on GaAs (001) by molecular beam epitaxy // Materials Science in Semiconductor Processing. 2015. Vol. 29. January. Pp. 351–356.

6. **Эргашов Е. С., Ташмухамедова Д. А., Джурабекова Ф. Г., Умирзаков Б. Е.** Влияние микронеоднородностей поверхности на состав и электронные свойства пленок CdTe/Mo(111) // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2016. Т. 80. № 2. Ст. 157.

7. **Bagaev V. S., Zaytsev V. V., Kalinin V. V., Oktyabrskii S. R., Plotnikov A. F.** Excitonic luminescence of CdTe and $Cd_{0.87}Zn_{0.13}Te$ submonolayers in ZnTe films grown by molecular beam epitaxy // Solid State Communications. 1993. Vol. 88. No. 10. Pp. 777–780.

8. **Karczewski G., Maćkowski S., Kutrowski M., Wojtowicz T., Kossut J.** Photoluminescence study of CdTe/ZnTe self-assembled quantum dots // Applied Physics Letters. 1999. Vol. 74. No. 20. Pp. 3011–3013.

9. **Moger S. N., Mahesha M. G.** Investigation on ZnTe/$Cd_xZn_{1-x}Te$ heterostructure for photodetector applications // Sensors and Actuators A: Physical. 2020. Vol. 315. 1 November. P. 112294.

10. **Hernández C. V.** Introduction to Raman spectroscopy and its applications. Cham, Switzerland: Springer, 2025. 244 p.

11. **Kapitonov A. M., Woggon U., Kayser D., Hommel D., Itoh T.** Luminescence of epitaxial submonolayer CdSe nanostructures in ZnSe // Journal of Luminescence. 2005. Vol. 112. No. 1–4. Pp. 177–180.

12. **Kim J. S., Kim H. M., Park H. L., Choi J. C.** Growth and optical characterization of single quantum well structure of submonolayer ZnS/ZnTe // Solid State Communications. 2006. Vol. 137. No. 3. Pp. 115–119.

13. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Boltaev E. U., Dzhurakhalov A. A.** Obtaining of epitaxial films of metal silicides by ion implantation and molecular beam epitaxy // Materials Science and Engineering: B – Solid State Materials for Advanced Technology. 2003. Vol. 101. No. 1–3. Pp. 124–127.

14. **Kryshtab T., Andraca J. A., Borkovska L. V., Korsunska N. O., Venger Ye. F., Sadofyev Yu. G.** Effect of CdTe monolayer insertion on CdZnTe/ZnTe quantum well characteristics // Microelectronics Journal. 2008. Vol. 39. No. 3–4. Pp. 418–422.

15. **Fan J., Ouyang L., Liu X., Ding D., Furdyna J. K., Smith D. J., Zhang Y. H.** Growth and material properties of ZnTe on GaAs, InP, InAs and GaSb (001) substrates for electronic and optoelectronic device applications // Journal of Crystal Growth. 2011. Vol. 323. No. 1. Pp. 127–131.

16. **Умирзаков Б. Е., Донаев С. Б.** Создание ионной бомбардировкой упорядоченных зародышей для получения наноразмерных структур Si на поверхности пленок CaF_2 // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017. № 7. С. 70–73.

17. **Agekyan V., Chukeev M., Karczewski G., Serov A., Filosofov N., Reznitski A.** Exciton spectra and energy transfer in CdTe/ZnTe double quantum wells grown by atomic-layer epitaxy // Semiconductors. 2019. Vol. 53. No. 16. Pp. 2060–2063.

18. **Абдуваитов А. А., Болтаев Х. Х., Умирзаков Б. Е., Ташмухамедова Д. А., Абдурахманов Г.** Изучение изменения состава поверхности CdTe при имплантации ионов O^{2+} и последующего отжига // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2024. Т. 88. № 11. С. 1830–1834.

19. **Sawicki K., Malinowski F. K., Galkowski K., Jakubczyk T., Kossacki P., Pacuski W., Suffczinski J.** *Single-color*, *in situ* photolithography marking of individual CdTe/ZnTe quantum dots containing a single Mn^{2+} ion // Applied Physics Letters. 2015. Vol. 106. No. 1. P. 012101.

20. **Samin A. J., Petrosky J. C.** An analysis of point defects in ZnTe using density functional theory calculations // Journal of Alloys and Compounds. 2022. Vol. 921. 15 November. P. 166017.

21. **Рыжков М. С., Козлов Д. А., Худайбердиев Д. А., Квон З. Д., Михайлов Н. Н.** Интерференционный транспорт в двумерном топологическом изоляторе в CdHgTe квантовой яме // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 117. № 1–2 (1). С. 50–54.

22. **Щербаков И. П., Дунаев А. А., Еронько С. Б., Чмель А. Е.** Спектроскопическое исследование примесных и собственных нарушений строения кристаллитов в керамике ZnTe при механической обработке // Письма в ЖТФ. Т. 47. № 4. С. 26–28.

23. **Тарасов А. С., Михайлов Н. Н., Дворецкий С. А., Менщиков Р. В., Ужаков И. Н., Кожухов А. С., Федосенко Е. В., Терещенко О. Е.** Получение атомарно-чистых и структурно-упорядоченных поверхностей эпитаксиальных пленок CdTe для последующей эпитаксии // Физика и техника полупроводников. 2021. Т. 55. № 9. С. 748–753.

24. **Martinez A. M., Giudici P., Trigubo A. B., D'Elia R., Heredia E., Ramelli R., Gonzalez R., Aza F., Gilabert U.** Crystalline quality, composition homogeneity, tellurium precipitates/inclusions concentration, optical transmission, and energy band gap of Bridgman grown single-crystalline $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ($0 \le x \le 0.1$) // Materials. 2021. Vol. 14. No. 15. P. 4207.

25. **Дворецкий С. А., Ступак М. Ф., Михайлов Н. Н., Макаров С. Н., Елесин А. Г., Верхогляд А. Г.** Исследование кристаллического состояния слоев молекулярно-лучевой эпитаксии гетероструктур (013)HgCdTe/CdTe/ZnTe/GaAs методом генерации второй гармоники // Физика и техника полупроводников. 2022. Т. 56. № 8. С. 780–787.

26. **Ступак М. Ф., Михайлов Н. Н., Дворецкий С. А., Якушев М. В., Икусов Д. Г., Макаров С. Н., Елесин А. Г., Верхогляд А. Г.** Возможности характеризации кристаллических параметров структур $Cd_xHg_{1-x}Te$ на подложке из GaAs методом генерации на отражение второй гармоники зондирующего излучения // Физика твердого тала. 2020. Т. 62. № 2. С. 252–259.

27. **Ушаков В. В., Клевков Ю. В.** Микрофотолюминесценция нелегированного монокристаллического теллурида цинка, полученного неравновесными парофазными методами // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. № 9. С. 1029–1033.

28. **Ступак М. Ф., Дворецкий С. А., Михайлов Н. Н., Макаров С. Н., Елесин А. Г.** Измерение локальных напряжений в поверхностных слоях многослойных структур нуль-методом с использованием фазового синхронизма // Письма в Журнал технической физики. 2024. Т. 50. № 1. С. 32–35.

29. **Chemam R., Bouabellou A., Grob J. J., Muller D., Schmerber G.** ZnTe nanoparticles formed by ion implantation in a SiO_2 layer on silicon // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2004. Vol. 216. February. Pp. 116–120.

30. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Ruzibaeva M. K., Djurabekova F. G., Danaev S. B.** Investigation of change of the composition and structure of the CaF_2/Si films surface at the low-energy bombardment // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2014. Vol. 326. 1 May. Pp. 322–325.

31. **Исаханов З. А., Мухтаров З. Э., Умирзаков Б. Е., Рузибаева М. К.** Оптимальные режимы ионной имплантации и отжига для стимулирования вторичной отрицательной ионной эмиссии // Журнал технической физики. 2011. Т. 8. № 4. С. 117–120.

32. **Hassan A. M., Diab F., Kotp E. F., Al-Kashef G., Shaaban E. R., Metawa A. E.** Implantation of Cu onto ZnTe thin film using plasma focus device for optoelectronic applications // Optical Materials. 2021. Vol. 117. July. P. 111182.

33. **Abduvayitov A. A., Tashmukhamedova D. A., Umirzakov B. E., Khujaniyozov J. B., Bekpulatov I. R., Loboda V. V.** Effect of argon ion bombardment on the composition, electronic structure and physical properties of cadmium fluoride // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2024. Vol. 17. No. 3. Pp. 87–96.

34. **Ташмухамедова Д. А.** Исследование состава и электронной структуры границы раздела $CoSi_2$/Si // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2006. Т. 70. № 8. С. 1228–1230.

35. **Mahmood W., Awan S.U., Din A.U., et al.** Pronounced impact of *p*-type carriers and reduction of bandgap in semiconducting ZnTe thin films by Cu doping for intermediate buffer layer in heterojunction solar cells // Materials. 2019. Vol. 12. No. 8. P. 1359.

36. **Донаев С. Б., Ташатов А. К., Умирзаков Б. Е.** Влияние бомбардировки ионами Ar^+ на состав и структуру поверхности нанопленок $CoSi_2$/Si(111) // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2015. № 4. С. 95–98.

37. **Абдувайитов А. А., Болтаев Х. Х., Розиков Г. А.** Изучение состава неконтролируемых примесей и профиля их распределения на границе раздела Ni–CdS // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2022. № 10. С. 48–51.

38. **Ghosh K., Ghorai G., Sahoo P. K.** Cathodoluminescence and structural properties of ZnTe nanocrystals synthesized from Te/ZnO thin films // Journal of Alloys and Compounds. 2023. Vol. 960. 15 October. P. 170655.

39. **Davis L. E., MacDonald N. C., Palmberg P. W., Riach G. E., Weber R. E.** Handbook of Auger electron spectroscopy. Second edition. Minnesota (USA): Physical Electronics Industry Inc., 1976. 252 p.

40. **Болтаев Х. Х., Ташмухамедова Д. А., Умирзаков Б. Е.** Состав и электронные свойства наноразмерных фаз и нанопленок силицидов металлов, созданных методом ионной имплантации в сочетании с отжигом // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2014. № 4. С. 24–29.

REFERENCES

1. **Iniewski K.,** CdTe and CdZnTe materials: Material properties and applications, Springer, Cham, Switzerland, 2024.

2. **Suthar D., Chuhadiya S., Sharma R., et al.,** An overview on the role of ZnTe as an efficient interface in CdTe thin film solar cells: A review, Mater. Adv. 3 (22) (2022) 8081–8107.

3. **Zhao Y., Jia Z., Lin Q.,** Optoelectronic properties and charge carrier dynamics of polycrystalline ZnTe thin films, J. Phys. Chem. Lett. 16 (24) (2025) 5979–5985.

4. **Yilmaz S., Başol B. M., Olğar M. A., et al.,** Comparative analysis of chloride-treated ZnTe films in photodetector devices, Mat. Sci. Semicond. Process. 198 (1 Nov) (2025) 109733.

5. **Zhang L., Liu C., Yang Q., et al.,** Growth and characterization of highly Nitrogen doped ZnTe films on GaAs (001) by molecular beam epitaxy, Mat. Sci. Semicond. Process. 29 (Jan) (2015) 351–356.

6. **Ergashov Y. S., Tashmukhamedova D. A., Djurabekova F. G., Umirzakov B. E.,** Effect of surface microroughness on the composition and electronic properties of CdTe/Mo(111) films, Bull. Russ. Acad. Sci., Phys. 80 (2) (2016) 138.

7. **Bagaev V. S., Zaytsev V. V., Kalinin V. V., et al.,** Excitonic luminescence of CdTe and $Cd_{0.87}Zn_{0.13}Te$ submonolayers in ZnTe films grown by molecular beam epitaxy, Solid State Commun. 88 (10) (1993) 777–780.

8. **Karczewski G., Maćkowski S., Kutrowski M., et al.,** Photoluminescence study of CdTe/ZnTe self-assembled quantum dots, Appl. Phys. Lett. 74 (20) (1999) 3011–3013.

9. **Moger S. N., Mahesha M. G.,** Investigation on ZnTe/$Cd_xZn_{1-x}Te$ heterostructure for photodetector applications, Sens. Actuat. A-Phys. 315 (1 Nov) (2020) 112294.

10. **Hernández C. V.,** Introduction to Raman spectroscopy and its applications, Springer Cham, Switzerland, 2025.

11. **Kapitonov A. M., Woggon U., Kayser D., et al.,** Luminescence of epitaxial sub-monolayer CdSe nanostructures in ZnSe, J. Lumin. 112 (1–4) (2005) 177–180.

12. **Kim J. S., Kim H. M., Park H. L., Choi J. C.,** Growth and optical characterization of single quantum well structure of submonolayer ZnS/ZnTe, Solid State Commun. 137 (3) (2006) 115–119.

13. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Boltaev E. U., Dzhurakhalov A. A.,** Obtaining of epitaxial films of metal silicides by ion implantation and molecular beam epitaxy, Mater. Sci. Eng. B. 101 (1–3) (2003) 124–127.

14. **Kryshtab T., Andraca J. A., Borkovska L. V., et al.,** Effect of CdTe monolayer insertion on CdZnTe/ZnTe quantum well characteristics, Microelectron. J. 39 (3–4) (2008) 418–422.

15. **Fan J., Ouyang L., Liu X., et al,** Growth and material properties of ZnTe on GaAs, InP, InAs and GaSb (001) substrates for electronic and optoelectronic device applications. J. Cryst. Growth. 323 (1) (2011) 127–131.

16. **Umirzakov B. E., Donaev S. B.,** On the creation of ordered nuclei by ion bombardment for obtaining nanoscale Si structures on the surface of CaF_2 films, J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 11 (4) (2017) 746–748.

17. **Agekyan V., Chukeev M., Karczewski G., et al.,** Exciton spectra and energy transfer in CdTe/ZnTe double quantum wells grown by atomic-layer epitaxy, Semiconductors. 53 (16) (2019) 2060–2063.

18. **Abduvayitov A. A., Boltaev Kh. Kh., Umirzakov B. E., et al.,** Analyzing the change in the composition of a CdTe surface upon implanting ions O^{2+} and subsequent annealing. Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 88 (11) (2024) 1850–1854.

19. **Sawicki K., Malinowski F. K., Galkowski K., et al.,** *Single-color, in situ* photolithography marking of individual CdTe/ZnTe quantum dots containing a single Mn^{2+} ion, Appl. Phys. Lett. 106 (1) (2015) 012101.

20. **Samin A. J., Petrosky J. C.,** An analysis of point defects in ZnTe using density functional theory calculations, J. Alloys Compnd. 921 (15 Nov) (2022) 166017.

21. **Ryzhkov M. S., Kozlov D. A., Khudaiberdiev D. A., et al.,** Interference transport in a two-dimensional topological insulator in a CdHgTe quantum well, JETP Letters. 117 (1) (2023) 44–47.

22. **Shcherbakov I. P., Dunaev A. A., Eron'ko S. B., Chmel' A. E.,** Spectroscopic investigation of impurity and intrinsic distortions of the crystallite structure in ZnTe ceramics during mechanical treatment, Tech. Phys. Lett. 47 (2) (2021) 181–183.

23. **Tarasov A. S., Mikhailov N. N., Dvoretsky S. A., et al.,** Preparation of atomically clean and structurally ordered surfaces of epitaxial CdTe films for subsequent epitaxy, Semiconductors. 55 (1) (2021) S62–S66.

24. **Martinez A. M., Giudici P., Trigubo A. B., et al.,** Crystalline quality, composition homogeneity, tellurium precipitates/inclusions concentration, optical transmission, and energy band gap of Bridgman grown single-crystalline $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ($0 \le x \le 0.1$), Materials. 14 (15) (2021) 4207.

25. **Dvoretsky S. A., Stupak M. F., Mikhailov N. N., et al.,** Study of the crystalline state of MBE (013)HgCdTe/CdTe/ZnTe/GaAs heterostructure layers by the second harmonic generation method, Semiconductors. 56 (8) (2022) 562–569.

26. **Stupak M. F., Mikhailov N. N., Dvoretskii S. A., et al.,** Possibilities of characterizing the crystal parameters of $Cd_xHg_{1-x}Te$ structures on GaAs substrates by the method of generation of the probe-radiation second harmonic in reflection geometry, Physics of the Solid State. 62 (2) (2020) 252–259.

27. **Ushakov V. V., Klevkov Yu. V.,** Microphotoluminescence of undoped single-crystal zinc telluride produced by nonequilibrium vapor-phase growth techniques, Semiconductors. 39 (9) (2005) 993–997.

28. **Stupak M. F., Dvoretsky S. A., Mikhailov N. N., et al.,** Measurement of local stresses in the surface layers of multilayer structures by the null method using phase matching, Tech. Phys. Lett. 50 (1) (2024) 32–35.

29. **Chemam R., Bouabellou A., Grob J. J., et al.,** ZnTe formed by ion implantation in a SiO_2 layer on silicon, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 216 (Febr) (2004) 116–120.

30. **Umirzakov B. E., Tashmukhamedova D. A., Ruzibaeva M. K., et al.,** Investigation of change of the composition and structure of the CaF_2/Si films surface at the low-energy bombardment, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 326 (1 May) (2014) 322–325.

31. **Isakhanov Z. A., Mukhtarov Z. E., Umirzakov B. E., Ruzibaeva M. K.,** Optimum ion implantation and annealing conditions for stimulating secondary negative ion emission, Tech. Phys. 56 (4) (2011) 546–549.

32. **Hassan A. M., Diab F., Kotp E. F., et al.,** Implantation of Cu onto ZnTe thin film using plasma focus device for optoelectronic applications, Opt. Mater. 117 (Jul) (2021) 111182.

33. **Abduvayitov A. A., Tashmukhamedova D. A., Umirzakov B. E., et al.,** Effect of argon ion bombardment on the composition, electronic structure and physical properties of cadmium fluoride, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (3) (2024) 87–96.

34. **Tashmukhamedova D. A.,** Study of composition and electronic structure of $CoSi_2$/Si interface, Bull. Russ. Acad. Sci., Phys. 70 (8) (2006) 1409–1411.

35. **Mahmood W., Awan S. U., Din A. U., et al.,** Pronounced impact of *p*-type carriers and reduction of bandgap in semiconducting ZnTe thin films by Cu doping for intermediate buffer layer in heterojunction solar cells, Materials. 12 (8) (2019) 1359.

36. **Donaev S. B., Tashatov A. K., Umirzakov B. E.,** Effect of Ar^+-ion bombardment on the composition and structure of the surface of CoSi2/Si(111) nanofilms, J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 9 (2) (2015) 406–409.

37. **Abduvayitov A. A., Boltaev Kh. Kh., Rozikov G. A.,** Study of the composition of uncontrolled impurities and the profiles of their distribution at the Ni–CdS interface, J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 16 (5) (2022) 860–863.

38. **Ghosh K., Ghorai G., Sahoo P. K.,** Cathodoluminescence and structural properties of ZnTe nanocrystals synthesized from Te/ZnO thin films, J. Alloys Compnd. 960 (15 Oct) (2023) 170655.

39. **Davis L. E., MacDonald N. C., Palmberg P. W., et al.,** Handbook of Auger electron spectroscopy, 2-nd ed., Physical Electronics Industry Inc., Minnesota (USA), 1976.

40. **Boltaev Kh. Kh., Tashmukhamedova D. A., Umirzakov B. E.,** Structure and electronic properties of nanoscale phases and nanofilms of metal silicides produced by ion implantation in combination with annealing, J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 8 (2) (2014) 326–331.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ХУЖАНИЁЗОВ Жуманазар Бобокулович – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Республика Узбекистан.*
2100095, Республика Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2
KhujaniyozovJB@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6067-8196

УМИРЗАКОВ Балтоходжа Ерматович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Республика Узбекистан.*
2100095, Республика Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2
be.umirzakov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9815-2111

ТАШМУХАМЕДОВА Дилноза Артикбаевна – *доктор физико- математических наук, профессор кафедры технологий производства электронных аппаратов Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Республика Узбекистан.*
2100095, Республика Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2
ftmet@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5813-7518

ЛОБОДА Вера Владимировна – *кандидат физико-математических наук, директор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vera_loboda@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3103-7060

АБДУВАЙИТОВ Акбаржон Абдумаджитович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Ташкентского государственного технического университета имени Ислама Каримова, г. Ташкент, Республика Узбекистан.*
2100095, Республика Узбекистан, г. Ташкент, Университетская ул., 2
akbarjon.abduvayitov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-5732-6103

THE AUTHORS

KHUJANIYOZOV Jumanazar B.
Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
2 Universitet St., Almazar, Tashkent, 100095, Republic of Uzbekistan
KhujaniyozovJB@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6067-8196

UMIRZAKOV Baltokhodja E.
Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
2 Universitet St., Almazar, Tashkent, 100095, Republic of Uzbekistan
be.umirzakov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9815-2111

TASHMUKHAMEDOVA Dilnoza A.
Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
2 Universitet St., Almazar, Tashkent, 100095, Republic of Uzbekistan
ftmet@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5813-7518

LOBODA Vera V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vera_loboda@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3103-7060

ABDUVAYITOV Akbarjon A.
Tashkent State Technical University Named after Islam Karimov
2 Universitet St., Almazar, Tashkent, 100095, Republic of Uzbekistan
akbarjon.abduvayitov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-5732-6103

Статья поступила в редакцию 14.01.2026. Одобрена после рецензирования 12.02.2026. Принята 13.02.2026.
Received 14.01.2026. Approved after reviewing 12.02.2026. Accepted 13.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 539.1.043
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19209

ОБРАЗОВАНИЕ УСТОЙЧИВЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ ПРИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКЕ АЛЬФА-ОКСИДА ГАЛЛИЯ

А. И. Клевцов [1, 2] ✉, П. А. Карасев [1], А. И. Титов [1]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Акционерное общество "Научно-производственное предприятие «ЭЛАР»", Санкт-Петербург, Россия

✉ klevtsovanton@rambler.ru

Аннотация. В работе представлены результаты исследования накопления радиационных повреждений в α-Ga_2O_3 при последовательной бомбардировке ионами фтора и фосфора с различной энергией кэВ-диапазона. Установлено заметное влияние последовательности ионного облучения как на количество, так и профиль распределения устойчивых дефектов по глубине. Обсуждается физическая природа подобной некоммутативности.

Ключевые слова: оксид галлия, ионная имплантация, последовательное облучение, радиационный дефект, резерфордовское обратное рассеяние

Для цитирования: Клевцов А. И., Карасев П. А., Титов А. И. Образование устойчивых радиационных повреждений при последовательной ионной бомбардировке альфа-оксида галлия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 98–106. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.19209

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19209

RADIATION DEFECT FORMATION DURING SEQUENTIAL ION BOMBARDMENT OF ALPHA-GALLIUM OXIDE

A. I. Klevtsov [1, 2] ✉, P. A. Karaseov [1], A. I. Titov [1]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

[2] Joint-Stock Company "Research and Production Enterprise «ELAR»", St. Petersburg, Russia

✉ klevtsovanton@rambler.ru

Abstract. This paper presents the results of a study of radiation damage accumulation in α-Ga_2O_3 under sequential bombardment with fluorine and phosphorus ions with varying energies of the keV range. A significant effect of the ion irradiation sequence on both the number and depth distribution profile of stable defects was established. The physical nature of this noncommutativity is discussed.

Keywords: gallium oxide, ion implantation, sequential irradiation, radiation defects, Rutherford backscattering

For citation: Klevtsov A. I., Karaseov P. A., Titov A. I., Radiation defect formation during sequential ion bombardment of alpha-gallium oxide, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 98–106. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19209

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Клевцов А. И., Карасев П. А., Титов А. И., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Введение

Ионная имплантация является одним из ключевых процессов современной полупроводниковой технологии для селективной модификации свойств материалов. Хорошо известно, что облучение полупроводников ускоренными ионами всегда сопровождается образованием стабильных нарушений кристаллической структуры [1]. Эффективность такого радиационного повреждения зависит от целого ряда параметров, таких как масса и энергия ионов, плотность их потока, температура и состав мишени и т.п. [2, 3].

При создании полупроводниковых приборов широко используется последовательное облучение ионами с различной энергией и/или ионами разных химических элементов. Очевидным примером использования данного подхода может служить формирование необходимого распределения легирующих атомов примеси по глубине [4]. Несмотря на широкое практическое применение, закономерности и физические механизмы, определяющие итоговую степень структурного разупорядочения мишени при последовательном облучении, остаются для ряда полупроводниковых материалов недостаточно понятными, а для таких весьма актуальных полупроводников, как оксид галлия, практически неизученными.

В то же время из литературы известно, что накопление дефектов при последовательном облучении полупроводников ионами, обладающими различной энергией, и/или их типов, может быть как неаддитивным, так и некоммутативным процессом [5 – 7]. Это, в частности, означает, что результирующий профиль распределения структурных повреждений может оказаться не просто суммой профилей глубинных нарушений, сформированных отдельными ионными облучениями с соответствующими энергиями и дозами (неаддитивность). Кроме того, конечное распределение нарушений может драматически зависеть от порядка, в котором применялось облучение (см., например, такие сведения для кремния в работах [5, 6] и для нитрида галлия в [7]) (некоммутативность). Помимо этого, было установлено, что при некоторых комбинациях ионов и последовательностей бомбардировки второе облучение может даже уменьшать уровень радиационных повреждений, который был сформирован после первой имплантации [8 – 14].

Переход к более широкозонным оксидным полупроводникам открывает новые перспективы для силовой электроники и оптоэлектроники, но одновременно ставит вопрос о радиационной стойкости и особенностях дефектообразования в этих материалах, в частности при имплантации ускоренных ионов.

Одним из наиболее перспективных представителей данного семейства считается оксид галлия [15 – 19], существующий в нескольких политипных модификациях [15]. Моноклинная β-фаза оксида галлия (β-Ga_2O_3), ширина запрещенной зоны которого составляет около 4,8 эВ, уже активно исследуется и внедряется в производство диодов Шоттки [20] и полевых транзисторов [21]. В то же время метастабильной ромбоэдрической α-фазе оксида галлия (α-Ga_2O_3) со структурой корунда присущ ряд уникальных свойств:

большая ширина запрещенной зоны (до ~5,3 эВ),

высокое критическое поле пробоя (до ~8 МВ),

возможность эпитаксиального роста на сравнительно недорогих сапфировых подложках [22, 23].

Практическая реализация приборных структур на основе α-Ga_2O_3 неизбежно требует надежных методов локального легирования и изоляции, основным из которых остается ионная имплантация. Таким образом, для формирования основ ионно-лучевой модификации α-Ga_2O_3 необходимо понимать закономерности накопления и отжига радиационных дефектов в этом материале, в том числе при последовательном облучении. Однако, если формирование структурных нарушений и радиационная стойкость β-Ga_2O_3 в последние годы изучается довольно активно [15 – 22, 24], то данные о повреждениях в α-Ga_2O_3 пока остаются ограниченными [25 – 27], а работы по последовательной бомбардировке ионами разного типа и энергии до недавнего времени практически отсутствовали [28].

В настоящей работе впервые исследовано накопление радиационных повреждений в полупроводниковом соединении α-Ga_2O_3 в условиях последовательного облучения легкими ионами фтора F^+ и фосфора P^+ с энергиями кэВ-диапазона, используемого в промышленности.

© Klevtsov A. I., Karaseov P. A., Titov A. I., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Методика эксперимента

В работе исследованы эпитаксиальные слои α-Ga_2O_3 со структурой корунда толщиной около 2 мкм с ориентацией (0001), выращенные на *c*-плоскости сапфировой подложки методом хлорид-гидридной газофазной эпитаксии (*англ.* Hydride Vapour-Phase Epitaxy (HVPE)) в ООО «Совершенные кристаллы» (Санкт-Петербург) [29]. Образцы облучали ионами фтора и фосфора при комнатной температуре, с использованием ионного имплантера на 500 кВ (HVEE-500) в АО "Научно-производственное предприятие «ЭЛАР»" (Санкт-Петербург). Облучение проводили под углом 7° по отношению к кристаллографическому направлению [0001] для минимизации эффектов каналирования в кристалле.

Для проведения корректного анализа экспериментальных данных сравнение радиационного повреждения проводилось для одинакового количества смещений на атом (*англ.* Displacements per Atom (DPA)), генерируемых в мишени. Значения дозы ионов Φ_{DPA} были определены в приближении парных столкновений как отношение концентрации вакансий в максимуме профиля упругих потерь энергии (n_v) при заданном флюенсе ионов, рассчитанной с использованием кода TRIM [30], к атомной концентрации α-Ga_2O_3 (n_{at} = 1,03·10^{23} ат/см^3), так что $\Phi_{DPA} = (n_v \cdot \Phi) / n_{at}$, где Φ, см$^{-2}$, – флюенс.

Также плотность ионного потока, определяемая как $F_{DPA} = d\Phi_{DPA}/dt$, поддерживалась постоянной в единицах DPA/с. Все параметры использованных облучений приведены в таблице.

Таблица

Значения параметров использованного ионного облучения

Ион	Энергия		R_p	R_{pd}	1 DPA	Плотность ионного тока		
	кэВ	кэВ/аем	нм	нм	10^{14} см$^{-2}$	мкА/см^2	10^{11} см$^{-2}$·с$^{-1}$	10^{-3} DPA/с
F^+	25	1,3	30	17	10,61	0,41	25,4	2,4
	50	2,6	55	36	12,15	0,47	29,2	
	60	3,0	74	48	12,72	0,49	30,6	
P^+	40	1,3	30	17	6,28	0,24	15,1	
	80	2,6	55	36	6,48	0,25	15,6	

Обозначения: R_p – проективный пробег ионов примеси – положение максимума концентрации внедренной примеси; R_{pd} – максимум функции генерации первичных дефектов; DPA – количество смещений на атом.

Примечание. Во всех случаях использовались положительные, однократно заряженные ионы. Доза во всех случаях составляла 1,5 DPA.

Степень разупорядочения кристаллической структуры образцов после облучения измерялась методом резерфордовского обратного рассеяния в сочетании с каналированием (RBS/C). Для измерения использовался зондирующий пучок ионов гелия He^{++} с энергией 0,7 МэВ в кристаллографическом направлении [0001]. Детектор рассеянных частиц располагался под углом 170° относительно направления падающего пучка.

Экспериментальные результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены функции генерации первичных точечных дефектов – упругих потерь энергии (сплошные линии), рассчитанные по TRIM [30]. Значения максимума профиля концентрации внедренной примеси R_p и максимума функции генерации первичных дефектов R_{pd} также сведены в таблицу. Энергии ионов подбирались так, чтобы распределения первичных точечных дефектов для ионов F^+ (25 кэВ) и P^+ (40 кэВ), а также F^+ (50 кэВ) и P^+ (80 кэВ) были подобны друг другу (см. рис. 1). Для проведения второго облучения (с высокой энергией) энергия ионов выбиралась таким образом, чтобы максимум функции генерации дефектов располагался на глубине, соответствующей положению дефектов, образовавшихся в объеме при первом облучении (с низкой энергией).

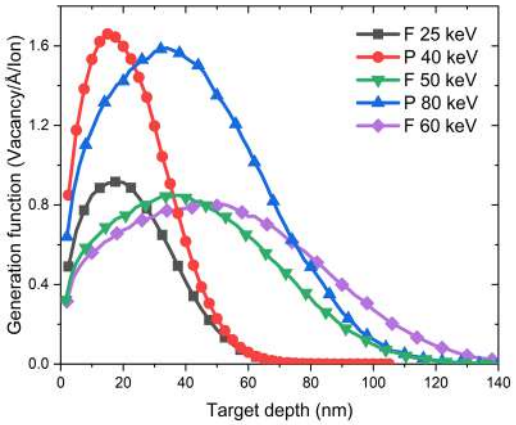


Рис. 1. Зависимости функции генерации первичных точечных дефектов в α-Ga_2O_3 от глубины образца, рассчитанной по TRIM для ионов фтора с энергиями 25 – 60 кэВ и ионов фосфора с энергиями 40 и 80 кэВ

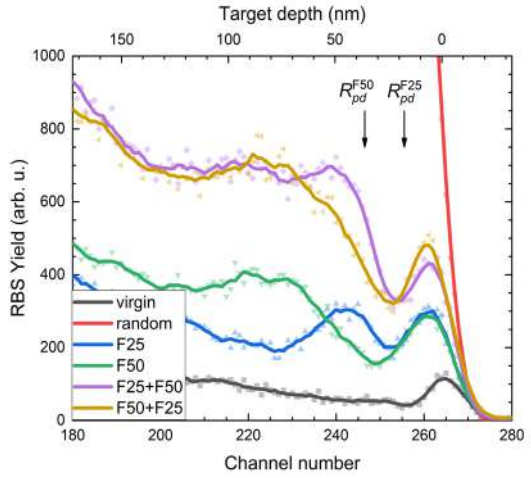


Рис. 2. Экспериментальные спектры резерфордовского обратного рассеяния при облучении образцов α-Ga_2O_3 ионами фтора с энергиями 25 и 50 кэВ разными способами: однократные и двукратные облучения в разной последовательности (см. легенду). Даны также кривые для необлученных образцов в ориентированном (virgin) и неориентированном (случайном (random)) направлениях зондирующего пучка.

Доза составляла 1,5 DPA для каждого отдельного облучения. Стрелками показаны положения максимумов функций генерации первичных точечных дефектов, соответствующих воздействию ионами фтора используемых энергий

На рис. 2 представлены экспериментальные RBS/C-спектры для случаев одиночного облучения ионами фтора 25 и 50 кэВ дозой 1,5 DPA. Спектры представляют собой зависимость числа зарегистрированных обратно-отраженных ионов гелия от номера канала мультиканального анализатора. На спектрах в обоих случаях наблюдаются два максимума: один в объеме образца – объемный пик дефектов (BDP); второй в области поверхности – поверхностный пик дефектов (SDP), связанный с образованием поверхностного аморфного слоя за счет диффузии первичных точечных дефектов из объема к поверхности, благодаря их подвижности [25]. Для ионов фтора с энергией 25 кэВ BDP располагается на спектре в области 246-го канала, что соответствует глубине примерно 35 нм и максимуму функции генерации для ионов фтора с энергией 50 кэВ, для которых, в свою очередь, BDP расположен в области 229-го канала, эквивалентного глубине около 62 нм.

Также на рис. 2 представлены результаты последовательного облучения ионами фтора для двух случаев: в первом сначала низкой энергией 25 кэВ, затем высокой 50 кэВ; во втором случае наоборот: сначала высокой энергией, затем низкой. Каждый этап облучения проводился одной и той же дозой: 1,5 DPA. Из данных рис. 2 следует, что конечный вид спектра, а следовательно, и распределение дефектов, сильно зависит от способа облучения, несмотря на одинаковые значения DPA и DPA/c. Действительно, когда первое облучение проводится ионами фтора низкой энергии, т.е. оказывается суммарное энергетическое воздействие 25 + 50 кэВ, после второго облучения наблюдается повышение BDP. И наоборот, величина BDP оказывается ниже при обратном порядке облучения.

Таким образом, облучение ионами фтора с энергиями 25 и 50 кэВ представляет собой некоммутативный процесс [28].

Далее были проведены эксперименты по проверке коммутативности ионной бомбардировки образцов α-Ga_2O_3 ионами фосфора. Как было указано выше, энергии облучения и ионами фосфора подбирались так, чтобы функции генерации первичных точечных дефектов были подобны соответствующим функциям для ионов F^+. Облучение проводилось той же дозой: 1,5 DPA. На рис. 3 показаны спектры резерфордовского обратного рассеяния для однократных облучений ионами фосфора по 40 и 80 кэВ; при этом положения BDP для них также находятся в области 246-го (глубина ~35 нм) и 229-го (~ 62 нм) каналов соответственно

[25, 26]. Результаты облучения ионами фосфора в разной последовательности, а именно 40 + 80 кэВ и 80 + 40 кэВ также представлены на рис. 3. Наблюдается значительное возрастание сигнала для последовательности низкая энергия – высокая энергия, а следовательно, и более интенсивное накопление устойчивых радиационных повреждений. Как и в случае облучения ионами фтора, бомбардировка ионами фосфора с энергиями 40 и 80 кэВ также является некоммутативным процессом.

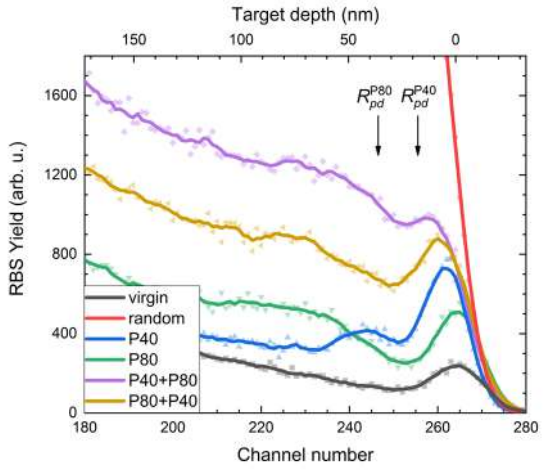


Рис. 3. Спектры резерфордовского обратного рассеяния, аналогичные приведенным на рис. 2, но для облучения ионами фосфора с энергиями 40 и 80 кэВ (см. легенду)

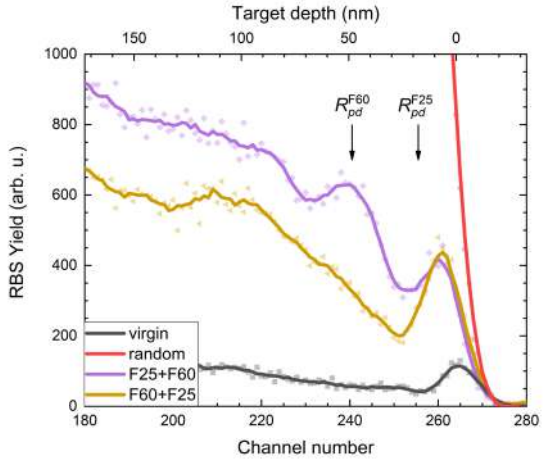


Рис. 4. Спектры, аналогичные приведенным на рис. 2, но соответствуют лишь двукратному облучению ионами фтора с энергиями 25 и 60 кэВ в разной последовательности

Наконец, в заключительном эксперименте энергия второго облучения ионами фтора была выбрана равной 60 кэВ. Подбор был сделан так, чтобы максимум генерации лежал несколько глубже положения BDP для ионов 25 кэВ. Дозы каждого этапа облучения также были равны 1,5 DPA. Итоговые RBS/C-спектры для случаев F^+ 25 + 60 кэВ и 60 + 25 кэВ представлены на рис. 4. Видно, что максимум генерации смещен вглубь образца относительно положения BPD F^+ 25 кэВ примерно на 13 нм, а для F^+ 60 кэВ BDP расположен в области 220-го канала (~90 нм). Как и в остальных случаях, обнаружена интенсификация дефектообразования для последовательности облучения низкая энергия – высокая энергия. Несмотря на увеличение энергии второго иона, облучение ионами фтора 25 + 60 кэВ также оказалось некоммутативным.

К настоящему времени были предложены два механизма ионной имплантации полупроводников (и продемонстрированы их возможности), приводящих к некоммутативности накопления структурных нарушений.

Механизм первый [25]: это нелинейность дозовых зависимостей структурных нарушений на разных глубинах для каждого типа бомбардирующего иона.

Механизм второй [7, 31]: это формирование на глубине более высокой концентрации стабильных повреждений при облучении ионами меньшей энергии, что приводит к более эффективному образованию устойчивых дефектов с участием подвижных точечных дефектов при последующем высокоэнергетичном облучении.

Именно второй механизм наблюдался нами экспериментально. В случае же, когда высокоэнергетичное облучение применялось первым, концентрация стабильных нарушений в объеме оказывалась ниже (по сравнению с низкоэнергетическим облучением) и подвижные точечные дефекты менее эффективно закреплялись на глубине и диффундировали к границе поверхностный аморфный слой/кристаллический слой. Для выяснения физической природы некоммутативности при последовательной имплантации ионов в образцы α-Ga_2O_3, очевидно, необходимы дополнительные исследования.

Заключение

В работе исследовано накопление радиационных повреждений в образцах альфа-оксида галлия при последовательном облучении ионами фтора, и отдельно ионами

фосфора (также последовательно) с разной энергией как ионов фтора так и ионов фосфора. Обнаружена некоммутативность этого процесса в облучаемом объекте при последовательном воздействии указанными ионами. Предложены возможные механизмы, объясняющие данный эффект. Понимание закономерностей и физической природы сильной зависимости интенсивности накопления устойчивых дефектов при имплантации ионов в разной последовательности позволит учитывать этот эффект при создании электронных приборов на основе полупроводникового соединения α-Ga_2O_3. Очевидно, что в дальнейшем необходимо продолжать как экспериментальные, так и теоретические исследования рассматриваемого явления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Фелдман Л., Майер Д.** Основы анализа поверхности и тонких пленок. Пер. с англ. М.: Мир, 1989. 342 с.

2. **Davies J. A.** High energy density collision cascades and spike effects (Chapter 4) // J. S. Williams, J. M. Poate (Eds.). Ion implantation and beam processing. Sydney, Australia: Academic Press, 1984. Pp. 81–97.

3. **Thompson D. A.** High density cascade effects // Radiation Effects. 1981. Vol. 56. No. 3–4. Pp. 105–150.

4. **Taube A., Kaminska E., Kozubal M., et al.** Ion implantation for isolation of AlGaN/GaN HEMTs using C or Al // Physica Status Solidi A. 2015. Vol. 212. No. 5. Pp. 1162–1169.

5. **Аброян И. А., Титов А. И., Хлебалкин А. В.** Образование дефектов в кремнии при комбинированном облучении ионами // Физика и техника полупроводников. 1979. Т. 13. № 2. С. 227–233.

6. **Аброян А. И., Конышев В. В., Титов А. И., Хлебалкин А. В.** Влияние состояния кристаллической структуры кремния на накопление дефектов при ионном облучении // Физика и техника полупроводников. 1981. Т. 15. № 1. С. 166–168.

7. **Titov A. I., Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Struchkov A. I.** The formation of radiation damage in GaN during successive bombardment by light ions of various energies // Vacuum. 2020. Vol. 173. March. P. 109149.

8. **Bai Q., Li L., Cheng F. F., Bin R., Fa T., Fu E., Yao S. D.** Study on microstructure and mechanical properties of He and H ion irradiated 6H-SiC // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 365. Part A, 15 December. Pp. 347–351.

9. **Bogh E., Hogild P., Stensgaard I.** Spatial distribution of defects in ion bombarded silicon and germanium // Radiation Effects. 1971. Vol. 7. No. 1–2. Pp. 115–121.

10. **Kool W. H., Roosendaal H. E., Wiggers L. W., Saris F. W.** Production and beam annealing of damage in carbon implanted silicon. II // Radiation Effects. 1978. Vol. 36. No. 1–2. Pp. 41–48.

11. **Аброян И. А., Никулина Л. М., Титов А. И.** Ионно-стимулированное упорядочение структуры предварительно облученного кремния // Физика и техника полупроводников. 1985. Т. 19. № 6. С. 1030–1034.

12. **Аброян И. А., Никулина Л. М.** Молекулярный эффект при имплантации легких ионов в полупроводники // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31. № 10. С. 1164–1167.

13. **Jiang W., Weber W. J., Zhang Y., Thevuthasan S., Shutthanandan V.** Ion beam analysis of irradiation effects in 6H–SiC // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2003. Vol. 207. No. 1. Pp. 92–99.

14. **Pelaz L., Marqués L. A., Barbolla J.** Ion-beam-induced amorphization and recrystallization in silicon // Journal of Applied Physics. 2004. Vol. 96. No. 11. Pp. 5947–5976.

15. **Stepanov S. I., Nikolaev V. I., Bougrov V. E., Romanov A. E.** Gallium oxide: properties and application – A review // Reviews on Advanced Materials Science. 2016. Vol. 44. No. 1. Pp. 63–86.

16. **Pearton S. J., Ren F., Mastro M.** (Eds.). Gallium oxide. Technology, devices and applications. Amsterdam, Netherlands: Elsevier Inc., 2019. 479 p.

17. **Pearton S. J., Ren F., Tadjer M., Kim J.** Perspective: Ga_2O_3 for ultra-high power rectifiers and MOSFETS // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 124. No. 22. P. 220901.

18. **Wellmann P. J.** Power electronic semiconductor materials for automotive and energy saving applications – SiC, GaN, Ga_2O_3, and diamond // Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. 2017. Vol. 643. No. 21. Pp. 1312–1322.

19. **Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al.** Ion implantation in β-Ga_2O_3: Physics and technology // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2021. Vol. 39. No. 3. P. 030802.

20. **Cai Y., Feng Z., Wang Z., et al.** Demonstration of the normally off β-Ga_2O_3 MOSFET with high threshold voltage and high current density // Applied Physics Letters. 2023. Vol. 123. No. 19. P. 193501.

21. **Farzana E., Roy S., Hendricks N. S., Krishnamoorthy S., Speck J. S.** Vertical PtO_x/Pt/β-Ga_2O_3 Schottky diodes with high permittivity dielectric field plate for low leakage and high breakdown voltage // Applied Physics Letters. 2023. Vol. 123. No. 19. P. 192102.

22. **Ahmadi E., Oshima Y.** Materials issues and devices of α- and β-Ga_2O_3 // Journal of Applied Physics. 2019. Vol. 126. No. 16. P. 160901.

23. **Polyakov A. Y., Nikolaev V. I., Yakimov E. B., Ren F., Pearton S. J., Kim J.** Deep level defect states in β-, α-, and ε-Ga_2O_3 crystals and films: Impact on device performance // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2022. Vol. 40. No. 2. P. 020804.

24. **Azarov A., Galeckas A., Mikhaylov A., Nikolskaya A., Tetelbaum D., Korolev D., Monakhov E., Kuznetsov A.** Defect evolution and nitrogen incorporation in ion-implanted β-Ga_2O_3 // Applied Physics Letters. 2024. Vol. 125. No. 19. P. 192107.

25. **Klevtsov A., Karaseov P., Azarov A., Karabeshkin K., Fedorenko E., Titov A., Kuznetsov A.** Nonlinear effects in α-Ga_2O_3 radiation phenomena // APL Materials. 2024. Vol. 12. No. 11. P. 111121.

26. **Клевцов А. И., Карасев П. А., Карабешкин К. В., Титов А. И.** Особенности накопления структурных нарушений при имплантации ионов разных масс в альфа-оксиде галлия при малых уровнях повреждения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 42–49.

27. **Titov A., Klevtsov A., Fedorenko E., Azarov A., Kuznetsov A., Karaseov P.** Density and fractality of collision cascades in α-Ga_2O_3 // Applied Physics Letters. 2025. Vol. 127. No. 15. P. 152107.

28. **Klevtsov A. I., Kleimanov R. V., Azarov A., Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Titov A. I.** Damage accumulation in alpha gallium oxide during sequential keV light ion implantations // Proceedings of the 2024 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). October 17–18, St. Petersburg, Russia. IEEE: 2024. Pp. 339–342.

29. **Печников А. И., Степанов С. И., Чикиряка А. В., Щеглов М. П., Одноблюдов М. А., Николаев В. И.** Толстые слои alpha-Ga_2O_3 на сапфировых подложках, полученные методом хлоридной эпитаксии // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 6. С. 789–792.

30. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.** The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985. 321 p.

31. **Titov A. I., Karaseov P. A., Kataev A. Yu, Azarov A. Yu, Kucheyev S. O.** Model for radiation damage buildup in GaN // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2012. Vol. 277. 15 April. Pp. 80–83.

REFERENCES

1. **Feldman L. C., Mayer J. W.,** Fundamentals of surface and thin film analysis, North-Holland, Amsterdam, Netherlands, 1986.

2. **Davies J. A.,** High energy density collision cascades and spike effects (Ch. 4), In book: J. S. Williams, J. M. Poate (Eds.). Ion implantation and beam processing, Academic Press, Sydney, Australia (1984) 81–97.

3. **Thompson D. A.,** High density cascade effects, Radiat. Eff. 56 (3–4) (1981) 105–150.

4. **Taube A., Kaminska E., Kozubal M., et al.,** Ion implantation for isolation of AlGaN/GaN HEMTs using C or Al, Phys. Status Solidi A. 212 (5) (2015) 1162–1169.

5. **Abroyan I. A., Titov A. I., Khlebalkin A. V.,** Obrazovaniye defektov v kremnii pri kombinirovannom obluchenii ionami [The formation of defects in silicon under combined ion irradiation], Fiz. Tekh. Poluprovodn. (USSR). 13 (2) (1979) 227–233 (in Russian).

6. **Abroyan A. I., Konyshev V. V., Titov A. I., Khlebalkin A. V.,** Vliyaniye sostoyaniya kristallicheskoy struktury kremniya na nakopleniye defektov pri ionnom obluchenii [The influence of the state of the Si crystalline structure on the accumulation of defects during ion irradiation], Fiz. Tekh. Poluprovodn. (USSR). 15 (1) (1981)166–168 (in Russian).

7. **Titov A. I., Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Struchkov A. I.,** The formation of radiation damage in GaN during successive bombardment by light ions of various energies, Vacuum. 2020. 173 (March) (2020) 109149.

8. **Bai Q., Li L., Cheng F. F., et al.,** Study on microstructure and mechanical properties of He and H ion irradiated 6H-SiC, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 365 (Part A, 15 Dec) (2015) 347–351.

9. **Bogh E., Hogild P., Stensgaard I.,** Spatial distribution of defects in ion bombarded silicon and germanium, Rad. Eff. 7 (1–2) (1971) 115–121.

10. **Kool W. H., Roosendaal H. E., Wiggers L.W., Saris F. W.,** Production and beam annealing of damage in carbon implanted silicon. II, Rad. Eff. 36 (1–2) (1978) 41–48.

11. **Abroyan I. A., Nikulina L. M., Titov A. I.,** Ionically stimulated ordering of previously irradiated silicon, Fiz. Tekh. Poluprovodn. (USSR). 19 (6) (1985) 1030–1034 (in Russian).

12. **Abroyan I. A., Nikulina L. M.,** Molecular effect during light ion implantation in semiconductors, Fiz. Tekh. Poluprovodn. (USSR). 31 (10) (1997) 1164 –1167 (in Russian).

13. **Jiang W., Weber W. J., Zhang Y., et al.,** Ion beam analysis of irradiation effects in 6H–SiC, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 207 (1) (2003) 92–99.

14. **Pelaz L., Marqués L. A., Barbolla J.,** Ion-beam-induced amorphization and recrystallization in silicon, J. Appl. Phys. 96 (11) (2004) 5947–5976.

15. **Stepanov S. I., Nikolaev V. I., Bougrov V. E., Romanov A. E.,** Gallium oxide: properties and application – A review, Rev. Adv. Mater. Sci. 44 (1) (2016) 63–86.

16. **Pearton S. J., Ren F., Mastro M.** (Eds.), Gallium oxide. Technology, devices and applications, Elsevier Inc., Amsterdam (Netherlands), 2019.

17. **Pearton S. J., Ren F., Tadjer M., Kim J.,** Perspective: Ga_2O_3 for ultra-high power rectifiers and MOSFETS, J. Appl. Phys. 124 (22) (2018) 220901.

18. **Wellmann P. J.,** Power electronic semiconductor materials for automotive and energy saving applications – SiC, GaN, Ga_2O_3, and diamond, Z. Anorg. Allg. Chem. 643 (21) (2017) 1312–1322.

19. **Nikolskaya A., Okulich E., Korolev D., et al.,** Ion implantation in β-Ga_2O_3: Physics and technology, J. Vac. Sci. Technol. A. 39 (3) (2021) 030802.

20. **Cai Y., Feng Z., Wang Z., et al.,** Demonstration of the normally off β-Ga_2O_3 MOSFET with high threshold voltage and high current density, Appl. Phys. Lett. 123 (19) (2023) 193501.

21. **Farzana E., Roy S., Hendricks N. S., et al.,** Vertical PtO_x/Pt/β-Ga_2O_3 Schottky diodes with high permittivity dielectric field plate for low leakage and high breakdown voltage, Appl. Phys. Lett. 123 (19) (2023) 192102

22. **Ahmadi E., Oshima Y.,** Materials issues and devices of α- and β-Ga_2O_3, J. Appl. Phys. 126 (16) (2019) 160901.

23. **Polyakov S. J., Nikolaev S. J., Yakimov S. J., et al.,** Deep level defect states in β-, α-, and ε-Ga_2O_3 crystals and films: Impact on device performance, J. Vac. Sci. Technol. A. 40 (2) (2022) 020804.

24. **Azarov A., Galeckas A., Mikhaylov A. et al.,** Defect evolution and nitrogen incorporation in ion-implanted β-Ga_2O_3, Appl. Phys. Lett. 125 (19) (2024) 192107.

25. **Klevtsov A., Karaseov P., Azarov A., et al.,** Non-linear effects in α-Ga_2O_3 radiation phenomena, APL Mater. 12 (11) (2024) 111121.

26. **Klevtsov A. I., Karaseov P. A., Karabeshkin K. V., Titov A. I.,** Peculiarities of structure damage accumulation under the implantation of ions of different masses into alpha-gallium oxide at low damage levels, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 42–49 (in Russian).

27. **Titov A., Klevtsov A., Fedorenko E., et al.,** Density and fractality of collision cascades in α-Ga_2O_3, Appl. Phys. Lett. 127 (15) (2025) 152107.

28. **Klevtsov A. I., Kleimanov R. V., Azarov A., et al.,** Damage accumulation in alpha gallium oxide during sequential keV light ion implantations, Proc. 2024 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), Oct. 17–18, St. Petersburg, Russia, IEEE (2024) 339–342.

29. **Pechnikov A. I., Stepanov S. I., Chikiryaka A.V., et al.,** Thick α-Ga_2O_3 layers on sapphire substrates grown by halide epitaxy, Semicond. 53 (6) (2019) 780–783.

30. **Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.,** The stopping and range of ions in solids, Pergamon Press, New York, 1985.

31. **Titov A. I., Karaseov P. A., Kataev A. Yu., et al.,** Model for radiation damage buildup in GaN, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 277 (15 Apr) (2012) 80–83.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КЛЕВЦОВ Антон Игоревич – *ассистент кафедры физики Института физики и математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, инженер-технолог 1 категории Акционерного общества "Научно-производственное предприятие «ЭЛАР»", Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
klevtsovanton@rambler.ru
ORCID: 0009-0004-6988-9685

КАРАСЕВ Платон Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
platon.karaseov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2511-0188

ТИТОВ Андрей Иванович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ATitov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

THE AUTHORS

KLEVTSOV Anton I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Joint-Stock Company "Research and Production Enterprise «ELAR»",
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
klevtsovanton@rambler.ru
ORCID: 0009-0004-6988-9685

KARASEOV Platon A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
platon.karaseov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-2511-0188

TITOV Andrei I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ATitov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-4933-9534

Статья поступила в редакцию 20.05.2026. Одобрена после рецензирования 03.06.2026. Принята 03.06.2026.
Received 20.05.2026. Approved after reviewing 03.06.2026. Accepted 03.06.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Физическое материаловедение

Обзорная статья
УДК 538.9 + 538.975
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19210

ПЛАЗМОННЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ, ФОРМИРУЕМЫЕ МЕТОДОМ ИОННОГО ОБМЕНА В СТЕКЛЕ: СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ

В. В. Журихина [1, 2] ✉, Е. С. Бабич [2], А. Н. Терпицкий [2], И. Нуритдинов [3], М. А. Рахматов [4], А. А. Эшбеков [4]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

[3] Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан, г. Ташкент, Республика Узбекистан;

[4] Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан

✉ zhurihina_vv@spbstu.ru

Аннотация. Плазмонные материалы на основе наноструктур благородных металлов обладают уникальными оптическими свойствами в видимом диапазоне. В настоящее время плазмоны, которые поддерживаются металлическими наночастицами или распространяются вдоль металлических интерфейсов, привлекают все большее внимание в сенсорике, медицине, визуализации, нанофотонных и оптоэлектронных технологиях. В статье представлен краткий обзор двух основных плазмонных мод: поверхностных плазмонных поляритонов на металлических интерфейсах и локализованных плазмонов в наноструктурах, а также физических основ плазмонно-усиленных датчиков, таких как колориметрические сенсоры, сенсоры на основе плазмонно-усиленной флуоресценции и сенсоры на основе гигантского комбинационного рассеяния. Такие датчики широко используются в здравоохранении, безопасности, пищевой промышленности и мониторинге окружающей среды. Рассмотрено получение плазмонных наноструктур в стеклах методом ионного обмена и их применение для детектирования химических соединений и биообъектов.

Ключевые слова: локализация световой волны, наноструктура, ионный обмен, плазмон, усиление электромагнитного поля, сенсор

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FSRM-2026-0005).

Для цитирования: Журихина В. В., Бабич Е. С., Терпицкий А. Н., Нуритдинов И., Рахматов М. А., Эшбеков А. А. Плазмонные наноматериалы, формируемые методом ионного обмена в стекле: свойства и применение // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 107–135. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19210

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Журихина В. В., Бабич Е. С., Терпицкий А. Н., Нуритдинов И., Рахматов М. А., Эшбеков А. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Overview article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19210

PLASMONIC NANOMATERIALS FORMED BY ION EXCHANGE IN GLASS: PROPERTIES AND APPLICATIONS

V. V. Zhurikhina [1, 2] ✉, E. S. Babich [2], A. N. Terpitskiy [2], I. Nuritdinov [3], M. A. Rakhmatov [4], A. A. Eshbekov [4]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

[2] Alferov University, RAS, St. Petersburg, Russia;

[3] Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Republic of Uzbekistan;

[4] Sharof Rashidov Samarkand State University, Samarkand, Republic of Uzbekistan

✉ zhurihina_vv@spbstu.ru

Abstract. Plasmonic materials based on noble metal nanostructures exhibit unique optical properties in the visible range. Currently, plasmons supported by metal nanoparticles or propagating along metal interfaces are attracting increasing attention in sensorics, medicine, imaging, nanophotonics, and optoelectronic technologies. This article has provided a brief overview of two main plasmonic modes: surface plasmon polaritons at metal interfaces and localized plasmons in nanostructures. It also discussed the physical principles of plasmon-enhanced sensors, such as colorimetric, plasmon-enhanced fluorescence, and surface enhanced Raman scattering ones. These sensors are widely used in healthcare, security, food processing, and environmental monitoring. The fabrication of plasmonic nanostructures in glasses using ion exchange and their application for detecting chemical compounds and biological objects are discussed.

Keywords: localization of light, nanostructure, ion exchange, plasmon, electromagnetic field amplification, sensor

Funding: The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project FSRM-2026-0005)

For citation: Zhurikhina V. V., Babich E. S., Terpitskiy A. N., Nuritdinov I., Rakhmatov M. A., Eshbekov A. A., Plasmonic nanomaterials formed by ion exchange in glass: properties and applications, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 107–135. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19210

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Хорошо известно, что на оптических длинах волн электромагнитные свойства благородных металлов – золота, серебра и меди – очень похожи на свойства электронного газа. Классическая электронная теория предсказывает (и многочисленные эксперименты подтверждают) отрицательную вещественную часть диэлектрической проницаемости для благородных металлов на оптических длинах волн или вблизи них [1]. Благодаря этому колебания заряда могут распространяться вдоль поверхности благородных и ряда других металлов на оптических частотах. В электромагнитном отклике наночастиц с размерами порядка нескольких нанометров доминируют колебания поверхностного заряда.

Поверхностный плазмон (ПП) – это явление, вызванное коллективными колебаниями электронов проводимости в наноструктурированных металлических системах [2]. Уникальным свойством таких систем выступает способность сохранять оптическую энергию сконцентрированной на наномасштабном уровне благодаря поверхностным плазмонам. При совпадении частоты внешнего возбуждения с частотой поверхностного плазмона наблюдается явление поверхностного плазмонного резонанса.

© Zhurikhina V. V., Babich E. S., Terpitskiy A. N., Nuritdinov I., Rakhmatov M. A., Eshbekov A. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Как интенсивность, так и положение поверхностного плазмонного резонанса существенным образом зависят от размера, формы и состава наноструктур, а также от диэлектрических свойств окружающей среды [3 – 5]. Последнее открывает возможности для спектроскопических методов исследования, которые позволяют в режиме реального времени отслеживать взаимодействия между аналитом и поверхностью сенсора [6]. Более того, сенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса требуют использования минимальных количеств исследуемого вещества и не нуждаются в маркировке образцов, что устраняет необходимость их предварительной подготовки [7]. Это приводит к высокочувствительной, универсальной и очень эффективной технологии, которая интенсивно развивается в течение последних двух десятилетий.

Поверхностные плазмон-поляритоны и плазмоны в наночастицах

Обычно рассматривают две различные формы плазмонного резонанса (рис. 1):

поверхностные плазмонные поляритоны (ППП), распространяющиеся вдоль металлических интерфейсов;

локализованный поверхностный плазмонный резонанс в металлических наночастицах (ЛППР) [8].

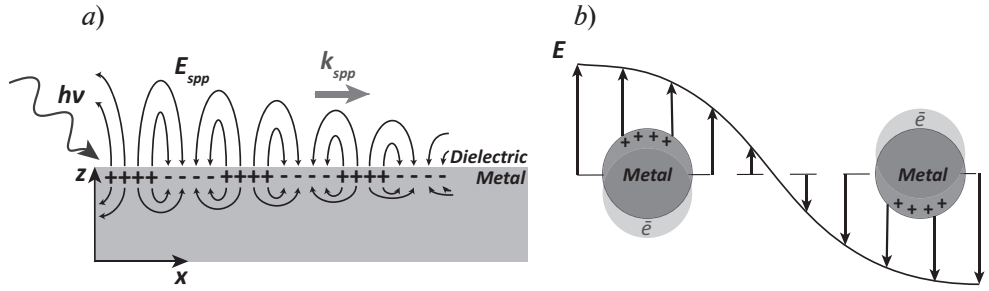


Рис. 1. Схематическое изображение двух типов плазмонного резонанса:
a – поверхностный плазмон-поляритон (ППП); распространяется вдоль интерфейса металл–диэлектрик;
b – локализованный поверхностный плазмонный резонанс (ЛППР) в наночастицах;
возбуждается при падении на наночастицу электромагнитной волны

ЛППР наблюдается, если размеры металлической наноструктуры много меньше длины волны падающего света. Для оптического диапазона оптимальный размер наночастиц составляет 10 – 15 нм [9]. При взаимодействии с внешней электромагнитной волной, в металлической наноструктуре возникают коллективные нераспространяющиеся колебания поверхностных электронов. При этом частота плазмонного колебания зависит от морфологии наночастицы и поляризации волны. В эллипсоидальной наночастице частота ЛППР ω_α вдоль оси α определяется следующей формулой [10]:

$$\omega_\alpha = \omega_p \Big/ \sqrt{1+\varepsilon_d\left(1/L_\alpha - 1\right)}, \qquad (1)$$

где ω_p – плазменная частота Друде, ε_d – диэлектрическая проницаемость окружающей среды, L_α – геометрический фактор для данной оси (для сферы $L_\alpha = 1/3$).

Как следует из формулы (1), резонансная частота зависит от диэлектрической проницаемости окружающей среды, что является основой для плазмонных сенсоров. Кроме того, плазмонный резонанс приводит к высокой концентрации электромагнитного поля вокруг наноструктуры. Усиленные локальные поля увеличивают эффективность излучательных и неизлучательных процессов, в которых участвует молекула, расположенная в ближнем поле наночастицы. Этот эффект часто называют эффектом наноантенны [11]; он обусловливает эффекты поверхностно-усиленной флуоресценции [12] и поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света [13]. Оба этих явления можно использовать для сенсорики.

В отличие от ЛППР, ППП поддерживают электронные колебания на поверхности металл – диэлектрик, в частности, на поверхности тонких металлических пленок. Такие волны, поляризованные в направлении, перпендикулярном к поверхности металла

(ТМ-поляризация), возможны только на интерфейсах между материалами, имеющими разные знаки вещественной части диэлектрической проницаемости (в металле на оптических частотах вещественная часть диэлектрической проницаемости отрицательная). В случае интерфейса металл–диэлектрик, на оптических частотах эти волны распространяются как электромагнитные поля, связанные с поверхностными плазменными колебаниями – колебаниями электронов проводимости в металле [14]. Это, по своей сути, двумерное возбуждение, электромагнитное поле которого экспоненциально затухает с расстоянием от поверхности интерфейса [14].

Волновой вектор ППП Q на частоте ω можно записать как [10]

$$Q = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}}, \qquad (2)$$

где ε_m – диэлектрическая функция металла.

Из-за несоответствия волновых векторов падающего света и распространяющегося плазмон-поляритона (волновой вектор ППП всегда больше волнового вектора падающей электромагнитной волны), ППП невозможно возбудить излучением в свободном пространстве. Для его возбуждения требуется согласование импульсов, например, за счет нарушенного полного внутреннего отражения или периодической структуры.

Классической установкой для возбуждения ППП служит конфигурация Кречмана [15]. В этой конфигурации металлическая пленка (обычно благородный металл, чаще всего золото), нанесенная на призму, почти полностью отражает падающее излучение, за исключением определенного угла, называемого углом возбуждения ППП. Как можно заключить из анализа выражения (2), этот угол зависит от показателя преломления среды, что и используется при создании датчиков.

Распространяющиеся ППП или смешанный режим ППП/ЛППР могут использоваться для обнаружения изменений диэлектрической проницаемости окружающей среды. Если молекулы аналита в водном растворе связываются с плазмонной металлической пленкой, то угол возбуждения ППП изменяется, а длина волны ППП возрастает ввиду более высокого показателя преломления молекул [16, 17].

Также сообщалось об изготовлении оптоволоконных датчиков на основе ППП [18, 19]. Основой таких датчиков служили одномодовые конические волокна, покрытые тонким металлическим слоем с одной стороны. Распространяющаяся в волокне оптическая мода может возбуждать различные гибридные поверхностные плазмонные моды в металлическом слое. В результате спектр пропускания волокна с металлическим покрытием показывает несколько пиков ППП, положение которых зависит от параметров системы и показателя преломления внешней среды [18]. Волоконно-оптические датчики на основе ППП имеют ряд преимуществ, например малый вес, а также возможности дистанционного зондирования и мультиплексирования.

Сенсоры на основе плазмонов в наночастицах

Наночастицы благородных металлов, таких как золото, серебро и медь (Au, Ag и Cu), демонстрируют ЛППР в оптическом диапазоне и широко используются для создания плазмонных сенсоров [20]. Согласно формуле (1), положение ЛППР зависит от формы наночастицы и диэлектрического окружения: длина волны резонанса плазмонов смещается, когда аналит связывается с поверхностью наночастицы (иногда для этого необходима функционализация наночастицы), изменяя локальный показатель преломления (рис. 2).

Изменение показателя преломления n внешней среды на заданную величину Δn смещает положение максимума кривой плазмонного резонанса λ_{res} (в единицах длины волны) или E_{res} (в единицах энергии). Соответствующую константу пропорциональности, или чувствительность можно выражать в единицах длины волны (S_λ) или энергии (S_E) [21]:

$$S_\lambda = d\lambda_{res}/dn,\ S_E = dE_{res}/dn = -1{,}240\ S_\lambda/\lambda^2\ (\text{нм/эВ}).$$

Относительно большая ширина плазмонного резонанса Γ (ширина на полувысоте) усложняет анализ, поскольку для наноструктур с разной геометрией эта величина может различаться более чем в десять раз. Очевидно, что легче обнаружить сдвиг резонанса для узких линий, поэтому отношение сдвига резонанса к ширине линии является более

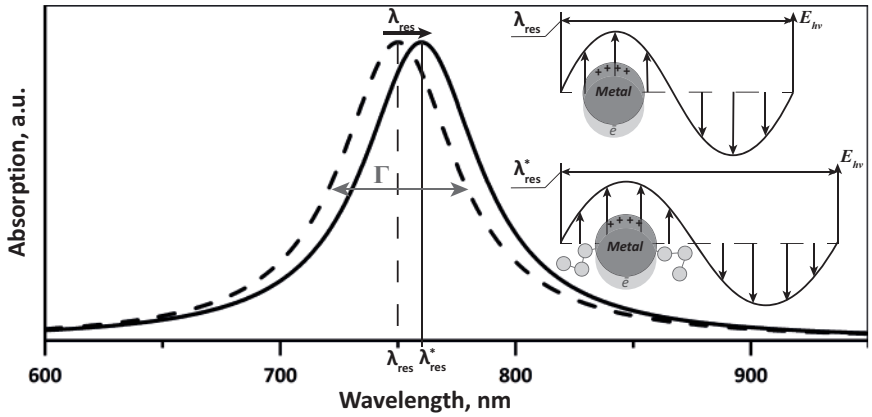


Рис. 2. Сдвиг положения ЛППР при изменении внешней среды; ключевые параметры: Г – ширина плазмонного резонанса на полувысоте максимума и λ_{res} – положение максимума плазмонного резонанса на шкале длин волн

корректной мерой качества сенсора на основе плазмонов. Отношение сдвига резонанса к ширине линии – это безразмерная величина, добротность резонансной структуры (FOM) [21]:

$$\text{FOM} = S/\Gamma.$$

Добротность можно легко определить экспериментально, и эта величина удобна для сравнения плазмонных свойств различных структур. Можно показать [22], что для малых металлических наночастиц добротность зависит только от природы металла. Она имеет наибольшее значение при малом затухании (малых значениях мнимой части диэлектрической проницаемости) и в точке, где вещественная часть диэлектрической проницаемости имеет наиболее сильную зависимость от частоты. Меняя геометрию наночастицы, можно настроить резонансную частоту и, в свою очередь, добротность плазмонных датчиков. Из всех сенсоров на благородных металлах наибольшую добротность демонстрируют сенсоры на основе серебряных наночастиц, что связано с низкими потерями для серебра в оптическом диапазоне частот.

Колориметрические плазмонные сенсоры, основанные на смещении пика ЛППР в коллоидных растворах с наночастицами, являются простым и удобным методом обнаружения аналитов в растворе, поскольку этот метод часто обеспечивает прямую визуализацию концентрации аналита. Например, функционализированные золотые наночастицы использовались для колориметрического обнаружения тяжелых металлов, малых биологических молекул и биомакромолекул [23 – 25].

В работе [26] был предложен новый колориметрический анализ для сверхчувствительного визуального обнаружения глюкозы на основе золотых наночастиц в форме бипирамид. Предлагаемый колориметрический анализ глюкозы демонстрировал предел детектирования 0,02 мМ. Более того, с помощью предложенного датчика приблизительные уровни глюкозы можно оценивать по изменению цвета невооруженным глазом и таким образом провести различие между здоровыми людьми и пациентами с диабетом без использования какого-либо сложного инструмента.

Усиление электромагнитного поля вблизи поверхности наночастиц за счет ЛППР можно применять для плазмонно-усиленной флуоресцентной спектроскопии. Усиление флуоресценции сенсоров на основе ЛППР возможно путем повышения эффективности возбуждения аналита и/или испускания им света [27]. В обоих случаях более сильные локальные электромагнитные поля приведут к большему усилению. Согласно формуле (1), усиление электромагнитного поля вблизи острой структуры будет выше благодаря геометрическому фактору (эффект иглы или громоотвода). Таким образом, наностержни, вытянутые эллипсоиды и дендриты будут демонстрировать повышенную, по сравнению с наносферами, плазмонно-усиленную флуоресценцию. Фактор усиления плазмонной флуоресценции обычно находится в диапазоне 10 – 100, но может быть и выше в оптимизированных плазмонных наноструктурах, достигая в некоторых случаях значения 10^3 [28].

В частности, исследователь Ф. Се с соавторами использовали массив нанотреугольников серебра Ag для усиления флуоресценции красителей в ближнем инфракрасном диапазоне [29]. Авторы показали, что низкий квантовый выход (4%) флуоресценции красителя в ближнем ИК-диапазоне можно увеличить на два порядка, если использовать нанорешетку серебряных треугольников.

Поверхностно-усиленное комбинационное рассеяние света (гигантское комбинационное рассеяние (ГКР)) является одним из самых мощных и перспективных аналитических методов для био- и химического анализа благодаря следующим преимуществам [30 – 33]:

высокая селективность метода за счет уникальных спектральных характеристик аналитов;

высокая чувствительность, вплоть до обнаружения отдельных молекул, простота эксплуатации;

возможность обнаружения многокомпонентных соединений с помощью одного возбуждающего лазера за счет узких спектральных полос.

Само комбинационное рассеяние (КР) обладает низкой эффективностью из-за малого сечения рассеяния (порядка 10^{-28} – 10^{-30} см^2/молекула). Однако повышенное локальное электромагнитное поле в плазмонных наноструктурах обеспечивает усиление сигнала КР от 10^4 до 10^8 [34]. Повышение величины локального электромагнитного поля вблизи плазмонных наноструктур определяет эффективность датчиков на основе ГКР, поэтому в настоящее время существенные усилия исследователей направлены на разработку ГКР-подложек [35 – 37].

Одной из эффективных методик, отличающихся относительной простотой и дешевизной технологии, является методика изготовления плазмонных структур в объеме и на поверхности стекла с помощью ионного обмена [38 – 41]. Формирование наноструктур в стекле с использованием методики ионного обмена в сочетании с поляризацией стекла и его травлением позволяет формировать в стекле микроканалы с плазмонными наночастицами, что перспективно для использования в микрофлюидике [42, 43].

Плазмонные структуры, формируемые методом ионного обмена в стеклах

Стекла – это уникальные материалы, обладающие особыми свойствами, критически важными для применения в ряде технологий. Стекла обладают прозрачностью и твердостью при комнатной температуре, механической прочностью и высокой химической стойкостью. Великий российский ученый М. В. Ломоносов в 1752 году в письме к куратору Московского университета И. И. Шувалову писал [44]:

«Неправо о вещах те думают, Шувалов,
Которые Стекло чтут ниже Минералов,
. . . . . .
Пою перед тобой в восторге похвалу
Не камням дорогим, ни злату, но Стеклу».

Ионный обмен из расплавленных солей является хорошо зарекомендовавшей себя технологией, способной изменять химико-физические свойства стекла. Эта методика использовалась, например, в производстве керамик в эпоху Возрождения. Такая керамика была покрыта тонкой стеклянной пленкой с наночастицами серебра и меди различных размеров, образованных в результате процесса ионного обмена между ионами металлов и ионами щелочных элементов в стекле с последующим восстановлением металлических ионов и их агрегацией в наночастицы [45].

Как правило, оптическое стекло представляет собой аморфный материал, состоящий из нескольких типов оксидов [46]:

сеткообразователи (SiO_2, GeO_2 или P_2O_5);

промежуточные сеткообразователи (Al_2O_3, TiO_2), которые не могут создавать стекло сами по себе, но могут быть объединены с сеткообразователями;

оксиды-модификаторы (Na_2O, K_2O, CaO или BaO), которые слабее связаны с сеткой стекла.

Ионный обмен – это, по сути, химическая реакция, в которой подвижные ионы твердого тела обмениваются на ионы с аналогичным зарядом из раствора. Поскольку щелочные ионы-модификаторы слабо связаны с матрицей стекла, они больше всего пригодны для ионного обмена. Для применения в оптике и фотонике в подавляющем большинстве случаев используется обмен ионов Na^+ или K^+ в составе стекла на ионы Ag^+, K^+ или Tl^+ из солевого расплава (рис. 3).

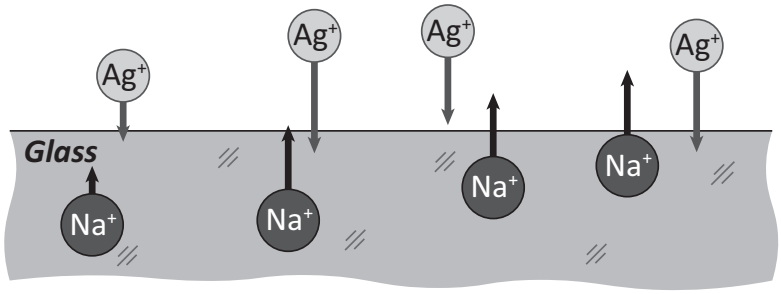


Рис. 3. Схематическое представление ионного обмена в стекле

В настоящее время технология ионного обмена успешно применяется для упрочнения стекла [47], создания оптических волноводов и активных оптических устройств [48, 49], формирования металлических наноструктур в стекле [50]. На последней из перечисленных технологий остановимся более подробно.

Формирование металлических наночастиц в объеме и на поверхности стекла.

Среди множества различных металлических наночастиц синтез и изучение наночастиц серебра кажутся особенно интересными, поскольку серебро демонстрирует самую высокую электро-и теплопроводность среди всех металлов [51]. Электронные и оптические свойства наночастиц серебра можно контролировать путем подбора режимов синтеза.

К распространенным способам получения металлических наночастиц в стеклах относятся метод быстрой закалки стекла при его синтезе из расплава [52], золь-гель методика [53], ионная имплантация [54] и метод ионного обмена [55].

Ионный обмен обладает рядом преимуществ:

может обеспечивать внедрение в стекло достаточно высоких концентраций ионов металлов;

в результате обмена стекло остается неповрежденным (в отличие от метода ионной имплантации, который вносит существенные дефекты в матрицу стекла);

позволяет производить большие объемы стекла с металлическими наночастицами.

После внедрения ионов серебра в стеклянную матрицу путем ионного обмена необходимо создать условия для фазового распада пересыщенного твердого раствора стекло-металл и выпадения второй фазы – металлических наночастиц. Для этого используется отжиг (температурная обработка) ионообменного стекла в воздушной атмосфере или атмосфере водорода, а также ионизирующее излучение совместно с термической обработкой или без нее. Кроме того, наночастицы можно получать при проведении ионного обмена в стекло, содержащее в своем составе восстановители – ионы переменной валентности.

Главное ограничение метода – сложность получения монодисперсных ансамблей наночастиц с узким распределением по размерам. Это связано с самой природой процесса, который состоит из двух этапов: диффузии ионов и их последующей агрегации. Метод ионного обмена приводит к образованию полидисперсных наночастиц ввиду стохастической нуклеации и диффузионного роста [56]. Даже при оптимизации параметров процесса распределение по размерам остается широким [57]. При этом глубина залегания наночастиц зависит от времени и температуры проведения процесса, а также от заряда диффундирующего иона; глубина составляет от сотен нанометров до нескольких микрометров. Для многозарядных ионов (например, Cu^{2+}) глубина проникновения существенно меньше, чем для однозарядных (Ag^+, Na^+) [58]. Термообработка при температурах, превышающих температуру стеклования, может приводить к формированию структур типа ядро-оболочка [59].

Состав стекла критическим образом влияет на диффузию и восстановление ионов. Добавление в стекло ионов переменной валентности, например церия, железа или сурьмы, способствует восстановлению серебра при ионном обмене и росту фотолюминесцентных молекулярных кластеров серебра и плазмонных наночастиц серебра [60]. В стеклах, легированных галогенидами, такими как хлор или бром, и подвергнутых ионному обмену $Na^+ \leftrightarrow Ag^+$ и термообработке, наблюдается образование фото- и термохромных нанокристаллов AgCl или AgBr [61]. При этом методика формирования наночастиц методом ионного обмена воспроизводима при незначительном отклонении в составе стекла или параметров процесса.

При термической обработке, проводимой на воздухе и при температуре ниже некоторого порогового значения, в стекле образуются молекулярные кластеры (размерами менее 1 нм), которые, скорее всего, представляют собой димеры серебра [62]. Происходящие процессы можно записать следующим образом [62]:

$$2(\equiv Si - O - Ag^+) \leftrightarrow \equiv Si - O - Si\equiv + O^- + (Ag_2)^+,$$

$$O^- + (Ag_2)^+ \rightarrow 2\,Ag^0 + (1/2)\,O_2.$$

С увеличением продолжительности отжига при температуре ниже порогового значения возрастает лишь количество кластеров, но не их размер. Термическая обработка выше порогового значения температуры приводит к росту размеров наночастиц серебра [62]. Электронная структура молекулярных кластеров существенно отличается от электронной структуры металлических наночастиц, в частности, молекулярные кластеры демонстрируют люминесценцию в видимом диапазоне при накачке УФ-излучением, что позволяет их использовать в различных сенсорных приложениях [63, 64]. При этом в молекулярных кластерах, ввиду их малых размеров, отсутствует коллективное колебание электронов – плазмонный резонанс.

Другой способ термической обработки ионообменного стекла для формирования металлических наночастиц состоит в отжиге образца в восстанавливающей атмосфере водорода H_2. Этот способ приводит к формированию нанокомпозита стекло-металл внутри стекла и наноостровковой пленки металла на поверхности стекла, вследствие диффузии атомов металлов, восстановленных в результате проникновения водорода в стекло [56]. Восстановление ионов металла описывается реакцией [65]:

$$\equiv Si - O - Ag^+ + (1/2)\,H_2 \rightarrow \equiv Si - O - H^+ + Ag^0.$$

При отжиге ионообменного стекла в водороде при определенных условиях, можно способствовать преимущественному образованию наночастиц на поверхности или в объеме стекла [66], а также создавать упорядоченные ансамбли металлических наночастиц на поверхности [67].

Ионизирующие излучения, такие как гамма-кванты, электроны, тяжелые ионы, рентгеновские или лазерные лучи, можно использовать совместно с термической обработкой или вместо нее для получения серебряных наночастиц в ионообменном стекле [68 – 70]. Ионизирующее излучение создает в диэлектрической матрице стекла экситоны, которые приводят к образованию стабильных дефектов и изменению валентного состояния легирующих и примесных ионов в стеклах.

Гамма-облучение диэлектрической матрицы стекла приводит к образованию в ней электронно-дырочных пар. Часть электронов восстанавливает ионы серебра до нейтрального состояния [71]:

$$\text{glass} \xrightarrow{\gamma\text{-rays}} h^+ + e^-,$$

$$Ag^+ + e^- \rightarrow Ag^0.$$

Последующее образование наночастиц происходит за счет активации диффузии нейтральных атомов серебра в стеклянной матрице при термической обработке по такой реакции [71] (рис. 4):

$$nAg^0 \rightarrow Ag_n.$$

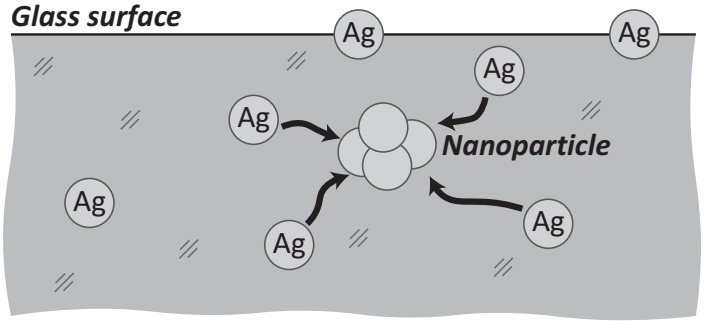


Рис. 4. Схема формирования серебряных наночастиц в стекле

Образование наночастиц серебра сопровождается возникновением пиков на длинах волн плазмонного резонанса 400 – 420 нм в спектрах оптического поглощения, а также окрашиванием исходно прозрачного стекла в светло-желтый или интенсивно-желтый цвет, в зависимости от объемной доли наночастиц. Процесс образования наночастиц серебра зависит от дозы облучения, и его скорость увеличивается по сравнению с термическим отжигом, поскольку гамма-облучение увеличивает коэффициент диффузии серебра в стекле на несколько порядков [71, 72].

Формирование наночастиц в стекле может также осуществляться под действием лазера без дополнительного термического отжига. Лазерное облучение приводит к разогреву облучаемой области стекла и ее размягчению [73], а также (в случае ионообменного стекла) к разрыву связей серебро – немостиковый кислород с последующим восстановлением ионов серебра электронами из отрицательно заряженных атомов немостикового кислорода [66]. Кроме того, лазерное облучение на длине волны 355 нм приводит к образованию свободных электронов в стекле за счет многофотонного поглощения [74]. Это, в свою очередь, вызывает восстановление ионов серебра до металлического состояния путем захвата электронов. Пересыщение приповерхностной области стекла атомами серебра обусловливает его склонность к фазовому распаду с выпадением металлических наночастиц [75].

Металлические дендритные структуры в стекле. Дендритные (или фрактальные) наноструктуры привлекают повышенное внимание исследователей ввиду их разветвленной структуры и большой площади поверхности, что представляет интерес для многих практических приложений, в частности ГКР и катализа [76, 77]. Были проведены исследования по получению дендритов серебра с использованием различных методов:

фотовосстановление в присутствии поливинилового спирта [78],

восстановление с использованием аскорбиновой кислоты в присутствии полиакрилата натрия [79],

жидкий гальвано-химический синтез [80] с использованием импульсной соноэлектрохимической техники [81] и другие.

Однако большинство методов «мокрой химии» для получения дендритных наноструктур основаны на использовании поверхностно-активных веществ или полимерных шаблонов, что усложняет процедуру синтеза и процесс очистки образцов. В некоторых случаях трудно избежать загрязнения конечного продукта из-за образования нежелательных (побочных) химических соединений в реакционной среде, делающих дендриты непригодными для дальнейшего применения. Поэтому поиск методов синтеза дендритных наноструктур без шаблонов – это актуальное направление исследований.

Перспективным методом синтеза дендритов серебра, не требующим сложного оборудования и использования «мокрой химии», является ионный обмен в стекле в сочетании с приложением постоянного электрического напряжения к противоположным сторонам [82] или к одной и той же стороне стеклянной подложки [40]. Получаемые таким способом структуры представлены на рис. 5.

Механизм образования дендритов при подаче напряжения на ионообменное стекло, содержащее ионы металла, можно представить следующим образом [82].

На первом этапе, в результате дрейфа ионов серебра под действием электрического поля и их восстановления на катоде, на поверхности стекла формируются зародыши

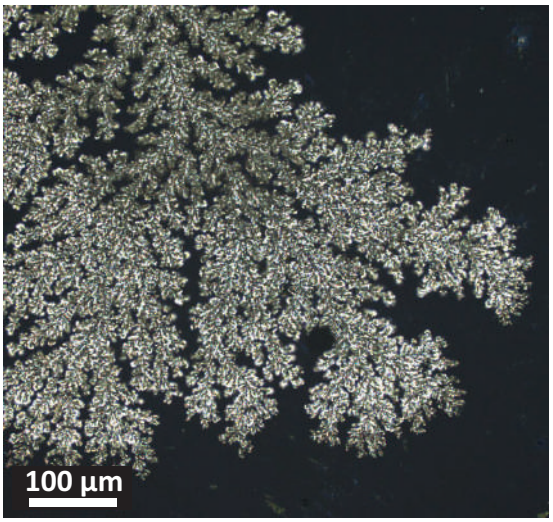


Рис. 5. Оптическое изображение серебряных дендритов в ионообменном стекле

металлической фазы. На втором этапе происходит диффузионный рост зародышей и образование металлических островков, находящихся в контакте с катодом; некоторые из них выступают в качестве вторичного катода и таким образом становятся источниками роста дендритов. Поскольку после ионного обмена ионы серебра сосредоточены в приповерхностной области стекла, рост дендритов происходит главным образом в плоскости, параллельной поверхности образца, внутри стекла. Последующее травление стекла в разбавленном растворе плавиковой кислоты/фторида аммония (HF/NH_4F) приводит к «прорастанию» на поверхности стекла игольчатых структур высотой до ~100 нм и более мелких разветвлений дендритов [40]. Образованные таким образом металлические наноструктуры перспективны для применения в катализе и датчиках ГКР.

Использование плазмонных наноструктур в качестве подложек для сенсоров на основе гигантского комбинационного рассеяния

Взаимодействие между светом и наноструктурами благородных металлов служит ключевым моментом для использования одного из наиболее эффективных оптических методов исследования: поверхностно-усиленного (гигантского) комбинационного рассеяния. Металлические наноструктуры выполняют роль «горячих точек» для электрического поля падающей световой волны ввиду эффекта локализованного поверхностного плазмонного резонанса в наноструктурах [83]. Когда молекула аналита находится близко к одной из этих «точек», ее сигнал комбинационного рассеяния возрастает на несколько порядков за счет усиления электрического поля, действующего на молекулу. Это обеспечивает датчикам-сенсорам, основанным на эффекте ЛППР, сверхчувствительные пределы детектирования в сочетании с высокой избирательностью, присущей спектроскопии комбинационного рассеяния света [84].

Для разработки высокопроизводительных сенсоров на основе ГКР необходима оптимизация подложек. Идеальные подложки для ГКР должны обеспечивать высокий уровень усиления сигнала, воспроизводимый отклик, возможность многократного использования, стабильность металлических наночастиц, низкую стоимость и простоту метода изготовления [85].

Сопоставление метода ионного обмена с другими методиками изготовления плазмонных структур для ГКР

Основными параметрами, характеризующими плазмонные структуры, использующиеся как подложки для ГКР, служат размерное распределение наночастиц, плотность горячих точек и коэффициент усиления сигнала комбинационного рассеяния. Ниже представлен краткий сравнительный анализ методик формирования металлических наноструктур для ГКР.

Ионный обмен в стекле. Наночастицы, получаемые методом ионного обмена в стекле, имеют довольно широкое полидисперсное распределение по размерам, что обусловлено диффузионным характером их формирования [86]. При этом размер частиц можно варьировать от 2 до 250 нм через управление временами ионного обмена и режимами отжига [87, 88]. Среднеквадратичное отклонение размеров может достигать 30 – 40% [86]. Плотность горячих точек средняя, и есть возможность ее варьирования, например, при сочетании метода ионного обмена и термической поляризации стекла [66]. Также сочетание двух этих методов позволяет формировать горячие точки в соответствии с заранее заданным рисунком. Коэффициент усиления ГКР – средний по величине (до 10^7 [89]).

Фемтосекундная лазерная запись плюс восстановление. При фемтосекундной лазерной записи с последующим восстановлением мощные фемтосекундные лазерные импульсы фокусируются в объем стекла или раствора прекурсора. Многофотонное поглощение инициирует локальное восстановление ионов металла (например, Ag^{+} или Au^{3+}) до нейтрального состояния, что сопровождается формированием наночастиц в области фокуса. Такая методика позволяет получать частицы контролируемого размера (обычно 20 – 200 нм), меняя мощность лазера и скорость сканирования, и формировать структуры с заданной геометрией [91]. Дисперсия размеров составляет порядка 10% [92]. Плотность горячих точек при этом высокая. Также можно создавать массивы димеров или цепочек частиц с зазорами менее 10 нм, включая 3D-структуры в объеме материала [92]. Высокий коэффициент усиления ГКР в таких структурах (до 10^{10} [93]) достигается за счет точного контроля размера наночастиц и создания ансамблей частиц с управляемыми характеристиками [91, 94].

Наноимпринт-литография плюс напыление. По этой технологии на подложку наносится полимерный резист, в котором механическим штампом формируется рельеф (лунки или столбики). Затем путем напыления (например, термического или электронно-лучевого) осаждается слой металла (Ag, Au); после удаления резиста, на подложке остаются строго упорядоченные металлические структуры [95, 96]. Размерное распределение, которое при этом получается, – чрезвычайно узкое (фактически монодисперсное). Кроме того, описанная технология обеспечивает наилучшую воспроизводимость формы и размера (от 10 нм до нескольких микрометров), соответствующую форме штампа [97]. Методика наноимпринт-литографии обеспечивает максимальную плотность горячих точек и позволяет проектировать массивы с усилением поля в строго заданных узких областях (например, в зазорах между нанодисками) [97]. Это обеспечивает высокий коэффициент усиления сигнала ГКР (до 10^{7} [97]) для структур с субнанометровыми зазорами.

Химическое травление плюс металлизация. Для получения плазмонных наноструктур методом химического травления с последующей металлизацией поверхность (например, кремния, меди или алюминиевой фольги) обрабатывается химическим травителем для создания шероховатости. Далее на эту шероховатую поверхность химически или гальванически осаждается слой благородного металла [98, 99]. Процесс трудно контролировать, и часто при его проведении образуются дендритные структуры. Формируемое размерное распределение наноструктур при использовании этой методики – широкое и фрактальное; размеры варьируются от нано- до микромасштаба [100], плотность горячих точек довольно высокая. Последнее обеспечивает достаточно высокий коэффициент усиления сигнала ГКР (до 10^{8} для металлизированного мезапористого кремния [101]).

В таблице представлено сравнение вышеперечисленных методик по трем основным характеристикам.

Таблица

Сравнение значений параметров плазмонных структур при использовании различных методов

Метод	Размерное распределение	Плотность «горячих точек»	Коэффициент усиления сигнала ГКР
Ионный обмен в стекле	Широкое (полидисперсное) [86]	Средняя/низкая (случайное распределение) [88]	10^{3} – 10^{7} [89, 90]
Фемтосекундная лазерная запись + восстановление	Узкое (контролируемое) [91, 92]	Высокая [92]	10^{8} – 10^{10} [93, 102]
Наноимпринт-литография + напыление	Очень узкое (монодисперсное) [10]	Очень высокая (детерминированное расположение) [96]	10^{6} – 10^{7} [97]
Химическое травление + металлизация	Широкое (случайное, дендритное) [100]	Очень высокая (субнанометровые зазоры) [14]	10^{7} – 10^{8} [101]

Несмотря на сравнительно низкую плотность горячих точек и относительно невысокий коэффициент усиления сигнала ГКР, по сравнению с другими технологиями, метод ионного обмена обладает рядом уникальных преимуществ, которые делают его привлекательным для создания ГКР-активных подложек.

Следует выделить такие преимущества метода ионного обмена для формирования ГКР-структур:

1. Технологическая простота и масштабируемость. Это простой и недорогой процесс, пригодный для крупномасштабного производства ГКР-активных подложек. Метод не требует сложного литографического оборудования и высокого вакуума.

2. Низкая стоимость исходных материалов. В качестве основы для подложек используется многокомпонентное стекло, которое представляет собой дешевый и технологичный материал. Сама процедура ионного обмена также не требует дорогостоящего оборудования или расходных материалов.

3. Наночастицы защищены от внешней среды. В отличие от многих других методов, где наночастицы находятся непосредственно на поверхности и подвержены окислению и сульфидизации, в объеме ионообменного стекла над наночастицами металла находится тонкий слой стекла. Это обеспечивает долговечность и сохранность подложки без потери свойств и возможность многократного использования при последовательном травлении; последнее позволяет обнажать новые слои с неповрежденными наночастицами для повторного использования подложки.

4. Высокий коэффициент усиления сигнала (до $10^5 – 10^6$), достигаемый при использовании метода, что достаточно для многих аналитических задач, включая проблемы биомедицины.

5. Гибкость метода и возможность контроля параметров. Процесс позволяет варьировать и состав, и структуру наночастиц. Например, при последовательном внедрении ионов разных металлов (медь и серебро) и контроле температуры отжига можно формировать наноструктуры типа «ядро-оболочка» и структуры смешанного состава, положение плазмонного резонанса в которых зависит от соотношения концентраций металлов. Кроме того, комбинация ионного обмена с лазерным облучением позволяет создавать («рисовать») структуры заданной формы.

6. Возможность интеграции в оптические схемы. Формирование наночастиц в стекле – это идеальный вариант для разработки интегрированных сенсорных чипов, объединяющих оптические волноводы и микрофлюидику.

7. Хорошая изученность и возможность моделирования. Процессы ионного обмена и последующего формирования наночастиц хорошо изучены и поддаются математическому моделированию, что позволяет прогнозировать свойства конечных наноструктур.

Таким образом, при целом комплексе перечисленных преимуществ метода главными можно считать уникальное сочетание простоты и экономичности производства, а также открывающиеся возможности повысить долговечность ГКР-подложек благодаря естественной защите наночастиц стеклянной матрицей. Это делает технологию особенно привлекательной для создания практичных и стабильных сенсоров, пригодных даже для полевых условий. Хотя и имеются некоторые ограничения в контроле дисперсии наночастиц по размерам, характерные для этого метода, они не служат серьезным препятствием для его применения.

Серебряные наночастицы обеспечивают лучшее усиление ГКР среди всех наноструктур благородных металлов, хотя и склонны к окислению и сульфидированию.

С учетом оценок значений параметров подложек (они приведены выше), изготовленных различными методами, подложки для ГКР на основе ионообменных стекол со сформированными наноструктурами серебра представляются самыми перспективными по следующим причинам:

серебряные наноструктуры обеспечивают высокое усиление сигнала ГКР;

серебряные наноостровковые пленки можно удалять с поверхности после использования и сформировывать новые наночастицы на поверхности простым нагревом подложки с ионами серебра; другими словами, подложка пригодна для многоразового использования [38];

при нахождении серебряных наноструктур в объеме стекла они не повреждаются, при

этом перед непосредственным использованием наноструктуры можно выводить на поверхность путем травления стекла [40];

методика проста и низкозатратна, результаты хорошо воспроизводятся.

Детектирование различных веществ с помощью ГКР-методики на подложках с серебряными наноструктурами, сформированными методом ионного обмена

Исследование усиления сигнала комбинационного рассеяния света наноостровковыми пленками серебра, образованными на поверхности стекла в результате ионного обмена и термического отжига, а также влияние взаимного расположения «горячих точек» в ансамбле самоорганизующихся серебряных наноостровков, проводилось в работе [39]. Для нерезонансного возбуждения был зарегистрирован сигнал комбинационного рассеяния света от водного раствора 1,2-ди(4-пиридил)этилена (BPE) с концентрацией 10^{-3} М. Проведенное сравнение характеристик поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света пленками наноостровков на разных стадиях их роста показало, что на стадии коалесценции наноостровков усиление доминировало вследствие повышения напряженности электрического поля близкорасположенными группами наноостровков. На более ранних стадиях роста была установлена линейная зависимость между сигналом ГКР и поверхностной плотностью наноостровков. Максимальное усиление сигнала наноостровками наблюдалось на пороге коалесценции.

Серебряные наноостровковые пленки, сформированные на поверхности ионообменного стекла при термическом отжиге, демонстрируют стабильность в биосовместимых буферах, что открывает новые возможности их применения для ГКР-диагностики биообъектов, растворенных в буферах. В статье [41] было показано, что серебряные наноостровковые пленки стабильны в одном из наиболее распространенных (в биологических исследованиях) буферов – фосфатно-солевом (PBS), в PBS, разбавленном водой в соотношении 1:100, а также в буфере на основе PBS, в котором хлорид натрия NaCl заменен на такое же количество перхлората натрия $NaClO_4$, и в кислом фосфатном буфере. Показано, что после воздействия PBS пленки наноостровков обеспечивают хороший сигнал ГКР от монослоя BPE (концентрация 10^{-4} М), что делает их перспективными для применения в биосенсорах.

Метод ГКР с успехом применяется для диагностики аминокислот и белковых соединений. Было продемонстрировано [103], что спектры ГКР D-аланина и DL-серина можно наблюдать, если использовать подложки из серебряных наноостровковых пленок, погруженные в стандартные растворы PBS с миллимолярными концентрациями этих аминокислот. При этом полученные спектры существенно отличаются по интенсивности пиков и их положению от спектров комбинационного рассеяния объемных растворов и ГКР кристаллитов соответствующих аминокислот на подложках, не погруженных в буфер, и их КР на чистом стекле. Этот эффект предположительно приписывается электростатической ориентации цвиттер-ионов аминокислот наночастицами серебра, которые приобретают отрицательный заряд из-за десорбции Ag(I) хлоридом в растворе.

Таким образом, несмотря на достаточное усиление сигнала за счет металлических наноостровков, при идентификации аминокислот в различных биосовместимых буферах необходимо учитывать взаимодействие аминокислот с металлическим субстратом.

В работе [104] было проведено сравнительное исследование методов ГКР и иммуноферментного анализа для обнаружения нуклеопротеинов вируса SARS-CoV-2. В качестве подложек для ГКР использовались наноостровковые пленки серебра на поверхности ионообменного стекла. Было установлено, что спектры ГКР позволяют различать признаки антигенов, антител и признаки, показывающие связь между ними. При этом методика ГКР демонстрирует гораздо более низкий предел обнаружения, по сравнению с иммуноферментным анализом: 1 пг/мл против примерно 50 – 100 пг/мл, а также позволяет существенно снизить время диагностики: для проведения иммуноферментного анализа необходимо около двух часов, тогда как измерения ГКР занимают всего несколько секунд.

Разветвленная структура дендритов делает их весьма привлекательными для сенсорных приложений. Применение дендритов для ГКР-диагностики исследовалось в ряде работ [105 – 107]. Так, например, в работе [108] было проанализировано применение дендритных наноструктур, сформированных методом электролиза в стекле, обогащенном

ионами серебра, для ГКР-детектирования малых концентраций вредных веществ. Полученный предел обнаружения пестицида тирама соответствовал поверхностной концентрации $4{,}6 \cdot 10^{-10}$ г/мм^2 (монослой). Коэффициент усиления комбинационного рассеяния, обеспечиваемый дендритами, составлял $4 \cdot 10^5$.

Серебро известно своими антибактериальными свойствами, что позволяет успешно использовать его в медицине и фармакологии [109]. Однако токсическое действие серебра на живые клетки может оказаться препятствием для использования подложек на основе серебряных наночастиц для ГКР-анализа биологических объектов. В этом случае можно использовать наночастицы других металлов, в частности золота. Перспективным представляется также использование биметаллических наночастиц, например, серебро-золото. Такие наночастицы смогут объединить преимущества каждого из металлов – высокую добротность ЛППР, обеспечиваемую серебром, а также химическую и биологическую инертность золота для диагностики биообъектов.

В работе [110] с использованием ионного обмена и обратной диффузии были получены ансамбли биосовместимых наночастиц сплава золота и серебра с различным содержанием серебра, пригодные для использования в качестве подложек для ГКР. Биметаллические наночастицы золото-серебро выращивали методом ионного обмена серебро-натрий в силикатном стекле с последующими нанесением на поверхность образца деперколированной золотой пленки и термообработкой. Варьирование режима термообработки позволяло менять долю серебра в наночастице и корректировать спектральное положение их локального поверхностного плазмонного резонанса в спектральном диапазоне между резонансами наночастиц золота и серебра.

Исследование жизнеспособности клеток на чистых стеклах и стеклянных подложках с наночастицами различного состава показало, что клетки, выращенные на контрольных предметных стеклах и предметных стеклах с золотыми наночастицами, а также с наночастицами, имеющими долю серебра 40 – 50 мас. %, демонстрируют одинаковую жизнеспособность в пределах референтной точности. При этом для подложек с чисто серебряными наночастицами было зарегистрировано заметное снижение жизнеспособности и примерно 100%-е падение функциональности/адгезии [110].

Перспективные направления развития

Универсальность процесса ионного обмена в стекле открывает новые перспективы его применения в области плазмоники и фотоники, некоторые из которых уже находятся в стадии разработки, а другие еще только начинают изучаться.

Интегрированная фотонная платформа. Ионный обмен в стекле – это одна из основных технологических платформ для производства недорогих и высокопроизводительных планарных волноводов [111]. Этот процесс, который обычно включает обмен ионов K^+ или Ag^+ на ионы Na^+ в стекле, создает локальное увеличение показателя преломления, формируя основу для каналирования световой волны. Эта технология развивалась в течение последних 30 лет, что позволило создать широкий спектр устройств для телекоммуникаций, оптической обработки информации и сенсорики [112]. Волноводные структуры включают как пассивные, так и активные компоненты. Пассивные устройства, такие как направленные ответвители, решетки и оптические разветвители, были многократно успешно продемонстрированы [113]. Активные устройства, такие как интегрированные оптические усилители и лазеры, изготавливаются путем легирования стекла ионами редкоземельных элементов (например, неодима Nd^{3+}) и последующего создания волноводов с помощью ионного обмена [114]. Одним из наиболее интересных направлений можно считать применение этой технологии в квантовой фотонике. В перспективе стоит использовать ионообменные волноводы для реализации квантовых схем для криптографии и задач квантовой обработки, интегрируя их с лазерами из ионообменного стекла на одном чипе. Это позволяет рассматривать ионообменное стекло как перспективную платформу для «квантовой интегральной оптики» [115].

Гибкая фотоника на основе стекла. Концепция «гибкой фотоники» представляет собой новый этап для создания устройств на основе ионообменного стекла [116]. Это направление рассматривается как альтернатива гибкой фотонике на полимерной основе, которая имеет свои недостатки: ограниченный диапазон показателей преломления, поглощение в

ближнем ИК-диапазоне и низкую химическую стабильность. Хотя стекло традиционно считается твердым материалом, возможность создания тонких ионообменных слоев открывает перспективу создания фотонных компонентов на гибких стеклянных подложках. Идея состоит в том, что технологию ионного обмена можно адаптировать для создания гибких фотонных структур на основе коммерческого стекла, при сохранении низких оптических потерь и химической стабильности.

Для устройств гибкой фотоники возможно использование сверхтонких листов коммерческого стекла (например, Willow Glass от Corning толщиной менее 100 мкм [117]), демонстрирующих высокое качество поверхности и гибкость, подобную листу бумаги. Для упрочнения этих ультратонких стекол предлагается использовать метод ионного обмена. Для щелочных стекол классический ионный обмен (например, $Na^+ \leftrightarrow K^+$) создает на поверхности сжимающие напряжения, которые компенсируют микротрещины при изгибе, позволяя достигать меньших радиусов изгиба без разрушения. Это открывает путь к созданию полностью стеклянных гибких устройств для портативной электроники.

Фотонные устройства с ионами/наночастицами благородных металлов. Еще одна перспектива процесса ионообменного формирования наночастиц и кластеров металлов связана с возможностью создания недорогих фотонных систем с улучшенными характеристиками для широкого спектра применений. В частности, внесение ионов благородных металлов (Ag, Au) методом ионного обмена в объем или на поверхность микрорезонаторов с модами шепчущей галереи (WGM) (микросфер, микродисков) из многокомпонентных стекол позволяет придать новые свойства этим устройствам. Возможность нуклеации и выращивания наноструктур благородных металлов (в виде димерных кластеров и/или металлических наночастиц размером в несколько нанометров) внутри активной среды резонатора, изготовленного из стекла, легированного ионами редкоземельных элементов, после ионного обмена и термической постобработки может повысить люминесцентную эффективность редкоземельного элемента и его излучение за счет поверхностного плазмонного резонанса и/или механизмов переноса энергии, как это наблюдалось для планарных подложек [118, 119]. Более того, усиление сигнала на конвертированной частоте происходит внутри того же микрорезонатора, который, поддерживая высокую плотность световой энергии, позволяет фотонам многократно взаимодействовать как с ионами редкоземельных элементов, так и с металлическими наноструктурами, обычно расположенными на расстоянии нескольких десятков/сотен нанометров ниже поверхности резонатора, в пределах поля действия волноводных мод. Если эти наноструктуры представлены небольшими плазмонными наночастицами (например, размером в несколько нанометров), то может произойти комбинация двух резонансных явлений: связанного с микрорезонатором волноводных мод и плазмонного резонанса наночастиц; это приведет к дальнейшему значительному усилению сигнала.

Наличие наночастиц благородных металлов, внедренных в полость волновода в стекле, также может способствовать усилению нелинейного оптического отклика среды из-за наличия плазмонных эффектов. Например, наночастицы серебра с их высокой нелинейностью третьего порядка стоят на первом месте для разработки полностью оптических устройств обработки сигналов, таких как эффективные оптические ограничители, которые требуют материалов с высоким нелинейным показателем преломления $n^{(2)}$ [120].

Квантовая и когерентная плазмоника. В этой области внимание исследователей смещается от простого усиления поля плазмонными наночастицами к использованию квантовых явлений, таких как фазовая когерентность и сильная связь между плазмонами и другими квазичастицами (экситонами, электрон-дырочными парами). Это открывает путь к созданию элементов для квантовых компьютеров на графеновых плазмонах и новых типов нанофотонных устройств [121]. Квантовая плазмоника позволяет создавать источники одиночных фотонов, транзисторы посредством фотонной блокады и нанолазеры (спазеры) с беспороговой генерацией. Гибридные плазмонно-фотонные схемы поддерживают генерацию, манипулирование и детектирование одиночных плазмонов на чипе [122, 123].

Заключение

Наноструктуры, демонстрирующие плазмонные резонансы, имеют широкий спектр практических приложений: от визуализации концентрации глюкозы в крови до

детектирования токсичных веществ и диагностики вирусных инфекций. Эффективность плазмонно-усиленных сенсоров непосредственно зависит от геометрии плазмонных структур и методов их изготовления. Существенно, что параметры наноструктур можно легко адаптировать к различным приложениям посредством выбора материала и морфологии структуры. Особенно следует отметить простоту и дешевизну изготовления плазмонных наноструктур в стеклах методом ионного обмена. Все вышеизложенное обеспечивает необходимую гибкость при разработке различных сенсоров, использующих плазмонное усиление электрического поля и открывает большие возможности для использования таких устройств. Развитие плазмоники обеспечит еще более эффективные усиление и визуализацию сигналов, получаемых от исследуемых веществ и разработку новых устройств детектирования химических и биологических соединений на основе флуоресценции и ГКР.

Благодарность

Авторы выражают глубокую благодарность доктору физико-математических наук Андрею Александровичу Липовскому, профессору, заведующему кафедрой функциональных микро- и наноматериалов Санкт-Петербургского академического университета имени Ж. И. Алфёрова, за плодотворное обсуждение материалов статьи, которое способствовало улучшению ее качества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bass M.** Handbook of optics. Vol. I: Geometrical and physical optics, polarized light, components and instruments. New York: McGraw-Hill, Inc., 1996. 1628 p.

2. **Bohm D., Pines D.** A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas // Physical Review. 1953. Vol. 92. No. 3. Pp. 609–625.

3. **Albella P., Garcia-Cueto B., González F., Moreno F., Wu P. C., Kim T.-H., Brown A., Yang Y., Everitt H. O., Videen G.** Shape matters: Plasmonic nanoparticle shape enhances interaction with dielectric substrate // Nano Letters. 2011. Vol. 11. No. 9. Pp. 3531–3537.

4. **Jain P. K., El-Sayed M. A.** Surface plasmon resonance sensitivity of metal nanostructures: Physical basis and universal scaling in metal nanoshells // The Journal of Physical Chemistry C. 2007. Vol. 111. No. 47. Pp. 17451–17454.

5. **Scherbak S. A., Shustova O. V., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.** Electric properties of hemispherical metal nanoparticles: Influence of the dielectric cover and substrate // Plasmonics. 2015. Vol. 10. No. 3. Pp. 519–527.

6. **Rich R.** Advances in surface plasmon resonance biosensor analysis // Current Opinion in Biotechnology. 2000. Vol. 11. No. 1. Pp. 54–61.

7. **Écija-Arenas Á., Kirchner E.-M., Hirsch T., Fernández-Romero J. M.** Development of an aptamer-based SPR-biosensor for the determination of kanamycin residues in foods // Analytica Chimica Acta. 2021. Vol. 1169. 18 July. P. 338631.

8. **Zayats A. V., Smolyaninov I. I.** Near-field photonics: surface plasmon polaritons and localized surface plasmons // Journal of Optics A: Pure and Applied Optics. 2003. Vol. 5. No. 4. Pp. S16–S50.

9. **Kosubukin V. A.** Size dependence of light-field enhancement caused by surface plasmon excitation // Physics Letters A. 1991. Vol. 160. No. 6. Pp. 584–588.

10. **Климов В. В.** Наноплазмоника. 2-е изд. М.: Физматлит, 2010. 480 с.

11. **Novotny L.** Effective wavelength scaling for optical antennas // Physical Review Letters. 2007. Vol. 98. No. 26. P. 266802.

12. **Russell K.J., Liu T.-L., Cui S., Hu E.L.** Large spontaneous emission enhancement in plasmonic nanocavities // Nature Photonics. 2012. Vol. 6. No. 7. Pp. 459–462.

13. **Fan M., Andrade G. F. S., Brolo A. G.** A review on the fabrication of substrates for surface enhanced Raman spectroscopy and their applications in analytical chemistry // Analytica Chimica Acta. 2011. Vol. 693. No. 1–2. Pp. 7–25.

14. Поверхностные поляритоны. Электромагнитные волны на поверхностях и границах раздела сред. Сб. статей под ред. Аграновича В. М. и Миллса Д. Л. М.: Наука, 1985. 525 с.

15. **Zayats A. V., Smolyaninov I. I., Maradudin A. A.** Nano-optics of surface plasmon polaritons // Physics Reports. 2005. Vol. 408. No. 3–4. Pp. 131–314.

16. **Bolduc O. R., Pelletier J. N., Masson J.-F.** SPR biosensing in crude serum using ultralow fouling binary patterned peptide SAM // Analytical Chemistry. 2010. Vol. 82. No. 9. Pp. 3699–3706.

17. **Homola J., Yee S. S., Gauglitz G.** Surface plasmon resonance sensors: Review // Sensors and Actuators B: Chemical. 1999. Vol. 54. No. 1–2. Pp. 3–15.

18. **Monzón-Hernández D., Villatoro J., Talavera D., Luna-Moreno D.** Optical-fiber surface-plasmon resonance sensor with multiple resonance peaks // Applied Optics. 2004. Vol. 43. No. 6. P. 1216.

19. **Díez A., Andrés M. V., Cruz J. L.** In-line fiber-optic sensors based on the excitation of surface plasma modes in metal-coated tapered fibers // Sensors and Actuators B: Chemical. 2001. Vol. 73. No. 2–3. Pp. 95–99.

20. **Mayer K. M., Hafner J. H.** Localized surface plasmon resonance sensors // Chemical Reviews. 2011. Vol. 111. No. 6. Pp. 3828–3857.

21. **Becker J., Trügler A., Jakab A., Hohenester U., Sönnichsen C.** The optimal aspect ratio of gold nanorods for plasmonic bio-sensing // Plasmonics. 2010. Vol. 5. No. 2. Pp. 161–167.

22. **Hohenester U.** Nano and quantum optics: An introduction to basic principles and theory (Book series “Graduate texts in physics”). Cham, Switzerland: Springer International Publishing, 2020. 665 p.

23. **Daniel W. L., Han M. S., Lee J.-S., Mirkin C. A.** Colorimetric nitrite and nitrate detection with gold nanoparticle probes and kinetic end points // Journal of the American Chemical Society. 2009. Vol. 131. No. 18. Pp. 6362–6363.

24. **Zhang J., Wang L., Pan D., Song S., Boey F. Y. C., Zhang H., Fan C.** Visual cocaine detection with gold nanoparticles and rationally engineered aptamer structures // Small. 2008. Vol. 4. No. 8. Pp. 1196–1200.

25. **Storhoff J. J., Elghanian R., Mucic R. C., Mirkin C. A., Letsinger R. L.** One-pot colorimetric differentiation of polynucleotides with single base imperfections using gold nanoparticle probes // Journal of the American Chemical Society. 1998. Vol. 120. No. 9. Pp. 1959–1964.

26. **Qin X., Yuan C.-L., Shi R., Wang S.-Z., Wang Y.-L.** Colorimetric detection of dopamine based on iodine-mediated etching of gold nanorods // Chinese Journal of Analytical Chemistry. 2021. Vol. 49. No. 1. Pp. 60–67.

27. **Li M., Cushing S. K., Wu N.** Plasmon-enhanced optical sensors: a review // The Analyst. 2015. Vol. 140. No. 2. Pp. 386–406.

28. **Kinkhabwala A., Yu Z., Fan S., Avlasevich Y., Müllen K., Moerner W. E.** Large single-molecule fluorescence enhancements produced by a bowtie nanoantenna // Nature Photonics. 2009. Vol. 3. No. 11. Pp. 654–657.

29. **Xie F., Pang J. S., Centeno A., Ryan M. P., Riley D. J., Alford N. M.** Nanoscale control of Ag nanostructures for plasmonic fluorescence enhancement of near-infrared dyes // Nano Research. 2013. Vol. 6. No. 7. Pp. 496–510.

30. **Vo-Dinh T.,** SERS chemical sensors and biosensors: new tools for environmental and biological analysis // Sensors and Actuators B: Chemical. 1995. Vol. 29. No. 1–3. Pp. 183–189.

31. **Zhurikhina V., Skvortsov A., Babich E., Redkov A.** Raman spectroscopy of amino acids using metal nanoisland films on glass // Proceedings of the 2021 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). IEEE, 14–15 October, St. Petersburg, Russian Federation, 2021. Pp. 168–170.

32. **Li M., Cushing S. K., Zhang J., Lankford J., Aguilar Z. P., Ma D., Wu N.** Shape-dependent surface-enhanced Raman scattering in gold–Raman-probe–silica sandwiched nanoparticles for biocompatible applications // Nanotechnology. 2012. Vol. 23. No. 11. P. 115501.

33. **Zong S., Wang Z., Chen H., Yang J., Cui Y.** Surface enhanced Raman scattering traceable and glutathione responsive nanocarrier for the intracellular drug delivery // Analytical Chemistry. 2013. Vol. 85. No. 4. Pp. 2223–2230.

34. **Ko E., Hwang J., Kim J. H., Lee J. H., Lee S. H., Tran V.-K., Chung W. S., Park C. H., Choo J., Seong G. H.** Electrochemical fabrication of nanostructures on porous silicon for biochemical sensing platforms // Analytical Sciences. 2016. Vol. 32. No. 6. Pp. 681–686.

35. **Babich E., Scherbak S., Lubyankina E., Zhurikhina V., Lipovskii A.** Power spectral density analysis for optimizing SERS structures // Sensors. 2022. Vol. 22. No. 2. P. 593.

36. **Batista E., Dos Santos D. P., Andrade G. F. S., Sant'Ana A. C., Brolo A. G., Temperini M. L. A.** Using polycarbonate membranes as templates for the preparation of au nanostructures for surface-enhanced Raman scattering // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. 2009. Vol. 9. No. 5. Pp. 3233–3238.

37. **Miller E. N., Palm D. C., De Silva D., Parbatani A., Meyers A. R., Williams D. L., Thompson D. E.** Microsphere lithography on hydrophobic surfaces for generating gold films that exhibit infrared localized surface plasmon resonances // The Journal of Physical Chemistry B. 2013. Vol. 117. No. 49. Pp. 15313–15318.

38. **Zhurikhina V. V., Brunkov P. N., Melehin V. G., Kaplas T., Svirko Y., Rutckaia V. V., Lipovskii A. A.** Self-assembled silver nanoislands formed on glass surface via out-diffusion for multiple usages in SERS applications // Nanoscale Research Letters. 2012. Vol. 7. 17 December. P. 676.

39. **Babich E., Scherbak S., Asonkeng F., Maurer T., Lipovskii A.** Hot spot statistics and SERS performance of self-assembled silver nanoisland films // Optical Materials Express. 2019. Vol. 9. No. 10. P. 4090.

40. **Babich E., Raskhodchikov D., Redkov A., Hmima A., Nashchekin A., Lipovskii A.** Dendritic structures by glass electrolysis: Studies and SERS capability // Current Applied Physics. 2021. Vol. 24. April. Pp. 54–59.

41. **Skvortsov A., Babich E., Redkov A., Lipovskii A., Zhurikhina V.** Stable in biocompatible buffers silver nanoisland films for SERS // Biosensors. 2021. Vol. 11. No. 11. P. 448.

42. **Babich E., Reduto I., Redkov A., Reshetov I., Zhurikhina V., Lipovskii A.** Thermal poling of glasses to fabricate masks for ion exchange // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1695. 28 December. P. 012107.

43. **Babich E. S., Gangrskaia E. S., Reduto I. V., Béal J., Redkov A. V., Maurer T., Lipovskii A. A.** Self-assembled silver nanoparticles in glass microstructured by poling for SERS application // Current Applied Physics. 2019. Vol. 19. No. 10. Pp. 1088–1095.

44. **Ломоносов М. В.** Избранные философские произведения. М.: Госполитиздат, 1950. 759 с.

45. **Padovani S., Sada C., Mazzoldi P., Brunetti B., Borgia I., Sgamellotti A., Giulivi A., D'Acapito F., Battaglin G.** Copper in glazes of Renaissance luster pottery: Nanoparticles, ions, and local environment // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 93. No. 12. Pp. 10058–10063.

46. **Zachariasen W. H.** The atomic arrangement in glass // Journal of the American Chemical Society. 1932. Vol. 54. No. 10. Pp. 3841–3851.

47. **Gy R.** Ion exchange for glass strengthening // Materials Science and Engineering: B. 2008. Vol. 149. No. 2. Pp. 159–165.

48. **Giallorenzi T. G., West E. J., Kirk R., Ginther R., Andrews R. A.** Optical waveguides formed by thermal migration of ions in glass // Applied Optics. 1973. Vol. 12. No. 6. P. 1240.

49. **Ashley P. R., Bloemer M. J., Davis J. H.** Measurement of nonlinear properties in Ag-ion exchange waveguides using degenerate four-wave mixing // Applied Physics Letters. 1990. Vol. 57. No. 15. Pp. 1488–1490.

50. **Berger A.** Concentration and size depth profile of colloidal silver particles in glass surfaces produced by sodium-silver ion-exchange // Journal of Non-Crystalline Solids. 1992. Vol. 151. No. 1–2. Pp. 88–94.

51. **Cheng Z., Liu L., Xu S., Lu M., Wang X.** Temperature dependence of electrical and thermal conduction in single silver nanowire // Scientific Reports. 2015. Vol. 5. 02 June. P. 10718.

52. **Singh S. P., Karmakar B.** Single-step synthesis and surface plasmons of bismuth-coated spherical to hexagonal silver nanoparticles in dichroic Ag: Bismuth glass nanocomposites // Plasmonics. 2011. Vol. 6. No. 3. Pp. 457–467.

53. **Epifani M., Giannini C., Tapfer L., Vasanelli L.** Sol–gel synthesis and characterization of Ag and Au nanoparticles in SiO_2, TiO_2, and ZrO_2 thin films // Journal of the American Ceramic Society. 2000. Vol. 83. No. 10. Pp. 2385–2393.

54. **De Marchi G., Mattei G., Mazzoldi P., Sada C., Miotello A.** Two stages in the kinetics of gold cluster growth in ion-implanted silica during isothermal annealing in oxidizing atmosphere // Journal of Applied Physics. 2002. Vol. 92. No. 8. Pp. 4249–4254.

55. **Chen Y., Jaakola J. J., Säynätjoki A., Tervonen A., Honkanen S.** Glass-embedded silver nanoparticle patterns by masked ion-exchange process for surface-enhanced Raman scattering // Journal of Raman Spectroscopy. 2011. Vol. 42. No. 5. Pp. 936–940.

56. **Redkov A. V., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.** Formation and self-arrangement of silver nanoparticles in glass via annealing in hydrogen: The model // Journal of Non-Crystalline Solids. 2013. Vol. 376. 15 September. Pp. 152–157.

57. **Abdel-Hameed S. A. M., Fathi A. M.** Preparation and characterization of silver nanoparticles within silicate glass ceramics via modification of ion exchange process // Journal of Alloys and Compounds. 2010. Vol. 498. No. 1. Pp. 71–76.

58. **Gonella F., Quaranta A., Cattaruzza E., Padovani S., Sada C., D'Acapito F., Maurizio C.** Cu-alkali ion exchange in glass: a model for the copper diffusion based on XAFS experiments // Computational Materials Science. 2005. Vol. 33. No. 1–3. Pp. 31–36.

59. **Дёмичев И. А., Сидоров А. И., Никоноров Н. В.** Особенности оптических свойств диффузионных слоев, полученных при последовательном обмене ионов натрия на ионы меди и серебра в силикатном стекле // Оптический журнал. 2015. Т. 82. № 11. С. 66–70.

60. **Sgibnev Y. M., Nikonorov N. V., Ignatiev A. I.** Luminescence of silver clusters in ion-exchanged cerium-doped photo-thermo-refractive glasses // Journal of Luminescence. 2016. Vol. 176. August. Pp. 292–297.

61. **Sgibnev Y., Nikonorov N., Ignatiev A.** Governing functionality of silver ion-exchanged photo-thermo-refractive glass matrix by small additives // Applied Sciences. 2021. Vol. 11. No. 9. P. 3891.

62. **Simo A., Polte J., Pfänder N., Vainio U., Emmerling F., Rademann K.** Formation mechanism of silver nanoparticles stabilized in glassy matrices // Journal of the American Chemical Society. 2012. Vol. 134. No. 45. Pp. 18824–18833.

63. **Qu X., Li Y., Li L., Wang Y., Liang J., Liang J.** Fluorescent gold nanoclusters: synthesis and recent biological application // Journal of Nanomaterials. 2015. Vol. 2015. 13 August. P. 84097.

64. **Саратовский А. С., Гирсова М. А., Анфимова И. Н., Антропова Т. В.** Формирование молекулярных кластеров серебра полимерно-солевым методом в пористых стеклах // Оптика и спектроскопия. 2023. Т. 131. № 1. С. 92–94.

65. **Kaganovskii Yu., Lipovskii A., Rosenbluh M., Zhurikhina V.** Formation of nanoclusters through silver reduction in glasses: The model // Journal of Non-Crystalline Solids. 2007. Vol. 353. No. 22–23. Pp. 2263–2271.

66. **Redkov A., Chervinskii S., Baklanov A., Reduto I., Zhurikhina V., Lipovskii A.** Plasmonic molecules via glass annealing in hydrogen // Nanoscale Research Letters. 2014. Vol. 9. 08 November. P. 606.

67. **Chervinskii S., Sevriuk V., Reduto I., Lipovskii A.** Formation and 2D-patterning of silver nanoisland film using thermal poling and out-diffusion from glass // Journal of Applied Physics. 2013. Vol. 114. No. 22. P. 224301.

68. **Hofmeister H., Thiel S., Dubiel M., Schurig E.** Synthesis of nanosized silver particles in ion-exchanged glass by electron beam irradiation // Applied Physics Letters. 1997. Vol. 70. No. 13. Pp. 1694–1696.

69. **Espiau de Lamaestre R., Béa1 H., Bernas H., Belloni J., Marignier J. L.** Irradiation-induced Ag nanocluster nucleation in silicate glasses: Analogy with photography // Physical Review B. 2007. Vol. 76. No. 20. P. 205431.

70. **Zhang J., Dong W., Qiao L., Li J., Zheng J., Sheng J.** Silver nanocluster formation in soda-lime silicate glass by X-ray irradiation and annealing // Journal of Crystal Growth. 2007. Vol. 305. No. 1. Pp. 278–284.

71. **Farah K., Hosni F., Mejri A., Boizot B., Hamzaoui A. H., Ben Ouada H.** Effect of gamma rays absorbed doses and heat treatment on the optical absorption spectra of silver ion-exchanged silicate glass // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2014. Vol. 323. 15 March. Pp. 36–41.

72. **Евстропьев С. К., Никоноров Н. В., Салимов Ш. К., Эшбеков А. А., Юдин Д. М.** Спектры ЭПР щелочносиликатных стекол, подвергнутых ионному обмену и гамма-облучению // Физика и химия стекла. 1991. Т. 17. № 1. С. 126–129.

73. **Kaganovsky Y. S., Antonov I., Ianetz D., Rosenbluh M., Ihlemann J., Müller S. G., Marowsky G., Lipovskii A. A.** Mass transfer in optical nanocomposites induced by pulsed laser irradiation // Solid State Phenomena. 2003. Vol. 94. June. Pp. 105–114.

74. **Marquestaut N., Petit Y., Royon A., Mounaix P., Cardinal T., Canioni L.** Three-dimensional silver nanoparticle formation using femtosecond laser irradiation in phosphate glasses: Analogy with photography // Advanced Functional Materials. 2014. Vol. 24. No. 37. Pp. 5824–5832.

75. **Rosenbluh M., Antonov I., Ianetz D., Kaganovskii Yu., Lipovskii A. A.** Microfabrication of structures by laser light in metal-doped glasses // Optical Materials. 2003. Vol. 24. No. 1–2. Pp. 401–410.

76. **Lo Faro M. J., D'Andrea C., Leonardi A. A., Morganti D., Irrera A., Fazio B.** Fractal silver dendrites as 3D SERS platform for highly sensitive detection of biomolecules in hydration conditions // Nanomaterials. 2019. Vol. 9. No. 11. P. 1630.

77. **Wang D., Astruc D.** Dendritic catalysis – Basic concepts and recent trends // Coordination Chemistry Reviews. 2013. Vol. 257. No. 15–16. Pp. 2317–2334.

78. **Zhou Y., Yu S. H., Wang C. Y., Li X. G., Zhu Y. R., Chen Z. Y.** A novel ultraviolet irradiation photoreduction technique for the preparation of single-crystal Ag nanorods and Ag dendrites // Advanced Materials. 1999. Vol. 11. No. 10. Pp. 850–852.

79. **Lee G.-J., Shin S.-I., Oh S.-G.** Preparation of silver dendritic nanoparticles using sodium polyacrylate in aqueous solution // Chemistry Letters. 2004. Vol. 33. No. 2. Pp. 118–119.

80. **Gutés A., Carraro C., Maboudian R.** Silver dendrites from galvanic displacement on commercial aluminum foil as an effective SERS substrate // Journal of the American Chemical Society. 2010. Vol. 132. No. 5. Pp. 1476–1477.

81. **Zhu J., Liu S., Palchik O., Koltypin Y., Gedanken A.** Shape-controlled synthesis of silver nanoparticles by pulse sonoelectrochemical methods // Langmuir. 2000. Vol. 16. No. 16. Pp. 6396–6399.

82. **Брунков П. Н., Липовский А. А., Мелехин В. Г., Редьков А. В., Стаценко В. В.** Формирование серебряных фрактальных структур в ионообменных стеклах при полинге // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 2. С. 112–117.

83. **Grand J., de la Chapelle M. L., Bijeon J.-L., Adam P.-M., Vial A., Royer P.** Role of localized surface plasmons in surface-enhanced Raman scattering of shape-controlled metallic particles in regular arrays // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. 2005. Vol. 72. No. 3. P. 033407.

84. **Li P., Long F., Chen W., Chen J., Chu P. K., Wang H.** Fundamentals and applications of surface-enhanced Raman spectroscopy – based biosensors // Current Opinion in Biomedical Engineering. 2020. Vol. 13. March. Pp. 51–59.

85. **Mosier-Boss P.** Review of SERS substrates for chemical sensing // Nanomaterials. 2017. Vol. 7. No. 6. P. 142.

86. **Cheng W. D., Wu Z. J., Gu X. H., Lin F., Xing X. Q., Mo G., Wu Z. H.** GISAXS study on the size and distribution evolutions of Ag nanoparticles in ion-exchange glass during annealing // Materials Chemistry and Physics. 2015. Vol. 152. 15 February. Pp. 48–53.

87. **Inozemtsev V. A., Dokukin M. E., Sgibnev Y. M., Sherstyukova E. A., Kandrashina S. S., Shvedov M. A., Shelaev A. V., Nikonorov N. V., Sergunova V. A., Baryshev A. V.** Na-Ag ion-exchanged glass substrates for plasmon-enhanced fluorescence imaging of neutrophils // Sensors. 2025. Vol. 25. No. 7. P. 2278.

88. **Kolobkova E., Kuznetsova M. S., Nikonorov N.** Ag/Na ion exchange in fluorophosphate glasses and formation of Ag nanoparticles in the bulk and on the surface of the glass // ACS Applied Nano Materials. 2019. Vol. 2. No. 11. Pp. 6928–6938.

89. **Simo A., Joseph V., Fenger R., Kneipp J., Rademann K.** Long-term stable silver subsurface ion-exchanged glasses for SERS applications // ChemPhysChem. 2011. Vol. 12. No. 9. Pp. 1683–1688.

90. **Zhao J., Lin J., Zhang W., Wei H., Chen Y.** SERS-active Ag nanoparticles embedded in glass prepared by a two-step electric field-assisted diffusion // Optical Materials. 2015. Vol. 39. January. Pp. 97–102.

91. **Huang H., Hu A., Sivayoganathan M., Duley W. W., Huang Z. H., Zhou Y.** Femtosecond laser fabrication of silver plasmonic structures for application as single particle SERS detectors // Materials Research Express. 2014. Vol. 1. No. 2. P. 025022.

92. **Yao Y., Zhao Y., Zhang H., Pan W., Liang W., Jiang Y., Yan X., Yan Y.** Ultrafast laser-induced 1T′/2H-MoTe2 nanopattern with Au-nanoclusters for Raman monitoring of cellular drug metabolism // ACS Nano. 2025. Vol. 19. No. 17. Pp. 16732–16743.

93. **Lun Y., Zhao B., Geng Y., Du W., Zhao X., Wang X.** Reusable SERS platform of femtosecond laser processed substrate for detection of malachite green // Molecules. 2024. Vol. 29. No. 21. P. 5053.

94. **Ushkov A., Belozerova N., Dyubo D., et al.** Laser-synthesized amorphous $PdSe_{2-x}$ nanoparticles: A defect-rich platform for high-efficiency SERS, photocatalysis, and photothermal conversion // Advanced Materials Interfaces. 2026. 7 December. P. e00902.

95. **Chou S. Y., Krauss P. R., Renstrom P. J.** Nanoimprint lithography // Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. 1996. Vol. 14. No. 6. Pp. 4129–4133.

96. **Guo L. J.** Nanoimprint lithography: Methods and material requirements // Advanced Materials. 2007. Vol. 19. No. 4. Pp. 495–513.

97. **Cottat M., Lidgi-Guigui N., Tijunelyte I., Barbillon G., Hamouda F., Gogol P., Aassime A., Lourtioz J.-M., Bartenlian B., de la Chapelle M. L.** Soft UV nanoimprint lithography-designed highly sensitive substrates for SERS detection // Nanoscale Research Letters. 2014. Vol. 9. 21 November. P. 623.

98. **Malekian B., Xiong K., Emilsson G., Andersson J., Fager C., Olsson E., Larsson-Langhammer E., Dahlin A.** Fabrication and characterization of plasmonic nanopores with cavities in the solid support // Sensors. 2017. Vol. 17. No. 6. P. 1444.

99. **Gonçalves M. R., Makaryan T., Enderle F., Wiedemann S., Plettl A., Marti O., Ziemann P.** Plasmonic nanostructures fabricated using nanosphere-lithography, soft-lithography and plasma etching // Beilstein Journal of Nanotechnology. 2011. Vol. 2. Pp. 448–458.

100. **Bandarenka H. V., Girel K. V., Zavatski S. A., Panarin A., Terekhov S. N.** Progress in the development of SERS-active substrates based on metal-coated porous silicon // Materials. 2018. Vol. 11. No. 5. P. 852.

101. **Lai Y., Wang J., He T., Sun S.** Improved surface enhanced Raman scattering for nanostructured silver on porous silicon for ultrasensitive determination of 2,4,6-Trinitrotoluene // Analytical Letters. 2014. Vol. 47. No. 5. Pp. 833–842.

102. **Hu Y., Zhou Y., Luo G., Li D., Qu M.** Femtosecond laser-induced nanoparticle implantation into flexible substrate for sensitive and reusable microfluidics SERS detection // International Journal of Extreme Manufacturing. 2024. Vol. 6. No. 4. P. 045005.

103. **Skvortsov A., Babich E., Lipovskii A., Redkov A., Yang G., Zhurikhina V.** Raman scattering study of amino acids adsorbed on a silver nanoisland film // Sensors. 2022. Vol. 22. No. 14. P. 5455.

104. **Fatkhutdinova L. I., Babich E., Boldyrev K., et al.** Rapid and sensitive detection of nucleoprotein SARS-CoV-2 virus: SERS vs ELISA // Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications. 2023. Vol. 57. December. P. 101172.

105. **Yakimchuk D. V., Kaniukov E. Yu., Lepeshov S., et al.** Self-organized spatially separated silver 3D dendrites as efficient plasmonic nanostructures for surface-enhanced Raman spectroscopy applications // Journal of Applied Physics. 2019. Vol. 126. No. 23. P. 233105.

106. **He L., Lin M., Li H., Kim N.-J.** Surface-enhanced Raman spectroscopy coupled with dendritic silver nanosubstrate for detection of restricted antibiotics // Journal of Raman Spectroscopy. 2010. Vol. 41. No. 7. Pp. 739–744.

107. **Dies H., Raveendran J., Escobedo C., Docoslis A.** In situ assembly of active surface-enhanced Raman scattering substrates via electric field-guided growth of dendritic nanoparticle structures // Nanoscale. 2017. Vol. 9. No. 23. Pp. 7847–7857.

108. **Lubyankina E. A., Babich E. S., Lipovskii A. A.** Pesticides detection by SERS using dendritic structures grown in glass // St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics. 2023. Vol. 16. No. 1.1. Pp. 374–379.

109. **Antsiferova A. A., Kashkarov P. K., Koval'chuk M. V.** Effect of different forms of silver on biological objects // Nanobiotechnology Reports. 2022. Vol. 17. No. 2. Pp. 155–164.

110. **Babich E., Scherbak S., Kirilenko D., Kondratev V., Stupin D., Lipovskii A.** Glasses with biocompatible Au/Ag NPs of governed composition // Journal of Physics D: Applied Physics. 2024. Vol. 57. No. 13. P. 135302.

111. **Broquin J.-E., Honkanen S.** Integrated photonics on glass: A review of the ion-exchange technology achievements // Applied Sciences. 2021. Vol. 11. No. 10. P. 4472.

112. **Righini G. C., Licares J.** Active and quantum integrated photonic elements by ion exchange in glass // Applied Sciences. 2021. Vol. 11. No. 11. P. 5222.

113. **Yinlei H., Minghua W., Xihua L., Jianyi Y., Xiaoqing J., Qiang Z.** Recent development of ion-exchanged glass waveguide technology // 2006 Asian Optical Fiber Communication & Optoelectronic Exposition & Conference. 24–27 October, Shanghai, China, IEEE, 2006. Pp. 1–10.

114. **Conti G. N., Peyghambarian N., Ferrari M., Montagna M., Righini G. C., Brenci M., Forastiere M. A., Pelli S., Ricci G.** Rare-earth-doped glasses and ion-exchanged integrated optical amplifiers and lasers // Philosophical Magazine B. 2002. Vol. 82. No. 6. Pp. 721–734.

115. **Prieto-Blanco X., Montero-Orille C., Linares J., Gonzalez-Nunez H., Balado D.** Quantum projectors implemented with optical directional couplers in ion-exchanged glasses // Journal of Lightwave Technology. 2022. Vol. 40. No. 23. Pp. 7676–7684.

116. **Berneschi S., Righini G. C., Pelli S.** Towards a glass new world: The role of ion-exchange in modern technology // Applied Sciences. 2021. Vol. 11. No. 10. P. 4610.

117. **Righini G. C., Ferrari M., Lukowiak A., Macrelli G.** Flexible glass: Myth and photonic technology // Materials. 2025. Vol. 18. No. 9. P. 2010.

118. **Huang Y., Zhuang S., Peng L., Wu J., Liao T., Xu C., Duan Y.** Efficiency improvement of up-conversion luminescence of Yb^{3+}/Tm^{3+} co-doped tellurite glass microsphere // Journal of Alloys and Compounds. 2018. Vol. 748. 5 June. Pp. 93–99.

119. **Singh S. K., Giri N. K., Rai D. K., Rai S. B.** Enhanced upconversion emission in Er^{3+}-doped tellurite glass containing silver nanoparticles // Solid State Sciences. 2010. Vol. 12. No. 8. Pp. 1480–1483.

120. **Mai H. H., Kaydashev V. E., Tikhomirov V. K., Janssens E., Shestakov M. V., Meledina M., Turner S., Van Tendeloo G., Moshchalkov V. V., Lievens P.** Nonlinear optical properties of Ag nanoclusters and nanoparticles dispersed in a glass host // The Journal of Physical Chemistry C. 2014. Vol. 118. No. 29. Pp. 15995–16002.

121. **Alonso Calafell I., Cox J. D., Radonjić M., Saavedra J. R. M., García de Abajo F. J., Rozema L. A., Walther P.** Quantum computing with graphene plasmons // npj Quantum Information. 2019. Vol. 5. 02 May. P. 37.

122. **Bozhevolnyi S. I., Mortensen N. A.** Plasmonics for emerging quantum technologies // Nanophotonics. 2017. Vol. 6. No. 5. Pp. 1185–1188.

123. **Tame M. S., McEnery K. R., Özdemir Ş. K., Lee J., Maier S. A., Kim M. S.** Quantum Plasmonics // Nature Physics. 2013. Vol. 9. No. 6. Pp. 329–344.

REFERENCES

1. **Bass M.,** Handbook of optics, Vol. I: Geometrical and physical optics, polarized light, components and instruments. McGraw-Hill, Inc., New York, 1996.

2. **Bohm D., Pines D.,** A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas, Phys. Rev. 92 (3) (1953) 609–625.

3. **Albella P., Garcia-Cueto B., González F., et al.,** Shape matters: Plasmonic nanoparticle shape enhances interaction with dielectric substrate, Nano Lett. 11 (9) (2011) 3531–3537.

4. **Jain P. K., El-Sayed M. A.,** Surface plasmon resonance sensitivity of metal nanostructures: Physical basis and universal scaling in metal nanoshells, J. Phys. Chem. C. 111 (47) (2007) 17451–17454.

5. **Scherbak S. A., Shustova O. V., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.,** Electric properties of hemispherical metal nanoparticles: Influence of the dielectric cover and substrate, Plasmonics. 10 (3) (2015) 519–527.

6. **Rich R.,** Advances in surface plasmon resonance biosensor analysis, Curr. Opin. Biotechnol. 11 (1) (2000) 54–61.

7. **Écija-Arenas Á., Kirchner E.-M., Hirsch T., Fernández-Romero J. M.,** Development of an aptamer-based SPR-biosensor for the determination of kanamycin residues in foods, Anal. Chim. Acta. 1169. (18 Jul) (2021) 338631.

8. **Zayats A. V., Smolyaninov I. I.,** Near-field photonics: surface plasmon polaritons and localized surface plasmons, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 5 (4) (2003) S16–S50.

9. **Kosubukin V. A.,** Size dependence of light-field enhancement caused by surface plasmon excitation, Phys. Lett. A. 160 (6) (1991) 584–588.

10. **Klimov V.,** Nanoplasmonics, Jenny Stanford Publishing, Singapore, 2014.

11. **Novotny L.,** Effective wavelength scaling for optical antennas, Phys. Rev. Lett. 98 (26) (2007) 266802.

12. **Russell K. J., Liu T.-L., Cui S., et al.,** Large spontaneous emission enhancement in plasmonic nanocavities, Nat. Photonics. 6 (7) (2012) 459–462.

13. **Fan M., Andrade G. F. S., Brolo A. G.,** A review on the fabrication of substrates for surface enhanced Raman spectroscopy and their applications in analytical chemistry, Anal. Chim. Acta. 693 (1–2) (2011) 7–25.

14. **Agranovich V. M., Mills D. L.,** Surface polaritons: Electromagnetic waves at surfaces and interfaces, Elsevier, New York, 2012.

15. **Zayats A. V., Smolyaninov I. I., Maradudin A. A.,** Nano-optics of surface plasmon polaritons, Phys. Rep. 408 (3–4) (2005) 131–314.

16. **Bolduc O. R., Pelletier J. N., Masson J.-F.,** SPR biosensing in crude serum using ultralow fouling binary patterned peptide SAM, Anal. Chem. 82 (9) (2010) 3699–3706.

17. **Homola J., Yee S. S., Gauglitz G.,** Surface plasmon resonance sensors: Review, Sens. Actuator B – Chem. 54 (1–2) (1999) 3–15.

18. **Monzón-Hernández D., Villatoro J., Talavera D., et al.,** Optical-fiber surface-plasmon resonance sensor with multiple resonance peaks, Appl. Opt. 43 (6) (2004) 1216.

19. **Díez A., Andrés M. V., Cruz J. L.,** In-line fiber-optic sensors based on the excitation of surface plasma modes in metal-coated tapered fibers, Sens. Actuator B – Chem. 73 (2–3) (2001) 95–99.

20. **Mayer K. M., Hafner J. H.**, Localized surface plasmon resonance sensors, Chem. Rev. 111 (6) (2011) 3828–3857.

21. **Becker J., Trügler A., Jakab A., et al.,** The optimal aspect ratio of gold nanorods for plasmonic bio-sensing, Plasmonics. 5 (2) (2010) 161–167.

22. **Hohenester U.,** Nano and quantum optics: Graduate texts in physics. Cham: Springer International Publishing, 2020.

23. **Daniel W. L., Han M. S., Lee J.-S., et al.,** Colorimetric nitrite and nitrate detection with gold nanoparticle probes and kinetic end points, J. Am. Chem. Soc. 131 (18) (2009) 6362–6363.

24. **Zhang J., Wang L., Pan D., et al.,** Visual cocaine detection with gold nanoparticles and rationally engineered aptamer structures, Small. 4 (8) (2008) 1196–1200.

25. **Storhoff J. J., Elghanian R., Mucic R. C., et al.,** One-pot colorimetric differentiation of polynucleotides with single base imperfections using gold nanoparticle probes, J. Am. Chem. Soc. 120 (9) (1998) 1959–1964.

26. **Qin X., Yuan C.-L., Shi R., et al.,** Colorimetric detection of dopamine based on iodine-mediated etching of gold nanorods, Chin. J. Anal. Chem. 49 (1) (2021) 60–67.

27. **Li M., Cushing S. K., Wu N.,** Plasmon-enhanced optical sensors: A review, Analyst. 140 (2) (2015) 386–406.

28. **Kinkhabwala A., Yu Z., Fan S., et al.,** Large single-molecule fluorescence enhancements produced by a bowtie nanoantenna, Nat. Photon. 3 (11) (2009) 654–657.

29. **Xie F., Pang J. S., Centeno A., et al.,** Nanoscale control of Ag nanostructures for plasmonic fluorescence enhancement of near-infrared dyes, Nano Res. 6 (7) (2013) 496–510.

30. **Vo-Dinh T.,** SERS chemical sensors and biosensors: new tools for environmental and biological analysis, Sens. Actuator B – Chem. 29 (1–3) (1995) 183–189.

31. **Zhurikhina V., Skvortsov A., Babich E., et al.,** Raman spectroscopy of amino acids using metal nanoisland films on glass, Proc. the 2021 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), IEEE, 14–15 Oct., St. Petersburg, Russian Federation (I2021) 168–170.

32. **Li M., Cushing S. K., Zhang J., et al.,** Shape-dependent surface-enhanced Raman scattering in gold–Raman-probe–silica sandwiched nanoparticles for biocompatible applications, Nanotechnol. 23 (11) (2012) 115501.

33. **Zong S., Wang Z., Chen H., et al.,** Surface enhanced Raman scattering traceable and glutathione responsive nanocarrier for the intracellular drug delivery, Anal. Chem. 85 (4) (2013) 2223–2230.

34. **Ko E., Hwang J., Kim J. H., et al.,** Electrochemical fabrication of nanostructures on porous silicon for biochemical sensing platforms, Anal. Sci. 32 (6) (2016) 681–686.

35. **Babich E., Scherbak S., Lubyankina E., et al.,** Power spectral density analysis for optimizing SERS structures, Sensors. 22 (2) (2022) 593.

36. **Batista E., Dos Santos D. P., Andrade G. F. S., et al.,** Using polycarbonate membranes as templates for the preparation of au nanostructures for surface-enhanced Raman scattering, J. Nanosci. Nanotechnol. 9 (5) (2009) 3233–3238.

37. **Miller E. N., Palm D. C., De Silva D., et al.,** Microsphere lithography on hydrophobic surfaces for generating gold films that exhibit infrared localized surface plasmon resonances, J. Phys. Chem B. 117 (49) (2013) 15313–15318.

38. **Zhurikhina V. V., Brunkov P. N., Melehin V. G., et al.,** Self-assembled silver nanoislands formed on glass surface via out-diffusion for multiple usages in SERS applications, Nanoscale Res. Lett. 7 (17 Dec) (2012) 676.

39. **Babich E., Scherbak S., Asonkeng F., et al.,** Hot spot statistics and SERS performance of self-assembled silver nanoisland films, Opt. Mater. Express. 9 (10) (2019) 4090.

40. **Babich E., Raskhodchikov D., Redkov A., et al.,** Dendritic structures by glass electrolysis: Studies and SERS capability, Curr. Appl. Phys. 24 (Apr) (2021) 54–59.

41. **Skvortsov A., Babich E., Redkov A., et al.,** Stable in biocompatible buffers silver nanoisland films for SERS, Biosensors. 11 (11) (2021) 448.

42. **Babich E., Reduto I., Redkov A., et al.,** Thermal poling of glasses to fabricate masks for ion exchange, J. Phys.: Conf. Ser. 1695 (28 Dec) (2020) 012107.

43. **Babich E. S., Gangrskaia E. S., Reduto I. V., et al.,** Self-assembled silver nanoparticles in glass microstructured by poling for SERS application, Curr. Appl. Phys. 19 (10) (2019) 1088–1095.

44. **Lomonosov M. V.,** Izbrannyye filosofskiye proizvedeniya [Selected philosophical works], Gospolitizdat Publishing, Moscow, 1950 (in Russian).

45. **Padovani S., Sada C., Mazzoldi P., et al.,** Copper in glasses of Renaissance luster pottery: Nanoparticles, ions, and local environment, J. Appl. Phys. 93 (12) (2003) 10058–10063.

46. **Zachariasen W. H.,** The atomic arrangement in glass, J. Am. Chem. Soc. 54 (10) (1932) 3841–3851.

47. **Gy R.,** Ion exchange for glass strengthening, Mater. Sci. Eng. B. 149 (2) (2008) 159–165.

48. **Giallorenzi T. G., West E. J., Kirk R., et al.,** Optical waveguides formed by thermal migration of ions in glass, Appl. Opt. 12 (6) (1973) 1240.

49. **Ashley P. R., Bloemer M. J., Davis J. H.,** Measurement of nonlinear properties in Ag-ion exchange waveguides using degenerate four-wave mixing, Appl. Phys. Lett. 57 (15) (1990) 1488–1490.

50. **Berger A.,** Concentration and size depth profile of colloidal silver particles in glass surfaces produced by sodium-silver ion-exchange, J. Non-Cryst. Solids. 151 (1–2) (1992) 88–94.

51. **Cheng Z., Liu L., Xu S., et al.,** Temperature dependence of electrical and thermal conduction in single silver nanowire, Sci. Rep. 5 (02 Jun) (2015) 10718.

52. **Singh S. P., Karmakar B.,** Single-step synthesis and surface plasmons of bismuth-coated spherical to hexagonal silver nanoparticles in dichroic Ag: Bismuth glass nanocomposites, Plasmonics. 6 (3) (2011) 457–467.

53. **Epifani M., Giannini C., Tapfer L., et al.,** Sol–gel synthesis and characterization of Ag and Au nanoparticles in SiO_2, TiO_2, and ZrO_2 thin films, J. Am. Cer. Soc. 83 (10) (2000) 2385–2393.

54. **De Marchi G., Mattei G., Mazzoldi P., et al.,** Two stages in the kinetics of gold cluster growth in ion-implanted silica during isothermal annealing in oxidizing atmosphere, J. Appl. Phys. 92 (8) (2002) 4249–4254.

55. **Chen Y., Jaakola J. J., Säynätjoki A., et al.,** Glass-embedded silver nanoparticle patterns by masked ion-exchange process for surface-enhanced Raman scattering, J. Raman Spectrosc. 42 (5) (2011) 936–940.

56. **Redkov A. V., Zhurikhina V. V., Lipovskii A. A.,** Formation and self-arrangement of silver nanoparticles in glass via annealing in hydrogen: The model, J. Non-Cryst. Solids. 376 (15 Sept) (2013) 152–157.

57. **Abdel-Hameed S. A. M., Fathi A. M.,** Preparation and characterization of silver nanoparticles within silicate glass ceramics via modification of ion exchange process, J. Alloys Compnd. 498 (1) (2010) 71–76.

58. **Gonella F., Quaranta A., Cattaruzza E., et al.,** Cu-alkali ion exchange in glass: a model for the copper diffusion based on XAFS experiments, Comput. Mater. Sci. 33 (1–3) (2005) 31–36.

59. **Demichev I. A., Sidorov A. I., Nikonorov N. V.,** Features of the optical properties of diffusion layers obtained by successive replacement of sodium ions with copper and silver ions in silicate glass, J. Opt. Technol. 82 (11) (2015) 767.

60. **Sgibnev Y. M., Nikonorov N. V., Ignatiev A. I.,** Luminescence of silver clusters in ion-exchanged cerium-doped photo-thermo-refractive glasses, J. Luminesc. 176 (Aug) (2016) 292–297.

61. **Sgibnev Y., Nikonorov N., Ignatiev A.** Governing functionality of silver ion-exchanged photo-thermo-refractive glass matrix by small additives, Appl. Sci. 11 (9) (2021) 3891.

62. **Simo A., Polte J., Pfänder N., et al.,** Formation mechanism of silver nanoparticles stabilized in glassy matrices, J. Am. Chem. Soc. 134 (45) (2012) 18824–18833.

63. **Qu X., Li Y., Li L., et al.,** Fluorescent gold nanoclusters: Synthesis and recent biological application, J. Nanomater. 2015 (13 Aug) (2015) 84097.

64. **Saratovskiy A. S., Girsova M. A., Anfimova I. A., Antropova T. V.,** Formation of molecular clusters of silver by polymer-salt method in porous glasses, Opt. Spectrosc. 131 (1) (2023) 92–94 (in Russian).

65. **Kaganovskii Y., Lipovskii A., Rosenbluh M., et al.,** Formation of nanoclusters through silver reduction in glasses: The model, J. Non-Cryst. Solids. 353 (22–23) (2007) 2263–2271.

66. **Redkov A., Chervinskii S., Baklanov A., et al.,** Plasmonic molecules via glass annealing in hydrogen, Nanoscale Res. Lett. 9 (08 Nov) (2014) 606.

67. **Chervinskii S., Sevriuk V., Reduto I., et al.,** Formation and 2D-patterning of silver nanoisland film using thermal poling and out-diffusion from glass, J. Appl. Phys. 114 (22) (2013) 224301.

68. **Hofmeister H., Thiel S., Dubiel M., et al.,** Synthesis of nanosized silver particles in ion-exchanged glass by electron beam irradiation, Appl. Phys. Lett. 70 (13) (1997) 1694–1696.

69. **Espiau de Lamaestre R., Béa1 H., Bernas H., et al.,** Irradiation-induced Ag nanocluster nucleation in silicate glasses: Analogy with photography, Phys. Rev. B. 76 (20) (2007) 205431.

70. **Zhang J., Dong W., Qiao L., et al.,** Silver nanocluster formation in soda-lime silicate glass by X-ray irradiation and annealing, J. Cryst. Growth. 305 (1) (2007) 278–284.

71. **Farah K., Hosni F., Mejri A., et al.,** Effect of gamma rays absorbed doses and heat treatment on the optical absorption spectra of silver ion-exchanged silicate glass, Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 323 (15 Mar) (2014) 36–41.

72. **Evstropiev S. K., Nikonorov N. V., Salimov Sh., et al.,** Spektry EPR shchelochnosilikatnykh stekol, podvergnutykh ionnomu obmenu i gamma-oblucheniyu [ESR spectra of alkali-silicate glasses subjected to ion exchange and gamma irradiation], Fizika i Khimiya Stekla [Physics and Chemistry of Glass]. 17 (1) (1991) 126–129 (in Russian).

73. **Kaganovsky Y. S., Antonov I., Ianetz D., et al.,** Mass transfer in optical nanocomposites induced by pulsed laser irradiation // Solid State Phenomena. 2003. Vol. 94. Pp. 105–114.

74. **Marquestaut N., Petit Y., Royon A., et al.,** Three-dimensional silver nanoparticle formation using femtosecond laser irradiation in phosphate glasses: Analogy with photography, Adv. Funct. Mater. 24 (37) (2014) 5824–5832.

75. **Rosenbluh M., Antonov I., Ianetz D., et al.,** Microfabrication of structures by laser light in metal-doped glasses, Opt. Mater. 24 (1–2) (2005) 401–410.

76. **Lo Faro M. J., D'Andrea C., Leonardi A. A., et al.**, Fractal silver dendrites as 3D SERS platform for highly sensitive detection of biomolecules in hydration conditions, Nanomater. 9 (11) (2019) 1630.

77. **Wang D., Astruc D.,** Dendritic catalysis – Basic concepts and recent trends, Coord. Chem. Rev. 257 (15–16) (2013) 2317–2334.

78. **Zhou Y., Yu S. H., Wang C. Y., et al.,** A novel ultraviolet irradiation photoreduction technique for the preparation of single-crystal Ag nanorods and Ag dendrites, Adv. Mater. 11 (10) (1991) 850–852.

79. **Lee G.-J., Shin S.-I., Oh S.-G.,** Preparation of silver dendritic nanoparticles using sodium polyacrylate in aqueous solution, Chem. Lett. subjected to ion exchange and gamma irradiation

80. **Gutés A., Carraro C., Maboudian R.,** Silver dendrites from galvanic displacement on commercial aluminum foil as an effective SERS substrate, J. Am. Chem. Soc. 132 (5) (2010) 1476–1477.

81. **Zhu J., Liu S., Palchik O., et al.,** Shape-controlled synthesis of silver nanoparticles by pulse sonoelectrochemical methods, Langmuir. 16 (16) (2000) 6396–6399.

82. **Brunkov P. N., Lipovskii A. A., Melekhin V. G., et al.,** Formation of silver fractal structures in ion-exchange glasses under poling, Tech. Phys. 60 (2) (2015) 270–274.

83. **Grand J., De la Chapelle M. L., Bijeon J.-L., et al.,** Role of localized surface plasmons in surface-enhanced Raman scattering of shape-controlled metallic particles in regular arrays, Phys. Rev. B: Condens. Matter. 72 (3) (2005) 033407.

84. **Li P., Long F., Chen W., et al.,** Fundamentals and applications of surface-enhanced Raman spectroscopy–based biosensors, Current Opinion in Biomedical Engineering. 13 (2020) 51–59.

85. **Mosier-Boss P.,** Review of SERS substrates for chemical sensing, Nanomater. 7 (6) (2017) 142.

86. **Cheng W. D., Wu Z.J., Gu X.H., et al.,** GISAXS study on the size and distribution evolutions of Ag nanoparticles in ion-exchange glass during annealing, Mater. Chem. Phys. 152 (2015) 48–53.

87. **Inozemtsev V. A., Dokukin M. E., Sgibnev Y. M., et al.,** Na-Ag ion-exchanged glass substrates for plasmon-enhanced fluorescence imaging of neutrophils, Sensors. 25 (7) (2025) 2278.

88. **Kolobkova E., Kuznetsova M. S., Nikonorov N.,** Ag/Na ion exchange in fluorophosphate glasses and formation of Ag nanoparticles in the bulk and on the surface of the glass, ACS Appl. Nano Mater. 2 (11) (2019) 6928–6938.

89. **Simo A., Joseph V., Fenger R., et al.,** Long-term stable silver subsurface ion-exchanged glasses for SERS applications, ChemPhysChem. 12 (9) (2011) 1683–1688.

90. **Zhao J., Lin J., Zhang W., et al.,** SERS-active Ag nanoparticles embedded in glass prepared by a two-step electric field-assisted diffusion, Opt. Mater. 39 (Jan) (2015) 97–102.

91. **Huang H., Hu A., Sivayoganathan M., et al.,** Femtosecond laser fabrication of silver plasmonic structures for application as single particle SERS detectors, Mater. Res. Express. 1 (2) (2014) 025022.

92. **Yao Y., Zhao Y., Zhang H., et al.,** Ultrafast laser-induced 1T′/2H-MoTe2 nanopattern with Au-nanoclusters for Raman monitoring of cellular drug metabolism, ACS Nano. 19 (17) (2025) 16732–16743.

93. **Lun Y., Zhao B., Geng Y., et al.,** Reusable SERS platform of femtosecond laser processed substrate for detection of malachite green, Molecules. 29 (21) (2024) 5053.

94. **Ushkov A., Belozerova N., Dyubo D., et al.,** Laser-synthesized amorphous $PdSe_{2-x}$ nanoparticles: A defect-rich platform for high-efficiency SERS, photocatalysis, and photothermal conversion, Adv. Mater. Interfaces. (7 Dec) (2026) e00902.

95. **Chou S. Y., Krauss P. R., Renstrom P. J.,** Nanoimprint lithography, J. Vac. Sci. Technol. B. 14 (6) (1996) 4129–4133.

96. **Guo L. J.,** Nanoimprint lithography: Methods and material requirements, Adv. Mater. 19 (4) (2007) 495–513.

97. **Cottat M., Lidgi-Guigui N., Tijunelyte I., et al.,** Soft UV nanoimprint lithography-designed highly sensitive substrates for SERS detection, Nanoscale Res. Lett. 9 (21 Nov) (2014) 623.

98. **Malekian B., Xiong K., Emilsson G., et al.,** Fabrication and characterization of plasmonic nanopores with cavities in the solid support, Sensors. 17 (6) (2017) 1444.

99. **Gonçalves M. R., Makaryan T., Enderle F., et al.,** Plasmonic nanostructures fabricated using nanosphere-lithography, soft-lithography and plasma etching, Beilstein J. Nanotechnol. 2 (2011) 448–458.

100. **Bandarenka H. V., Girel K. V., Zavatski S. A., et al.,** Progress in the development of SERS-active substrates based on metal-coated porous silicon, Materials. 11 (5) (2018) 852.

101. **Lai Y., Wang J., He T., et al.,** Improved surface enhanced Raman scattering for nanostructured silver on porous silicon for ultrasensitive determination of 2,4,6-Trinitrotoluene, Anal. Lett. 47 (5) (2014) 833–842.

102. **Hu Y., Zhou Y., Luo G., et al.,** Femtosecond laser-induced nanoparticle implantation into flexible substrate for sensitive and reusable microfluidics SERS detection, Int. J. Extrem. Manuf. 6 (4) (2024) 045005.

103. **Skvortsov A., Babich E., Lipovskii A., et al.,** Raman scattering study of amino acids adsorbed on a silver nanoisland film, Sensors. 22 (14) (2022) 5455.

104. **Fatkhutdinova L. I., Babich E., Boldyrev K., et al.,** Rapid and sensitive detection of nucleoprotein SARS-CoV-2 virus: SERS vs ELISA, Photonic. Nanostruct. 57 (Dec) (2023) 101172.

105. **Yakimchuk D. V., Kaniukov E. Yu., Lepeshov S., et al.,** Self-organized spatially separated silver 3D dendrites as efficient plasmonic nanostructures for surface-enhanced Raman spectroscopy applications, J. Appl. Phys. 126 (23) (2019) 233105.

106. **He L., Lin M., Li H., et al.,** Surface-enhanced Raman spectroscopy coupled with dendritic silver nanosubstrate for detection of restricted antibiotics, J. Raman Spectrosc. 41 (7) (2010) 739–744.

107. **Dies H., Raveendran J., Escobedo C., et al.,** In situ assembly of active surface-enhanced Raman scattering substrates via electric field-guided growth of dendritic nanoparticle structures, Nanoscale. 9 (23) (2017) 7847–7857.

108. **Babich E. S., Lipovskii A. A., Lubyankina E. A.,** Pesticides detection by SERS using dendritic structures grown in glass, St. Petersburg Polytechnic University Journal. Physics and Mathematics. 16 (1.1) (2023) 374–379.

109. **Antsiferova A. A., Kashkarov P. K., Koval'chuk M. V.,** Effect of different forms of silver on biological objects, Nanobiotechnol. Rep. 17 (2) (2022) 155–164.

110. **Babich E., Scherbak S., Kirilenko D., et al.,** Glasses with biocompatible Au/Ag NPs of governed composition, J. Phys. D: Appl. Phys. 57 (13) (2024) 135302.

111. **Broquin J.-E., Honkanen S.,** Integrated photonics on glass: A review of the ion-exchange technology achievements, Appl. Sci. 11 (10) (2021) 4472.

112. **Righini G. C., Licares J.,** Active and quantum integrated photonic elements by ion exchange in glass, Appl. Sci. 11 (11) (2021) 5222.

113. **Yinlei H., Minghua W., Xihua L., et al.,** Recent development of ion-exchanged glass waveguide technology, 2006 Asian Optical Fiber Commun. & Optoelectronic Exposition & Conf., 24 – 27 Oct., Shanghai, China, IEEE (2006) 1–10.

114. **Conti G. N., Peyghambarian N., Ferrari M., et al.,** Rare-earth-doped glasses and ion-exchanged integrated optical amplifiers and lasers, Phil. Mag. B. 82 (6) (2002) 721–734.

115. **Prieto-Blanco X., Montero-Orille C., Linares J., et al.,** Quantum projectors implemented with optical directional couplers in ion-exchanged glasses, J. Lightwave Technol. 40 (23) (2022) 7676–7684.

116. **Berneschi S., Righini G. C., Pelli S.,** Towards a glass new world: The role of ion-exchange in modern technology, Appl. Sci. 11 (10) (2021) 4610.

117. **Righini G. C., Ferrari M., Lukowiak A., et al.,** Flexible glass: Myth and photonic technology, Materials. 18 (9) (2025) 2010.

118. **Huang Y., Zhuang S., Peng L., et al.,** Efficiency improvement of up–conversion luminescence of Yb^{3+}/Tm^{3+} co-doped tellurite glass microsphere, J. Alloys Compnd. 748 (5 Jun) (2018) 93–99.

119. **Singh S. K., Giri N.K., Rai D.K., et al.,** Enhanced upconversion emission in Er^{3+}-doped tellurite glass containing silver nanoparticles, Solid State Sci. 12 (8) (2010) 1480–1483.

120. **Mai H. H., Kaydashev V. E., Tikhomirov V. K., et al.,** Nonlinear optical properties of Ag nanoclusters and nanoparticles dispersed in a glass host, J. Phys. Chem. C. 118 (29) (2014) 15995–16002.

121. **Alonso Calafell I., Cox J. D., Radonjić M., et al.,** Quantum computing with graphene plasmons, npj Quantum Inf. 5 (02 May) (2019) 37.

122. **Bozhevolnyi S. I., Mortensen N. A.,** Plasmonics for emerging quantum technologies, Nanophotonics. 6 (5) (2017) 1185–1188.

123. **Tame M. S., McEnery K. R., Özdemir Ş. K., et al.,** Quantum plasmonics, Nat. Phys. 9 (6) (2013) 329–344.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЖУРИХИНА Валентина Владимировна – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, ведущий научный сотрудник лаборатории оптики гетерогенных структур и оптических материалов Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

zhurihina_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-0685-9409

БАБИЧ Екатерина Сергеевна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории оптики гетерогенных структур и оптических материалов Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

babich.katherina@gmail.com

ORCID: 0000-0003-4970-2591

ТЕРПИЦКИЙ Алексей Николаевич – *инженер лаборатории оптики гетерогенных структур и оптических материалов Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3

terpiczkij@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1744-5976

НУРИТДИНОВ Иззатилло – *доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан, г. Ташкент, Республика Узбекистан.*
100214, Республика Узбекистан, г. Ташкент, поселок Улугбек
izzatilloh@yahoo.com
ORCID: 0000-0002-9749-8751

РАХМАТОВ Машраб Анвар оглы – *аспирант кафедры физики твердого тела Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан.*
140100, Республика Узбекистан, г. Самарканд, Университетский б-р, 15
mashrab-r@gmail.com

ЭШБЕКОВ Азамкул Анорбоевич – *доктор физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова, г. Самарканд, Республика Узбекистан.*
140100, Республика Узбекистан, г. Самарканд, Университетский б-р, 15
eshbekov-a@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8283-791X

THE AUTHORS

ZHURIKHINA Valentina V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
Alferov University, RAS
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zhurihina_vv@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0685-9409

BABICH Ekaterina S.
Alferov University, RAS
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
babich.katherina@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4970-2591

TERPITSKIY Alexey N.
Alferov University, RAS
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
terpiczkij@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1744-5976

NURITDINOV Izzatillo
Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan
Ulugbek settlement, Tashkent, 100214, Republic of Uzbekistan
izzatilloh@yahoo.com
ORCID: 0000-0002-9749-8751

RAKHMATOV Mashrab A. ogly
Sharof Rashidov Samarkand State University
15 University Blvd., Samarkand, 140100, Republic of Uzbekistan
mashrab-r@gmail.com

ESHBEKOV A'zamkul A.
Sharof Rashidov Samarkand State University
15 University Blvd, Samarkand, 140100, Republic of Uzbekistan
eshbekov-a@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8283-791X

Статья поступила в редакцию 21.11.2025. Одобрена после рецензирования 03.03.2026. Принята 03.03.2026.
Received 21.11.2025. Approved after reviewing 03.03.2026. Accepted 03.03.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Original article
UDC 54.057
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19211

STRUCTURAL PROPERTIES OF SOME NANOCRYSTALLINE SPINEL CHROMITES PREPARED BY SOLID-STATE REACTION METHOD

R. Yousef [1], A. Yousef [2], A. Nassif [3] ✉, Sh. A. Kadhim [4]

[1] Homs University, Homs, Syrian Arab Republic;
[2] Al-Hawash Private University, Homs, Syrian Arab Republic;
[3] Al-Wataniya Private University, Hama, Syrian Arab Republic;
[4] University of Kufa, An Najaf, Republic of Iraq
✉ nassifalaa85@gmail.com

Abstract. Chromium nanocomposites MCr_2O_4 have been synthesized by a solid-state reaction. The synthesized samples were characterized using X-ray powder diffraction technology (XRD). The temperature of synthesis was 1000°C for $NiCr_2O_4$ and 900°C for Zn Cr_2O_4. Miller indices (*hkl*) were calculated for the production, and the compounds were shown to have cubic structure FCC. The lattice parameters were as follows: $a = 8.26$ Å, $Z = 8$, $V = 564.26$Å^3 and $a = 8.2650$ Å, $Z = 8$, $V = 564.58$ Å^3 for $NiCr_2O_4$ and $ZnCr_2O_4$ respectively. The space group of symmetry is F*d*3*m* for the both. The grain sizes were calculated by the Debye − Scherrer formula for the two compounds and were 31.92 nm and 32.78 nm, respectively. The $ZnCr_2O_4$ and $NiCr_2O_4$ nanoparticles' morphology was examined using scanning electron microscopy (SEM). The SEM images showed the agglomeration of the nanoparticles, which were formed of square-shaped nanocrystallites.

Keywords: MCr_2O_4, spinel, solid-state reaction method, grain size

For citation: Nassif A., Yousef R., Yousef A., Kadhim Sh. A., Structural properties of some nanocrystalline spinel chromites prepared by solid-state reaction method, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 136−146. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19211

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Научная статья
УДК 54.057
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19211

СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ДВУХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ХРОМШПИНЕЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ТВЕРДОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ

Р. Юсеф [1], А. Юсеф [2], А. Нассиф [3] ✉, Ш. А. Кадхим [4]

[1] Университет Хомса, г. Хомс, Сирийская Арабская Республика;
[2] Частный университет Аль-Хаваш, г. Хомс, Сирийская Арабская Республика;
[3] Частный университет Аль-Ватания, г. Хама, Сирийская Арабская Республика;
[4] Университет Куфы, г. Эн-Наджаф, Республика Ирак
✉ nassifalaa85@gmail.com

Аннотация. В работе были синтезированы нанокомпозиты хрома MCr_2O_4 методом твердофазных реакций. Значения температуры синтеза составили 1000°C для $NiCr_2O_4$ и 900°C для Zn Cr_2O_4. Были рассчитаны индексы Миллера (*hkl*) и показано, что соединения обладают гранецентрированной кубической структурой. Параметры решетки составили: $a = 8{,}26$ Å, $Z = 8$, $V = 564{,}26$ Å ($NiCr_2O_4$) и $a = 8{,}2650$ Å, $Z = 8$, $V = 564{,}58$ Å^3 ($ZnCr_2O_4$).

© Yousef R., Yousef A., Nassif A., Kadhim Sh. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Для обоих хромитов пространственная группа симметрии – F*d*3*m*. Размеры зерен, рассчитанные по формуле Дебая – Шеррера, составили 31,92 нм ($NiCr_2O_4$) и 32,78 нм ($ZnCr_2O_4$). Морфология наночастиц двух синтезированных хромитов была изучена с помощью сканирующей электронной микроскопии. На полученных изображениях была видна агломерация наночастиц, состоящая из квадратных нанокристаллитов.

Ключевые слова: MCr_2O_4, шпинель, метод твердофазных реакций, размер зерна

Для цитирования: Нассиф А., Юсеф Р., Юсеф А., Кадхим Ш. А. Структурные свойства двух нанокристаллических хромшпинелей, полученных методом твердофазной реакции // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 136–146. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19211

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Introduction

Mixed oxides of chromium with transition metals MCr_2O_4 where M = Ni, Zn, having a spinel structure [1], have attracted a lot of attention due to their great importance in many technical fields and their desirable industrial properties such as their high melting point, high resistance to acids and alkalis, high activity, and low production cost [2]. In recent years this fact has prompted researchers to improve and develop methods for synthesizing these materials. It is possible that the most common method for obtaining these oxides is the solid-state reaction [3], which depends on mechanical mixing of solid oxides and annealing them, in addition to many other chemical techniques that allow obtaining nanometer materials with a high degree of purity and greater homogeneity. Among them, such as the sol-gel method [2], the hydrothermal synthesis method [4], the co-precipitation method [5], and the combustion reaction method [6] are widely used.

In this research, the solid-state reaction method was adopted to synthesize a chromite – transition metal system, as the transition metal chromite has distinctive magnetic properties and is used as a catalyst in many reactions and is also used in the manufacture of gas sensors [6 – 9]. The solid-state reaction method is one of the most important ones for obtaining these compounds because of its ease of preparation, as it does not require special skills. Since some materials are difficult to dissolve in water, this method provides a solution to this problem in terms of preparing the desired compounds without the need to dissolve them in any solution. On the other hand, this advantage constitutes a high economic feasibility for the solid-state method, as the only material used in most of its reactions is acetone, which is used to facilitate the mixing of the solid compounds during the sample preparation process and in relatively small quantities.

This method is characterized by giving a high-purity mixture of what it requires of high-purity oxides without any impurities from different materials for synthesis when mixing compared to other synthesis methods. Stoichiometric ratios of the raw materials are taken in their pure form to ensure the completion of the reaction and obtain a single phase of the new pure material without the presence of other phases of impurities or raw materials [10, 11].

Experimental part

The samples of nickel chromite and zinc chromite were prepared by the solid-state reaction (SSR) method as powders by mixing appropriate amounts of nickel, zinc and chromium oxides $NiO : Cr_2O_3 = 1 : 1$ and $ZnO : Cr_2O_3 = 1 : 1$ in the presence of air. The primary nano oxides were ZnO (99% VWR International Ltd.), NiO (99% Chem-Lab.), and Cr_2O_3 (99.1% Genral Purpose Reagent). The chemical reactions between these oxides were as follows:

$$NiO + Cr_2O_3 \rightarrow NiCr_2O_4, \quad (1)$$

$$ZnO + Cr_2O_3 \rightarrow ZnCr_2O_4. \quad (2)$$

The previous materials were ground and mixed using an agate mortar to ensure obtaining a homogeneous mixture after adding an amount of acetone to improve the homogeneous mixing

© Юсеф Р., Юсеф А., Нассиф А., Кадхим Ш. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Table 1

The calculated masses of raw materials (oxides) used in the preparation of 10 g of each chromite

Oxide	*M*, g/mol	*m*, g
NiO : Cr_2O_3 = 1 : 1 (see Eq. (1))		
NiO	74.71	3.2951
Cr_2O_3	151.99	6.7048
ZnO : Cr_2O_3 = 1 : 1 (see Eq. (2))		
ZnO	81.37	3.487
Cr_2O_3	151.99	6.513
Cromites		
$NiCr_2O_4$	226.645	9.9999
$ZnCr_2O_4$	233.332	10.0000

Notations: *M*, *m* are respectively the molar mass and mass.

process for approximately 15 min until the acetone dried. This process was repeated three times in succession for each sample. After that, the resulting mixture was dried by heating it to a temperature of 100°C for a sufficient period of time to ensure the elimination of moisture. The raw materials' masses were calculated according to Eqs. (1) and (2) and are presented in Table 1. The required masses were estimated to get a 10 g amount of the resulting compound.

Subsequently, the powder was put inside a porcelain crucible and heated at various temperatures within the range from 600 to 1100°C for nickel chromite and from 600 to 900°C for zinc chromite. Six hours passed throughout the annealing process. After the preparation of zinc- and nickel-chromite nanoparticles the powder was compressed using a hydraulic press to create pellets with a radius of 0.5 cm and a thickness of 0.2 cm under a pressure of 10 t/m^2. The pressing process increased the interaction between the particles by bringing them closer to one another.

Results and discussion

X-ray diffraction (XRD) analysis. The prepared samples were characterised by the X-ray diffraction (XRD) technique (Philips-PW-1840, $\lambda_{CoK\alpha}$ = 1.7889 Å). By XRD technique the optimum temperature for synthesis was determined, which was the temperature that indicated the appearance of a single phase, i.e. obtaining the desired compound. In this investigation, it was 1000°C for the nickel chromite compound and 900°C for the zinc chromite compound, at which a single compound was obtained and all diffraction peaks indicated the raw materials NiO, ZnO, Cr_2O_3 being absent.

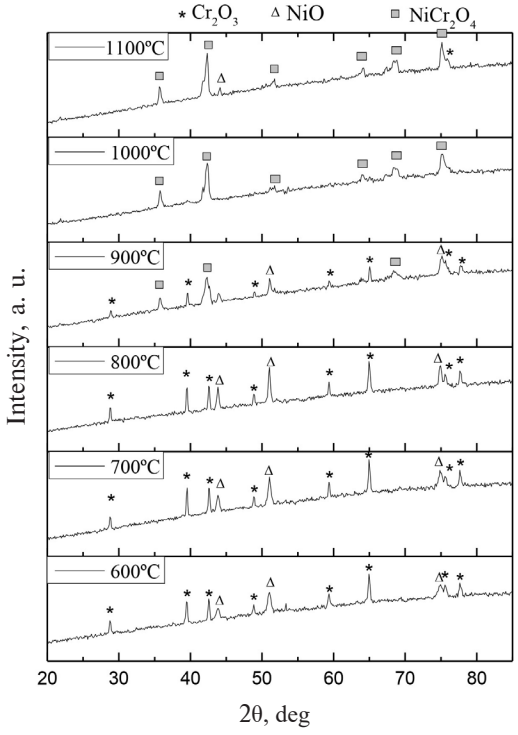


Fig. 1. XRD patterns of the prepared nickel chromite annealed at different temperatures for six hours

The scanning process was carried out using angles within the range 2θ = (20 − 85)° with an angle step of 0.02° and a time step of 2 s. The same angular range was used for all scanning processes. For the measurement procedure, the powder samples were placed on special substrates to eliminate background radiation, while the pellet samples were placed directly on the sample holder, aligned correctly with the substrate used for the powder. After collecting the diffraction data (peak positions and their intensities), the intensity values were plotted against the Bragg diffraction angle 2θ. The crystal lattice constants were then calculated from the positions of the characteristic peaks of the compound.

Nickel chromite $NiCr_2O_4$. Fig. 1 shows the XRD patterns of $NiCr_2O_4$ samples which were annealed in the temperature range from 600°C to 1100°C for 6 hrs. This data exhibited that the initial annealing process did not lead to any reaction between the raw materials, as the resulting peaks indicated a mixture of raw materials, and there was no peak indicating the desired compound.

Therefore, 600ºC could not be considered an optimum temperature for the synthesis of nickel chromite compound, and the resulting mixture was the one of thermally uncombined primary oxides only. For this reason, we gradually raised the annealing temperature while monitoring the synthesis through the resulting pattern, and we found that the primary oxides did not react with each other at all, and the peaks' locations or their intensities did not change until 900ºC. At this temperature, we noticed a clear decrease in the intensities of the peaks that were due to the raw materials, but they did not disappear, in addition to the appearance of three new peaks indicating the nickel chromite compound at the angles 2θ = 35.6º, 42.2º, 68.3º which prompted us to raise the annealing temperature to 1000ºC to ensure that the synthesis was completed perfectly at this temperature or higher temperatures were required to obtain better results. When the resulting compound was annealed at 1000ºC, we noticed that the peaks due to the primary oxides disappeared completely and that all intensive diffraction peaks were attributed to the $NiCr_2O_4$ compound. Therefore, it could be considered that a pure phase of the $NiCr_2O_4$ compound was obtained that did not contain any intermediate phases or any phases of the starting materials from which the synthesis process was finished at 1000ºC. When the annealing temperature was raised to 1100ºC, we noticed the appearance of some peaks due to the starting materials again. Consequently, it became clear to us that the $NiCr_2O_4$ compound began to decompose at 1100ºC and that 1000ºC was the optimal temperature for the synthesis of the $NiCr_2O_4$ compound. The result we reached is consistent with the published practical work [12].

All the diffraction peaks were indexed and compared with the standard JCPDS, ICSD data of the starting NiO, Cr_2O_3 oxides and $NiCr_2O_4$ compound of the numbers 04-0835, 38-1479 and 23-1271 respectively. Fig. 2 shows the XRD pattern of $NiCr_2O_4$, which was annealed at 1000ºC for 6 hrs because that was the optimal temperature for $NiCr_2O_4$ compound synthesis.

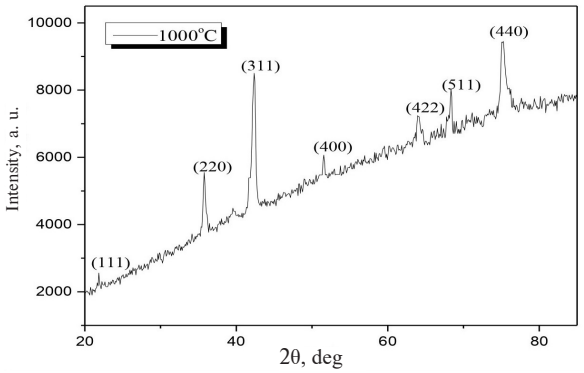


Fig. 2. XRD patterns of the prepared nickel chromite $NiCr_2O_4$ annealed at 1000°C for six hours

Miller indices of diffraction peaks were determined for the $NiCr_2O_4$ compound. These peaks indicate that the $NiCr_2O_4$ has a cubic structure and belongs to the F*d*3*m* space group. From X-ray diffraction measurements of $NiCr_2O_4$, the distance between crystal lattices *d* were calculated using the Bragg law [12]:

$$n\lambda = 2d\cdot\sin\theta,$$

where λ = 1.7889 Å is the X-ray wavelength and θ is the diffraction angle.

Then the values of the lattice constant were determined using the relation of the distance between parallel crystal plans in the case of the cubic crystal structure that is given by the formula [14]:

$$(d_{hkl})^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2), \qquad (3)$$

where *a* is the lattice constant.

The values of the distance between parallel crystal plans and the lattice constant of $NiCr_2O_4$ for each diffracting peak are listed in Table 2.

An analysis of the data in Table 2 allows us to conclude that the peaks belonging to the Miller indexes (400), (311), (220) are the most intensive, and we find that they meet the conditions:

$$h + k = 2k,\ k + 1 = 2n,\ h + 1 = 2n.$$

Table 2

The results of X-ray diffraction (XRD) analysis for $NiCr_2O_4$ compound annealed at 1000ºC

2θ, dg	I/I_0, %	d_{hkl}, Å	*a*, Å	(*hkl*)
35.668	55	2.919	8.256	(220)
42.210	100	2.483	8.234	(311)
51.380	22	2.062	8.249	(400)
63.901	22	1.689	8.276	(422)
68.363	35	1.591	8.268	(511)
75.122	50	1.467	8.296	(440)

Notations: I/I_0 is the normalized intensity of diffraction peaks, d_{hkl} is the interplanar distance, *a* is the lattice constant, (*hkl*) are the Miller indices

That is, the basic cell is face-centered and therefore the compound crystallizes in Face-Centered Cubic (FCC) type. The average lattice constant of $NiCr_2O_4$ is presented in Table 3. The unit cell volume was also calculated by the following formula:

$$V = a^3 \quad (4)$$

and given in Table 3.

Table 3

Additional structural data for $NiCr_2O_4$ compound

a, Å	V, Å^3	ρ, g/cm^3		Z
		Theoretical	Experimental	
8.2634	564.26	5.3006	5.331	8

Notations: a is the average value of the lattice constant, V is the unit cell volume, ρ is the compound density, Z is the number of formulae in the unit cell.

The experimental density ρ_{exp} of $NiCr_2O_4$ was measured by the pycnometer method (distilled water was used for immersion; its density was 0.99705 g/cm^3 at 25°C). To ensure reproducibility of the results, we repeated each measurement at least 3 times for each sample. The average value is given in Table 3. The theoretical X-ray density for prepared nickel chromite was calculated as follows [11]:

$$\rho_{th} = ZM/N_A V, \quad (5)$$

where Z is the number of formula units in the unit cell ($Z = 8$ for the spinel lattice), M is the molecular mass of the nickel chromite, N_A is the Avogadro number, V is the unit cell volume.

Regarding $Z = 8$, we can write the general formula for the content of the basic cell as follows: $Ni_8Cr_{16}O_{32}$. Thus, one cell contains eight nickel atoms, sixteen chromium ones, and 32 oxygen ones. Substituting the value of Z as an integer in Eq. 5 gives us the value of the theoretical density (see Table 3). The calculated result is very close to the experimental value, which proves the accuracy of our theoretical calculations and the accuracy of our choice of the basic cell unit. The crystallite size of the $NiCr_2O_4$ compound was calculated using Scherrer's formula [14, 15]:

$$L = 0.9\lambda/(\beta \cdot \cos\theta), \quad (6)$$

where β, rad, is the full width at half-maximum (FWHM) of diffraction peaks; λ is the X-ray wavelength (λ = 1.78897); θ is the Bragg reflection angle.

The estimated values of crystallite size for each diffracting peak of $NiCr_2O_4$ compound were calculated using X'pert HighScore software and listed in Table 4. The average crystallite size was 31.92 nm, so the prepared compound had a nanostructure.

Table 4

The broadening of diffraction peaks and average grain size of $NiCr_2O_4$ compound annealed at 1000°C

Peak number	Peak position	β_{obs}	β_{std}	Grain size L, nm	
	degrees			Peak	Averaged
1	35.668	0.295	0.001	33.0	31.92
2	42.210	0.394		25.2	
3	51.380	0.295		34.8	
4	63.900			37.0	
5	68.363	0.296		37.8	
6	75.122	0.492		23.7	

Zinc chromite $ZnCr_2O_4$. Fig. 3 shows the X-ray diffraction patterns of the annealed nickel chromite compound $ZnCr_2O4$ within the temperature range from 600 to 900°C, where it appears that annealing at temperatures of 600°C to 800°C led to the formation of the zinc chromite compound, but with the presence of other peaks that refer to the raw materials, indicating that the thermal reaction is incomplete. It was found from Fig. 3 that all intensive diffraction peaks were attributed to the $ZnCr_2O_4$ compound for the sample annealed at 900°C, where the reaction between primary materials was completed. This indicates that the optimum temperature for $ZnCr_2O_4$ compound synthesis is 900°C which is lower than the temperature of nickel chromite formation.

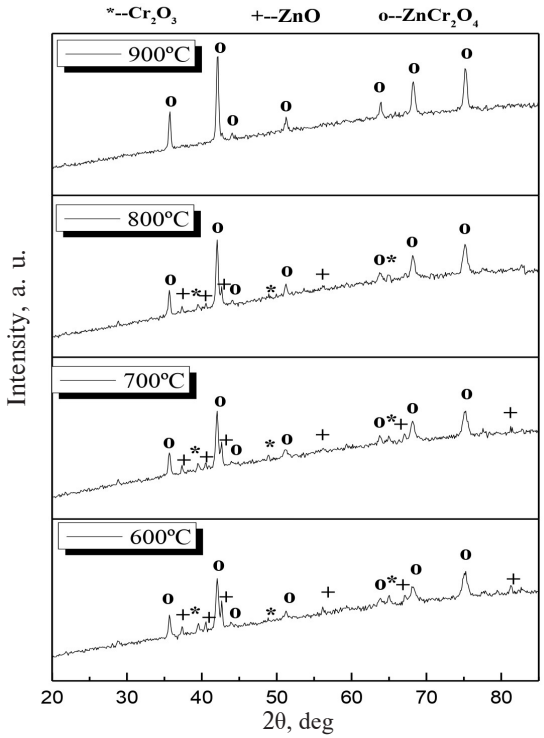


Fig. 3. XRD patterns of the prepared zinc chromite $ZnCr_2O_4$ annealed at different temperatures for six hours

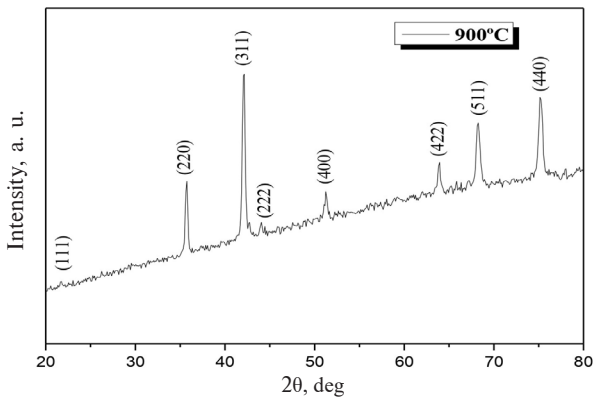


Fig. 4. XRD patterns of the prepared zinc chromite $ZnCr_2O_4$ annealed at 900°C for six hours

All the diffraction peaks were indexed and compared with the standard JCPDS, ICSD data of the starting ZnO and Cr_2O_3 oxides and $ZnCr_2O_4$ compound of the numbers 36-1451, 38-1479 and 24-495 respectively. Fig. 4 shows the XRD pattern of $ZnCr_2O_4$, which was annealed at 900 °C for 6 hrs because that is the optimal temperature for the $ZnCr_2O_4$ compound synthesis.

Miller indices of diffraction peaks were determined for $ZnCr_2O_4$ cromite. These peaks indicated that $ZnCr_2O_4$ had a cubic structure and belonged to the space group F*d3m*. From X-ray diffraction measurements of $ZnCr_2O_4$, the distance between crystal lattices and the values of the lattice constant were determined using the Bragg law and Eq. 3 for cubic crystal structure. The calculated result is listed in Table 5. The results show that the compound belongs to the cubic symmetry pattern, and all the Miller index values for all peaks agree with this crystallization pattern, which is consistent with Eq. 3.

Table 5

The results of X-ray diffraction (XRD) analysis for $ZnCr_2O_4$ compound annealed at 900°C

2θ, dg	I/I_0, %	d_{hkl}, Å	*a*, Å	(*hkl*)
21.704	6	4.7484	8.2245	(111)
35.675	45	2.9186	8.2549	(220)
42.066	100	2.4909	8.2614	(311)
44.031	7	2.3849	8.2615	(222)
51.246	16	2.0674	8.2692	(400)
63.8476	13	1.6906	8.2824	(422)
68.2505	35	1.5936	8.2804	(511)
75.2356	40	1.4646	8.2852	(440)

All notations are identical to those used in Table 2

The unit cell volume of $ZnCr_2O_4$ was calculated by Eq. 4. This value and other structural calculations such as the average lattice constant, the experimental density, the theoretical X-ray

Table 6

Additional structural data for $ZnCr_2O_4$ compound

a, Å	*V*, Å^3	ρ, g/cm^3		*Z*
		Theoretical	Experimental	
8.2650	564.58	5.49	5.45	8

All notations are identical to those used in Table 3

density, and the number of formula units in the single crystal cell are listed in Table 6. Regarding $Z = 8$, we can write the general formula for the content of the basic cell as follows: $Zn_8Cr_{16}O_{32}$. The crystallite size of the $ZnCr_2O_4$ compound was calculated using Eq. 6. The estimated values of crystallite size for each diffracting peak of $ZnCr_2O_4$ compound were calculated using X'pert HighScore software (see Table 7). The average crystallite size was 32.78 nm. Hence, the prepared compound is characterized by a nanostructure.

Table 7

The broadening of diffraction peaks and average grain size of $ZnCr_2O_4$ compound annealed at 900°C

Peak number	Peak position	β_{obs}	β_{std}	Grain size *L*, nm	
	degrees			Peak	Averaged
1	21.704	0.295	0.001	31.9	32.78
2	35.675	0.295		33.0	
3	42.066	0.295		33.6	
4	44.031			33.8	
5	51.246	0.295		34.8	
6	63.848	0.295		37.0	
7	68.251	0.394		28.4	
8	75.236	0.394		29.7	

Table 8

A comparison of the results of structural calculations for $NiCr_2O_4$ and $ZnCr_2O_4$

Compound	*a*, Å	*V*, Å^3	ρ, g/cm^3		*Z*	*L*
			Experimental	Calculated		
$NiCr_2O_4$	8.2634	564.26	5.331	5.30	8	31.92
$ZnCr_2O_4$	8.2650	564.58	5.450		8	32.78

Table 9

A comparison of our results with those obtained from literature

Compound	*a*, Å		*V*, Å^3	
	Our work	Other authors	Our work	Other authors
$NiCr_2O_4$	8.263	8.32 [17, 16]	564.26	575.96 [17, 16]
		8.27 [19, 18]		566.66 [19, 18]
$ZnCr_2O_4$	8.265	8.280 [17, 16]	564.58	567.66 [17, 16]
		8.325 [19, 18]		576.96[19, 18]

The results obtained from the previous calculations for both nickel chromite and zinc chromite compounds are arranged in Table 8. Based on those mentioned earlier, we conclude that the solid synthesis method, a straightforward and reasonably priced preparation technique, can create chromium-based spinels at temperatures between 800 and 1000°C. Furthermore, the nanoscale particle size produced by this preparation technique makes these compounds suitable for use in gas sensitivity applications, electrodes, and other fields.

Table 9 shows a comparison of the results we obtained with some other scientific works.

Scanning electron microscopy (SEM). The morphology of the $ZnCr_2O_4$ and $NiCr_2O_4$ nanoparticles was investigated using scanning electron microscopy (SEM). Fig. 5 displays the SEM images of $ZnCr_2O_4$ and $NiCr_2O_4$ nanoparticles synthesized by solid-state reactions. They show the agglomeration of the nanoparticles, which are formed up of square-shaped nanofine crystallites.

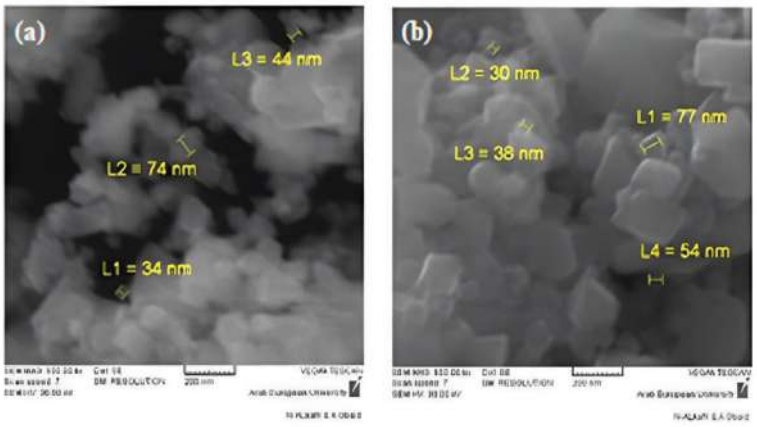


Fig. 5. SEM images of $NiCr_2O_4$ (*a*) and $ZnCr_2O_4$ (*b*) nanoparticles prepared by the solid-state method at 1000°C (*a*) and 900°C (*b*) for 6 hours

Summary

This work has shown that the straightforward and economical solid-state reaction approach can be used to synthesize nickel chromite and zinc chromite nanoparticles successfully, with the optimal synthesis temperatures of 1000°C and 900°C, respectively. Both compounds had nanoscale grain sizes of about 32 nm and crystallized in a face-centered cubic (F*d3m*) structure. The solid-state reaction approach is an effective method to create chromium-based nanocomposites since it can yield highly pure, nanostructured spinel phases at comparatively low synthesis temperatures. The produced compounds are excellent prospects for technical uses including gas sensors, electrodes, and other cutting-edge functional materials because of these structural features.

Acknowledgment

The authors would like to thank the technical team in XRD Lab at Homs University for financial support.

REFERENCES

1. **Fairooz N. Y., Imran A. R.,** Wet commixing synthesis, physical properties and photocatalytical activity of nickel oxide chromite spinel, J. Appl. Chem. 2 (Jan) (2013) 129–136.

2. **Habibi M., Fakhri F.,** Fabrication and characterization of $CuCr_2O_4$ nanocomposite by XRD, FESEM, FTIR and DRS, Synth. React. Inorg. Met.-Org. Nano-Met. Chem. 46 (6) (2016) 847–851.

3. **Ishibashi H., Yasumi T.,** Structural transition of spinel compound $NiCr_2O_4$ at ferrimagnetic transition temperature, J. Magn. Magn. Mater. 310 (2, P. 2) (2007) e610–e612.

4. **Durrani S. K., Hussain S. Z., Saeed K., et al.,** Hydrothermal synthesis and characterization of nanosized transition metal chromite spinels, Turk. J. Chem. 36 (1) (2012) 111–120.

5. **Safaei-Ghomi J., Akbarzadeh Z., Khojastehbakht-Koopaei B.,** C–N cross-coupling reaction catalysed by reusable $CuCr_2O_4$ nanoparticles under ligand-free conditions: a highly efficient synthesis of triarylamines, RSC Adv. 5 (37) (2015) 28879–28884.

6. **Abu Bakar S., Ahad N., Bin Saion E.,** Thermal treatment synthesis and characterization of nanosized nickel chromite spinels, Proc. 2012 Int. Conf. of Solid State Sci & Technol. (ICSSST-2012), Dec. 18 − 20, 2012. Holiday Inn, Malacca, Malaysia; JEOL. Serving Advanced Technology (2013) 47−54.

7. **Barros B., Costa A. C. F. M., Kiminami R. H. G. A., da Gama L.,** Preparation and characterization of spinel MCr_2O_4 (M = Zn, Co, Cu and Ni) by combustion reaction, J. Metastab. Nanocryst. Mater. 20−21 (07 Jul) (2004) 325−332.

8. **Tomiyasu K., Kagomiya I.,** Magnetic structure of $NiCr_2O_4$ studied by neutron scattering and magnetization measurements, J. Phys. Soc. Jpn. 73 (9) (2004) 2539−2542.

9. **Ptak M., Maczka M., Gągor A., et al.**, Temperature-dependent XRD, IR, magnetic, SEM and TEM studies of Jahn − Teller distorted $NiCr_2O_4$ powders, J. Solid State Chem. 201 (May) (2013) 270−279.

10. **West A. R.,** Solid state chemistry and its applications. Second edition, student edition, John Wiley & Sons, Ltd; Chichester, New York, 2022.

11. **Gao H., Guo J., Li Y., et al.,** Highly selective and sensitive xylene gas sensor fabricated from $NiO/NiCr_2O_4$ p-p nanoparticles, Sens. Actuator. B. Chem. 284 (1 Apr) (2019) 305−315.

12. **Muhammed S. A., Abbas N. K.,** Synthesis and investigation of structural and optical properties of CdO:Ag nanoparticles of various concentrations, Baghdad Sci. J. 20 (5) (2023) 32.

13. **Noshahi N. A., Nadeem K., Kamran M.,** Role of Mn doping on magnetic properties of multiferroic $NiCr_2O_4$ nanoparticles, Ceram. Int. 47 (8) (2021) 10643−10649.

14. **Bakar S. A., Soltani N., Yunus W. M. M., et al.,** Structural and paramagnetic behavior of spinel $NiCr_2O_4$ nanoparticles synthesized by thermal treatment method: Effect of calcination temperature, Solid State Commun. 192 (Aug) (2014) 15−19.

15. **Enhessari M., Salehabadi A., Khanahmadzadeh S., et al.,** Modified sol-gel processing of $NiCr_2O_4$ nanoparticles; structural analysis and optical band gap, High Temp. Mater. Process. 36 (22 Jun) (2017) 121−125.

16. **Joshi P., Saxena P., Choudhary P., et al.,** Structural and vibrational response in Al modified $NiCr_2O_4$, AIP Conf. Proc. 2100 (Apr) (2019) 020174.

17. **Yazdanbakhsh M., Khosravi I., Goharshadi E. K., Youssefi A.,** Fabrication of nanospinel $ZnCr_2O_4$ using sol-gel method and its application on removal of azo dye from aqueous solution, J. Hazard. Mater. 184 (1−3) (2010) 684−689.

18. **Kumar K. V., Bhavani S. D.,** Influence of calcination temperature on physical and optical properties of nickel chromite nanoparticles, Sci. Sinter. 54 (4) (2022) 457−468.

19. **Ghosh D., Dutta U., Haque A., et al.,** Ultra-high sensitivity of luminescent $ZnCr_2O_4$ nanoparticles toward nitroaromatic explosives sensing, Dalton Trans. 47 (14) (2018) 5011−5018.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Fairooz N. Y., Imran A. R.** Wet commixing synthesis, physical properties and photocatalytical activity of nickel oxide chromite spinel // Journal of Applied Chemistry. 2013. Vol. 2. January. Pp. 129−136.

2. **Habibi M., Fakhri F.** Fabrication and characterization of $CuCr_2O_4$ nanocomposite by XRD, FESEM, FTIR and DRS // Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry. 2016. Vol. 46. No. 6. Pp. 847−851.

3. **Ishibashi H., Yasumi T.** Structural transition of spinel compound $NiCr_2O_4$ at ferrimagnetic transition temperature // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2007. Vol. 310. No. 2. Part 2. Pp. e610−e612.

4. **Durrani S. K., Hussain S. Z., Saeed K., Khan Y., Arif M., Akhmed N.** Hydrothermal synthesis and characterization of nanosized transition metal chromite spinels // Turkish Journal of Chemistry. 2012. Vol. 36. No. 1. Pp. 111−120.

5. **Safaei-Ghomi J., Akbarzadeh Z., Khojastehbakht-Koopaei B.** C−N cross-coupling reaction catalysed by reusable $CuCr_2O_4$ nanoparticles under ligand-free conditions: A highly efficient synthesis of triarylamines // RSC Advances. 2015. Vol. 5. No. 37. Pp. 28879−28884.

6. **Abu Bakar S., Ahad N., Bin Saion E.** Thermal treatment synthesis and characterization of nanosized nickel chromite spinels // Proceedings of 2012 International Conference of Solid State Sciences and Technology (ICSSST-2012). December 18 – 20, 2012. Holiday Inn, Malacca, Malaysia. JEOL. Serving Advanced Technology. 2013. Pp. 47–54.

7. **Barros B., Costa A. C. F. M., Kiminami R. H. G. A., da Gama L.** Preparation and characterization of spinel MCr_2O_4 (M = Zn, Co, Cu and Ni) by combustion reaction // Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials. 2004. Vol. 20–21. 07 July. Pp. 325–332.

8. **Tomiyasu K., Kagomiya I.** Magnetic structure of $NiCr_2O_4$ studied by neutron scattering and magnetization measurements // Journal of the Physical Society of Japan. 2004. Vol. 73. No. 9. 2539–2542.

9. **Ptak M., Maczka M., Gągor A., Pikul A., Macalik L., Hanuza J.** Temperature-dependent XRD, IR, magnetic, SEM and TEM studies of Jahn – Teller distorted $NiCr_2O_4$ powders // Journal of Solid State Chemistry. 2013. Vol. 201. May. Pp. 270–279.

10. **Вест А.** Химия твердого тела. Теория и приложения. В 2-х ч. Пер. с англ. М.: Мир, 1988. Ч. 1 – 558 с. Ч. 2 – 334 с.

11. **Gao H., Guo J., Li Y., et al.** Highly selective and sensitive xylene gas sensor fabricated from $NiO/NiCr_2O_4$ p-p nanoparticles // Sensors and Actuators B: Chemical. 2019. Vol. 284. 1 April. Pp. 305–315.

12. **Muhammed S. A., Abbas N. K.** Synthesis and investigation of structural and optical properties of CdO:Ag nanoparticles of various concentrations // Baghdad Science Journal. 2023. Vol. 20. No. 5. P. 32.

13. **Noshahi N. A., Nadeem K., Kamran M.** Role of Mn doping on magnetic properties of multiferroic $NiCr_2O_4$ nanoparticles // Ceramics International. 2021. Vol. 47. No. 8. Pp. 10643–10649.

14. **Bakar S. A., Soltani N., Yunus W. M. M., Saion E., Bahrami A.** Structural and paramagnetic behavior of spinel $NiCr_2O_4$ nanoparticles synthesized by thermal treatment method: Effect of calcination temperature // Solid State Communications. 2014. Vol. 192. August. Pp. 15–19.

15. **Enhessari M., Salehabadi A., Khanahmadzadeh S., Arkat K., Nouri J.** Modified sol-gel processing of $NiCr_2O_4$ nanoparticles; structural analysis and optical band gap // High Temperature Materials and Processes. 2017. Vol. 36. 22 June. Pp. 121–125.

16. **Joshi P., Saxena P., Choudhary P., Varshney M. D., Mishra A.** Structural and vibrational response in Al modified $NiCr_2O_4$ // AIP Conference Proceedings. 2019. Vol. 2100. No. 1. April. P. 020174.

17. **Yazdanbakhsh M., Khosravi I., Goharshadi E. K., Youssefi A.** Fabrication of nanospinel $ZnCr_2O_4$ using sol-gel method and its application on removal of azo dye from aqueous solution // Journal of Hazardous Materials. 2010. Vol. 184. No. 1–3. Pp. 684–689.

18. **Kumar K. V., Bhavani S. D.** Influence of calcination temperature on physical and optical properties of nickel chromite nanoparticles // Science of Sintering. 2022. Vol. 54. No. 4. Pp. 457–468.

19. **Ghosh D., Dutta U., Haque A., Mordvinova N. E., Lebedev O. I., Pal K., Gayen A., Seikh M. M., Mahata P.** Ultra-high sensitivity of luminescent $ZnCr_2O_4$ nanoparticles toward nitroaromatic explosives sensing // Dalton Transactions. 2018. Vol. 47. No. 14. Pp. 5011–5018.

THE AUTHORS

YOUSEF Rasha
Homs University
PP75+5VC, Damascus – Aleppo Highway, Homs, Syrian Arab Republic
ryousef@homs-univ.edu.sy

YOUSEF Areej
Al-Hawash Private University
Q8HJ+RMH, Al-Mouzeina, Homs, Syrian Arab Republic
areejyousef@hpu.edu.sy

NASSIF Alaa
Al-Wataniya Private University
XQ92+PMC, Hama, Syrian Arab Republic
nassifalaa85@gmail.com
ORCID: 0000-0001-6190-4642

KADHIM Shaymaa Awad
University of Kufa
P.O. Box 21, Kufa, Najaf Governorate, 540011, Republic of Iraq
shaymaa.alshebly@uokufa.edu.iq
ORCID: 0000-0002-3991-5318

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЮСЕФ Раша – *PhD в области физики конденсированного состояния, преподаватель Университета Хомса, г. Хомс, Сирийская Арабская Республика.*
PP75+5VC, Syrian Arab Republic, Homs, Damascus – Aleppo Highway, Homs University
ryousef@homs-univ.edu.sy

ЮСЕФ Аридж – *PhD, преподаватель Частного университета Аль-Хаваш, г. Хомс, Сирийская Арабская Республика.*
Q8HJ+RMH, Syrian Arab Republic, Homs, Al-Mouzeina, Al-Hawash University
areejyousef@hpu.edu.sy

НАССИФ Алаа – *доктор военных наук, профессор инженерного факультета Частного университета Аль-Ватания, г. Хама, Сирийская Арабская Республика.*
XQ92+PMC, Syrian Arab Republic, Hama, Al-Wataniya Private University
nassifalaa85@gmail.com
ORCID: 0000-0001-6190-4642

КАДХИМ Шаймаа Авад – *PhD, профессор кафедры физики Университета Куфы, г. Эн-Наджаф, Республика Ирак.*
P.O. Box 21, Republic of Iraq, Kufa, Najaf Governorate, 540011, Kufa University
shaymaa.alshebly@uokufa.edu.iq
ORCID: 0000-0002-3991-5318

Received 30.09.2025. Approved after reviewing 08.12.2025. Accepted 08.12.2025.
Статья поступила в редакцию 30.09.2025. Одобрена после рецензирования 08.12.2025. Принята 08.12.2025.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Биофизика и медицинская физика

Научная статья
УДК 577.24
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19212

РАЗЛИЧИЯ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИИ РЕКОМБИНАЗ RAD51 И UvsX С ДНК, ВЫЯВЛЕННЫЕ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА УРОВНЕ ОДИНОЧНЫХ МОЛЕКУЛ

И. Д. Гончаров, А. И. Садова, И. М. Нужин, П. А. Теницкая, И. В. Курдюмова, А. А. Горьковская, М. А. Ходорковский ✉, А. А. Алексеев

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

✉ khodorkovskii@gmail.com

Аннотация. Нуклеопротеиновые филаменты, формируемые белками-рекомбиназами на ДНК, являются ключевыми структурами процесса гомологичной рекомбинации, обеспечивающей поддержание стабильности генома. Формирование филамента на ДНК приводит к значительному изменению механических свойств комплекса, в частности к удлинению ДНК, при этом кинетика сборки филамента зависит от механического натяжения. В работе с помощью метода оптического захвата получены данные о динамике сборки филаментов RAD51 человека и UvsX бактериофага T6 на двухцепочечной ДНК при различных силах механического натяжения. В диапазоне 3 – 12 пН RAD51 эффективно связывается с ДНК, формируя филаменты с высокой степенью покрытия. В отличие от RAD51, эффективное формирование филаментов UvsX происходит только при высоком натяжении (12 пН), тогда как при значениях 3 – 6 пН связывание UvsX с ДНК существенно ограничено. Различная склонность двух рекомбиназ к взаимодействию с ДНК отражает адаптацию к клеточным условиям и механизмам регуляции гомологичной рекомбинации.

Ключевые слова: гомологичная рекомбинация, RAD51, UvsX, RecA, онкотерапия, рекомбиназная полимеразная амплификация, метод оптического захвата, нуклеопротеиновый филамент

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-74-00107: «Конформационные состояния рекомбиназы RAD51»).

Для цитирования: Гончаров И. Д., Садова А. И., Нужин И. М., Теницкая П. А., Курдюмова И. В., Горьковская А. А., Ходорковский М. А., Алексеев А. А. Различия во взаимодействии рекомбиназ RAD51 и UvsX с ДНК, выявленные в экспериментах на уровне одиночных молекул // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 147–159. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19212

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Гончаров И. Д., Садова А. И., Нужин И. М., Теницкая П. А., Курдюмова И. В., Горьковская А. А., Ходорковский М. А., Алексеев А. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19212

DIFFERENCES IN THE INTERACTION OF RAD51 AND UvsX RECOMBINASES WITH DNA REVEALED BY SINGLE-MOLECULE EXPERIMENTS

I. D. Goncharov, A. I. Sadova, I. M. Nuzhin, P. A. Tenitskaya, I. V. Kurdyumova, A. A. Gorkovskaia, M. A. Khodorkovskiy ✉, A. A. Alekseev

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

✉ khodorkovskii@gmail.com

Abstract. Nucleoprotein filaments formed by recombinase proteins on DNA are key structures of the homologous recombination process, which ensures the maintenance of the genome stability. Filament formation on DNA leads to a significant change in the mechanical properties of the complex, in particular to DNA lengthening, while the kinetics of filament assembly depends on mechanical tension. Using optical tweezers, this study has obtained the data on the assembly dynamics of human RAD51 recombinase and bacteriophage T6 UvsX recombinase filaments on double-stranded DNA under varying mechanical tension. In the range between 3 and 12 pN, RAD51 efficiently bound to DNA, forming filaments with a high coverage. In contrast to RAD51, an efficient UvsX filament formation occurred only under high tension (12 pN), whereas UvsX binding to DNA was severely restricted at 3–6 pN. The different tendency of the two recombinases to interact with DNA reflected their adaptation to cellular environments and regulatory mechanisms governing homologous recombination.

Keywords: homologous recombination, RAD51, UvsX, RecA, cancer treatment, recombinase polymerase amplification, optical tweezers, nucleoprotein filament

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-74-00107, "Conformational states of RAD51 recombinase").

For citation: Goncharov I. D., Sadova A. I., Nuzhin I. M., Tenitskaya P. A., Kurdyumova I. V., Gorkovskaia A. A., Khodorkovskiy M. A., Alekseev A. A., Differences in the interaction of RAD51 and UvsX recombinases with DNA revealed by single-molecule experiments, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 147–159. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19212

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Гомологичная рекомбинация – ключевой механизм поддержания стабильности генома. Она позволяет клеткам восстанавливать двухцепочечные разрывы ДНК, возобновлять остановленные репликативные вилки и обмениваться генетическим материалом в ходе мейоза [1, 2]. Центральную роль в процессе гомологичной рекомбинации играют рекомбиназы – высококонсервативные ДНК-связывающие белки, которые покрывают одноцепочечную ДНК (ssDNA), образуя нуклеопротеиновый филамент. Этот филамент осуществляет поиск гомологичной последовательности на другой молекуле ДНК и способствует инвазии цепи [3, 4].

Эукариотическая рекомбиназа RAD51, бактериальная рекомбиназа RecA и фаговая рекомбиназа UvsX относятся к одному суперсемейству, представленному во всех доменах жизни [5, 6]. Фаговая рекомбиназа UvsX функционально более близка к бактериальному белку RecA и участвует в процессах гомологичной рекомбинации, рекомбинационно-зависимой репликации и репарации ДНК в инфицированных клетках-хозяевах [7, 8]. Все члены суперсемейства содержат консервативный RecA-подобный АТФазный домен с

© Goncharov I. D., Sadova A. I., Nuzhin I. M., Tenitskaya P. A., Kurdyumova I. V., Gorkovskaia A. A., Khodorkovskiy M. A., Alekseev A. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

мотивами Walker A и Walker B, которые участвуют в связывании и гидролизе аденозинтрифосфата (АТФ), регулируя сборку, стабильность и диссоциацию нуклеопротеинового филамента [5, 9 – 12].

RecA – наиболее детально изученный представитель семейства. Структура его спирального филамента, межмономерные контакты и структура мономера известны с почти атомным разрешением благодаря результатам исследований, полученных методами рентгеноструктурного анализа и криоэлектронной микроскопии [3, 9]. Функции RecA в SOS-ответе, гомологичной рекомбинации, рестарте репликативных вилок, горизонтальном переносе генов и формировании биопленок хорошо охарактеризованы [13 – 18]. ДНК-зависимая АТФазная активность RecA измерена: ее значения k_{cat} составляют 30 мин$^{-1}$ для филамента RecA на ssDNA и 20 мин$^{-1}$ на двухцепочечной ДНК (dsDNA) [19].

RAD51 человека в настоящее время интенсивно изучается, поскольку повышенная экспрессия этой рекомбиназы в опухолях обеспечивает устойчивость к химиотерапевтическим препаратам, повреждающим ДНК, что делает данный белок перспективной мишенью для таргетной терапии [20 – 22]. АТФазная активность RAD51 человека была охарактеризована в работе [23], где показано, что значения каталитической константы k_{cat} составляют 0,21 мин$^{-1}$ в присутствии ssDNA и 0,07 – 0,11 мин$^{-1}$ в присутствии dsDNA.

Рекомбиназа UvsX Т-четных фагов изучена существенно меньше, чем бактериальные или эукариотические гомологи, хотя в последние годы интерес к ее свойствам значительно возрос в связи с ее использованием в технологии рекомбиназной полимеразной амплификации (РПА) [24, 25]. В ходе РПА UvsX формирует нуклеопротеиновые филаменты на одноцепочечных праймерах и осуществляет их внедрение в двухцепочечную ДНК-матрицу, позволяя ДНК-полимеразе начать синтез новой цепи без необходимости термической денатурации дуплекса. Самая высокая активность рекомбиназы UvsX среди гомологов делает этот фермент предпочтительным для применения в РПА. Так, согласно литературным данным, каталитическая константа k_{cat} гидролиза для UvsX достигает значения 240 – 500 мин$^{-1}$, что на порядок выше аналогичного показателя для бактериального белка RecA [26, 27].

Нуклеопротеиновый филамент, формируемый рекомбиназами, представляет собой ключевую структурную единицу гомологичной рекомбинации, обеспечивающую поиск гомологии и инвазию цепи в донорскую ДНК [28]. Связывание рекомбиназ с ДНК приводит к значительному удлинению молекулы (примерно в 1,5 раза), по сравнению с B-формой ДНК, и изменению ее механических свойств, включая жесткость и эластичность [9, 29 – 31].

Метод оптического захвата позволяет в реальном времени отслеживать эти структурные превращения на уровне одиночных молекул ДНК, так как измеряются трансформации их длины под контролируемым внешним натяжением.

В настоящей работе представлены данные о кинетике сборки нуклеопротеиновых филаментов RAD51 человека и UvsX фага T6 на dsDNA при различных величинах прикладываемой силы натяжения. Результаты получены с помощью метода оптического захвата.

Материалы и методы

ДНК-конструкция. Для проведения экспериментов на уровне одиночных молекул ДНК использовали линейную dsDNA длиной 11 100 пар оснований (base pairs (BPs)). Молекулы обладали идентичной природной последовательностью и несли биотиновые модификации на обоих концах для специфического прикрепления к микросферам, функционализированным стрептавидином. Подробная методика получения и очистки таких ДНК-конструкций описана в работах [12, 32].

Получение очищенных форм белков. Рекомбинантные белки RAD51 человека и UvsX бактериофага T6 получали путем экспрессии в штаммах *Escherichia coli* BLR(DE3)pLysS для RAD51 и Rosetta(DE3) для UvsX. Для этого использовали плазмиды, кодирующие соответствующие белки, слитые с полигистидиновым хвостом. Клетки выращивали в среде Lysogeny broth (LB) до оптической плотности 0,6, индуцировали экспрессию добавлением изопропил-D-1-тиогалактопиранозида (IPTG) и дополнительно инкубировали при 37°C в течение 3 ч. Очистку целевого белка из полученной биомассы клеток проводили методом аффинной хроматографии на Ni-NTA-агарозе (NTA – нитрилотриуксусная кислота).

Лизат клеток наносили на колонку в буфере с 50 мМ имидазола, после чего белок элюировали ступенчатым градиентом имидазола. Полученные препараты обладали чистотой не менее 95 %, что подтверждалось при помощи электрофореза в полиакриламидном геле по методу Лэммли. Очищенные белки хранили при –80 °С в буфере с добавлением 10% глицерина. Подробная методика очистки белков описана в работах [33, 34].

Установка «Лазерный пинцет». Эксперименты выполняли на оригинальной уникальной научной установке «Лазерный пинцет», собранной на основе неинвертированного микроскопа Axio Imager.Z1 (Carl Zeiss). Установка позволяет осуществлять оптический захват одновременно двумя независимыми ловушками, благодаря разделению излучения лазера (Nd:YAG, λ = 1064 нм, Spectra Physics, модель BL-106C) поляризационным делителем на две компоненты, поляризованные во взаимно перпендикулярных направлениях. Пучки фокусировали с помощью иммерсионного объектива с высокой числовой апертурой (NA = 1,25). Чтобы перемещать подвижную ловушку в плоскости образца, луч направляли через зеркало, закрепленное на пьезоэлектрическом позиционирующем столике.

Экспериментальная установка была дополнена многоканальной микрофлюидной системой u-Flux (LUMICKS B.V.) для ламинарной подачи и смены буферных растворов вокруг образца. Микрофлюидную камеру крепили на моторизованном столике микроскопа с трехосевым позиционированием. Регистрацию изображений вели на камеру iXon Ultra 897 (Andor Technology) с электронно-умножающей CCD-матрицей. Обработка видеоданных для определения дистанции между микросферами и соответствующей силы растяжения ДНК выполнялась в реальном времени специализированным программным обеспечением, созданным нами в среде LabVIEW. Жесткость оптических ловушек калибровали по силе вязкого сопротивления, которую испытывала захваченная микросфера при движении с заданной скоростью в жидкой среде известной вязкости.

Проведение экспериментов на уровне одиночных молекул ДНК

Для выполнения манипуляций с ДНК, между каналами с ламинарными потоками осуществляли перенос микросфер и молекулы ДНК, закрепленной между ними. В первом канале микрофлюидной системы захватывали стрептавидин-функционализированные полистироловые микросферы диаметром 2,1 мкм в две независимые оптические ловушки. Затем эти микросферы переносили во второй канал, содержащий раствор ДНК с концентрацией 30 пМ. В этих условиях осуществляли прикрепление одной молекулы ДНК к микросферам за счет формирования биотин-стрептавидиновых связей на ее концах, что приводило к фиксации ДНК между двумя микросферами. После такой фиксации эту систему подвергали предварительному растяжению до силы 10 – 20 пН в канале, содержащем только буферный раствор, с целью проверки целостности молекулы и исключения множественных прикреплений. Далее ДНК, закрепленную между микросферами, переносили в четвертый канал микрофлюидной системы, содержащий рекомбиназу RAD51 или UvsX в концентрации 300 нМ.

Используемый буферный раствор имел следующий состав:

40 мМ Tris-HCl (pH 7,5); 0,02% BSA; 1 мМ DTT; 5 мМ $MgCl_2$; 2 мМ АТФ.

При этих условиях регистрировали процесс сборки нуклеопротеинового филамента на молекуле ДНК. Измерения проводили в режиме фиксированной силы в диапазоне 3 – 12 пН при температуре 22°С. Сборку нуклеопротеинового филамента отслеживали в реальном времени по увеличению длины молекулы ДНК при формировании комплекса.

Используемый в работе метод оптического захвата позволяет манипулировать одиночными биомолекулами и отслеживать изменения их механических свойств ввиду возможности контроля силы натяжения (в диапазоне от долей пиконьютона до сотен пиконьютонов) и регистрации удлинения молекулы с нанометровым разрешением.

Результаты и обсуждение

Для изучения кинетики связывания рекомбиназ RAD51 и UvsX с ДНК использовали dsDNA длиной 11 100 BPs. При помощи совмещения метода оптического пинцета с микрофлюидной системой осуществляли захват одиночной молекулы ДНК (рис. 1, *а*).

Молекула ДНК при фиксированной силе натяжения обладает практически постоянной длиной, определяемой энтропийным и энтальпийным вкладами в упругий отклик. Экспериментально полученная зависимость силы натяжения от удлинения для используемой ДНК-конструкции представлена на рис. 1, *b*.

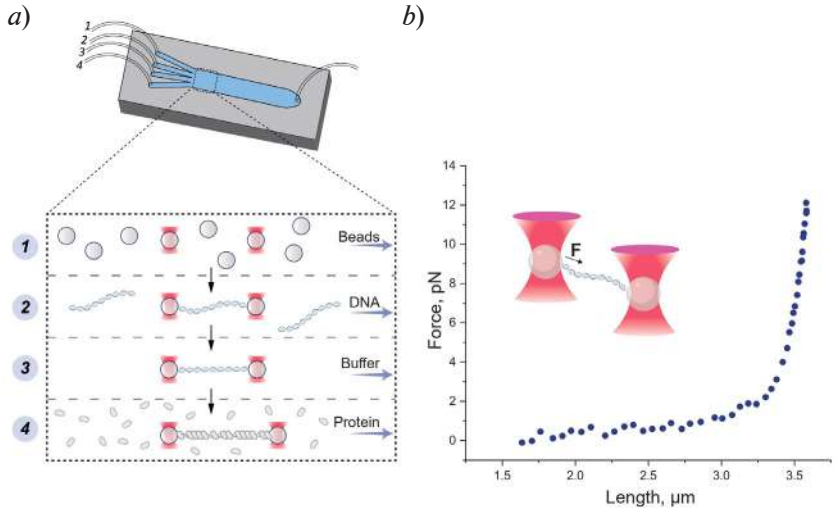


Рис. 1. Графическое представление экспериментов на уровне одиночных молекул ДНК: *a* – схематичное изображение микрофлюидной камеры с четырьмя ламинарными потоками *1 – 4*; *b* – пример получаемой зависимости натяжения *F* (пН) от длины молекулы ДНК, используемой в работе

Перенос удерживаемой молекулы ДНК в канал, содержащий рекомбиназу RAD51, приводил к сборке нуклеопротеинового филамента. В ходе инкубации к образцу прикладывали постоянную силу натяжения и регистрировали изменение длины. На рис. 2 показаны репрезентативные кривые сборки филамента RAD51, полученные при силах натяжения F = 3 пН, 6 пН и 12 пН. Динамика формирования филамента RAD51 была малочувствительной к вариации величины прикладываемого натяжения. Во всех случаях длина комплекса выходила на насыщение за время 60 – 80 с.

Итоговые значения длины филамента составили:

4,82 ± 0,09 мкм (N = 4) при F = 3 пН;

5,02 ± 0,04 мкм (N = 6) при F = 6 пН;

4,99 ± 0,11 мкм (N = 4) при F = 12 пН.

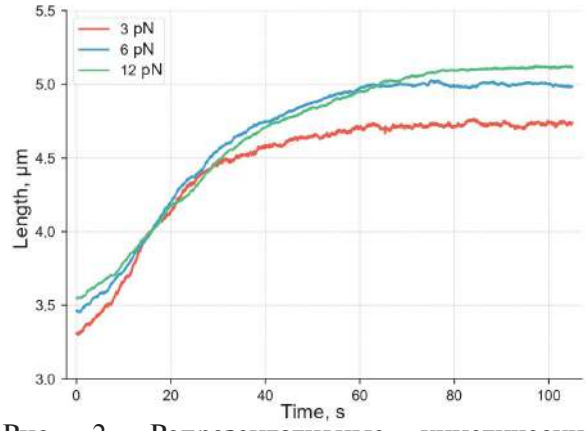


Рис. 2. Репрезентативные кинетические кривые сборки филаментов RAD51 на двухцепочечной ДНК (dsDNA) при трех различных силах натяжения

Полезно сопоставить полученные результаты итогового удлинения ДНК при формировании филамента RAD51–ДНК с данными, известными из структурных исследований. Согласно структурным данным, ДНК в первичном сайте нуклеопротеинового филамента удлинена примерно в 1,5 раза относительно контурной длины B-формы ДНК [5, 35]. Контурная длина используемых молекул ДНК (11 тыс. BPs) составляет около 3,7 мкм. Ввиду энтропийных факторов, длина ДНК, регистрируемая как межконцевое расстояние, оказалась короче контурной длины и составила примерно 3,5 мкм при силе F = 6 пН. Полуторакратное увеличение указанного значения дает оценку 5,25 мкм для длины филаментов,

формируемых на используемых двунитевых ДНК, что согласуется с итоговым удлинением ДНК на 1,5 мкм, регистрируемым в экспериментах. Этот результат свидетельствует о достаточно высокой степени покрытия ДНК рекомбиназой RAD51 в сформированных нуклеопротеиновых филаментах.

Аналогичным образом была исследована кинетика сборки филаментов UvsX. В отличие от RAD51, полноценное формирование нуклеопротеинового филамента наблюдалось только при приложении силы $F = 12$ пН (рис. 3, *a*). При силе $F = 3$ пН удлинения ДНК в ходе инкубации в канале с UvsX не наблюдалось, тогда как при $F = 6$ пН фиксировали лишь ограниченное увеличение длины, не достигающее стационарного значения (за время наблюдения), соответствующего полуторократному удлинению ДНК (рис. 3, *b*).

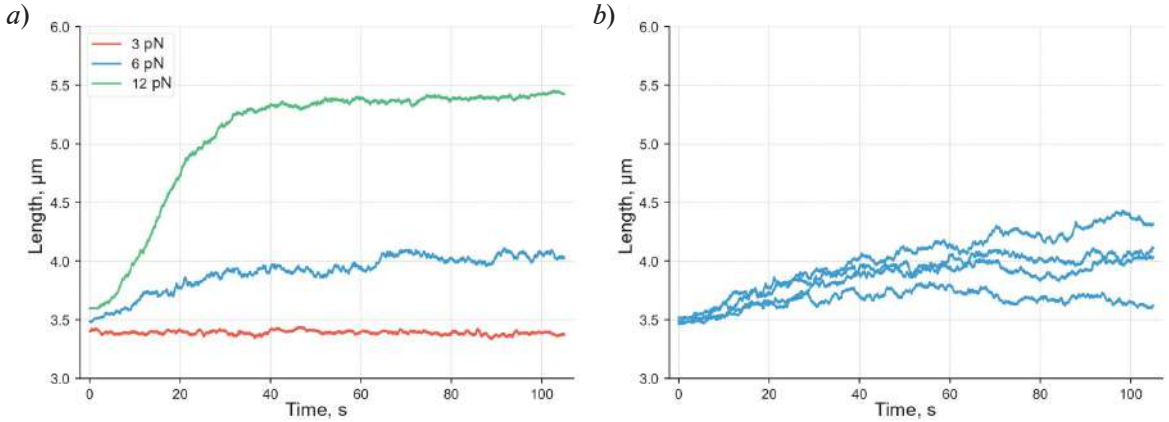


Рис. 3. Результаты наблюдения сборки филаментов UvsX на dsDNA:
a – репрезентативные кривые сборки при трех значениях *F*, пН: 3, 6 и 12;
b – кривые сборки филаментов UvsX при F = 6 пН

При силе $F = 12$ пН длина комплекса выходила на насыщение в течение 30 – 40 с, при этом итоговая длина составляла 5,4 ± 0,1 мкм ($N = 5$). Это значение несколько выше таковых, наблюдаемых при той же силе для RAD51, однако также согласуется с примерно полуторократным удлинением ДНК. Точная длина филамента, регистрируемая в экспериментах с использованием метода оптического захвата, определяется, помимо силы натяжения, целым рядом факторов, включая степень покрытия ДНК белком, шаг спирали филамента, число мономеров на оборот спирали, персистентная длина, а также локальное присутствие участков неактивной конформации, связанное с гидролизом АТФ. Тем не менее, структурные исследования показывают, что для филаментов, формируемых рекомбиназами, характерно удлинение ДНК приблизительно в 1,5 раза, по сравнению с длиной B-формы ДНК [9, 30, 31]. Наблюдение комплексов с большей длиной, например, при $F = 12$ пН, может указывать на формирование рекомбиназой UvsX филаментов с большей степенью покрытия ДНК, чем рекомбиназой RAD51, при этих условиях.

Несмотря на сложившееся мнение о меньшей активности рекомбиназы RAD51, по сравнению с RecA и UvsX, полученные результаты указывают на ее способность эффективно связываться с двухцепочечной ДНК (dsDNA).

Из литературных данных известно, что для рекомбиназы RecA из грамотрицательной бактерии *Escherichia coli* такое связывание затруднено и, как правило, наблюдается лишь при приложении достаточно высокой внешней силы натяжения, превышающей 20 пН [32].

В клетке же активность рекомбиназы RAD51 находится под контролем ряда медиаторных белков, прежде всего на этапе сборки нуклеопротеинового филамента на ssDNA [5]. В условиях *in vitro*, при катализе обмена нитями, RAD51 демонстрирует повышенную эффективность внедрения 5'-концевого фрагмента ssDNA, по сравнению с 3'-концевым, что контрастирует с поведением RecA, для которой предпочтительным является 3'-концевой участок [36]. Вместе с тем показано, что при использовании дуплексной ДНК с одноцепочечным выступом, для рекомбиназы RAD51 восстанавливается эффективность внедрения 3'-концевого фрагмента.

В большинстве моделей гомологичной рекомбинации, в качестве ключевого начального этапа рассматривается формирование нуклеопротеинового филамента на ssDNA в присутствии дополнительных белков, как конкурирующих за связывание с оцДНК, так и стимулирующих загрузку рекомбиназы на ssDNA. Вместе с тем природный субстрат, образующийся в результате процессинга ДНК и доступный для взаимодействия с рекомбиназой, представляет собой гибридную ДНК, включающую участок dsDNA, переходящий в 3'-концевой одноцепочечный фрагмент. В связи с этим можно предположить, что формирование стабильного филамента RAD51 на dsDNA способно, вследствие кооперативных взаимодействий, дополнительно повышать конформационную устойчивость филамента RAD51 на ssDNA и тем самым способствовать процессу гомологичной рекомбинации. Наличие взаимосвязи между конформационными состояниями различных участков филамента, сформированного на гибридной ДНК, ранее было продемонстрировано для рекомбиназы RecA [37].

Рекомбиназа UvsX считается наиболее активной и поэтому часто востребованной в системах рекомбиназной полимеразной амплификации. Каталитическая константа гидролиза АТФ для UvsX на три порядка превышает соответствующий показатель для RAD51. В ходе инфицирования клетки Т-четными бактериофагами, рекомбиназа UvsX обеспечивает рекомбинационно-зависимую репликацию множественных копий генома вируса на поздних стадиях инфекции, что позволяет осуществлять синтез сотен копий фаговой ДНК в сжатые временные сроки [38]. Неконтролируемое связывание UvsX с dsDNA могло бы препятствовать процессам репликации в условиях интенсивного синтеза фаговой ДНК, а также приводить к неоправданному расходу АТФ. В случае RAD51 подобное взаимодействие рекомбиназы с dsDNA видится более вероятным и не сопровождается значительным перерасходом АТФ вследствие существенно более низкой АТФазной активности данной рекомбиназы. При этом в эукариотических клетках активность RAD51 дополнительно находится под контролем значительно более широкого набора регуляторных белков.

Заключение

В работе получены данные о кинетике связывания рекомбиназ RAD51 и UvsX при различных силах внешнего натяжения в диапазоне 3 – 12 пН. Наблюдаемое отсутствие связывания UvsX с двухцепочечной ДНК (dsDNA) без приложения достаточного натяжения, по-видимому, отражает эволюционную адаптацию фаговой репликационной системы. Наблюдаемая различная склонность рекомбиназ RAD51 и UvsX к связыванию с dsDNA указывает на возможные альтернативные пути организации рекомбинационных комплексов *in vivo*.

Метод оптического захвата открыл возможность количественно охарактеризовать влияние механического напряжения на процессы формирования и стабильности рекомбиназных комплексов.

Проведение же исследований на уровне одиночных молекул ДНК позволяет прямое тестирование влияния типа ДНК-субстрата и физических условий на сборку и стабильность нуклеопротеиновых филаментов и служит основой для более детального описания молекулярных механизмов гомологичной рекомбинации.

Благодарность

Авторы статьи выражают глубокую благодарность Юрию Владимировичу Килю, старшему научному сотруднику лаборатории молекулярной и клеточной биофизики НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ за предоставление штамма BLR(DE3)pLysS и экспрессионного вектора для выделения RAD51, а также за плодотворное обсуждение материалов статьи, которое способствовало улучшению ее качества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Stewart M. D., Merino Vega D., Arend R. C., Baden J. F., Barbash O., Beaubier N., Collins G., French T., Ghahramani N., Hinson P.** Homologous recombination deficiency: concepts, definitions, and assays // The Oncologist. 2022. Vol. 27. No. 3. Pp. 167–174.

2. **Ito M., Shinohara A.** Chromosome architecture and homologous recombination in meiosis // Frontiers in Cell and Developmental Biology. 2023. Vol. 10. 6 January. P. 1097446.

3. **Yang H., Pavletich N. P.** Insights into homology search from cryo-EM structures of RecA-DNA recombination intermediates // Current Opinion in Genetics & Development. 2021. Vol. 71. December. Pp. 188–194.

4. **McIlwraith M. J., Van Dyck E., Masson J.-Y., Stasiak A. Z., Stasiak A., West S. C.** Reconstitution of the strand invasion step of double-strand break repair using human Rad51, Rad52 and RPA proteins // Journal of Molecular Biology. 2000. Vol. 304. No. 2. Pp. 151–164.

5. **Bonilla B., Hengel S. R., Grundy M. K., Bernstein K. A.** RAD51 gene family structure and function // Annual Review of Genetics. 2020. Vol. 54. November. Pp. 25–46.

6. **Pan Y., Xie N., Zhang X., Yang S., Lv S.** Computational insights into the dynamic structural features and binding characteristics of recombinase UvsX compared with RecA // Molecules. 2023. Vol. 28. No. 8. P. 3363.

7. **Yang S., VanLoock M. S., Yu X., Egelman E. H.** Comparison of bacteriophage T4 UvsX and human Rad51 filaments suggests that RecA-like polymers may have evolved independently // Journal of Molecular Biology. 2001. Vol. 312. No. 5. Pp. 999–1009.

8. **Bleuit J. S., Xu H., Ma Y., Wang T., Liu J., Morrical S. W.** Mediator proteins orchestrate enzyme–ssDNA assembly during T4 recombination-dependent DNA replication and repair // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2001. Vol. 98. No. 15. Pp. 8298–8305.

9. **Chen Z., Yang H., Pavletich N. P.** Mechanism of homologous recombination from the RecA–ssDNA/dsDNA structures // Nature. 2008. Vol. 453. No. 7194. Pp. 489–494.

10. **Gajewski S., Webb M. R., Galkin V., Egelman E. H., Kreuzer K. N., White S. W.** Crystal structure of the phage T4 recombinase UvsX and its functional interaction with the T4 SF2 helicase UvsW // Journal of Molecular Biology. 2011. Vol. 405. No. 1. Pp. 65–76.

11. **Alekseev A., Morozova N., Vedyaykin A., Yakimov A., Khodorkovskii M., Pobegalov G.** Single-molecule characterization of compressed RecA nucleoprotein filaments // Biochemical and Biophysical Research Communications. 2022. Vol. 614. 30 April. Pp. 29–33.

12. **Alekseev A., Serdakov M., Pobegalov G., Yakimov A., Bakhlanova I., Baitin D., Khodorkovskii M.** Single-molecule analysis reveals two distinct states of the compressed RecA filament on single-stranded DNA // FEBS Letters. 2020. Vol. 594. No. 21. Pp. 3464–3476.

13. **Del Val E., Nasser W., Abaibou H., Reverchon S.** RecA and DNA recombination: a review of molecular mechanisms // Biochemical Society Transactions. 2019. Vol. 47. No. 5. Pp. 1511–1531.

14. **Bianco P. R., Lu Y.** Single-molecule insight into stalled replication fork rescue in *Escherichia coli* // Nucleic Acids Research. 2021. Vol. 49. No. 8. Pp. 4220–4238.

15. **Kaushik V., Tiwari M., Tiwari V.** Interaction of RecA mediated SOS response with bacterial persistence, biofilm formation, and host response // International Journal of Biological Macromolecules. 2022. Vol. 217. 30 September. Pp. 931–943.

16. **Mortier-Barrière I., De Saizieu A., Claverys J. P., Martin B.** Competence-specific induction of RecA is required for full recombination proficiency during transformation in *Streptococcus pneumoniae* // Molecular Microbiology. 1998. Vol. 27. No. 1. Pp. 159–170.

17. **Le S., Serrano E., Kawamura R., Carrasco B., Yan J., Alonso J. C.** Bacillus subtilis RecA with DprA–SsbA antagonizes RecX function during natural transformation // Nucleic Acids Research. 2017. Vol. 45. No. 15. Pp. 8873–8885.

18. **Cory M. B., Li A., Hurley C. M., Carman P. J., Pumroy R. A., Hostetler Z. M., Perez R. M., Venkatesh Y., Li X., Gupta K.** The LexA–RecA* structure reveals a cryptic lock-and-key mechanism for SOS activation // Nature Structural & Molecular Biology. 2024. Vol. 31. No. 10. Pp. 1522–1531.

19. **Cox J. M., Tsodikov O. V., Cox M. M.** Organized unidirectional waves of ATP hydrolysis within a RecA filament // PLoS Biology. 2005. Vol. 3. No. 2. P. e52.

20. **Tennstedt P., Fresow R., Simon R., Marx A., Terracciano L., Petersen C., Sauter G., Dikomey E., Borgmann K.** RAD51 overexpression is a negative prognostic marker for colorectal adenocarcinoma // International Journal of Cancer. 2013. Vol. 132. No. 9. Pp. 2118–2126.

21. **Orhan E., Velazquez C., Tabet I., Sardet C., Theillet C.** Regulation of RAD51 at the transcriptional and functional levels: What prospects for cancer therapy? // Cancers. 2021. Vol. 13. No. 12. P. 2930.

22. **Budke B., Lv W., Kozikowski A. P., Connell P. P.** Recent developments using small molecules to target RAD51: how to best modulate RAD51 for anticancer therapy? // ChemMedChem. 2016. Vol. 11. No. 22. Pp. 2468–2473.

23. **Tombline G., Fishel R.** Biochemical characterization of the human Rad51 protein: I. ATP hydrolysis // Journal of Biological Chemistry. 2002. Vol. 277. No. 17. Pp. 14417–14425.

24. **Wang L., Li Y., Wang P., Zhang Y., Liu Q.** Enhanced recombinase polymerase amplification via UvsX engineering and reaction optimization for rapid detection of *Vibrio parahaemolyticus* // Letters in Applied Microbiology. 2025. Vol. 78. No. 6. P. ovaf081.

25. **Ji T., Fang X., Gao Y., Yu K., Gao X.** Research progress on the application of RPA-CRISPR/Cas12a in the rapid visual detection of pathogenic microorganisms // Frontiers in Cellular and Infection Microbiology. 2025. Vol. 15. 30 July. P. 1640938.

26. **Formosa T., Alberts B.** Purification and characterization of the T4 bacteriophage uvsX protein // Journal of Biological Chemistry. 1986. Vol. 261. No. 13. Pp. 6107–6118.

27. **Farb J. N., Morrical S. W.** Role of allosteric switch residue histidine 195 in maintaining active-site asymmetry in presynaptic filaments of bacteriophage T4 UvsX recombinase // Journal of Molecular Biology. 2009. Vol. 385. No. 2. Pp. 393–404.

28. **Subramanyam S., Kinz-Thompson C. D., Gonzalez Jr R. L., Spies M.** Observation and analysis of RAD51 nucleation dynamics at single-monomer resolution // Methods in enzymology. 2018. Vol. 600. 5 July. Pp. 201–232.

29. **Hegner M., Smith S. B., Bustamante C.** Polymerization and mechanical properties of single RecA–DNA filaments // Proceedings of the National Academy of Sciences. 1999. Vol. 96. No. 18. Pp. 10109–10114.

30. **Yu X., Egelman E. H.** DNA conformation induced by the bacteriophage T4 UvsX protein appears identical to the conformation induced by the *Escherichia coli* RecA protein // Journal of Molecular Biology. 1993. Vol. 232. No. 1. Pp. 1–4.

31. **Xu J., Zhao L., Xu Y., Zhao W., Sung P., Wang H.-W.** Cryo-EM structures of human RAD51 recombinase filaments during catalysis of DNA-strand exchange // Nature Structural & Molecular Biology. 2017. Vol. 24. No. 1. Pp. 40–46.

32. **Alekseev A., Pobegalov G., Morozova N., Vedyaykin A., Cherevatenko G., Yakimov A., Baitin D., Khodorkovskii M.** A new insight into RecA filament regulation by RecX from the analysis of conformation-specific interactions // eLife. 2022. Vol. 11. 22 June. P. e78409.

33. **Prasad T. K., Yeykal C. C., Greene E. C.** Visualizing the assembly of human Rad51 filaments on double-stranded DNA // Journal of Molecular Biology. 2006. Vol. 363. No. 3. Pp. 713–728.

34. **Kojima K., Juma K. M., Akagi S., Hayashi K., Takita T., O'Sullivan C. K., Fujiwara S., Nakura Y., Yanagihara I., Yasukawa K.** Solvent engineering studies on recombinase polymerase amplification // Journal of Bioscience and Bioengineering. 2021. Vol. 131. No. 2. Pp. 219–224.

35. **Short J. M., Liu Y., Chen S., Soni N., Madhusudhan M. S., Shivji M. K., Venkitaraman A. R.** High-resolution structure of the presynaptic RAD51 filament on single-stranded DNA by electron cryo-microscopy // Nucleic Acids Research. 2016. Vol. 44. No. 19. Pp. 9017–9030.

36. **Mazin A. V., Zaitseva E., Sung P., Kowalczykowski S. C.** Tailed duplex DNA is the preferred substrate for Rad51 protein-mediated homologous pairing // The EMBO Journal. 2000. Vol. 19. No. 5. Pp. 1148–1156.

37. **Kim S. H., Ragunathan K., Park J., Joo C., Kim D., Ha T.** Cooperative conformational transitions keep RecA filament active during ATPase cycle // Journal of the American Chemical Society. 2014. Vol. 136. No. 42. Pp. 14796–14800.

38. **Brister J. R., Nossal N. G.** Multiple origins of replication contribute to a discontinuous pattern of DNA synthesis across the T4 genome during infection // Journal of Molecular Biology. 2007. Vol. 368. No. 2. Pp. 336–348.

REFERENCES

1. **Stewart M. D., Merino Vega D., Arend R. C., et al.,** Homologous recombination deficiency: concepts, definitions, and assays, Oncologist. 27 (3) (2022) 167–174.

2. **Ito M., Shinohara A.,** Chromosome architecture and homologous recombination in meiosis, Front. Cell Dev. Biol. 10 (Jan 6) (2023) 1097446.

3. **Yang H., Pavletich N. P.,** Insights into homology search from cryo-EM structures of RecA-DNA recombination intermediates, Curr. Opin. Genet. Dev. 71 (Dec) (2021) 188–194.

4. **McIlwraith M. J., Van Dyck E., Masson J.-Y., et al.,** Reconstitution of the strand invasion step of double-strand break repair using human Rad51 Rad52 and RPA proteins, J. Mol. Biol. 304 (2) (2000) 151–164.

5. **Bonilla B., Hengel S. R., Grundy M. K., Bernstein K. A.,** RAD51 gene family structure and function, Annu. Rev. Genet. 54 (Nov) (2020) 25–46.

6. **Pan Y., Xie N., Zhang X., et al.,** Computational insights into the dynamic structural features and binding characteristics of recombinase UvsX compared with RecA, Molecules. 28 (8) (2023) 3363.

7. **Yang S., VanLoock M. S., Yu X., Egelman E. H.,** Comparison of bacteriophage T4 UvsX and human Rad51 filaments suggests that RecA-like polymers may have evolved independently, J. Mol. Biol. 312 (5) (2001) 999–1009.

8. **Bleuit J. S., Xu H., Ma Y., et al.,** Mediator proteins orchestrate enzyme–ssDNA assembly during T4 recombination-dependent DNA replication and repair, Proc. Natl. Acad. Sci. 98 (15) (2001) 8298–8305.

9. **Chen Z., Yang H., Pavletich N. P.,** Mechanism of homologous recombination from the RecA–ssDNA/dsDNA structures, Nature. 453 (7194) (2008) 489–494.

10. **Gajewski S., Webb M. R., Galkin V., et al.,** Crystal structure of the phage T4 recombinase UvsX and its functional interaction with the T4 SF2 helicase UvsW, J. Mol. Biol. 405 (1) (2011) 65–76.

11. **Alekseev A., Morozova N., Vedyaykin A., et al.,** Single-molecule characterization of compressed RecA nucleoprotein filaments, Biochem. Biophys. Res. Commun. 614 (Apr 30) (2022) 29–33.

12. **Alekseev A., Serdakov M., Pobegalov G., et al.,** Single-molecule analysis reveals two distinct states of the compressed RecA filament on single-stranded DNA, FEBS Lett. 594 (21) (2020) 3464–3476.

13. **Del Val E., Nasser W., Abaibou H., Reverchon S.,** RecA and DNA recombination: A review of molecular mechanisms, Biochem. Soc. Trans. 47 (5) (2019) 1511–1531.

14. **Bianco P. R., Lu Y.,** Single-molecule insight into stalled replication fork rescue in *Escherichia coli*, Nucleic Acids Res. 49 (8) (2021) 4220–4238.

15. **Kaushik V., Tiwari M., Tiwari V.,** Interaction of RecA mediated SOS response with bacterial persistence, biofilm formation, and host response, Int. J. Biol. Macromol. 217 (Sep 30) (2022) 931–943.

16. **Mortier-Barrière I., De Saizieu A., Claverys J. P., Martin B.,** Competence-specific induction of RecA is required for full recombination proficiency during transformation in *Streptococcus pneumoniae*, Mol. Microbiol. 27 (1) (1998) 159–170.

17. **Le S., Serrano E., Kawamura R., et al.,** Bacillus subtilis RecA with DprA–SsbA antagonizes RecX function during natural transformation, Nucleic Acids Res. 45 (15) (2017) 8873–8885.

18. **Cory M. B., Li A., Hurley C. M., et al.,** The LexA–RecA* structure reveals a cryptic lock-and-key mechanism for SOS activation, Nat. Struct. Mol. Biol. 31 (10) (2024) 1522–1531.

19. **Cox J. M., Tsodikov O. V., Cox M. M.,** Organized unidirectional waves of ATP hydrolysis within a RecA filament, PLoS Biol. 3 (2) (2005) e52.

20. **Tennstedt P., Fresow R., Simon R., et al.,** RAD51 overexpression is a negative prognostic marker for colorectal adenocarcinoma, Int. J. Cancer. 132 (9) (2013) 2118–2126.

21. **Orhan E., Velazquez C., Tabet I., et al.,** Regulation of RAD51 at the transcriptional and functional levels: what prospects for cancer therapy? Cancers (Basel). 13 (12) (2021) 2930.

22. **Budke B., Lv W., Kozikowski A. P., Connell P. P.,** Recent developments using small molecules to target RAD51: How to best modulate RAD51 for anticancer therapy? ChemMedChem. 11 (22) (2016) 2468–2473.

23. **Tombline G., Fishel R.,** Biochemical characterization of the human Rad51 protein: I. ATP hydrolysis, J. Biol. Chem. 277 (17) (2002) 14417–14425.

24. **Wang L., Li Y., Wang P., et al.,** Enhanced recombinase polymerase amplification via UvsX engineering and reaction optimization for rapid detection of *Vibrio parahaemolyticus*, Lett. Appl. Microbiol. 78 (6) (2025) ovaf081.

25. **Ji T., Fang X., Gao Y., et al.,** Research progress on the application of RPA-CRISPR/Cas12a in the rapid visual detection of pathogenic microorganisms, Front. Cell. Infect. Microbiol. 15 (Jul 30) (2025) 1640938.

26. **Formosa T., Alberts B.,** Purification and characterization of the T4 bacteriophage uvsX protein, J. Biol. Chem. 261 (13) (1986) 6107–6118.

27. **Farb J. N., Morrical S. W.,** Role of allosteric switch residue histidine 195 in maintaining active-site asymmetry in presynaptic filaments of bacteriophage T4 UvsX recombinase, J. Mol. Biol. 385 (2) (2009) 393–404.

28. **Subramanyam S., Kinz-Thompson C. D., Gonzalez Jr R. L., Spies M.,** Observation and analysis of RAD51 nucleation dynamics at single-monomer resolution, Methods Enzymol. 600 (Jul 5) (2018) 201–232.

29. **Hegner M., Smith S. B., Bustamante C.,** Polymerization and mechanical properties of single RecA–DNA filaments, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 96 (18) (1999) 10109–10114.

30. **Yu X., Egelman E. H.,** DNA conformation induced by the bacteriophage T4 UvsX protein appears identical to the conformation induced by the *Escherichia coli* RecA protein, J. Mol. Biol. 232 (1) (1993) 1–4.

31. **Xu J., Zhao L., Xu Y., et al.,** Cryo-EM structures of human RAD51 recombinase filaments during catalysis of DNA-strand exchange, Nat. Struct. Mol. Biol. 24 (1) (2017) 40–46.

32. **Alekseev A., Pobegalov G., Morozova N., et al.,** A new insight into RecA filament regulation by RecX from the analysis of conformation-specific interactions, eLife. 11 (Jun 22) (2022) e78409.

33. **Prasad T. K., Yeykal C. C., Greene E. C.,** Visualizing the assembly of human Rad51 filaments on double-stranded DNA, J. Mol. Biol. 363 (3) (2006) 713–728.

34. **Kojima K., Juma K. M., Akagi S., et al.,** Solvent engineering studies on recombinase polymerase amplification, J. Biosci. Bioeng. 131 (2) (2021) 219–224.

35. **Short J. M., Liu Y., Chen S., et al.,** High-resolution structure of the presynaptic RAD51 filament on single-stranded DNA by electron cryo-microscopy, Nucleic Acids Res. 44 (19) (2016) 9017–9030.

36. **Mazin A. V., Zaitseva E., Sung P., Kowalczykowski S. C.,** Tailed duplex DNA is the preferred substrate for Rad51 protein-mediated homologous pairing, EMBO J. 19 (5) (2000) 1148–1156.

37. **Kim S. H., Ragunathan K., Park J., et al.,** Cooperative conformational transitions keep RecA filament active during ATPase cycle, J. Am. Chem. Soc. 136 (42) (2014) 14796–14800.

38. **Brister J. R., Nossal N. G.,** Multiple origins of replication contribute to a discontinuous pattern of DNA synthesis across the T4 genome during infection, J. Mol. Biol. 368 (2) (2007) 336–348.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОНЧАРОВ Иван Дмитриевич – *лаборант-исследователь лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
bing_fox.2001@inbox.ru

САДОВА Александра Игоревна – *лаборант-исследователь лаборатории молекулярной биологии нуклеотид-связывающих белков Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
aleksa.sadova@yandex.ru

НУЖИН Илья Мулложонович – *студент Института биомедицинских систем и биотехнологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ilia.nuzhin@yandex.ru

ТЕНИЦКАЯ Полина Алексеевна – *студентка Института биомедицинских систем и биотехнологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
89818372011@mail.ru

КУРДЮМОВА Инна Викторовна – *инженер Центра коллективного пользования «Аналитический центр нано- и биотехнологий» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
tyzik03@gmail.com

ГОРЬКОВСКАЯ Александра Андреевна – *лаборант-исследователь лаборатории молекулярной микробиологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexgorkovskaya@gmail.com

ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич – *кандидат физико-математических наук, директор Научно-исследовательского комплекса «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
khodorkovskii@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0562-0156

АЛЕКСЕЕВ Александр Андреевич – *кандидат физико-математических наук, инженер-исследователь лаборатории молекулярной биологии нуклеотид-связывающих белков Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alex35093@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4371-265X

THE AUTHORS

GONCHAROV Ivan D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
bing_fox.2001@inbox.ru

SADOVA Aleksandra I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
aleksa.sadova@yandex.ru

NUZHIN Ilia M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ilia.nuzhin@yandex.ru

TENITSKAYA Polina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
89818372011@mail.ru

KURDYUMOVA Inna V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
tyzik03@gmail.com

GORKOVSKAIA Aleksandra A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexgorkovskaya@gmail.com

KHODORKOVSKIY Mikhail A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
khodorkovskii@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0562-0156

ALEKSEEV Aleksandr A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alex35093@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4371-265X

Статья поступила в редакцию 10.02.2026. Одобрена после рецензирования 02.03.2026. Принята 02.03.2026.
Received 10.02.2026. Approved after reviewing 02.03.2026. Accepted 02.03.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Ядерная физика

Научная статья
УДК 539.12
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19213

АЗИМУТАЛЬНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ФАКТОРОВ ЯДЕРНОЙ МОДИФИКАЦИИ π^0-МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЯДЕР МЕДИ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ И ЯДЕР УРАНА ПРИ 193 ГэВ

Е. В. Банников ✉, Я. А. Бердников, Д. М. Ларионова, Д. О. Котов, К. Н. Басиров, И. И. Борисов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

✉ bannikov.ev.21@gmail.com

Аннотация. В работе представлены результаты расчета факторов ядерной модификации π^0-мезонов как функции от их поперечного импульса и азимутального угла в различных центральностях столкновений релятивистских ядер Cu + Au при энергии 200 ГэВ и U + U при 193 ГэВ. В результате анализа полученных данных было установлено, что характер азимутальной зависимости факторов ядерной модификации π^0-мезонов в обеих системах столкновений универсален в рассматриваемом диапазоне по поперечному импульсу и может быть объяснен зависимостью потерь энергии партонов от длины их пути в кварк-глюонной плазме (КГП). Азимутальные зависимости факторов ядерной модификации π^0-мезонов, рассчитанные в данной работе, целесообразно использовать для уточнения параметров теоретических моделей, описывающих потери энергии партонов в КГП, образующейся в столкновениях деформированных ядер или в асимметричных системах столкновений.

Ключевые слова: кварк-глюонная плазма, азимутальная анизотропия, фактор ядерной модификации, π^0-мезон

Для цитирования: Банников Е. В., Бердников Я. А., Ларионова Д. М., Котов Д. О., Басиров К. Н., Борисов И. И. Азимутальные зависимости факторов ядерной модификации π^0-мезонов в столкновениях релятивистских ядер меди и золота при энергии 200 ГэВ и ядер урана при 193 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 160–170. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19213

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

© Банников Е. В., Бердников Я. А., Ларионова Д. М., Котов Д. О., Басиров К. Н., Борисов И. И., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19213

AZIMUTHAL DEPENDENCES OF THE NUCLEAR MODIFICATION FACTORS OF π^0 MESONS IN Cu+Au COLLISIONS AT AN ENERGY OF 200 GeV AND U+U COLLISIONS AT 193 GeV

E. V. Bannikov ✉, Ya. A. Berdnikov, D. M. Larionova, D. O. Kotov, K. N. Basirov, I. I. Borisov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ bannikov.ev.21@gmail.com

Abstract. The paper presents the results of calculating the nuclear modification factors of π^0 mesons as a function of their transverse momentum and azimuthal angle at different collision centralities of Cu + Au at an energy of 200 GeV and U + U at 193 GeV. As a result of the analysis of the obtained data, it was established that the azimuthal dependence of the nuclear modification factors of π^0 mesons in both collision systems demonstrated universality in the considered range of transverse momentum and could be explained by the dependence of parton energy losses on the length of their path in the quark-gluon plasma (QGP). It is advisable to use these azimuthal dependences of nuclear modification factors for clarification of the parameters in theoretical models describing the energy losses of partons in the QGP formed in collisions of deformed nuclei or in asymmetric collision systems.

Keywords: quark-gluon plasma, azimuthal anisotropy, nuclear modification factors, π^0 meson

For citation: Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Larionova D. M., Kotov D. O., Basirov K. N., Borisov I. I., Azimuthal dependences of the nuclear modification factors of π^0 mesons in Cu+Au collisions at an energy of 200 GeV and U+U collisions at 193 GeV, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 160–170. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19213

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

В конце XX века в рамках квантовой хромодинамики было предсказано, что при экстремальных значениях плотностей энергии и/или температуры, материя может переходить в особое состояние, в котором ее мельчайшие составляющие (партоны: кварки и глюоны) асимптотически свободны [1]. Данное состояние материи получило название кварк-глюонной плазмы (КГП). Впоследствии в экспериментах на ускорителях (коллайдерные эксперименты) было показано, что формирование КГП возможно в столкновениях релятивистских тяжелых ионов [2].

Исследование свойств КГП – это актуальная задача физики высоких энергий, однако она сталкивается с затруднениями, поскольку время жизни КГП очень мало (~10 фм/c [3]) и, следовательно, получить сведения о ее свойствах через прямые эксперименты не представляется возможным. Экспериментальные подходы к изучению возможности формирования КГП в столкновениях релятивистских ионов, а также исследования ее свойств, основаны на измерении выходов рожденных частиц и их угловых характеристик.

Данная работа посвящена измерению угловых зависимостей подавления рождения адронов при высоких значениях поперечных импульсов ($p_T > 5$ ГэВ/c) [4].

© Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Larionova D. M., Kotov D. O., Basirov K. N., Borisov I. I., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Постановка задачи

Одним из главных коллайдеров, которые используют для столкновений тяжелых релятивистских ядер, является RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider). В эксперименте PHENIX [3], проводимом на этом коллайдере, было обнаружено, что рождение адронов с большими поперечными импульсами p_T в столкновениях тяжелых ядер (например, ядер золота (Au + Au)) подавлено, по сравнению с их рождением в столкновениях протонов ($p + p$) [5]. Рождение адронов с высокими значениями величины p_T происходит преимущественно путем фрагментации струй, формируемых высокоэнергетическими партонами [6]. Проходя через плотную материю КГП, которая образуется в столкновениях тяжелых ядер, высокоэнергетические партоны взаимодействуют с ней, теряя при этом свою энергию в основном за счет тормозного излучения глюонов [6]. Потери энергии родительских партонов приводят к ослабеванию адронных струй и, следовательно, к уменьшению поперечного импульса адронов этих струй (эффект «гашение струй»).

Таким образом, обнаруженное подавление рождения адронов с большими p_T было интерпретировано как свидетельство образования КГП в столкновениях тяжелых ядер [3].

Для количественной оценки степени подавления рождения адронов при больших p_T принято использовать факторы ядерной модификации адронов (RAB), величина которых служит индикатором того, насколько рождение адронов подавлено в столкновениях ядер, по сравнению с ($p + p$)-столкновениями:

$$R_{AB}\left(p_T\right) = \frac{1}{\left\langle N_{coll}\right\rangle}\frac{d^2N_{AB}/dp_Tdy}{d^2N_{pp}/dp_Tdy},$$

где $\left\langle N_{coll}\right\rangle$ – среднее число бинарных неупругих нуклон-нуклонных взаимодействий; d^2N_{AB} / dp_Tdy – инвариантный спектр (по величине p_T) рождения изучаемых частиц в столкновениях ядер ($A + B$); d^2N_{pp} / dp_Tdy – инвариантный спектр (также по величине p_T) рождения изучаемых частиц в ($p + p$)-столкновениях; y – быстрота.

Подавление рождения адронов в ядро-ядерных столкновениях в результате потери энергии высокоэнергетических партонов приводит к уменьшению значений $R_{AB}(p_T)$ ниже единицы при $p_T > 5$ ГэВ/c.

Ранее проведенные измерения $R_{AB}(p_T)$ адронов при $p_T > 5$ ГэВ/c в релятивистских столкновениях тяжелых ядер были описаны теоретическими моделями, учитывающими потери энергии партонов при прохождении через среду КГП [6 – 8]. Одним из ключевых параметров этих моделей служит транспортный коэффициент $\hat{q}$, характеризующий средний квадрат поперечного импульса, которым обменивается высокоэнергетический партон и среда КГП на единицу длины пути партона.

Основные проблемы теоретических моделей, применяемых для описания потерь энергии партонов в КГП, заключаются в различии значений транспортного коэффициента $\hat{q}$, извлекаемых из разных моделей, и в различии оценок зависимостей потерь энергии партонов от длины их пути в КГП [6]. Такие различия приводят к невозможности однозначного детального описания измеренных зависимостей $R_{AB}(p_T)$ адронов и их азимутальной анизотропии (ее экспериментальной оценкой выступает эллиптический поток v_2).

Существующие модели при точном описании зависимости $R_{AB}(p_T)$ адронов при $p_T > 5$ ГэВ/c систематически недооценивают величину v_2 [9]. Учет более сложной начальной геометрии столкновения ядер, приводящей к повышению величины v_2 в модельных расчетах, а также использование более сложных подходов (например, AdS/CFT [6]) для совместного описания $R_{AB}(p_T)$ и v_2 требуют дальнейшего отдельного изучения [9, 10]. Несмотря на последние успехи в моделировании взаимодействий адронных струй со средой КГП [11], данная проблема не теряет своей актуальности.

Таким образом, для более четкого понимания процессов потерь энергии партонов необходимо экспериментально измерять величины, которые характеризуются большей чувствительностью к длине пути партонов в среде КГП.

Одним из способов более детального экспериментального исследования зависимости потерь энергии партонов от длины их пути в КГП является варьирование систем столкновений и проведение измерений функции $R_{AB}(p_T)$ адронов при $p_T > 5$ ГэВ/c в различных классах событий по центральности. В качестве адронов-индикаторов удобно использовать

π^0-мезоны, поскольку их идентификацию можно осуществлять в широком диапазоне значений поперечного импульса с относительно небольшими неопределенностями измерений.

Такой подход позволил провести измерения зависимостей $R_{AB}(p_T)$ π^0-мезонов вплоть до значения p_T около 20 ГэВ/c в различных классах событий по центральности столкновений ядер Au + Au [12], Cu + Au [13] и U + U [14]. Одним из результатов данных измерений стало обнаружение независимости характера подавления π^0-мезонов при $p_T > 5$ ГэВ/c от начальной геометрии системы столкновений при близких значениях величины N_{part} – числа нуклонов-участников, которая характеризует центральность столкновения и объем образованной КГП [13, 14].

Область перекрытия тяжелых ядер в общем случае имеет форму эллипсоида и, следовательно, средняя длина пути, проходимого родительским партоном в КГП, зависит от азимутального угла его вылета относительно плоскости реакции $\Delta\varphi$ (плоскость, формируемая осью пучка и вектором прицельного параметра). Степень подавления рождения адронов зависит от средней длины пути родительских партонов в КГП, поэтому подавление рождения адронов будет азимутально анизотропно в одном классе событий по центральности. Азимутальная анизотропия в импульсном пространстве количественно характеризуется величиной эллиптического потока.

Измерение зависимостей $R_{AB}(p_T)$ для адронов не позволяет изучать связь между подавлением рождения адронов и длиной пути родительских партонов в КГП, так как функция $R_{AB}(p_T)$ определяется по величинам, интегрированным по углу $\Delta\varphi$. Однако при одновременном использовании измеренных значений факторов ядерной модификации и эллиптических потоков адронов в зависимости от значений их p_T можно оценивать азимутальные функции $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$, обладающие высокой чувствительностью к длине пути партонов в КГП.

Указанные зависимости R_{AB} от двух кинематических переменных p_T и $\Delta\varphi$ были ранее уже исследованы для π^0-мезонов в различных классах событий по центральности столкновений Au + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ [10, 12]. В этих работах было установлено, что степень подавления рождения π^0-мезонов при одинаковой величине N_{part} (или в одном классе событий по центральности) может различаться почти в 2 раза, в зависимости от их азимутального угла относительно плоскости реакции.

В настоящей работе рассматриваются две системы столкновений тяжелых ядер: меди и золота (Cu + Au) и урана (U + U). В отличие от столкновений симметричных ядер золота, рассматриваемые системы столкновений обладают дополнительной анизотропией области перекрытия ядер относительно плоскости реакции. Такая анизотропия в столкновениях Cu + Au возникает ввиду разницы в размерах ядер меди и золота, приводящей к полному перекрытию ядра меди в центральных столкновениях. Ядра урана продольно деформированы и, следовательно, при различной их ориентации в пространстве, формы области перекрытия ядер могут различаться даже в одном классе событий по центральности.

Итак, в настоящей работе поставлена актуальная задача по измерению азимутально зависимых значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в системах ядро-ядерных столкновений Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ.

Как предполагалось, полученные результаты должны нести информацию о влиянии начальной геометрии столкновений на зависимость потерь энергии партонов от длины их пути в среде КГП, а также могут накладывать дополнительные ограничения на значения параметров теоретических моделей, описывающих потери энергии партонов.

Методика исследования

Азимутальную анизотропию подавления рождения π^0-мезонов можно непосредственно вычислить, если использовать их факторы ядерной модификации [10]:

$$R_{AB}\left(p_T, \Delta\varphi_i\right) = R_{AB}\left(p_T\right)\frac{\Delta N\left(p_T, \Delta\varphi_i\right)}{\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\Delta N\left(p_T, \Delta\varphi_i\right)},$$

где $\Delta N(p_T, \Delta\varphi_i)$ – выход π^0-мезонов в i-м интервале по азимутальному углу $\Delta\varphi_i$ при поперечном импульсе p_T.

Суммирование в знаменателе формулы проводится по всем i-м угловым интервалам (их число равно k). При вычислениях значения $R_{AB}(p_T)$ для π^0-мезонов в столкновениях Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ были взяты из работ [13, 14]. Второй сомножитель в данном выражении характеризует азимутальную зависимость выходов π^0-мезонов: он есть отношение выходов в интервале $\Delta\varphi_i$ к средней величине выходов по всем интервалам при данной величине p_T. Однако измеренные значения $\Delta N(p_T, \Delta\varphi_i)$ π^0-мезонов в различных интервалах по азимутальному углу в столкновениях Cu + Au и U + U не были ранее опубликованы, поэтому возникла необходимость использовать другой способ оценки азимутальной анизотропии рождения частиц.

Инклюзивные (интегральные по азимутальному углу) зависимости факторов ядерной модификации π^0-мезонов $R_{AB}(p_T)$ в эксперименте измеряются как отношение (нормированное на величину $\langle N_{coll} \rangle$) инвариантных дифференциальных спектров π^0-мезонов в столкновениях ядер к аналогичным спектрам в протон-протонных столкновениях. Для определения азимутальной зависимости рождения изучаемых частиц $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ их полный инвариантный спектр вида $E \cdot d^3N/d^3p$ можно разложить в ряд Фурье по азимутальному углу относительно плоскости реакции [15]:

$$E\frac{d^3N}{d^3p} = \frac{1}{2\pi}\frac{d^2N}{p_T dp_T dy}\left\{1 + \sum_{n=1}^{\infty} 2v_n \cos\left[n\left(\varphi - \Psi^{RP}\right)\right]\right\},$$

где φ – азимутальный угол вылета частицы, y – быстрота, v_n – коэффициенты Фурье (анизотропные потоки), Ψ^{RP} – азимутальный угол плоскости реакции.

Таким образом, азимутальная анизотропия распределения частиц по поперечному импульсу характеризуется значениями анизотропных потоков, из которых доминирует эллиптический поток v_2 (второй коэффициент Фурье). Тогда аналитическое представление выражения для вычисления значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ в виде непрерывной функции (при $k \to \infty$, $\Delta N(p_T, \Delta\varphi_i) \to dN/d\Delta\varphi$) будет иметь вид:

$$R_{AB}\left(p_T, \Delta\varphi\right) = R_{AB}\left(p_T\right)\left[1 + 2v_2\left(p_T\right)\cos\left(2\Delta\varphi\right)\right],$$

где угловая зависимость выходов π^0-мезонов параметризируется с помощью значений $v_2(p_T)$, а угол $\Delta\varphi$ может принимать произвольные значения в диапазоне $0 < \Delta\varphi < \pi/2$.

Значения $v_2(p_T)$ были нами взяты из статьи [16], при этом все необходимые величины для вычисления значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ оказываются доступными.

Значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов были вычислены для четырех (либо трех) интервалов по p_T в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c и в четырех (либо трех) классах событий по центральности столкновений ядер Cu + Au (либо ядер U + U). Выбор интервалов по p_T и классов событий по центральности был продиктован результатами измерений значений $R_{AB}(p_T)$ и $v_2(p_T)$, полученными ранее. Азимутальная зависимость значений факторов ядерной модификации π^0-мезонов была исследована в шести интервалах по $\Delta\varphi$ в диапазоне $0 < \Delta\varphi < \pi/2$.

Результаты измерений

На рис. 1 представлены рассчитанные значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в четырех интервалах по поперечному импульсу в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c и в четырех классах событий по центральности столкновений Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ. На рис. 1, *d* рассчитанные значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ приведены только для трех центральностей столкновений Cu + Au, что связано с отсутствием значений $v_2(p_T)$ для π^0-мезонов, измеренных в диапазоне $8 < p_T < 10$ ГэВ/c в центральности 40 – 60%.

Закрашенными маркерами на рис. 1 изображены значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$, а полыми маркерами – значения $R_{AB}(p_T)$. Неопределенности значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ были получены с помощью распространения неопределенностей от значений $v_2(p_T)$. Систематические неопределенности значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ представлены на рис. 1 в виде закрашенной полосы переменной ширины, где ширина полосы – величина систематической неопределенности. Систематические неопределенности от инклюзивных значений $R_{AB}(p_T)$ приведены на рис. 1 в виде закрашенных прямоугольников при $\Delta\varphi = \pi/4$ и распространяются на все значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ соответствующего ряда.

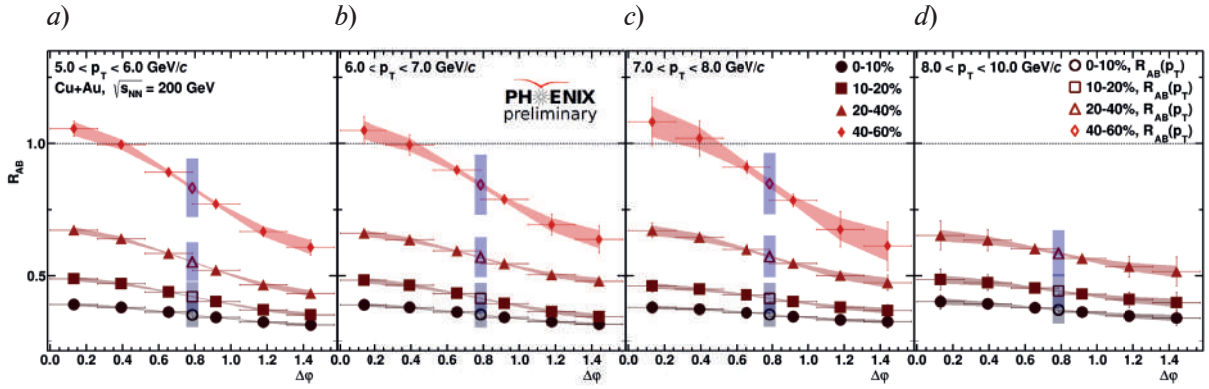


Рис. 1. Зависимости $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов, рассчитанные для четырех интервалов значений p_T (a – d) в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c и в четырех классах событий по центральности столкновений ядер Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ.

Классы по центральности, %: 0 – 10, 10 – 20, 20 – 40 и 40 – 60. Инклюзивные значения $R_{AB}(p_T)$ представлены точками при $\Delta\varphi = \pi/4$ (0,785 рад)

Азимутальная анизотропия факторов ядерной модификации π^0-мезонов возрастает с увеличением центральности столкновений, приводя к различию примерно в 1,7 раз между значениями $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ в плоскости реакции ($0 < \Delta\varphi < \pi/12$) и перпендикулярно ей ($5\pi/12 < \Delta\varphi < \pi/2$) в периферических столкновениях Cu + Au (40 – 60%). Наблюдаемая азимутальная анизотропия значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ свидетельствует о различной степени подавления рождения π^0-мезонов в зависимости от угла их вылета. Высокоэнергетический родительский партон, вылетевший в направлении плоскости реакции, пройдет в среднем меньший путь в КГП, чем путь, который бы он прошел, если бы вылетел в перпендикулярном направлении. Меньшая длина пути партона в КГП приводит в среднем к менее интенсивному взаимодействию партона с сильновзаимодействующей средой и, значит, к меньшим потерям энергии этого партона. Как следствие, гашение адронной струи, формируемой высокоэнергетическим партоном, будет слабее, а поперечный импульс π^0-мезонов, рожденных в результате фрагментации этого жесткого партона, будет больше.

Таким образом, наблюдаемую азимутальную зависимость подавления рождения π^0-мезонов можно объяснить зависимостью потерь энергии родительских партонов от длины их пути в КГП перед фрагментацией.

Из рис. 1 следует, что инклюзивные и азимутально зависимые значения факторов ядерной модификации π^0-мезонов снижаются при переходе от периферических столкновений (40 – 60%) к центральным (0 – 10%). Данное наблюдение свидетельствует о возрастании степени подавления π^0-мезонов с увеличением размера КГП, образующейся в столкновениях Cu + Au, что было ранее отмечено в работе [13].

Обнаруженные особенности поведения значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в столкновениях Cu + Au демонстрируют универсальность во всех четырех интервалах по поперечному импульсу в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c. Это может свидетельствовать о сходстве механизма потерь энергии партонов в КГП во всем рассматриваемом диапазоне по поперечному импульсу.

На рис. 2 приведены вычисленные значения $R_{AA}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в трех интервалах по поперечному импульсу в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c и в трех классах событий по центральности столкновений U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ. На рис. 2, c рассчитанные значения $R_{AA}(p_T, \Delta\varphi)$ приведены только для двух центральностей столкновений U + U, что связано с отсутствием значений $v_2(p_T)$ для π^0-мезонов, измеренных в диапазоне $8 < p_T < 10$ ГэВ/c в центральности 40 – 60%. Обозначения факторов ядерной модификации для разных случаев столкновения ядер (Cu + Au и U + U) различаются, потому что в первом случае ядра разные ($A + B$, R_{AB}), а во втором – одинаковые ($A + A$, R_{AA}). Неопределенности значений $R_{AA}(p_T, \Delta\varphi)$ и $R_{AA}(p_T)$ на рис. 2 представлены таким же образом, как на рис. 1.

Наблюдения, сделанные при анализе значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в столкновениях Cu + Au, справедливы для аналогичных значений в (U + U)-столкновениях. Стоит

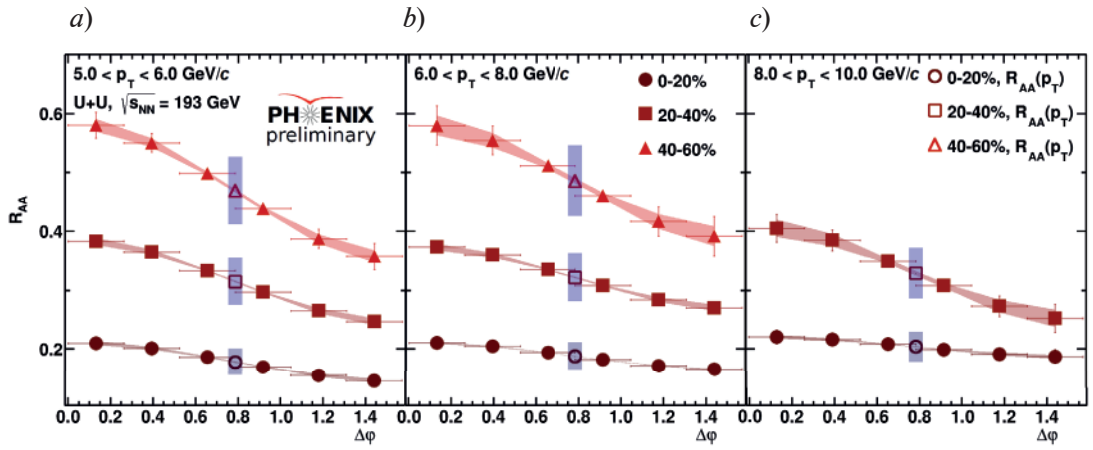


Рис. 2. Зависимости $R_{AA}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов, аналогичные представленным на рис. 1, но относящиеся к столкновениям ядер U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ и рассчитанные для трех интервалов по p_T ($a - c$) (в том же диапазоне их значений) и в трех классах событий по центральности столкновений, % : 0 – 20, 20 – 40 и 40 – 60.
Инклюзивные значения $R_{AA}(p_T)$ также представлены точками при $\Delta\varphi = \pi/4$

отметить, что отношение значений $R_{AA}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в плоскости реакции и в направлении, перпендикулярном этой плоскости, достигает ~1,5 в системе столкновений U + U, что составляет меньшее значение, чем в столкновениях Cu + Au. Скорее всего, эта разница связана с непотоковыми эффектами (например, корреляции струй [17, 18]). Такое влияние на измеренные значения $v_2(p_T)$ для π^0-мезонов в периферических столкновениях Cu + Au [16] может приводить к завышению значений эллиптических потоков.

Заключение

В данной работе рассчитаны азимутально зависимые факторы ядерной модификации π^0-мезонов в различных интервалах по поперечному импульсу в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c для разных классов событий по центральности столкновений Cu + Au при $\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ и U + U при $\sqrt{s_{NN}} = 193$ ГэВ.

Установлено, что азимутально зависимые значения факторов ядерной модификации π^0-мезонов в столкновениях Cu + Au оказываются систематически выше аналогичных значений в системе столкновений U + U, что объясняется формированием больших размеров КГП в столкновениях ядер урана. Особенности поведения значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в диапазоне $5 < p_T < 10$ ГэВ/c в рассматриваемых системах столкновений демонстрируют универсальность: при переходе от центральных столкновений к периферическим азимутальная анизотропия факторов ядерной модификации π^0-мезонов растет, а степень подавления рождения адронов снижается. Наблюдаемое поведение рассчитанных значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в столкновениях Cu + Au и U + U можно описать зависимостью потерь энергии партонов от длины их пути в КГП.

Обнаружено, что отношение значений $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов в плоскости реакции и в направлении, перпендикулярном этой плоскости, достигает примерно 1,5 в системе столкновений U + U и 1,7 в столкновениях Cu + Au. Одной из возможных причин указанного различия могут выступать непотоковые эффекты, влияние которых при измерении значений $v_2(p_T)$ для π^0-мезонов в периферических столкновениях Cu + Au [16] приводит к завышению значений эллиптических потоков.

Рассчитанные значения $R_{AB}(p_T, \Delta\varphi)$ для π^0-мезонов можно использовать для уточнения параметров теоретических моделей, описывающих потери энергии партонов в кварк-глюонной плазме, образующейся в столкновениях деформированных ядер или в асимметричных системах столкновений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Shuryak E.** Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter // Physics Reports. 1980. Vol. 61. No. 2. Pp. 71–158.

2. **Matsui T., Satz H.** J/ψ suppression by quark-gluon plasma formation // Physics Letters B. 1986. Vol.178. No. 4. Pp. 416 –422.

3. **Adcox K., Adler S., Afanasiev S., et al. (**PHENIX Collaboration). Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration // Nuclear Physics A. 2005. Vol. 757. No. 1–2. Pp. 184–283.

4. **Cao S., Wang X.-N.** Jet quenching and medium response in high-energy heavy-ion collisions: A review // Reports on Progress in Physics. 2021. Vol. 84. No. 2. P. 024301.

5. **Adcox K., Adler S., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration). Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 130$ GeV // Physical Review Letters. 2001. Vol. 88. No. 2. P. 022301.

6. **d'Enterria D.** Jet quenching (Section 6.4) // Landolt – Börnstein – Group I: "Elementary Particles, Nuclei and Atoms". 2010. Vol. 23. Pp. 471–520.

7. **Cunqueiro L., Sickles A.** Studying the QGP with jets at the LHC and RHIC // Progress in Particle and Nuclear Physics. 2022. Vol. 124. May. P. 103940.

8. **Harris J. W., Müller B.** "QGP signatures" revisited // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. No. 3. P. 247.

9. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Azimuthal anisotropy of π^0 production in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV: Path-length dependence of jet quenching and the role of initial geometry // Physical Review Letters. 2010. Vol. 105. No. 2. P. 142301.

10. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Neutral pion production with respect to centrality and reaction plane in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // Physical Review C. 2013. Vol. 87. No. 3. P. 034911.

11. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration). The ALICE experiment: A journey through QCD // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. 14 August. P. 813.

12. **Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N., et al. (**PHENIX Collaboration). High-p_T π^0 production with respect to the reaction plane in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // Physical Review C. 2009. Vol. 80. No. 5. P. 054907.

13. **Aidala C., Ajitanand N., Akiba Y., et al.** (PHENIX Collaboration). Production of π^0 and η mesons in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV // Physical Review C. 2018. Vol. 98. No. 5. P. 054903.

14. **Acharya U., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration). Production of π^0 and η mesons in U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 192$ GeV // Physical Review C. 2020. Vol. 102. No. 6. P. 064905.

15. **Voloshin S., Zhang Y.** Flow study in relativistic nuclear collisions by Fourier expansion of azimuthal particle distributions // Zeitschrift für Physik C. 1996. Vol. 70. No. 4. Pp. 665–671.

16. **Банников Е. В., Бердников Я. А., Ларионова Д. М., Котов Д. О.** Сравнение эллиптических потоков π^0-мезонов в столкновениях Cu+Au при энергии 200 ГэВ и U + U при 193 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 1. С. 144–157.

17. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration). Azimuthal anisotropy of π^0 and η mesons in Au+Au collisions at 200 GeV // Physical Review C. 2013. Vol. 88. No. 6. P. 064910.

18. **Jia J.** Ways to constrain the away-side jet in Au+Au collisions in PHENIX // Nuclear Physics A. 2007. Vol. 783. No. 1–4. Pp. 501–506.

REFERENCES

1. **Shuryak E.,** Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter, Phys. Rept. 61 (2) (1980) 71–158.

2. **Matsui T., Satz H.,** J/ψ suppression by quark-gluon plasma formation, Phys. Lett. B. 178 (4) (1986) 416–422.

3. **Adcox K., Adler S., Afanasiev S., et al.** (PHENIX Collaboration), Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration, Nucl. Phys. A. 757 (1–2) (2005) 184–283.

4. **Cao S., Wang X.-N.,** Jet quenching and medium response in high-energy heavy-ion collisions: a review, Rept. Prog. Phys. 84 (2) (2021) 024301.

5. **Adcox K., Adler S., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration), Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 130$ GeV, Phys. Rev. Lett. 88 (2) (2001) 022301.

6. **d'Enterria D.,** Jet quenching, Section 6.4. in book: Landolt – Börnstein – Group I: "Elementary Particles, Nuclei and Atoms", Vol. 23 (2010) 471–520.

7. **Cunqueiro L., Sickles A.,** Studying the QGP with jets at the LHC and RHIC, Prog. Part. Nucl. Phys. 124 (May) (2022) 103940.

8. **Harris J. W., Müller B.** "QGP signatures" revisited, Eur. Phys. J. C. 84 (3) (2024) 247.

9. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Azimuthal anisotropy of π^0 production in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV: Path-length dependence of jet quenching and the role of initial geometry, Phys. Rev. Lett. 105 (2) (2010) 142301.

10. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Neutral pion production with respect to centrality and reaction plane in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, Phys. Rev. C. 87 (3) (2013) 034911.

11. **Acharya S., Adamová D., Adler A., et al.** (ALICE Collaboration), The ALICE experiment: A journey through QCD, Eur. Phys. J. C. 84 (14 Aug) (2024) 813.

12. **Afanasiev S., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration), High-p_T π^0 production with respect to the reaction plane in Au+Au collisions at 200 GeV, Phys. Rev. C. 80 (5) (2009) 054907.

13. **Aidala C., Ajitanand N., Akiba Y., et al.** (PHENIX Collaboration), Production of π^0 and η mesons in Cu+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, Phys. Rev. C. 98 (5) (2018) 054903.

14. **Acharya U., Aidala C., Ajitanand N., et al.** (PHENIX Collaboration), Production of π^0 and η mesons in U+U collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 192$ GeV, Phys. Rev. C. 102 (6) (2020) 064905.

15. **Voloshin S., Zhang Y.,** Flow study in relativistic nuclear collisions by Fourier expansion of azimuthal particle distributions, Z. Phys C. 70 (4) (1996) 665–671.

16. **Bannikov E. V., Berdnikov Ya. A., Larionova D. M., Kotov D. O.,** Comparison of π^0 meson elliptic flow in Cu+Au collisions at the energy of 200 GeV and U+U collisions at 193 GeV, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (1) (2026) 144–157.

17. **Adare A., Afanasiev S., Aidala C., et al.** (PHENIX Collaboration), Azimuthal anisotropy of π^0 and η mesons in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV, Phys. Rev. C. 88 (6) (2013) 064910.

18. **Jia, J.,** Ways to constrain the away-side jet in Au+Au collisions in PHENIX, Nucl. Phys. A. 783 (1–4) (2007) 501–506.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАННИКОВ Егор Викторович – *аспирант Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

bannikov.ev.21@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9820-062X

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

berdnikov@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-0309-5917

ЛАРИОНОВА Дарья Максимовна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dashalario@gmail.com
ORCID: 0009-0007-7019-5586

КОТОВ Дмитрий Олегович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

БАСИРОВ Кирилл Наилевич – *инженер Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kirill.basirov@mail.ru

БОРИСОВ Иван Ильич – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
borisov.ii@edu.spbstu.ru

THE AUTHORS

BANNIKOV Egor V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
bannikov.ev.21@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9820-062X

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

LARIONOVA Daria M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dashalario@gmail.com
ORCID: 0009-0007-7019-5586

KOTOV Dmirty O.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454

BASIROV Kirill N.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kirill.basirov@mail.ru

BORISOV Ivan I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
borisov.ii@edu.spbstu.ru

Статья поступила в редакцию 11.01.2026. Одобрена после рецензирования 19.01.2026. Принята 19.01.2026.
Received 11.01.2026. Approved after reviewing 19.01.2026. Accepted 19.01.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научная статья
УДК 532.517
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19214

ДВОЙНАЯ ПРОДОЛЬНАЯ СПИНОВАЯ АСИММЕТРИЯ (J/ψ)-МЕЗОНОВ, РОЖДЕННЫХ В ПРОДОЛЬНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ПРОТОН-ПРОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

Д. В. Круашвили ✉, **Я. А. Бердников**
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

Аннотация. В работе предложено расширение программного пакета Pythia8, благодаря которому появилась возможность рассчитывать столкновения продольно-поляризованных протонов с рождением (J/ψ)-мезонов. Получены спектры по поперечному импульсу и двойная продольная спиновая асимметрия (J/ψ)-мезонов при энергии 510 ГэВ. Проведено сравнение расчетных результатов с экспериментальными данными и установлено их вполне удовлетворительное согласие. Этот успех послужил основанием для предсказания результатов эксперимента SPD на коллайдере NICA. Представлены соответствующие вычисления спектра по поперечному импульсу и двойная продольная спиновая асимметрия (J/ψ)-мезона при энергии 27 ГэВ. Все выводы сделаны в рамках коллинеарной партонной модели.

Ключевые слова: Pythia8, двойная продольная спиновая асимметрия, функция распределения партонов, партонное сечение рассеяния

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Круашвили Д. В., Бердников Я. А. Двойная продольная спиновая асимметрия (J/ψ)-мезонов, рожденных в продольно-поляризованных протон-протонных столкновениях // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 171–177. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19214

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19214

DOUBLE LONGITUDINAL SPIN ASYMMETRY OF J/ψ MESONS PRODUCED IN PROTON-PROTON COLLISIONS WITH LONGITUDINAL POLARIZATION

D. V. Kruashvili ✉, **Ya. A. Berdnikov**
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

Abstract. The paper puts forward an extension of the Pythia8 software package, which makes it possible to calculate collisions of longitudinally polarized protons with the production of J/ψ mesons. The transverse momentum spectra of J/ψ mesons and the double longitudinal spin asymmetry of them at an energy of 510 GeV have been obtained. The calculated results were compared with experimental data, and a satisfactory agreement between them was established. This success served as the basis for predicting the results of the SPD experiment at the NICA collider. The corresponding calculations of the transverse momentum spectrum and the double longitudinal spin asymmetry of the J/ψ mesons at an energy of 27 GeV were presented. All conclusions were based on the collinear parton model.

© Круашвили Д. В., Бердников Я. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Keywords: Pythia8, double longitudinal spin asymmetry, parton distribution function, parton cross section

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A., Double longitudinal spin asymmetry of J/ψ mesons produced in proton-proton collisions with longitudinal polarization, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 171–177. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19214

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Изучение рождения (J/ψ)-мезонов в протон-протонных (pp) столкновениях открывает доступ к функциям распределения глюонов в протоне, которые в свою очередь позволяют оценить вклад глюонов в спин протона [1].

Спин протона можно представить по формуле Манохараж – Джаффе [2]:

$$S_p = 1/2 = (1/2)\,\Delta\Sigma + \Delta G + L_q + L_g, \tag{1}$$

где $(1/2)\Delta\Sigma$, ΔG – вклады от спиральностей кварков [3] и глюонов, соответственно; L_q, L_g – вклады от орбитальных моментов кварков q и глюонов g, соответственно.

Эти вклады выражаются следующим образом [4]:

$$\Delta\Sigma = \sum_q \int \Delta f_q(x,Q^2)dx,\ \Delta G = \int \Delta g(x,Q^2)dx, \tag{2}$$

где

$$\Delta f_q\left(x,Q^2\right) = f_q^+\left(x,Q^2\right) - f_q^-\left(x,Q^2\right),\ \Delta g\left(x,Q^2\right) = g^+\left(x,Q^2\right) - g^-\left(x,Q^2\right) \tag{3}$$

(см. работу [5]).

В выражения (3) входят следующие слагаемые: $f_q^+\left(x,Q^2\right), f_q^-\left(x,Q^2\right)$ – функции распределения кварка типа q в протонах с положительной и отрицательной спиральностями, с долей импульса протона x при масштабе Q^2; $g^+(x, Q^2)$, $g^-(x, Q^2)$ – функции распределения глюона g в протонах с положительной и отрицательной спиральностями с долей импульса протона x при масштабе Q^2.

В литературе функции $\Delta f_q(x, Q^2)$ и $\Delta g(x, Q^2)$ принято называть «поляризованные функции распределения кварков и глюонов в протоне» (соответственно) [5]. Следует отметить, что согласно работе [3], функции $\Delta g(x, Q^2)$ изучены не так хорошо, как $\Delta f_q(x, Q^2)$.

Именно указанная недостаточная изученность этих функций, а также участие глюонов во взаимодействиях [5], приводящих к образованию (J/ψ)-мезона в протон-протонных столкновениях, и послужили мотивацией к проведению данного исследования.

Цель настоящей работы – выяснение условий и особенностей рождения (J/ψ)-мезонов в столкновениях поляризованных и неполяризованных протонов.

Методика исследования

Двойная продольная спиновая асимметрия (Double Longitudinal Spin Asymmetry (DLSA)) [4] в столкновениях продольно-поляризованных протонов определяется следующей формулой:

$$A_{LL} = \frac{d\sigma^{(++)} - d\sigma^{(+-)}}{d\sigma^{(++)} + d\sigma^{(++)}} = \frac{d\Delta\sigma}{d\sigma}, \tag{4}$$

где $d\sigma^{(++)}$, $d\sigma^{(+-)}$ – сечения процессов столкновения протонов с одинаковыми (++) и разными (+–) спиральностями; $d\Delta\sigma^{(++)}$, $d\Delta\sigma^{(+-)}$ – сечения рождения (J/ψ)-мезонов в столкновениях поляризованных протонов и неполяризованных (короче: поляризованное и неполяризованное сечения, соответственно) [4].

© Kruashvili D. V., Berdnikov Ya. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Согласное теореме о факторизации [6], неполяризованное сечение

$$d\sigma(pp\rightarrow J/\psi + X)$$

рождения адрона J/ψ в полуинклюзивном протон-протонном столкновении неполяризованных протонов можно записать в виде свертки неполяризованных партонных функций распределения $f_a(x_a, Q^2)$ и $f_b(x_b, Q^2)$ [7, 8]:

$$d\sigma\left(pp \rightarrow J/\psi + X\right) = \sum_{a,b,d} \int dx_a f_a\left(x_a, Q^2\right) \int dx_b \cdot f_b\left(x_b, Q^2\right) \cdot d\hat{\sigma}^{(ab\rightarrow(c\bar{c})d)} \tag{5}$$

Поляризованное сечение

$$d\Delta\sigma(pp\rightarrow J/\psi + X)$$

рождения адрона J/ψ в полуинклюзивном протон-протонном столкновении продольно-поляризованных протонов записывается в виде свертки продольно-поляризованных партонных функций распределения $\Delta f_a(x_a, Q^2)$ и $\Delta f_b(x_b, Q^2)$ [7 – 9]:

$$d\Delta\sigma\left(pp \rightarrow J/\psi + X\right) = \sum_{a,b,d} \int dx_a \Delta f_a\left(x_a, Q^2\right) \int dx_b \cdot \Delta f_b\left(x_b, Q^2\right) \cdot d\Delta\hat{\sigma}^{(ab\rightarrow(c\bar{c})d)}. \tag{6}$$

В выражениях (5) и (6) a, b – партоны (кварки, глюоны) сталкивающихся протонов; запись $(c\bar{c})d$ состоит из обозначения кварк-антикварковой пары очарованных кварков $(c\bar{c})$ и партона d, которые рождаются в процессе $ab \rightarrow (c\bar{c})d$; x_a, x_b – доли импульса первого протона, которую несет партон a, и второго протона, которую несет партон b.

В тех же выражениях (5) и (6) $d\hat{\sigma}^{(ab\rightarrow(c\bar{c})d)}$, $d\Delta\hat{\sigma}^{(ab\rightarrow(c\bar{c})d)}$ – сечения взаимодействия $ab\rightarrow (c\bar{c})d$ неполяризованных партонов и поляризованных, соответственно.

В рамках цвет-октетной модели выражения для сечения рождения (J/ψ)-мезона, принимают следующий вид [10]:

$$d\sigma\left(pp \rightarrow J/\psi + X\right) = \sum_{a,b,d} \int dx_a f_a\left(x_a, Q^2\right) \int dx_b \cdot f_b\left(x_b, Q^2\right) \sum_n \left\langle \mathcal{O}^{J/\psi}\left[n\right]\right\rangle \times$$
$$\times d\hat{\sigma}\left(ab \rightarrow c\bar{c}\left[n\right]d\right), \tag{7}$$

$$d\Delta\sigma\left(pp \rightarrow J/\psi + X\right) = \sum_{a,b,d} \int dx_a \Delta f_a\left(x_a, Q^2\right) \int dx_b \cdot \Delta f_b\left(x_b, Q^2\right) \sum_n \left\langle \mathcal{O}^{J/\psi}\left[n\right]\right\rangle \times$$
$$\times d\Delta\hat{\sigma}\left(ab \rightarrow c\bar{c}\left[n\right]d\right). \tag{8}$$

В выражениях (7) и (8) партонное сечение представлено как сумма всех $[n]$ возможных состояний пары $c\bar{c}$ очарованных кварка c и антикварка $\bar{c}$ [10]:

$$^3S_1^{(1)},\ ^3S_1^{(8)},\ ^1S_0^{(8)},\ ^3P_0^{(8)},\ ^3P_1^{(8)},\ ^3P_2^{(8)}. \tag{9}$$

Коэффициенты $\left\langle \mathcal{O}^{J/\psi}[n]\right\rangle$ отвечают за вероятность образования (J/ψ)-мезона из определенного состояния [10] (n – номер возможного кварк-антикваркового состояния пары $c\bar{c}$ очарованных кварков).

В настоящей работе учтены следующие процессы взаимодействия глюонов g, кварков q и антикварков $\bar{q}$, в которых могут рождаться (J/ψ)-мезоны:

$$gg \rightarrow (c\bar{c}) + g \rightarrow J/\psi + g,$$
$$qg \rightarrow (c\bar{c}) + q \rightarrow J/\psi + q,$$
$$q\bar{q} \rightarrow (c\bar{c}) + g \rightarrow J/\psi + g.$$

В исходном виде программного пакета Pythia8 [11] при генерации протон-протонных столкновений происходит свертка неполяризованных функций распределения и используются неполяризованные партонные сечения, что позволяет найти неполяризованное сечение (6). Для нахождения поляризованного сечения (7), которое необходимо для вычисления DLSA, необходимо заменить неполяризованные функции распределения и

неполяризованные партонные сечения поляризованными, что и было сделано в настоящей работе. Чтобы сгенерировать образование (J/ψ)-мезона, был изменен файл SigmaOnia.cc в Pythia8. В этом файле вместо исходных партонных сечений были использованы поляризованные партонные сечения [10].

Замена функций распределения происходит непосредственно в коде с помощью команды

pythia.readString("PDF: pSet = LHAPDF6:"+ name_pdf_set).

Исходные, неполяризованные, функции распределения были заменены поляризованными [12].

Проведенная модификация Pythia8 дала возможность рассчитать с помощью Pythia8 поляризованное сечение $d\Delta\sigma$ для (J/ψ)-мезона. Это, в свою очередь, дало возможность вычислить DLSA.

Результаты расчетов

С целью валидации алгоритма, предложенного в данной работе, и модификации программы расчета двойной продольной спиновой асимметрии (DLSA) (J/ψ)-мезонов, рожденных в продольно-поляризованных протон-протонных столкновениях, были получены при значении энергии 510 ГэВ следующие расчетные результаты:

спектры по поперечному импульсу (J/ψ)-мезонов, рожденных в столкновениях неполяризованных протонов (рис. 1);

DLSA для (J/ψ)-мезона (рис. 2).

Выбор указанного значения энергии был продиктован результатами экспериментов, выполненных коллаборациями STAR и PHENIX Брукхейвенской национальной лаборатории (США) [3, 13]. Данные по спектрам, показанные на рис. 1, умножены на вероятность (BR) распада (J/ψ)-мезона на мюон и антимюон). Эта вероятность (*англ.* Branching Ratio (BR)) – относительная доля определенного канала распада от общего числа распадов данной частицы. Она показывает, как часто мезон распадается именно по этому пути, и равна отношению парциальной ширины распада Γ_i к полной ширине распада Γ_{tot}: Γ_i/Γ_{tot}.

Анализ результатов, представленных на рис. 1 и 2, привел нас к следующим заключениям:

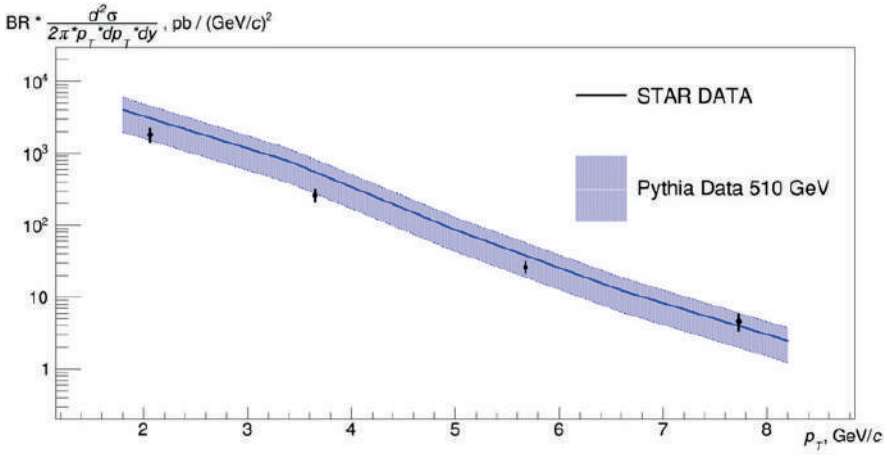


Рис. 1. Инвариантный спектр (J/ψ)-мезонов, рожденных в столкновениях неполяризованных протонов при энергии 510 ГэВ, по поперечному импульсу p_T (данные умножены на вероятность (BR) распада (J/ψ)-мезона на мюон и анти-мюон).

Результат нашего моделирования представлен синей сплошной кривой (ее размытость отражает диапазон ошибок расчета, обусловленный погрешностью партонных функций распределения).

Результаты эксперимента коллаборации STAR [13] представлены точками для сравнения

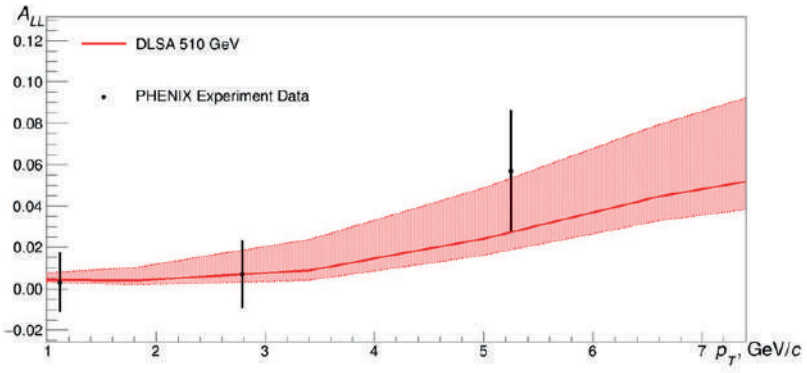


Рис. 2. Зависимость двойной продольной спиновой асимметрии (DLSA) (J/ψ)-мезонов, рожденных в продольно-поляризованных протон-протонных столкновениях при энергии 510 ГэВ, от поперечного импульса.

Результат нашего моделирования представлен красной сплошной кривой (ее размытость отражает диапазон ошибок расчета, обусловленных неточностями функций распределения (J/ψ)-мезонов [12]. Результаты эксперимента коллаборации PHENIX [3] представлены точками (отрезки – погрешности) для сравнения

данные моделирования, полученные нами с использованием модифицированной программы Pythia8, хорошо согласуются (в пределах ошибок) с экспериментальным спектром по поперечному импульсу p_T (J/ψ)-мезонов, рожденных в столкновениях неполяризованных протонов при энергии 510 ГэВ (см. рис. 1);

результаты наших расчетов с использованием указанной выше программы также хорошо (в пределах ошибок) согласуются с экспериментальной зависимостью DLSA (J/ψ)-мезонов, рожденных в столкновениях продольно-поляризованных протонов при энергии 510 ГэВ, от поперечного импульса.

Полученное нами, вполне удовлетворительное, согласие результатов расчетов с экспериментальными данными (см. рис. 1 и 2) позволяет предсказать поведение зависимостей DLSA (J/ψ)-мезонов во взаимодействиях поляризованных протонов. Результаты таких расчетов получены в данной работе (рис. 3) при энергии 27 ГэВ, характерной для планируемого эксперимента SPD коллайдера NICA.

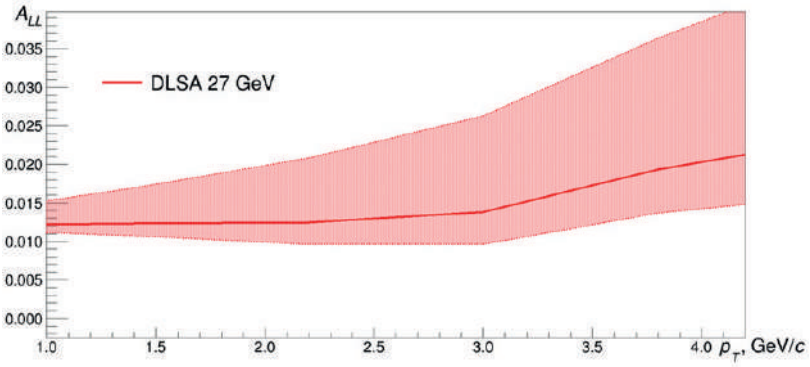


Рис. 3. Прогнозирующая зависимость DLSA (J/ψ)-мезонов, рожденных в продольно-поляризованных протон-протонных столкновениях, от поперечного импульса p_T. Расчетные данные аналогичны приведенным на рис. 2, но относятся к энергии 27 ГэВ (вместо 510 ГэВ на рис. 2)

Заключение

В работе была рассмотрена возможность вычисления двойной продольной спиновой асимметрии (DLSA) с помощью программного пакета Pythia8, путем модифицирования части исходного кода Pythia8. Такое новшество позволяет рассчитывать DLSA для (J/ψ)-мезона в протон-протонных столкновениях при различных значениях энергии. Приведено сравнение полученных расчетных данных с экспериментальными

результатами и показано вполне удовлетворительное их согласие при энергии 510 ГэВ. Такое соответствие послужило основанием для выполнения расчетного прогнозирования для планируемого эксперимента NICA (см. рис. 3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ji X., Xiong X., Yuan F.** Proton spin structure from measurable parton distributions // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. No. 15. P. 152005.

2. **Jaffe R. L., Manohar A.** The g_1 problem: Deep inelastic electron scattering and the spin of the proton // Nuclear Physics. B. 1990. Vol. 337. No. 3. 509–546.

3. **Adare A., Aidata C., Ajitanand N. N., et al.** Measurements of double-helicity asymmetries in inclusive J/ψ production in longitudinally polarized $p + p$ collisions at $s = 510$ GeV // Physical Review D. 2016. Vol. 94. No. 11. P. 112008.

4. **Салеев В. А., Шипилова А. В.** Двойные продольные спиновые асимметрии в прямом рождении фотонов на коллайдере NICA // Письма в журнал «Физика элементарных частиц и атомного ядра». 2023. Т. 20. № 3(248). С. 417–421.

5. **Stratmann M.** Polarized parton densities and processes // New Trends in HERA Physics 1999: Proceedings of the Ringberg Workshop Held at Tegernsee, Germany, 30 May – 4 June 1999, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2001. Pp. 83–97.

6. **Collins J. C., Soper D. E., Sterman G.** Factorization of hard processes in QCD // Advanced Series on Directions in High Energy Physics. 1988. Vol. 5. Pp. 1–91.

7. **Sivers D. W.** Single spin production asymmetries from the hard scattering of pointlike constituents // Physical Review D. 1990. Vol. 41. No. 1. Pp. 83–90.

8. **Collins J. C.** Fragmentation of transversely polarized quarks probed in transverse momentum distributions // Nuclear Physics B. 1993. Vol. 396. No. 1. Pp. 161–182.

9. **Bomhof C. J., Mulders P. J.** Gluonic pole cross sections and single spin asymmetries in hadron-hadron scattering // Journal of High Energy Physics. 2007. Vol. 2007. No. 2. P. 029.

10. **Klasen M., Kniehl B. A., Mihaila L. N., Steinhauser M.** Charmonium production in polarized high-energy collisions // Physical Review D. 2003. Vol. 68. No. 3. P. 034017.

11. **Ciesielski R., Goulianos K.** MBR Monte Carlo simulation in PYTHIA8 // arXiv preprint arXiv:1205.1446. 2012.

12. **Gehrmann T., Stirling W. J.** Spin-dependent parton distributions from polarized structure function data // Zeitschrift für Physik C.: Particles and Fields. 1995. Vol. 65. No. 3. Pp. 461–470.

13. **Adam J., Adamczyk L., Adams J. R., et al.** Measurements of the transverse-momentum-dependent cross sections of J/ψ production at mid-rapidity in proton+proton collisions at $s = 510$ and 500 GeV with the STAR detector // Physical Review D. 2019. Vol. 100. No. 5. P. 052009.

REFERENCES

1. **Ji X., Xiong X., Yuan F.,** Proton spin structure from measurable parton distributions, Phys. Rev. Lett. 109 (15) (2012) 152005.

2. **Jaffe R. L., Manohar A.,** The g_1 problem: Deep inelastic electron scattering and the spin of the proton, Nucl. Phys. B. 337 (3) (1990) 509–546.

3. **Adare A., Aidata C., Ajitanand N. N., et al.,** Measurements of double-helicity asymmetries in inclusive J/ψ production in longitudinally polarized $p + p$ collisions at $s = 510$ GeV, Phys. Rev. D. 94 (11) (2016) 112008.

4. **Saleev V. A., Shipilova A. V.,** Double longitudinal-spin asymmetries in direct photon production at NICA, Phys. Part. Nuclei. Lett. 20 (3) (2023) 400–403.

5. **Stratmann M.,** Polarized parton densities and processes, New Trends in HERA Physics 1999: Proc. Ringberg Workshop Held at Tegernsee, Germany, 30 May–4 June 1999, Springer Berlin Heidelberg (2001) 83–97.

6. **Collins J. C., Soper D. E., Sterman G.,** Factorization of hard processes in QCD, Adv. Ser. Dir. High Energy Phys. 5 (1988) 1–91.

7. **Sivers D. W.,** Single-spin production asymmetries from the hard scattering of pointlike constituents, Phys. Rev. D. 41 (1) (1990) 83–90.

8. **Collins J. C.,** Fragmentation of transversely polarized quarks probed in transverse momentum distributions, Nucl. Phys. B. 396 (1) (1993) 161–182.

9. **Bomhof C. J., Mulders P. J.,** Gluonic pole cross sections and single spin asymmetries in hadron-hadron scattering, J. High Energy Phys. 2007 (2) (2007) 029.

10. **Klasen M., Kniehl B. A., Mihaila L. N., Steinhauser M.,** Charmonium production in polarized high-energy collisions, Phys. Rev. D. 68 (3) (2003) 034017.

11. **Ciesielski R., Goulianos K.,** MBR Monte Carlo simulation in PYTHIA8, arXiv preprint arXiv:1205.1446 (2012).

12. **Gehrmann T., Stirling W. J.,** Spin-dependent parton distributions from polarized structure function data, Z. Phys. C. 65 (3) (1995) 461–470.

13. **Adam J., Adamczyk L., Adams J. R., et al.,** Measurements of the transverse-momentum-dependent cross sections of J/ψ production at mid-rapidity in proton+proton collisions at $s = 510$ and 500 GeV with the STAR detector, Phys. Rev. D. 100 (5) (2019) 052009.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КРУАШВИЛИ Дмитрий Васильевич – *инженер Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

THE AUTHORS

KRUASHVILI Dmitry V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kruashvili.dv@edu.spbstu.ru

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
berdnikov@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0309-5917

Статья поступила в редакцию 16.02.2026. Одобрена после рецензирования 03.03.2026. Принята 03.03.2026.

Received 16.02.2026. Approved after reviewing 03.03.2026. Accepted 03.03.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Механика

Научная статья
УДК 531.53
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19215

ПОДАВЛЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ МАЯТНИКА С ПОМОЩЬЮ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО РЕГУЛЯТОРА

Н. А. Смирнова ✉
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
✉ smirnova_na@spbstu.ru

Аннотация. В работе исследована эффективность системы параметрического демпфирования колебаний линейного, изначально слабодемпфированного маятника. Для этого построена система стабилизации с обратной связью по отклонению положения однозвенного маятника от заданного. В замкнутой системе использован регулятор, структура которого следует из уравнения Матье, а варьируемые коэффициенты подобраны с учетом предложенной методики. Установлено, что параметрический регулятор (ПР) способен сократить время установления благодаря увеличению демпфирования. Поэтому ПР целесообразно добавлять в систему с традиционным пропорциональным регулятором по отклонению для улучшения динамических показателей и повышения точности в установившемся режиме. Показано, что ПР успешно подавляет гармонические внешние возмущения. Для плоского двухзвенного маятника построен ПР по отклонению одного звена. Регулятор демпфирует колебания с низшей частотой, но этого оказывается достаточно для существенного повышения быстродействия при стабилизации.

Ключевые слова: линейный слабодемпфированный маятник, первый параметрический резонанс, замкнутая система, параметрический регулятор, метод стационаризации

Для цитирования: Смирнова Н. А. Подавление колебаний маятника с помощью параметрического регулятора // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2026. Т. 19. № 2. С. 178–188. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.19215

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19215

THE DAMPING OF PENDULAR OSCILLATIONS USING A PARAMETRIC CONTROLLER

N. A. Smirnova ✉
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
✉ smirnova_na@spbstu.ru

Abstract. In the paper, the efficiency of a parametric damping system for the oscillations of a linear, initially, lightly damped pendulum has been studied. A closed-loop stabilization system included the feedback based on the deviation of the simple pendulum's position from the prearranged one. Our system was equipped with a controller whose structure followed from the Mathieu equation, and the variable coefficients were selected taking into account the proposed methodology. The parametric controller (PC) was shown to be able to shorten the settling time via increasing the damping. Because of this, it makes sense to add the PC to a system with a traditional offset-based P-controller to improve dynamic performance and to increase accuracy in the steady state. Moreover, the PC successfully suppressed harmonic

© Смирнова Н. А., 2026. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

external disturbances. The PC based on the offset of one link was constructed for a planar two-link pendulum. The controller damped lower frequency oscillations, but this turned out to be enough to significantly improve the stabilization response.

Keywords: linear lightly damped pendulum, first parametric resonance, feedback system, parametric controller

For citation: Smirnova N. A., The damping of pendulum oscillations using a parametric controller, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 19 (2) (2026) 178–188. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.19215

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Введение

Параметрическое возбуждение может играть дестабилизирующую роль, если возникает параметрический резонанс [1], или способствовать стабилизации неустойчивой системы [2]. При изучении колебательных процессов периодически нестационарных, динамических систем основное внимание уделяется построению и уточнению областей возникновения резонансов на плоскости параметров периодического коэффициента [3, 4] или (с учетом демпфирования) в трехмерном пространстве [5]. Вне областей параметрического резонанса расположены области вибрационной стабилизации неустойчивых объектов [6 – 8]. Обычно границы зон параметрического возбуждения строятся путем отыскания приближенных периодических решений, разделяющих области с устойчивыми и неустойчивыми движениями. К наиболее востребованным асимптотическим методам относятся: метод многих масштабов [9], метод усреднения (или ван дер Поля) [10], метод гармонического баланса и другие [11 – 13]. Метод стационаризации периодического параметра [14], используемый в настоящей работе, является развитием метода гармонической линеаризации. Для его применения необходимо выполнение гипотезы фильтра линейной части системы, но не требуется выделения малого параметра или медленности изменения огибающей колебательного процесса.

Параметрическое возбуждение можно использовать не только для стабилизации колебаний неустойчивых объектов, но и для повышения демпфирования с целью ускорить стабилизацию объектов устойчивых. В системах с несколькими степенями подвижности известно явление параметрического антирезонанса [15]. Механизм такого антирезонанса основан на эффекте связи медленных модальных движений через параметрическое возбуждение. Для фундаментальной матрицы медленного движения, в соответствии с методом Флоке, строится матрица монодромии и для зафиксированных частоты и амплитуды параметра вычисляются характеристические числа (мультипликаторы). Показано, что параметрическое возбуждение определенной частоты (комбинационной для собственных частот объекта) перемещает характеристические числа матрицы монодромии к центру единичного круга [16]. Эффект демпфирования значителен для колебаний с низшей упругой частотой. Система демпфирования реализуется по принципу программного управления, поскольку частота параметрического возбуждения вычисляется по модели объекта.

Другой принцип повышения демпфирования реализуется в замкнутой системе, демпфирующие свойства которой зависят от баланса амплитуд и фаз циркулирующих в ней сигналов. Для линейных замкнутых систем эти свойства называются запасами устойчивости и определяются по критерию Найквиста на частоте среза. Создание в замкнутой системе условий, подобных и отличных от тех, при которых возбуждается первый параметрический резонанс, приводит к повышению демпфирования в этой системе. Подобие условий касается выбора частоты и амплитуды колебаний параметра. Отличие заключается в значении временного (или фазового) сдвига между колебаниями параметра и колебаниями выходной переменной объекта. Известно, что когда параметрический резонанс возбуждается, то устанавливается определенный сдвиг. Если же управлять этим сдвигом, то можно регулировать запасы устойчивости в замкнутой системе. Следовательно, вместо параметрического резонанса можно добиться параметрического демпфирования.

© Smirnova N. A., 2026. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В работах [17, 18] временной сдвиг между периодическим изменением параметра и колебаниями выходной координаты используется для демпфирования колебаний выхода. В статье [19] показано, что в задаче вибрационной стабилизации гибкого длинного стержня, при различных условиях его закрепления, область притяжения вертикального положения существенно зависит от начальной фазы колебаний основания.

В настоящей работе исследована эффективность параметрического демпфирования в задачах стабилизации маятников, осуществляемого с помощью системы управления с обратной связью. Предложена методика настройки варьируемых коэффициентов параметрического регулятора. Результаты численного моделирования продемонстрировали робастность алгоритма стабилизации.

Модель параметрического регулятора в замкнутой системе стабилизации

Рассмотрим задачу управляемой стабилизации устойчивого положения равновесия маятника. Цель управления – повышение быстродействия при стабилизации. В качестве объекта управления примем линейную модель однозвенного маятника. Принципиальной особенностью объекта управления является слабое демпфирование, не позволяющее добиться приемлемого качества процессов в замкнутой системе с пропорциональным регулятором.

Уравнение Матье, описывающее колебания линейного маятника, вызванные периодическим изменением параметра, имеет вид

$$\ddot{\alpha}(t) + 2\nu\dot{\alpha}(t) + \left[1 + \mu\sin\left(kt - \varphi\right)\right]\alpha(t) = 0, \tag{1}$$

где t – безразмерное время, $t = \omega_0\tilde{t}$ (ω_0 – собственная частота колебаний маятника, $\tilde{t}$ – размерное время); α – отклонение маятника от положения равновесия, $\alpha^d = 0$; k – отношение частоты колебаний параметра к величине ω_0; μ – безразмерная амплитуда колебаний параметра ($\mu < 1$); φ – сдвиг фазы между колебаниями параметра и маятника; ν – относительное затухание.

Запишем уравнение (1) в виде

$$\ddot{\alpha} + 2\nu\dot{\alpha} + \alpha = -\left[\mu\sin\left(kt - \varphi\right)\right]\alpha = u \tag{2}$$

и будем считать правую часть уравнения (2) управляющим входом u. Тогда выражение в квадратных скобках – это алгоритм параметрического регулирования, а уравнение (2) описывает модель замкнутой системы.

Следовательно, в замкнутой системе может возникать неустойчивый колебательный процесс с безразмерной частотой $k/2$, называемый первым параметрическим резонансом.

Целью работы является определение таких значений варьируемых коэффициентов регулятора, которые бы обеспечивали подавление колебаний выхода $\alpha(t)$. Качество подавления колебаний в замкнутой системе будем оценивать по времени установления.

Определим границы возбуждения первого параметрического резонанса в замкнутой системе. Пусть в уравнении (2) имеют место незатухающие колебания переменной

$$\alpha(t) = A\sin\,(k/2)t,$$

где A – амплитуда, $k/2$ – безразмерная частота.

Тогда алгоритм управления имеет следующий вид:

$$u = -\mu A\cdot\sin[(k/2)t]\cdot\sin(kt - \varphi) = -0{,}5\mu\, A\{\cos\,[(k/2)t - \varphi] - \cos\,[(3k/2)t - \varphi]\}. \tag{3}$$

Если отношение $k/2 \approx 1$, т.е. близко к собственной частоте осциллятора, то вторым слагаемым в правой части алгоритма (3) можно пренебречь и после тригонометрических преобразований получить приближенный алгоритм управления:

$$u = -0{,}5\mu\{\sin\varphi + [(2/k)\cos\varphi]d\}\cdot A\sin(k/2)t, \tag{3а}$$

где d – оператор дифференцирования по безразмерному времени.

Алгоритм (3а) преобразует гармонический сигнал отрицательной обратной связи в гармонический управляющий сигнал той же частоты $k/2$.

Поскольку справедливо равенство вида

$$\{\sin\varphi + [(2/k)\cos\varphi]d\}|_{d=ik/2} = \exp\{i\,[(\pi/2) - \varphi)]\},$$

модель параметрического регулятора для определения границы возбуждения параметрического резонанса можно записать в виде комплексного коэффициента передачи [14]:

$$W(i\varphi) = (\mu/2)\cdot\exp\{i\,[(\pi/2) - \varphi]\}. \quad (4)$$

Рассмотрим систему, замкнутую жесткой отрицательной обратной связью; ее прямая цепь образована последовательным соединением параметрического регулятора и осциллятора с передаточной функцией

$$H(p) = \frac{1}{p^2 + 2\nu p + 1}.$$

Согласно критерию Найквиста, в замкнутой системе установится периодический режим с частотой $k/2$, если соблюдено равенство модулей

$$\left|W(i\varphi)\right| = \left|H^{-1}\left(i\frac{\omega}{\omega_0}\right)\right|_{\frac{\omega}{\omega_0}=\frac{k}{2}},$$

следовательно,

$$\frac{\mu}{2} = \sqrt{\left(1 - \frac{k^2}{4}\right)^2 + \nu^2 k^2}, \quad (5)$$

и также соблюдено равенство фаз

$$\pi/2 - \varphi - \mathrm{arctg}[\nu k/(1 - k^2/4)] = -\pi. \quad (6)$$

Для случая $k = 2$ определим по формулам (5) и (6) значения амплитуды $\mu = 4\nu$ и сдвига фаз $\varphi = \pi$, при которых замкнутая система оказывается на границе устойчивости. Последовательность действий при настройке коэффициентов регулятора следующая.

Шаг 1. Зафиксируем частоту колебаний параметра $k = 2$.

Шаг 2. Выберем амплитуду колебаний параметра из диапазона $4\nu < \mu < 1$ в области возбуждения параметрического резонанса.

Шаг 3. Сдвиг фаз φ будем подбирать так, чтобы обеспечить в замкнутой системе достаточный запас устойчивости по фазе.

Ответ на вопрос о том, можно ли ускорить процесс стабилизации в замкнутой системе, по сравнению с неуправляемым процессом, был получен в ходе численного эксперимента. Основная цель при численной реализации параметрического регулятора состояла в получении сигнала с заданным периодом колебаний по имеющимся точным измерениям затухающих колебаний выхода $\alpha(t)$. Для этого в графической среде Simulink выход $\alpha(t)$ последовательно проходил через квадратичную функцию, дифференцирующее звено, звено чистого запаздывания с передаточной функцией

$$H_{dt}(p) = \exp(-\tau p)$$

и подавался на вход двухпозиционного реле [17]. На выходе реле формировался прямоугольный сигнал с периодом вдвое меньшим, по сравнению с «периодом» колебаний выхода $\alpha(t)$, и сдвинутый по фазе на $\varphi = (\pi/2) - k\tau$.

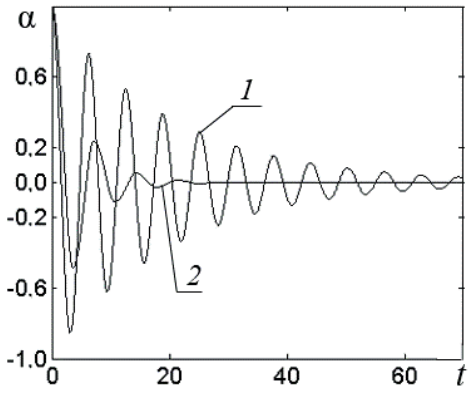


Рис. 1. Осциллограммы свободных колебаний маятника при значении относительного затухания $\nu = 0{,}05$ (кривая *1*) и выхода замкнутой системы $\alpha(t)$ при значениях коэффициентов параметрического регулятора $\mu = 0{,}5$ и $\tau = 0$ (кривая *2*)

На рис. 1 показаны осциллограмма выхода замкнутой системы стабилизации положения равновесия маятника $\alpha^d = 0$ и осциллограмма свободных колебаний маятника при $\alpha(0) = 1$. Время установления в замкнутой системе сократилось в четыре раза.

Эффективность стабилизации сохраняется при варьировании амплитуды μ и запаздывания τ в широком диапазоне. Можно рекомендовать при $\tau = 0$ выбирать значение μ ближе к верхней границе. Таким образом, отличительной чертой параметрического регулятора является его робастность.

Исследуем работоспособность параметрического регулятора в задаче подавления внешнего гармонического возмущения. Добавим в правую часть уравнения (2) гармонический возмущающий момент. Если заменить периодический параметр комплексным коэффициентом (4), то получим приближенное уравнение замкнутой системы:

$$\ddot{\alpha} + 2\nu\dot{\alpha} + \alpha + \frac{\mu}{2}\exp\left[i\left(\frac{\pi}{2} - \varphi\right)\right]\alpha = B\exp\left[i\left(\lambda t - \theta\right)\right], \tag{7}$$

где λ – отношение частоты колебаний возмущающего момента к собственной частоте осциллятора ω_0, B – амплитуда, θ – фаза возмущения.

Качество подавления вынужденных колебаний оценим по амплитудно-частотной характеристике замкнутой системы. Будем искать установившееся решение уравнения (7) в виде

$$\alpha_\infty = A\exp\left[i\left(\lambda t - \psi\right)\right], \tag{8}$$

где A – амплитуда вынужденных колебаний выхода замкнутой системы, ψ – сдвиг фазы.

Заметим, что описание параметрического регулятора комплексным коэффициентом $W(i\varphi)$ становится неадекватным для значений $\lambda < 1$, поскольку в диапазоне низких частот возмущающего воздействия вторым слагаемым в правой части формулы (3) пренебрегать нельзя. Подставив решение (8) в уравнение (7), получим:

$$(B/A)\exp\left[i\left(\psi - \theta\right)\right] = H^{-1}(i\lambda) + W(i\varphi), \tag{9}$$

где $H^{-1}(i\lambda) = -\lambda^2 + 2\nu i\lambda + 1$.

Принципиальная возможность возникновения режима вынужденных колебаний следует из баланса фаз при графическом решении уравнения (9). Баланс модулей в уравнении (9) дает выражение для амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) замкнутой системы, имеющей вид

$$\frac{A}{B} = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \lambda^2 + \frac{\mu}{2}\sin\varphi\right)^2 + \left(2\nu\lambda + \frac{\mu}{2}\cos\varphi\right)^2}}. \tag{10}$$

Если в выражении (10) положить $\varphi = 0$, что в совокупности с условием $4\nu < \mu < 1$ обеспечивает наименьшее время установления в замкнутой системе, то АЧХ преобразуется к виду

$$\frac{A}{B} = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \lambda^2\right)^2 + \left(2\nu\lambda + \frac{\mu}{2}\right)^2}}. \tag{11}$$

На собственной частоте $\lambda = 1$ маятника значение АЧХ замкнутой системы следует выражению

$$\left.\frac{A}{B}\right|_{\lambda=1} = \frac{1}{2\nu + \frac{\mu}{2}}$$

и снижается с увеличением значения μ.

На рис. 2 точками показаны значения амплитуд вынужденных колебаний, полученные в ходе вычислительного эксперимента при $B = 1$. Для сравнения приведена АЧХ (сплошная линия), построенная по формуле (11).

Видно, что наибольшее различие наблюдается в области низких частот и объясняется, по-видимому, неадекватным описанием параметрического регулятора комплексным

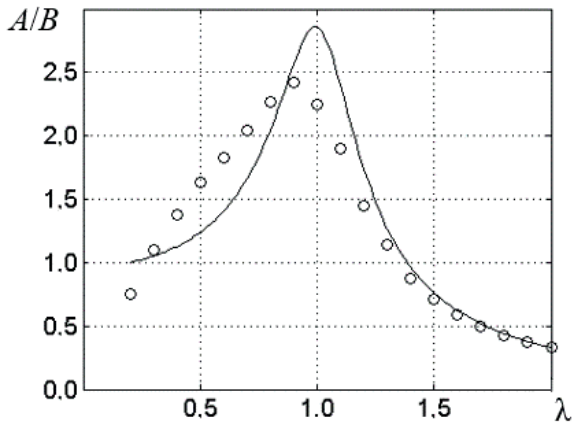


Рис. 2. АЧХ замкнутой системы, полученные по формуле (11) (сплошная линия) и численно (символы). Амплитуды A вынужденных колебаний вычислены при значениях коэффициентов $B = 1$, $\nu = 0{,}05$, $\mu = 0{,}5$, $\tau = 0$

коэффициентом. Важно отметить, что значение АЧХ замкнутой системы при $\lambda = 1$ гораздо ниже резонансного значения АЧХ линейного осциллятора $A_{osc} = 1/2\nu$.

Параметрический регулятор как дополнение к традиционному пропорциональному регулятору

Рассмотрим задачу управляемой стабилизации произвольного положения $\alpha^d \neq 0$, не совпадающего с положением устойчивого равновесия маятника. Дополним модель маятника моделью привода, приняв ее инерционным звеном первого порядка. Модель замкнутой системы с пропорциональным регулятором (П-регулятор) имеет вид

$$(Td + 1)(d^2 + 2\nu d + 1)\alpha(t) = K_p\,[\alpha^d - \alpha(t)],$$

где d – оператор дифференцирования по безразмерному времени; $T = \tilde{T}\omega_0$ – безразмерная постоянная инерционного звена; K_p – коэффициент усиления П-регулятора.

Эффективность П-регулятора в рассматриваемой задаче ограничена необходимостью обеспечить компромисс между требованиями к переходному и установившемуся (α_∞) режимам. Для уменьшения установившейся ошибки, имеющей вид

$$e_\infty = \alpha^d - \alpha_\infty = \alpha^d/(1 + K_p),$$

следует увеличивать коэффициент K_p. Для обеспечения устойчивости замкнутой системы значение коэффициента K_p должно удовлетворять неравенству

$$1 + K_p < (2\nu/T)\,(1 + 2\nu/T). \qquad (12)$$

На рис. 3 показан переходный процесс ($\alpha^d = 1$) в замкнутой системе с П-регулятором, коэффициент усиления $K_p = 2{,}6$ которого обеспечивает стандартный (60°) запас по фазе в замкнутой системе при выбранных значениях параметров объекта управления $\nu = 0{,}05$, $T = 0{,}01$.

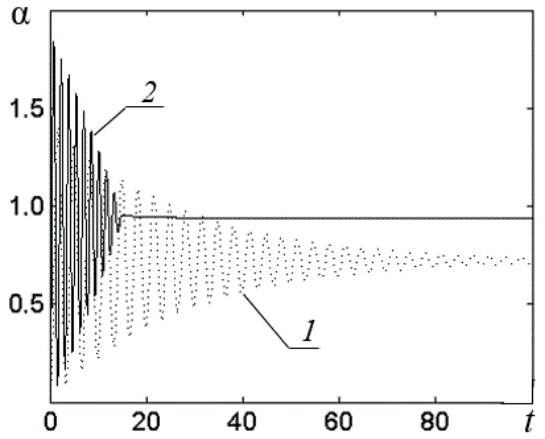


Рис. 3. Осциллограммы переходных процессов в замкнутой системе с П-регулятором (коэффициент усиления $K_p = 2{,}6$, кривая *1*), а также с П-регулятором (коэффициент усиления $K_p = 15$) и параметрическим регулятором при $\mu = 0{,}5$ и $\tau = 0$ (кривая *2*)

Включим в структурную схему замкнутой системы параметрический регулятор так, чтобы его выход суммировался с выходом П-регулятора. Добавление параметрического регулятора позволяет при неизменном значении коэффициента K_p добиться в замкнутой системе скорейшего установления переходного процесса. Кроме того, удается существенно расширить (по сравнению с условием (12)) диапазон возможных значений K_p, при которых замкнутая система устойчива. Последнее обстоятельство дает возможность уменьшить установившуюся ошибку в замкнутой системе. На рис. 3 показан переходный процесс в замкнутой системе, включающей П-регулятор с коэффициентом усиления $K_p = 15$ и параметрический регулятор. В результате установившаяся ошибка снизилась в 4,5 раза, а время установления – в 5,6 раз.

Стабилизация плоского двойного маятника

Рассмотрим задачу управляемой стабилизации устойчивого положения равновесия плоского двойного маятника. Воспользуемся линейной моделью двойного маятника, причем для простоты будем полагать массы концевых грузов и длины обоих звеньев одинаковыми. Запишем модель в обезразмеренном виде (как это было сделано в работах [20, 21]), для чего введем собственную частоту колебаний однозвенного маятника ω_0 и безразмерное время $t = \omega_0\tilde{t}$:

$$M\begin{bmatrix}\ddot{\alpha}_1\\ \ddot{\alpha}_2\end{bmatrix} + 2B\begin{bmatrix}\dot{\alpha}_1\\ \dot{\alpha}_2\end{bmatrix} + C\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}u\\ 0\end{bmatrix}, \tag{13}$$

где α_1 – отклонение первого звена от вертикали, $\alpha_d = 0$; α_2 – отклонение второго звена от линии продолжения первого звена; ν – относительное затухание, одинаковое в обоих шарнирах; M, B, C – матрицы инерционных, диссипативных и квазиупругих коэффициентов, соответственно; u – управляющее воздействие в подвесе.

Квадратные матрицы имеют следующий вид:

$$M = \begin{bmatrix}5 & 2\\ 2 & 1\end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix}\nu & 0\\ 0 & \nu\end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix}3 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}.$$

Поскольку выполняется соотношение

$$B = \nu(2C - M),$$

характеристический полином модели (13) имеет вид

$$x(p) = \det[M(p^2 - 2\nu p) + C(1 + 4\nu p)],$$

и следовательно,

$$x(p) = [p^2 - 2\nu p + (\omega_1)^2(1 + 4\nu p)]\cdot[p^2 - 2\nu p + (\omega_2)^2(1 + 4\nu p)], \tag{14}$$

где ω_1, ω_2 – безразмерные собственные частоты двойного маятника;

$$\omega_1 = \sqrt{2-\sqrt{2}} \approx 0,77,\ \omega_2 = \sqrt{2+\sqrt{2}} \approx 1,85.$$

Приняв за выход переменную $\alpha_1(t)$, запишем модель объекта управления

$$\alpha_1(p) = H_2(p)u(p),$$

где $H_2(p) = \dfrac{p^2 + 2\nu p + 1}{x(p)}$ – передаточная функция.

Процессы в замкнутой системе с параметрическим регулятором

$$u = -[\mu \sin(kt - \varphi)]\alpha_1 \tag{15}$$

удовлетворяют уравнению

$$H_2^{-1}(d)\cdot\alpha_1 + [\mu\cdot\sin(kt - \varphi)]\cdot\alpha_1 = 0. \tag{16}$$

Диапазон допустимых значений безразмерной амплитуды параметра μ вычисляется так же, как и в уравнении Матье:

$$\mu < H_2^{-1}(0) = \omega_1^2\omega_2^2 = 2.$$

Для определения границы возбуждения первого параметрического резонанса используем комплексный коэффициент передачи (4) в качестве приближенной модели параметрического регулятора. Варьируя значения μ, будем вычислять значения частот, которые являются корнями уравнения

$$\left|W^{-1}(i\varphi)\right| = \frac{2}{\mu} = \left|H_2\left(i\frac{\omega}{\omega_0}\right)\right|_{\frac{\omega}{\omega_0}=\frac{k}{2}}. \tag{17}$$

Искомых корней уравнения (17) может быть четыре, поэтому область возбуждения первого параметрического резонанса для двухзвенного маятника объединяет две подобласти в окрестности удвоенных собственных частот. Параметрический резонанс в замкнутой системе (16) наступает, если частота колебаний параметра k близка к удвоенной первой собственной частоте ω_1 или к удвоенной второй собственной частоте ω_2. Определение границ возбуждения резонанса удобно проводить с использованием диаграмм Боде

$$L_2 = 20 \log| H_2(i\omega/\omega_0) |.$$

На рис. 4, *a* показана диаграмма Боде L_2 при $\nu = 0{,}05$, которая может иметь только две точки пересечения с прямой

$$L_1 = 20 \log(2/\mu) \text{ при } \mu < 2.$$

Следовательно, в рассматриваемой замкнутой системе область возбуждения первого параметрического резонанса расположена в окрестности удвоенной первой собственной частоты. На рис. 4, *b* показана граница первого параметрического резонанса.

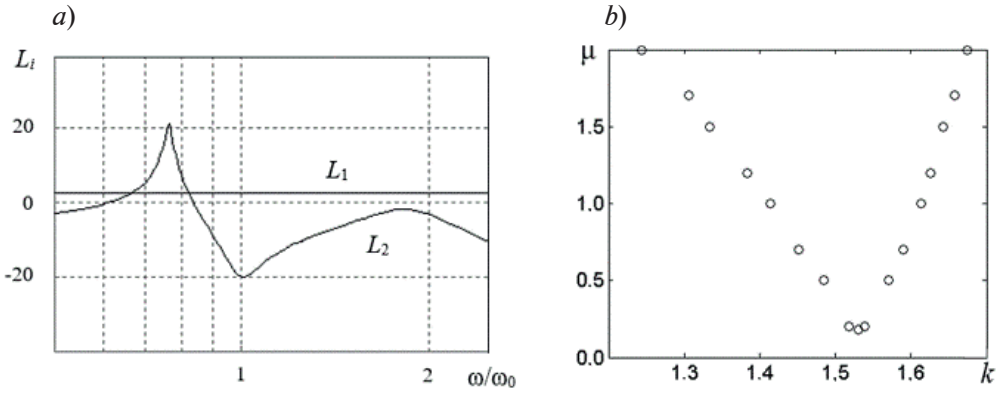


Рис. 4. Графическое представление решения уравнения (17) при значениях коэффициентов $\nu = 0{,}05$, $\mu = 1{,}5$ (*a*) и зависимость $\mu(k)$, являющаяся границей первого параметрического резонанса (*b*)

Реализация параметрического регулятора (15) осуществляется приближенно (как это было описано выше), поэтому результаты измерения угла $\alpha_1(t)$ на первом этапе возводятся в квадрат, чтобы сформировать периодический сигнал. Однако для произвольных начальных условий свободные колебания двухзвенного маятника представляют собой двухчастотный процесс, поскольку корни характеристического полинома (14) имеют вид

$$p_{12} = -(3-2\sqrt{2})\nu \pm i\sqrt{2-\sqrt{2}-(17-12\sqrt{2})\nu^2};$$
$$p_{34} = -(3+2\sqrt{2})\nu \pm i\sqrt{2+\sqrt{2}-(17+12\sqrt{2})\nu^2}.$$

Следовательно, переменная $\alpha_1(t)$ представляет собой суперпозицию экспоненциально затухающих колебаний с частотами, зависящими от значения ν. Для значения $\nu = 0{,}05$ логарифмический декремент затухания колебаний со второй частотой в 14,2 раза больше, чем таковой с первой частотой. Поэтому основная задача параметрического регулирования – это демпфирование колебаний с низшей частотой. Следует ожидать, что в замкнутой системе (16), по прошествии некоторого времени, в измерениях $\alpha_1(t)$ останется составляющая с низшей частотой. Параметрический регулятор будет эффективно гасить колебания $\alpha_1(t)$, если, разумеется, амплитуда μ будет достаточной, а сдвиг фаз φ обеспечит устойчивость замкнутой системы.

Поскольку в сочленении двух звеньев активный управляющий сигнал не предусмотрен, переменная $\alpha_2(t)$ изменяется в соответствии с уравнением

$$\ddot{\alpha}_2 + 2\nu\dot{\alpha}_2 + \alpha_2 = -2\ddot{\alpha}_1 - \alpha_1.$$

Результаты численного моделирования процессов в замкнутой системе, которая отличается от уравнения (16) приближенной реализацией параметрического регулятора, показаны на рис. 5. Чтобы продемонстрировать эффективность работы параметрического регулятора, там же приведены осциллограммы свободных колебаний слабодемпфированного двухзвенного маятника.

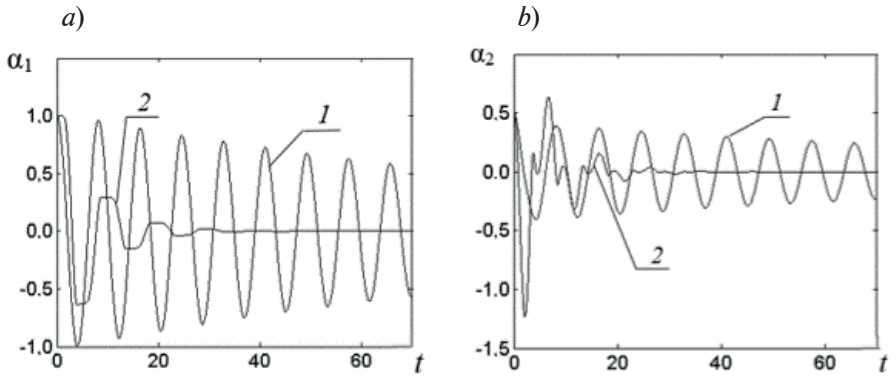


Рис. 5. Осциллограммы переменных α_1 (*a*) и α_2 (*b*):
свободные колебания при $\nu = 0{,}05$ (кривые *1*) и процессы в замкнутой системе с параметрическим регулятором при $\mu = 1{,}5$, $\tau = 0$ (кривые *2*)

Время установления в замкнутой системе значительно сократилось, по сравнению с временем установления свободных колебаний.

Заключение

Исследована работоспособность параметрического регулятора, включенного в замкнутую систему, которая предназначена для ускорения процесса стабилизации. Предложен способ настройки варьируемых коэффициентов регулятора. Путем численного моделирования установлено, что для получения эффекта параметрического демпфирования не требуется точной настройки регулятора, достаточно выбрать амплитуду и запаздывание из расчетного диапазона, а частота удваивается автоматически. Решены различные по постановке задачи стабилизации слабодемпфированного осциллятора, в которых параметрическое управление оказалось эффективным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Болотин В. В.** О поперечных колебаниях стержней, вызываемых периодическими продольными силами // Сб. статей «Поперечные колебания и критические скорости». Вып. 1. Изд. АН СССР, 1951. С. 46–77.

2. **Капица П. Л.** Маятник с вибрирующим подвесом // Успехи физических наук. 1951. Т. 44. № 1. С. 7–20.

3. **Бутиков Е. И.** Расширенный и уточненный критерий устойчивости маятника Капицы // Компьютерные инструменты в образовании. 2011. № 2. С. 16–26.

4. **Беломытцева Е. Г., Курин А. Ф., Туленко Е. Б.** Задача Коши для уравнения Матье с затуханием при параметрическом резонансе // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика. 2018. № 3. С. 105–125.

5. **Майлыбаев А. А., Сейранян А. П.** Параметрический резонанс в системах с малой диссипацией // Прикладная математика и механика. 2001. Т. 65. № 5. С. 779–792.

6. **Сейранян А. П., Майлыбаев А. А.** Вибрационная стабилизация статически неустойчивых систем // Доклады Академии наук. 2009. Т. 426. № 4. С. 480–486.

7. **Архипова И. М.** О стабилизации тройного перевернутого маятника с помощью вибрации точки опоры произвольной частоты // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2019. Т. 6. № 2. С. 281–287.

8. **Беляев А. К., Морозов Н. Ф., Товстик П. Е., Товстик Т. П.** Устойчивость гибкого вертикального стержня на вибрирующем основании // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2018. Т. 5. № 3. С. 477–488

9. **Найфэ А. Х.** Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984. 535 с.

10. **Трубецков Д. И., Рожнёв А. Г.** Линейные колебания и волны. М.: Физматлит, 2001. 415 с.

11. **Блехман И. И.** Вибрационная механика. М.: Наука, 1994. 400 с.

12. **Кузнецов А. П., Кузнецов С. П., Рыскин Н. М.** Нелинейные колебания. (Серия «Современная теория колебаний и волн»). М.: Физматлит, 2002. 292 с.

13. **Буданов В. М.** Редукция уравнения Матье к нелинейному уравнению первого порядка // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика. Механика. 2016. № 4. С. 66–69.

14. **Чечурин Л. С.** Метод гармонической стационаризации и оценка робастности периодически нестационарных систем управления // Сб. трудов «Управление большими системами». Вып. 22. М.: ИПУ РАН, 2008. С. 70–85.

15. **Tondl A., Půst L.** To the parametric anti-resonance application // Engineering Mechanics. 2010. Vol. 17. No. 2. Pp. 135–144.

16. **Dohnal F.** Damping by parametric stiffness excitation: Resonance and anti-resonance // Journal of Vibration and Control. 2008. Vol. 14. No. 5. Pp. 669–688.

17. **Чечурин С. Л., Чечурин Л. С.** Физические основы теории колебаний. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2005. 256 с.

18. **Chechurin L., Mandrik A., Vostrov K., Chechurin S.** Parametric and coordinate control of oscillating systems: Physics-based oscillation feedback design // IEEE Access. 2021. Vol. 9. 03 August. Pp. 113500–113507.

19. **Кулижников Д. Б., Товстик П. Е., Товстик Т. П.** Области притяжения в обобщенной задаче Капицы // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2019. Т. 6. № 3. С. 482–492.

20. **Смирнов А. С., Смольников Б. А.** Оптимизация режимов гашения колебаний пространственного двойного маятника. I. Постановка задачи // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9. № 2. С. 357–365.

21. **Смирнов А. С., Смольников Б. А.** Оптимизация режимов гашения колебаний пространственного двойного маятника. II. Решение задачи и анализ результатов // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2023. Т. 10. № 1. С. 121–138.

REFERENCES

1. **Bolotin V. V.,** On the transverse vibrations of rods excited by periodic longitudinal forces, In collected works: “Transverse vibrations and critical velocities”, No. 1., USSR Acad. Sci. Publ., Moscow (1951) 46 –77 (in Russian).

2. **Kapitsa P. L.,** Pendulum with vibrating suspension, Physics-Uspekhi. 44 (1) (1951) 7–20 (in Russian).

3. **Butikov E. I.,** Rasshirennyy i utochnennyy kriteriy ustoychivosti mayatnika Kapitsy [Extended and stable criteria of Kapitsa's pendulum], Computer Tools in Education Journal. (2) (2011) 16–26 (in Russian).

4. **Belomytseva E. G., Kurin A. F., Tulenko E. B.,** The Cauchy problem for the Mathieu equation with damping at parametric resonance, Bulletin of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics. (3) (2018) 105–125 (in Russian).

5. **Mailybayev A. A., Seyranian A. P.,** Parametric resonance in systems with small dissipation, J. Appl. Math. Mech. 65 (5) (2001) 755–767.

6. **Seyranyan A. P., Maylybayev A. A.,** Vibrational stabilization of statically unstable systems, Doklady Physics. 54 (6) (2009) 294–300.

7. **Arkhipova I. M.,** On stabilization of a triple inverted pendulum via vibration of a support point with an arbitrary frequency, Vestnik of the St. Peterburg University. Mathematics. 52 (2) (2019) 194–198.

8. **Belyayev A. K., Tovstik T. P., Morozov N. F., Tovstik P. E.,** The stability of a flexible vertical rod on a vibrating support, Vestnik of the St. Petersburg University. Mathematics. 51 (3) (2018) 296–304.

9. **Nayfeh A. H.,** Introduction to perturbation techniques, John Wiley & Sons, New York, 1981.
10. **Trubetskov D. I.,** Oscillations and waves: In linear and nonlinear systems (Book series "Mathematics and its applications"), Springer Netherlands, Dordrecht, 2011.
11. **Blekhman I. I.,** Vibrational mechanics. Nonlinear dynamic effects, general approach, applications, World Scientific Publishing Co. Pte Ltd., Singapore, 2000.
12. **Kuznetsov A. P., Kuznetsov S. P., Ryskin N. M.,** Nelineynyye kolebaniya [Nonlinear oscillations], Fizmatlit Publishing, Moscow, 2002 (in Russian).
13. **Budanov V. M.,** Reduction of the Mathieu equation to a nonlinear equation of the first order, Moscow University Mechanics Bulletin. 71 (4) (2016) 98–101.
14. **Chechurin L. S.,** Harmonic stationarization method and evaluation of robustness of periodic time-variant control systems, In collection of scientific papers "Large-scale Systems Control", Iss. 22, Institute of Control Sciences RAS, Moscow (2008) 70–85 (in Russian).
15. **Tondl A., Půst L.,** To the parametric anti-resonance application, Eng. Mech. 17 (2) (2010) 135–144.
16. **Dohnal F.,** Damping by parametric stiffness excitation: Resonance and anti-resonance, J. Vib. Control. 2008. Vol. 14 (5) (2008) 669–688.
17. **Chechurin L., Chechurin S.,** Physical fundamentals of oscillations: Frequency analysis of periodic motion stability, Springer International Publishing, Cham, Switzerland, 2018.
18. **Chechurin L., Mandrik A., Vostrov K., Chechurin S.,** Parametric and coordinate control of oscillating systems: Physics-based oscillation feedback design, IEEE Access. 9 (03 Aug) (2021) 113500–113507.
19. **Kulizhnikov D. B., Tovstik P. E., Tovstik T. P.,** The basin of attraction in the generalized Kapitsa problem, Vestnik of the St. Petersburg University. Mathematics. 52 (3) (2019) 309–316.
20. **Smirnov A. S., Smolnikov B. A.,** Optimization of oscillation damping modes of a spatial double pendulum: 1. Formulation of the problem, Vestnik of the St. Petersburg University. Mathematics. 55 (2) (2022) 243–248.
21. **Smirnov A. S., Smolnikov B. A.,** Optimization of oscillation damping modes of a spatial double pendulum: 2. Solution of the problem and analysis of the results, Vestnik of the St. Petersburg University. Mathematics. 56 (1) (2023) 93–106.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

СМИРНОВА Нина Анатольевна – *кандидат технических наук, доцент Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnova_na@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8831-743x

THE AUTHOR

SMIRNOVA Nina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
smirnova_na@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8831-743x

Статья поступила в редакцию 16.01.2026. Одобрена после рецензирования 09.02.2026. Принята 09.02.2026.
Received 16.01.2026. Approved after reviewing 09.02.2026. Accepted 09.02.2026.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2026

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS»

ТОМ 19, № 2, 2026

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11.12.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А. С. Колгатина – переводчик
Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 552-62-16

Сайт https://physmath.spbstu.ru/

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

Подписано в печать 30.06.2026 г. Дата выхода в свет 30.07.2026 г.
Формат 60x84/8. Печать цифровая.
Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .
Цена: Бесплатно.

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного ИЦ "ИКИ",
в Издательско-полиграфическом центре
Санкт-Петербургского политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
Физико-математические науки»

1.ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 1.1.8., 1.1.9., 1.3.2., 1.3.3., 1.3.4., 1.3.5., 1.3.6., 1.3.7., 1.3.8., 1.3.11., 1.3.19.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word.**

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без знаков переноса. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончится **ДОСРОЧНО**.

E-mail: physics@spbstu.ru,
Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.
Сайт журнала: https://physmath.spbstu.ru/